UNIVERSIDADE FEDERAL DE JUIZ DE FORA INSTITUTO DE CIÊNCIAS EXATAS / FACULDADE DE ENGENHARIA PROGRAMA DE PÓS-GRADUAÇÃO EM MODELAGEM COMPUTACIONAL

Berilo de Oliveira Santos

Quantificação de Incertezas do Campo de Permeabilidade Através da Expansão de Karhunen-Loève na Recuperação Avançada de Petróleo Utilizando Injeção de Espuma

Berilo de Oliveira Santos

Quantificação de Incertezas do Campo de Permeabilidade Através da Expansão de Karhunen-Loève na Recuperação Avançada de Petróleo Utilizando Injeção de Espuma

Dissertação apresentada ao Programa de Pós-Graduação em Modelagem Computacional da Universidade Federal de Juiz de Fora como requisito parcial à obtenção do título de Mestre em Modelagem Computacional. Área de concentração: Modelagem Computacional

Orientador: Prof. Dr. Bernardo Martins Rocha Coorientador: Prof. Dr. Rodrigo Weber dos Santos Coorientador: Prof. Dr. Grigori Chapiro Ficha catalográfica elaborada através do programa de geração automática da Biblioteca Universitária da UFJF, com os dados fornecidos pelo(a) autor(a)

de Oliveira Santos, Berilo. Quantificação de incertezas do campo de permeabilidade através da expansão de Karhunen-Loève na recuperação avançada de petróleo utilizando injeção de espuma / Berilo de Oliveira Santos. --2024. 86 p. : il. Orientador: Bernardo Martins Rocha Coorientadores: Rodrigo Weber dos Santos, Grigori Chapiro Dissertação (mestrado acadêmico) - Universidade Federal de Juiz de Fora, ICE/Engenharia. Programa de Pós-Graduação em Modelagem Computacional, 2024.

1. permeabilidade absoluta. 2. espuma. 3. meios porbsos. 4. análise de sensibilidade. 5. propagação de incertezas. I. Martins Rocha, Bernardo, orient. II. Weber dos Santos, Rodrigo, coorient. III. Chapiro, Grigori, coorient. IV. Título.

Berilo de Oliveira Santos

Quantificação de Incertezas do Campo de Permeabilidade Através da Expansão de Karhunen-Loève na Recuperação Avançada de Petróleo Utilizando Injeção de Espuma

Dissertação apresentada ao Programa de Pós-Graduação em Modelagem Computacional da Universidade Federal de Juiz de Fora como requisito parcial à obtenção do título de Mestre em Modelagem Computacional. Área de concentração: Modelagem

Aprovada em 28 de maio de 2024.

BANCA EXAMINADORA

Prof. Dr. Bernardo Martins Rocha - Orientador

Universidade Federal de Juiz de Fora

Prof. Dr. Rodrigo Weber dos Santos - Coorientador

Universidade Federal de Juiz de Fora

Prof. Dr. Grigori Chapiro - Coorientador Universidade Federal de Juiz de Fora

Prof. Dr. Iury Higor Aguiar da Igreja

Universidade Federal de Juiz de Fora

Prof. Dr. Márcio Rentes Borges Laboratório Nacional de Computação Científica Juiz de Fora, 24/05/2024.



Documento assinado eletronicamente por **Bernardo Martins Rocha**, **Professor(a)**, em 28/05/2024, às 12:18, conforme horário oficial de Brasília, com fundamento no § 3º do art. 4º do <u>Decreto nº 10.543</u>, <u>de 13 de novembro de 2020</u>.



Documento assinado eletronicamente por **Rodrigo Weber dos Santos**, **Professor(a)**, em 28/05/2024, às 12:21, conforme horário oficial de Brasília, com fundamento no § 3º do art. 4º do <u>Decreto nº</u> <u>10.543, de 13 de novembro de 2020</u>.



Documento assinado eletronicamente por **lury Higor Aguiar da Igreja**, **Professor(a)**, em 28/05/2024, às 13:17, conforme horário oficial de Brasília, com fundamento no § 3º do art. 4º do <u>Decreto nº</u> <u>10.543, de 13 de novembro de 2020</u>.



Documento assinado eletronicamente por **Marcio Rentes Borges**, **Usuário Externo**, em 31/05/2024, às 11:12, conforme horário oficial de Brasília, com fundamento no § 3º do art. 4º do <u>Decreto nº</u> 10.543, de 13 de novembro de 2020.



Documento assinado eletronicamente por **Grigori Chapiro**, **Professor(a)**, em 04/06/2024, às 15:48, conforme horário oficial de Brasília, com fundamento no § 3º do art. 4º do <u>Decreto nº 10.543, de 13</u> de novembro de 2020.



A autenticidade deste documento pode ser conferida no Portal do SEI-Ufjf (www2.ufjf.br/SEI) através do ícone Conferência de Documentos, informando o código verificador **1814357** e o código CRC **E7146376**.

Dedico este trabalho à minha família e a todos os professores que fizeram parte da minha trajetória até aqui.

AGRADECIMENTOS

Minha gratidão maior a Deus, que sempre fez da minha vida uma abundância e me permitiu ter uma profissão mais legal do que qualquer outra que eu sonhei quando criança.

Dedico este trabalho à minha família, Celso de Castro Santos, Mariles Fatima de Oliveira Santos, Celso de Oliveira Santos e Maisa de Oliveira Santos, mais um momento tão importante alcançado ao lado de vocês, as pessoas que sempre tornaram tudo possível, não há como agradecer por tanto. Remerceio também aos meus amigos pelo apoio até aqui e, principalmente, à Isabella Cristina da Silva Pires pelo companheirismo, força e inspiração.

Professor Bernardo Martins Rocha, meu orientador, meu amigo, já são 5 anos aprendendo contigo. Me senti grato a cada dia, por sua paciência, didática e descontração. Obrigado por tantas oportunidades, uma em seguida da outra, são incontáveis os sonhos que realizei por sua causa. Minha reverência também aos professores Rodrigo Weber dos Santos e Grigori Chapiro, que me orientaram nesses anos de mestrado, se tornando também amigos e mestres para toda a vida.

Minha profunda gratidão à UFJF, por mais um degrau na minha formação e pela educação pública, gratuita e de qualidade; ao PPGMC e ao LAMAP (colegas, amigos, professores e funcionários) por cada aprendizado, apoio e momento vivido.

Este trabalho foi realizado em associação com o projeto de P&D registrado como ANP 23518-4, "Avançando na modelagem matemática e computacional para apoiar a implementação da tecnologia 'Foam-assisted WAG' em reservatórios do Pré-sal" (Universidade Federal de Juiz de Fora - UFJF / Shell Brasil / ANP), apoiado pela Shell Brasil sob ANP P&D como "Compromisso de Investimentos com Pesquisa e Desenvolvimento".

"Água de beber, bica no quintal, sede de viver tudo."

RESUMO

Um método para recuperação avançada de petróleo (EOR, do inglês enhanced oil recovery) que vem sendo muito estudado é a injeção de espuma no meio poroso, por possibilitar uma varredura mais uniforme do reservatório. Nesse sentido, modelos matemáticos têm sido amplamente utilizados para realizar previsões e estudos de como otimizar a produção. Logo, é importante estudar e entender claramente a influência de cada parâmetro do modelo matemático sobre o escoamento. Muitas características dos fluidos devem ser levadas em consideração, mas, além disso, a influência da heterogeneidade e das incertezas do campo de permeabilidade absoluta desempenham importante papel no escoamento e no desempenho da espuma. O objetivo do trabalho é realizar a Quantificação de Incertezas (UQ, do inglês uncertainty quantification) e a Análise de Sensibilidade (SA, do inglês sensitivity analysis) de Quantidades de Interesse (QoIs, do inglês quantities of interest) relevantes para a compreensão e estudo da EOR em casos de escoamento com espumas e considerando incertezas do campo de permeabilidade absoluta, a fim de entender como essas podem ser atenuadas pela presença da espuma. Para alcançar isso, foi usada a expansão Karhunen-Loève na introdução de incertezas no campo de permeabilidade e a técnica de expansão em Caos Polinomial (PCE, do inglês *polynomial chaos expansion*) na criação emuladores de modelos de escoamento bifásico água-gás com presença de espuma para conduzir os estudos de forma eficiente, devido ao alto custo computacional dos modelos matemáticos envolvidos. Dentro desse contexto, a SA através do cálculo dos índices de Sobol poderá ser realizada de forma adequada através dos emuladores. Os resultados da quantificação de incertezas corroboram a capacidade da espuma em atenuar os efeitos da heterogeneidade do meio poroso, reduzir as variações e aumentar a eficiência do processo. Foi observado que a espuma mais forte explorada contribuiu para um retardamento do breakthrough e para reduzir as incertezas dos resultados. Os emuladores baseados na PCE demonstraram ser eficazes na previsão dos resultados, com métricas satisfatórias.

Palavras-chave: permeabilidade absoluta; espuma; meios porosos; análise de sensibilidade; propagação de incertezas.

ABSTRACT

A method for enhanced oil recovery (EOR) that has been extensively studied is the injection of foam into the porous medium, as it allows for a more uniform sweep of the reservoir. In this context, mathematical models have been widely used to make predictions and studies on how to optimize production. Therefore, it is important to study and clearly understand the influence of each parameter of the mathematical model on the flow. Many characteristics of fluids must be taken into consideration, but in addition, the influence of heterogeneity and uncertainties in the absolute permeability field play an important role in flow and foam performance. The objective of the work is to carry out Uncertainty Quantification (UQ) and Sensitivity Analysis (SA) of Quantities of Interest (QoIs) relevant to the understanding and study of EOR in cases of foam flow and considering uncertainties in the permeability field, in order to understand how these can be mitigated by the presence of foam. To achieve this, the Karhunen-Loève expansion was used to introduce uncertainties in the permeability field and the Polynomial Chaos expansion (PCE) technique was used to create emulators of two-phase water-gas flow models with the presence of foam to conduct the studies efficiently, due to the high computational cost of the mathematical models involved. mathematicians involved. Within this context, SA through the calculation of Sobol indices can be carried out appropriately through emulators. The uncertainty quantification results corroborate the foam's ability to mitigate the effects of the heterogeneity of the porous medium, reduce variations and increase process efficiency. It was observed that the stronger foam explored contributed to a delay in breakthrough and to reduce the uncertainties of the results. Emulators based on PCE have proven to be effective in predicting results, with satisfactory metrics.

Keywords: absolute permeability; foam; porous media; sensitivity analysis, uncertainty quantification.

LISTA DE FIGURAS

Figura 1 –	Ilustração dos fenômenos de segregação gravitacional (esquerda) e de <i>fingering</i>
Figura 2 –	Viscoso (diferente) 10 Illustração de diferentes técnicas de recuperação de petróleo 17
Figure 2	Ilustração de um meio persoa (esquerde) o fotografio de um metorial escômico
rigura 5 –	(direita) 24
Figure 1	Créfico des permoshilidades relativas de égue e gés para as propriedades
Figura 4 –	definidas como $S_{-} = 0.15$ $S_{-} = 0.24$ $k^0 = 0.14$ $k^0 = 0.40$ $n = 4$
	$n_{ev} = 2, \dots, \dots,$
Figura 5 –	Fluxograma do funcionamento de um emulador
Figura 6 –	Gráficos da função de covariância exponencial quadrada para três valores
i iguia o	diferentes de s (esquerda) e do mapa de cor da covariância (direita), corres-
	pondentes à função da Equação (3.19)
Figura 7 –	Solução analítica do problema de autovalor da expansão KL para o caso 1D
Ŭ,	com função de covariância dada por (3.20)
Figura 8 –	Decaimento dos autovalores do exemplo 1D para as resoluções analítica e
0	numérica
Figura 9 –	Comparação dos cálculos analítico e numérico das autofunções dos modos
	$n = \{1, 2, 3, 4, 5, 15\}$ da expansão KL para o caso unidimensional 48
Figura 10 –	Autofunções da expansão KL para o caso bidimensional
Figura 11 –	Realização única do processo da Equação (3.15) usando diferentes números
	de termos da expansão KL
Figura 12 –	Cinco realizações do processo da Equação (3.15) para diferentes números de
	termos da expansão KL $(n_{KL} = \{2, 5, 10, 15, 20\})$
Figura 13 –	Análises usadas como critério de truncamento para a Expansão KL, decai-
	mento dos autovalores (esquerda) e a energia dos autovalores (direita). 51
Figura 14 –	Influência dos parâmetros l_{KL} (esquerda) e σ_{KL} (direita) sobre os autovalo-
	res
Figura 15 –	Exemplos de campos aleatórios gerados variando apenas os parâmetros l_{KL}
	(esquerda) e σ_{KL} (direita)
Figura 16 –	Saturação de água para diferentes instantes de tempo de simulação do caso
	de referência do escoamento bifásico unidimensional com espuma. \ldots 56
Figura 17 –	Queda de pressão (esquerda) e produção de água acumulada (direita) de um
	caso de referência do escoamento bifásico com espuma unidimensional. 56
Figura 18 –	Erro LOO e Coeficiente \mathbb{R}^2 dos PCEs do estudo da espuma 1D para a queda
	de pressão (esquerda) e para a produção de água acumulada (direita). . 57

Figura 19 –	- Quantificação de incertezas do estudo da espuma 1D, através do PCE e
	do MC, para queda de pressão (esquerda) e produção de água acumulada
	$(direita). \dots \dots$
Figura 20 –	- Análise de sensibilidade via índices de Sobol do estudo da espuma 1D para
	que da de pressão (esquerda) e produção de água acumulada (direita). . $\ 58$
Figura 21 –	- Saturação de água para diferentes instantes de tempo de simulação de um
	caso de referência do escoamento bifásico unidimensional sem espuma. 59
Figura 22 –	- Valor médio da queda de pressão (esquerda) e da produção de água acumulada
	(direita) das amostras utilizadas na construção do estudo da incerteza na
	permeabilidade 1D para os casos com espuma e sem espuma 59
Figura 23 –	- Erro LOO (esquerda) e Coeficiente \mathbb{R}^2 (direita) dos PCEs da queda de pressão
	do estudo da incerteza na permeabilidade 1D para os casos com espuma e
	sem espuma
Figura 24 –	- Quantificação de incertezas do estudo da incerteza na permeabilidade 1D,
	através do PCE e do MC, para a queda de pressão: caso sem espuma (esquerda)
	e caso com espuma (direita)
Figura 25 –	- Campo de permeabilidade referente à camada 36 do projeto SPE-10. \therefore 61
Figura 26 –	- Histogramas da permeabilidade com seus respectivos valores médios (esquerda)
	e campos de permeabilidade (direita) de 4 amostras aleatórias do caso 2D. 62
Figura 27 –	- Gráficos da queda de pressão (esquerda) e da produção (direita) para 4
	amostras aleatórias do caso A 64
Figura 28 –	- Evolução temporal da saturação para 4 amostras aleatórias do caso A. 65
Figura 29 –	- Erro LOO (esquerda) e coeficiente R^2 (direita) dos PCEs da queda de pressão
	dos emuladores do caso A, para diferentes números de amostras 66
Figura 30 –	- Erro LOO (esquerda) e coeficiente R^2 (direita) dos PCEs da produção de água
	acumulada dos emuladores do caso A, para diferentes números de amostras. 66
Figura 31 –	Histograma do tempo de <i>breakthrough</i> das amostras do caso A 67
Figura 32 –	- Quantificação de incertezas do caso A, através do PCE e do MC, para a queda
	de pressão (esquerda) e produção de água acumulada (direita) 67
Figura 33 –	- Histograma do tempo de $breakthrough$ das amostras do caso 2D STARS. 68
Figura 34 –	- Quantificação de incertezas do caso A, através do PCE e do MC, para a queda
	de pressão (esquerda) e produção de água acumulada (direita) 69
Figura 35 –	- Autofunções da expansão KL para o caso bidimensional no domínio SPE-10
	camada 36
Figura 36 –	- Análise de sensibilidade do caso A para a queda de pressão 70
Figura 37 –	- Análise de sensibilidade do caso A para a produção de água acumulada
	(esquerda) e para o tempo de <i>breakthrough</i> (direita)
Figura 38 –	- Comparação entre os resultados de quantificação de incertezas do caso A e
	do caso B para a produção de água acumulada

Figura	39	– E	volução	temporal	da sat	uração	para	uma	mesma	amostra	ı de	campo	no	caso
		А	(esquer	rda) e no	caso B	(direit	ta).							72

LISTA DE ABREVIATURAS E SIGLAS

CMC	Critical Micelle Concentration - Concentração Micelar Crítica					
CoV	Coefficient of Variation - Coeficiente de Variação					
EDO	Equação Diferencial Ordinária					
EDP	Equação Diferencial Parcial					
EOR	Enhanced Oil Recovery – Recuperação Avançada de Petróleo					
FAWAG	<i>Foam-assisted Water-alternating-gas</i> – Injeção alternada de água e					
	assistida por espuma					
FOSSIL	Foam diSplacement SImuLator					
HQR	High Quality Regime – Regime de Alta Qualidade					
LOO	Leave-One-Out Error					
LQR	Low Quality Regime – Regime de Baixa Qualidade					
MC	Método Monte Carlo					
MCMC	Markov Chain Monte Carlo					
PCE	Polynomial Chaos Expansion - Expansão em Caos Polinomial					
PDF	Probability Density Function – Função Densidade de Probabilidade					
QoI	Quantity of Interest – Quantidade de Interesse					
SA	Sensitivity Analysis – Análise de Sensibilidade					
SAG	Surfactant-Alternating-Gas – Injeção Alternada de Solução de Surfac-					
	tante e Gás					
SPE	Society of Petroleum Engineers - Sociedade de Engenheiros de Petróleo					
UQ	Uncertainty Quantification – Quantificação de Incertezas					
WAG	Water-alternating-gas – Injeção alternada de água e gás					

SUMÁRIO

1	INTRODUÇÃO	16
1.1	MOTIVAÇÃO	16
1.2	REVISÃO DA LITERATURA	19
1.2.1	Incertezas no Campo de Permeabilidade	20
1.2.2	Tratamento das Incertezas	21
1.3	OBJETIVOS	22
1.4	ORGANIZAÇÃO DO TEXTO	23
2	MODELOS 2	24
2.1	CONCEITOS BÁSICOS DE MEIOS POROSOS	24
2.2	ESCOAMENTO BIFÁSICO INCLUINDO ESPUMA	28
2.2.1	Textura de Espuma	29
2.2.2	Qualidade de Espuma	30
2.2.3	Modelo de Escoamento de Espuma	30
2.2.4	Modelo STARS	31
2.2.5	Modelo Cinético de Primeira Ordem	32
2.3	IMPLEMENTAÇÃO COMPUTACIONAL	33
2.3.1	Foam diSplacement SImuLator (FOSSIL)	33
2.4	QUANTIDADES DE INTERESSE	34
2.5	FUNDAMENTOS PARA QUANTIFICAÇÃO DE INCERTEZAS	35
3	MÉTODOS COMPUTACIONAIS	37
3.1	EMULADORES OU MODELOS SUBSTITUTOS	37
3.2	QUANTIFICAÇÃO DE INCERTEZAS	38
3.2.1	Método Monte Carlo	39
3.3	EXPANSÃO EM CAOS POLINOMIAL	40
3.3.1	Quantificação de Incertezas através da Expansão em Caos Polin	0-
	mial	41
3.3.2	Métricas	41
3.4	ANÁLISE DE SENSIBILIDADE	42
3.5	EXPANSÃO DE KARHUNEN-LOÉVE	43
3.5.1	Função de Covariância	44
3.5.2	Exemplo Unidimensional com Solução Analítica	46
3.5.3	Implementação Computacional	47
3.5.4	Truncamento da Expansão Karhunen-Loève	50
3.5.5	Influência dos Parâmetros da Função de Covariância	51
4	RESULTADOS	53
4.1	CONFIGURAÇÕES	53
4.2	ESTUDO DOS PARÂMETROS ESCALARES DO MODELO STARS . 5	54

4.3	CAMPO DE PERMEABILIDADE PARA DOMÍNIO UNIDIMENSIONAL	58
4.4	CAMPO DE PERMEABILIDADE PARA DOMÍNIO BIDIMENSIONAL	61
4.4.1	Campo de Permeabilidades SPE-10	61
4.4.2	Aplicação da Expansão Karhunen-Loève	62
4.4.3	Espuma com o Modelo Cinético de Primeira Ordem (Caso A)	63
4.4.4	Espuma com o Modelo STARS (Caso B)	68
4.4.5	Análise de Sensibilidade	69
4.4.6	Discussões	71
5	CONCLUSÕES	74
5.1	LIMITAÇÕES E TRABALHOS FUTUROS	74
	REFERÊNCIAS	76

1 INTRODUÇÃO

1.1 MOTIVAÇÃO

A injeção de espuma em meios porosos abrange diversas aplicações de engenharia. Por essa razão, observa-se um aumento significativo no interesse pela modelagem desse processo de escoamento. Dentre os exemplos de aplicação, destacam-se: práticas de remediação do solo (WANG; MULLIGAN, 2004), descontaminação e bloqueio de poluentes em águas subterrâneas e aquíferos (HIRASAKI et al., 1997; PORTOIS et al., 2018), degradação de resíduos sólidos em aterros sanitários (HU et al., 2023), aplicação de fertilizantes na indústria agrícola (SHOJAEI; OR; SHOKRI, 2022), melhora no potencial de armazenamento de CO_2 visando a transição energética (SÆLE; GRAUE; ALCORN, 2022). Entretanto, uma das suas principais aplicações é na recuperação avançada de petróleo (EOR, do inglês *Enhanced Oil Recovery*) (ROSSEN, 2017), que é a aplicação diretamente relacionada ao escopo deste trabalho.

Técnicas preliminares de extração de petróleo, como a injeção de água ou gás para aumentar a pressão do reservatório, são utilizadas desde a década de 1930 (JONES; GETROUW; VINCENT-BONNIEU, 2018), porém, geralmente recuperam apenas cerca de 30% do petróleo ali disponível (SUNMONU; ONYEKONWU, 2013). A eficiência de varredura do fluido de injeção pode ser significativamente afetada por diferentes fenômenos, incluindo a segregação gravitacional (*gravity override*), que ocorre quando o gás injetado se acumula nas camadas superiores do reservatório (SHI; ROSSEN, 1998; ROSSEN; SHEN, 2007; SHOJAEI et al., 2018; WANG et al., 2023); o desenvolvimento de caminhos preferenciais (*viscous fingering*), devido às menores densidade e viscosidade do gás; e às heterogeneidades nos campos de permeabilidade absoluta e porosidade do reservatório (GIORDANO; SALTER; MOHANTY, 1985; HOMSY, 1987; FARAJZADEH et al., 2015a; SHOJAEI et al., 2018; HEMATPUR et al., 2018). Esses fenômenos são ilustrados na Figura 1.



Figura 1 – Ilustração dos fenômenos de segregação gravitacional (esquerda) e de *fingering* viscoso (direita).

Técnicas de EOR surgiram e foram se aprimorando cada vez mais através de processos nos quais são injetados materiais não usualmente presentes no reservatório (LAKE; VENUTO et al., 1990). Como forma de tentar atenuar os efeitos da segregação gravitacional e também por razões ambientais e econômicas (reinjeção do CO₂ produzido de volta no reservatório), a técnica de injeção alternada de água e gás (WAG, do inglês *Water Alternating Gas*) começou a ser utilizada (STONE, 1982; GODOI; MATAI, 2021). No entanto, posteriormente, ainda foi necessário buscar alternativas que atenuassem com mais eficiência a formação de caminhos preferenciais e a segregação gravitacional.

As técnicas de injeção alternada de água e gás assistida por espuma (FAWAG, do inglês *Foam Assisted Water Alternating Gas*), injeção alternada de solução de surfactante e gás (SAG, do inglês *Surfactant Alternating Gas*) e coinjeção de solução de surfactante e gás, surgiram posteriormente como uma boa opção para a eficiência da recuperação de óleo, pela redução da segregação gravitacional e do *fingering* em meios porosos heterogêneos (BLAKER et al., 2002; KLOET; RENKEMA; ROSSEN, 2009; FARAJZADEH et al., 2015a). Nessas técnicas, a espuma aumenta a viscosidade aparente do gás, reduzindo significativamente sua mobilidade, resultando em uma eficiência de varredura melhorada e, consequentemente, em uma maior produção de óleo (SMITH, 1988; HIRASAKI, 1989; ZITHA, 2006; GASSARA et al., 2017; HEMATPUR et al., 2018). Uma ilustração que compara de maneira qualitativa as diferenças entre os escoamentos de diferentes técnicas pode ser observada na Figura 2.



(c) WAG

(d) FAWAG

Figura 2 – Ilustração de diferentes técnicas de recuperação de petróleo.

A presença de óleo no deslocamento de espuma pode modificar o comportamento da espuma e ainda não é totalmente compreendida e, por isso, representa um grande desafio (MYERS; RADKE, 2000; MA et al., 2018). Além disso, a ausência de óleo é uma suposição razoável próxima aos poços de injeção (ASHOORI; MARCHESIN; ROSSEN, 2010a), e uma investigação detalhada do comportamento do fluxo de água-gás-espuma, mesmo que simplificada, pode orientar a técnica buscando uma eficiência de varredura aprimorada em aplicações reais. Por esta razão, os estudos realizados neste trabalho consideram apenas a dinâmica do fluxo de água e gás na presença de espuma.

Dentro do contexto da EOR, também é necessário considerar os efeitos da geometria do meio porosos, uma vez que o comportamento da espuma também é altamente dependente dela, incluindo o tamanho dos poros, garganta dos poros, forma e conectividade (MA, 2013). Propriedades relevantes para a formação de espuma, como a saturação de água crítica e a pressão capilar crítica, são afetadas por essa geometria. A relação entre porosidade e geometria dos poros com propriedades básicas já tem um vasto histórico de investigação na literatura (LI et al., 2021). A heterogeneidade tem impacto nos mecanismos de geração e destruição da espuma, bem como na adsorção dinâmica de surfactantes no comportamento transitório da espuma e na qualidade da espuma (TAHA; PATIL; NGUYEN, 2023; ABDELGAWAD et al., 2022), influenciando significativamente o escoamento.

Dentre tantos fatores que interferem no escoamento, durante a modelagem do problema, não é simples entender quais parâmetros têm maior influência sobre os resultados a cada instante de tempo. Nesse sentido, simulações computacionais começaram a ser realizadas a fim de aumentar a compreensão sobre o assunto e maximizar os ganhos em contextos de grande escala, pois permitem estimar o comportamento do reservatório e identificar estratégias eficazes para maximizar a recuperação de petróleo em diferentes condições operacionais (CHANG; YORTSOS, 1992; CHENG et al., 2000; ZITHA et al., 2006; ASHOORI; MARCHESIN; ROSSEN, 2010a; MA et al., 2018; VALDEZ et al., 2021; PAULA et al., 2023). Além disso, análises adicionais são necessárias para compreender e calibrar o modelo, como métodos de análise de sensibilidade (SA, do inglês *Sensitivity*) Analysis) e quantificação de incertezas (UQ, do inglês Uncertainty Quantification). As técnicas de UQ, através da análise dos momentos estatísticos, fornecem informações sobre as incertezas das saídas relacionadas aos parâmetros de entrada (ECK et al., 2016). Por outro lado, as técnicas de SA permitem identificar quais parâmetros de entrada têm maior ou menor influência sobre as saídas do modelo, além de verificar interações entre os parâmetros que possam afetar significativamente as quantidades de interesse (QoIs) (SOBOL, 2001; SALTELLI et al., 2008). Essas técnicas geralmente requerem um alto número de avaliações do modelo, o que resulta em um alto custo computacional para sua avaliação (SULLIVAN, 2015; ECK et al., 2016).

Uma abordagem comumente adotada para lidar com essa questão é a utilização de emuladores. Essa técnica envolve a construção de um modelo substituto de baixo custo, derivado de um número reduzido de avaliações do modelo direto. Isso permite alcançar a amostragem necessária de forma computacionalmente menos custosa (SMITH, 2013).

1.2 REVISÃO DA LITERATURA

O escoamento multifásico em meios porosos é tradicionalmente descrito pela Lei de Darcy, em conjunto com a lei de conservação de massa para as diferentes fases fluidas envolvidas. No contexto da presença de espuma, várias abordagens foram propostas, e podem se dividir em dois grupos principais: modelos de espuma implícitos (ou empíricos) e explícitos (ou mecaniscistas) (MA et al., 2015; HEMATPUR et al., 2018).

Na abordagem explícita, o efeito da espuma é simulado através de modelos de balanço populacional, que reproduzem sua criação, destruição e transporte pelo meio poroso (FRITIS et al., 2024). Nesse contexto, a textura da espuma é comumente definida como o número de bolhas por unidade de volume e é representado explicitamente através de uma equação adicional ao modelo (KOVSCEK; RADKE, 1993). Esses modelos são os que representam de modo mais realista a física do escoamento de espuma (MA et al., 2015; HEMATPUR et al., 2018). Por outro lado, os modelos implícitos são facilmente integrados ao modelo de escoamento bifásico, pois não exigem a resolução de nenhuma equação diferencial parcial (EDP) adicional, ao contrário dos modelos mecanicistas. Além disso, neles, geralmente se assume que a espuma está em equilíbrio local, ou seja, as taxas de criação de bolhas e de coalescência são iguais. Essa suposição é fundamentada na escala de tempo dos mecanismos de geração e coalescência de espuma, que é significativamente menor que o tempo de propagação da espuma (MA et al., 2018). Por essa razão, os modelos implícitos são adotados em muitos estudos que exigem um alto número de simulações, já que proporcionam uma alternativa computacionalmente menos custosa para isso, além de serem mais fáceis de se implementar (MIRANDA et al., 2022; VALDEZ et al., 2021; RIBEIRO et al., 2024). Em softwares comerciais (simuladores), em geral, são encontrados os modelos em equilíbrio local, cujo uso é predominante na indústria e na literatura. Nessa abordagem, o efeito da espuma no deslocamento do fluido é representado usando um modelo de espuma implícito, incluindo uma função das variáveis de fluxo, que reduz diretamente a mobilidade da fase gasosa (FARAJZADEH et al., 2015); MA et al., 2015; HEMATPUR et al., 2018).

No contexto do uso de espuma para EOR, estudos experimentais têm sido conduzidos com sucesso na literatura. Experimentos de varredura de qualidade de espuma e varredura de taxa de fluxo são comumente usados para avaliar propriedades de espuma para calibrar parâmetros de modelos computacionais. A modelagem física do fluxo de espuma em meios porosos apresenta desafios devido à sua natureza não-newtoniana, à dependência da textura da espuma e ao complexo processo de geração/coalescência de bolhas. Consequentemente, a calibração do modelo é complexa e o papel das incertezas nos parâmetros estimados permanece pouco explorado. Experimentos de laboratório, frequentemente complementados por dados de campo, são usados para calibrar os modelos matemáticos que sustentam simuladores de reservatório. No entanto, as incertezas inerentes decorrentes de limitações técnicas, erros de medição em dados experimentais e discrepâncias do modelo são frequentemente negligenciadas ao lidar com parâmetros de modelos de escoamento de espuma ou com o campo de permeabilidades. Além disso, a determinação experimental dessas propriedades é desafiadora, demorada e impõe um alto custo financeiro. Portanto, é crucial considerar as incertezas nos dados experimentais e nos parâmetros dos modelos para avaliar a confiabilidade das previsões obtidas.

1.2.1 Incertezas no Campo de Permeabilidade

Um reservatório de petróleo, tipicamente, é caracterizado como um corpo de uma rocha sedimentar subterrânea profunda, cuja composição é formada por depósitos não uniformes que variam espacialmente e que contêm uma mistura de fluidos nos espaços intersticiais entre seus grãos (GERRITSEN; DURLOFSKY, 2005). As variações na permeabilidade e porosidade da rocha abrangem escalas que vão desde o nível microscópico dos poros até a escala quilométrica do campo, o que torna desafiadora a obtenção de um conhecimento detalhado e preciso dessas propriedades, que são influentes na recuperação de óleo e gás. Além disso, fatores adicionais, como falhas naturais, erosões, *vugs* e fraturas, contribuem para a complexidade da caracterização desses reservatórios. Diante desse contexto, modelos utilizados para descrever o escoamento de fluidos em meios porosos devem incorporar a noção de incerteza associadas a essas propriedades, como permeabilidade e porosidade. Por consequência, comumente, elas são tratadas como funções aleatórias da posição (BORGES et al., 2006; ABREU et al., 2007).

No contexto da exploração de reservatórios, uma variedade de métodos foi desenvolvida ao longo do tempo para estudar a formação rochosa e prever os melhores locais para perfuração. Isso inclui análises de geologia de superfície, gravimetria, magnetometria e métodos sísmicos (THOMAS et al., 2001). No entanto, esses métodos muitas vezes não geram informações suficientes para reconstruir com precisão um campo de permeabilidade através de simulações computacionais. Em escala e contexto laboratorial, por outro lado, uma variedade de análises de amostras de rocha podem ser conduzidas para obter informações geométricas, como porosidade, estatísticas de gargantas de poro, permeabilidade, e saturações (BEAR, 2018).

A precisão das previsões dos modelos existentes pode variar consideravelmente entre diferentes campos petrolíferos ou amostras de rochas alvo (LI et al., 2021). Em contexto de campo, surgem complicações adicionais devido à presença de heterogeneidades multiescalas, sugerindo que as amostras testadas em laboratório podem não ser representativas do comportamento nesse caso (FRIAS; MURAD; PEREIRA, 2004; MURAD et al., 2013). Além disso, muitos modelos são estabelecidos em escalas de laboratório, o que frequentemente requer o uso de malhas computacionais que reflitam sua escala de validade (nível microscópico dos poros), acarretando em custos computacionais consideráveis. O conhecimento incompleto dos dados exige a construção de modelos geomecânicos estocásticos em vez de teorias determinísticas para resolver o problema (GELHAR, 1986; RUBIN, 2003; DAGAN, 2012).

1.2.2 Tratamento das Incertezas

A heterogeneidade nas propriedades do fluxo multifásico, como permeabilidade absoluta, porosidade, permeabilidades relativas e pressão capilar, tem sido diretamente associada à heterogeneidade local (CHANG; YORTSOS, 1992). Este fenômeno foi identificado como uma das causas dos comportamentos de fluxo inesperados observados em locais de campo (BENHAM; BICKLE; NEUFELD, 2021). No entanto, não há fluxos de trabalho estabelecidos para caracterizar essas heterogeneidades (AN et al., 2023). Em muitos casos, o conhecimento geológico da rocha é menos detalhado do que o necessário para prever deterministicamente as propriedades do fluxo através dela, uma vez que essas propriedades podem exibir variabilidade espacial significativa e resistir à caracterização completa, pois se tratam de propriedades fortemente não lineares e estocásticas (DOUGLAS et al., 2006). As descrições inadequadas dessas propriedades comprometem a capacidade dos modelos computacionais em prever com precisão o desempenho dos reservatórios (BORGES; PEREIRA, 2020). Portanto, é crucial quantificar e reduzir as incertezas associadas aos parâmetros e campos espaciais dos reservatórios, como a permeabilidade absoluta, que é o foco deste trabalho.

Uma abordagem amplamente utilizada para lidar com as incertezas em campos de forma computacional, especialmente em problemas que envolvem heterogeneidades e incertezas em meios porosos, é através da geração de campos aleatórios (BORGES; PEREIRA; SOUTO, 2010; AKBARABADI et al., 2015; PEREIRA et al., 2012). Geralmente, devido à falta de conhecimento sobre a distribuição verdadeira dessas propriedades, assume-se que elas sejam caracterizadas por campos aleatórios gaussianos (BORGES; PEREIRA; SOUTO, 2010). Esse método oferece uma alternativa viável para abordagens computacionalmente caras, como considerar cada ponto do domínio discretizado como uma variável aleatória.

Dentre os métodos empregados para o tratamento de campos aleatórios, destacamse a expansão Karhunen-Loève (KL), a expansão de estimativa linear ótima (EOLE, do inglês *Expansion Optimal Linear Estimation*), expansão em séries ortogonais (OSE), o método Soma Sucessiva de Campos Gaussianos Independentes (SSCGI), entre outros (LOÈVE, 1977; SUDRET; KIUREGHIAN, 2000; LI; KIUREGHIAN, 1993; PEREIRA et al., 2012; BORGES; PEREIRA; SOUTO, 2010; SANTOS et al., 2022). Uma abordagem comum é considerar campos escalares gaussianos, estacionários, isotrópicos e definidos pela média e pela função de covariância para caracterizar a permeabilidade absoluta do meio poroso, como feito em Borges, Pereira e Souto (2010). Na literatura, o campo de permeabilidade absoluta é frequentemente modelado como uma distribuição *lognormal* (GELHAR, 1986; FURTADO; PEREIRA, 2003; RUBIN, 2003; PEREIRA et al., 2012; MURAD et al., 2013; AKBARABADI et al., 2015). Essa suposição é justificada pelo fato de que um processo estocástico gaussiano é determinado exclusivamente pelo valor médio das variáveis aleatórias e pela função de covariância (FURTADO; PEREIRA, 1998). Essa abordagem foi adotada em diversos estudos de UQ, como em Frias, Murad e Pereira (2004), que investigou a influência da heterogeneidade no espalhamento da pressão dos poros e na consolidação da rocha, e em Borges et al. (2009), que analisou os efeitos dos regimes de heterogeneidade sobre o escoamento. Além disso, em trabalhos como Borges e Pereira (2020), Douglas et al. (2006) e Das, Mohanty e Efendiev (2010), a combinação dos métodos Markov Chain Monte Carlo (MCMC) e expansão KL foi empregada para a caracterização de propriedades como a permeabilidade absoluta.

Um processo aleatório pode ser representado por meio de uma expansão em série, envolvendo um conjunto completo de funções determinísticas com coeficientes aleatórios correspondentes. A expansão KL é uma das técnicas mais populares para a discretização de campos aleatórios. Por meio dela, um campo, como a permeabilidade, é expandido com base na matriz de covariância, o que permite reduzir a dimensão do campo estocástico. Isso ocorre porque ela produz uma representação de série infinita para um processo estocástico, a qual pode ser truncada para diminuir o número de graus de liberdade necessários nos cálculos. Isso é alcançado utilizando apenas os autovetores dominantes da matriz de covariância, decompondo-a por meio de funções de base determinísticas ortogonais e coeficientes aleatórios não correlacionados (DOUGLAS et al., 2006; AKBARABADI et al., 2015). A principal vantagem do método de expansão KL, além da redução de dimensionalidade, é que ele pode ser facilmente generalizado para simular processos estocásticos. No entanto, requer um esforço computacional substancial para resolver a equação integral (HUANG; QUEK; PHOON, 2001).

1.3 OBJETIVOS

O principal objetivo desta dissertação é explorar as incertezas associadas à permeabilidade absoluta em meios porosos, em diferentes cenários de injeção de espuma para processos de EOR. Para atingir esse objetivo será usado um modelo de escoamento bifásico de água e gás na presença de espuma baseado em um simulador computacional através do qual serão realizados estudos de quantificação de incertezas e análise de sensibilidade.

Nesse contexto, a expansão KL foi implementada como método para introdução de incertezas no campo de permeabilidade, sendo que a expansão em Caos Polinomial (PCE, do inglês *Polynomial Chaos Expansion*) foi empregada para construir modelos substitutos (emuladores), reduzindo significativamente a quantidade de simulações necessárias para realizar estudos de UQ e SA. Dessa forma, ao combinar a expansão KL e a PCE, pode-se

gerar um conjunto de amostras de campos de permeabilidade absoluta aleatórios correlacionados espacialmente e realizar análises para avaliar o seu impacto sobre quantidades de interesse específicas em análise, como produção de água acumulada, queda de pressão e tempo de *breakthrough*. Para analisar a sensibilidade global, foram empregados os índices de Sobol.

Os objetivos específicos deste trabalho incluem (i) a implementação e verificação dos métodos KL e PCE para campos aleatórios em problemas simplificados em uma dimensão; e (ii) a avaliação do impacto das incertezas em um campo de permeabilidades realístico utilizando duas configurações diferentes de espuma.

1.4 ORGANIZAÇÃO DO TEXTO

O restante do texto deste trabalho está organizado da seguinte forma: no Capítulo 2 é apresentada algumas das características principais da teoria de escoamento de espumas em meios porosos, e também como este fenômeno é modelado matematicamente e implementado computacionalmente; no Capítulo 3 são apresentadas os métodos e ferramentas utilizados para construção dos emuladores e realização das quantificações de incertezas e análises de sensibilidade, bem como as métricas utilizadas para avaliá-las; no Capítulo 4, apresenta-se os resultados das simulações e análises realizadas. Por fim, o Capítulo 5 apresenta as discussões, limitações, contribuições e considerações finais deste trabalho.

2 MODELOS

A seguir serão apresentados os conceitos fundamentais e os modelos matemáticos utilizados para simular o fenômeno de escoamento de água e gás na presença de espuma em meios porosos.

2.1 CONCEITOS BÁSICOS DE MEIOS POROSOS

Um meio poroso consiste em um material composto por uma matriz sólida com poros, espaços internos vazios e interconectados, como ilustrado pela Figura 3. Esses poros possibilitam o escoamento de um fluido através do material e apresentam variações em tamanho, forma e distribuição de acordo com as características do material em questão (BEAR, 2018). Devido à sua capacidade de armazenar e transportar fluidos, os meios porosos desempenham funções de destaque em diversas aplicações e setores. Alguns exemplos incluem rochas, esponjas, solos, ossos, entre outros.





Figura 3 – Ilustração de um meio poroso (esquerda) e fotografia de um material cerâmico (direita).



Os fenômenos investigados neste trabalho, tem como domínio um meio poroso, por isso, a seguir, serão definidas importantes grandezas físicas relevantes para sua modelagem.

A porosidade ϕ em uma região é definida como a relação entre o volume poroso V_p e o volume total V nessa região, onde V_p representa o volume total dos poros que pode ser preenchido pelo fluido. Essa relação pode ser expressa pela seguinte equação:

$$\phi = \frac{V_p}{V}.\tag{2.1}$$

Para uma fase α , a sua saturação S_{α} é definida como a razão entre o volume ocupado pela

fase α e o volume poroso, isto é:

$$S_{\alpha} = \frac{V_{\alpha}}{V_p}.$$
(2.2)

Um meio poroso é considerado saturado quando o volume poroso está completamente preenchido pelas fases em estudo, ou seja:

$$\sum_{\alpha} S_{\alpha} = 1. \tag{2.3}$$

A permeabilidade, também conhecida como permeabilidade absoluta, caracteriza a capacidade do meio poroso de permitir o escoamento de um fluido através dele, considerando as características geométricas dos poros, como tamanho, forma e conectividade. É uma propriedade intrínseca do meio e é geralmente expressa em unidades de Darcy (D) ou m^2 .

No trabalho de Darcy (1856), foi introduzida uma equação constitutiva que descreve o comportamento de um escoamento monofásico em meio poroso, estabelecendo uma relação direta entre a velocidade do escoamento \mathbf{u} e o gradiente de pressão no meio ∇P . Conhecida como Lei de Darcy, ela se estabeleceu como um princípio fundamental na hidrodinâmica dos meios porosos. Essa equação, quando não há efeitos gravitacionais presentes, é dada por:

$$\mathbf{u}(\mathbf{x}) = -\frac{\boldsymbol{\kappa}(\mathbf{x})}{\mu} \nabla P, \qquad (2.4)$$

onde $\mathbf{u}(\mathbf{x})$ representa a velocidade em \mathbf{x} , μ é a viscosidade do fluido, $\boldsymbol{\kappa}(\mathbf{x})$ é o tensor de permeabilidades, no qual cada componente $\kappa_{i,j}$ do tensor $\boldsymbol{\kappa}$ reflete a capacidade de um fluido se deslocar na direção *i* devido a um gradiente de pressão na direção *j*.

Uma simplificação usualmente adotada na modelagem de meios porosos (PAULA et al., 2020), e que foi adotada neste trabalho, é considerar o campo de permeabilidades como isotrópico, isto é:

$$\boldsymbol{\kappa}(\mathbf{x}) = k(\mathbf{x})\mathbf{I},\tag{2.5}$$

onde k define o valor da permeabilidade e **I** é a matriz identidade.

A velocidade de Darcy, ou velocidade superficial \mathbf{u} é uma representação efetiva do deslocamento do fluido, uma vez que a velocidade intersticial \mathbf{v} que ocorre apenas nos poros, é dada por:

$$\mathbf{u} = \phi \mathbf{v}.\tag{2.6}$$

Uma extensão da Lei de Darcy proposta por Muskat e Meres (1936) permite a aplicação da Lei de Darcy, combinada com a Lei de Conservação de Massa para as fases fluidas, para descrever a dinâmica de escoamentos multifásicos em meios porosos. Nesse contexto, para cada fase α , são definidas a velocidade parcial de Darcy \mathbf{u}_{α} e a pressão parcial P_{α} , conforme expresso na equação abaixo.

$$\mathbf{u}_{\alpha}(\mathbf{x}) = -\boldsymbol{\kappa}(\mathbf{x})\lambda_{r\alpha}\nabla P_{\alpha}, \quad \mathbf{u} = \sum_{\alpha}\mathbf{u}_{\alpha}, \quad (2.7)$$

26

onde $\lambda_{r\alpha}$ é a mobilidade relativa da fase α , que será definida posteriormente.

Esta formulação considera apenas a parcela da velocidade real da fase \mathbf{v}_{α} correspondente à fração volumétrica ocupada pela fase α no meio. Dessa forma, temos que:

$$\mathbf{u}_{\alpha} = \phi S_{\alpha} \mathbf{v}_{\alpha}. \tag{2.8}$$

A viscosidade μ caracteriza a resistência de um fluido ao escoamento. A mobilidade de uma fase, denotada por λ_{α} , é definida como a razão entre a permeabilidade efetiva k_{α} e a viscosidade da fase μ_{α} . Dessa forma, a mobilidade total λ , a mobilidade da fase λ_{α} e a mobilidade relativa $\lambda_{r\alpha}$ são definidas por:

$$\lambda = \sum_{\alpha} \lambda_{\alpha}, \quad \lambda_{\alpha} = \frac{k_{\alpha}}{\mu_{\alpha}}, \quad \lambda_{r\alpha} = \frac{k_{r\alpha}}{\mu_{\alpha}}.$$
 (2.9)

O fluxo fracionário f_{α} é a fração volumétrica do deslocamento em uma direção composta pela fase α , definido como a razão entre a mobilidade da fase λ_{α} e a mobilidade total (BUCKLEY; LEVERETT, 1942):

$$f_{\alpha} = \frac{\lambda_{\alpha}}{\lambda},\tag{2.10}$$

sendo que a seguinte propriedade é satisfeita: $\sum_{\alpha} f_{\alpha} = 1$.

A permeabilidade efetiva k_{α} representa a capacidade de escoamento da fase α no meio, levando em conta a presença de outras fases. A permeabilidade relativa $k_{r\alpha}$ é definida como a razão entre as permeabilidades efetiva e absoluta, isto é:

$$k_{\alpha} = k_{r\alpha}\kappa. \tag{2.11}$$

Existem alguns modelos principais de permeabilidades relativas que as descrevem como funções das saturações das fases do problema (BROOKS; COREY, 1966; MUALEM, 1976; GENUCHTEN, 1980; CHIERICI, 1984). No escoamento bifásico de água e gás, como o considerado neste estudo, a definição de modelos de permeabilidade relativa é fundamental, pois a partir deles se baseiam muitas outras relações. Neste trabalho, as permeabilidades relativas foram descritas pelo modelo Corey-Brooks (BROOKS; COREY, 1966; BRUINING, 2021), o qual é dado por:

$$k_{rg} = k_{rg}^0 (S_{we})^{n_g},$$

$$k_{rw} = k_{rw}^0 (1 - S_{we})^{n_w},$$
(2.12)

onde S_{we} é a saturação de água normalizada, dada por:

$$S_{we} = \frac{S_w - S_{wc}}{1 - S_{wc} - S_{gr}},$$
(2.13)

e k_{rg}^0 , k_{rw}^0 , n_g , n_w , S_{wc} e S_{gr} são parâmetros do modelo. Os parâmetros S_{wc} e S_{gr} representam as saturações residuais de água e de gás, respectivamente. Para o modelo

Corey-Brooks, $n_g e n_w$ representam os seus expoentes, enquanto $k_{rg}^0 e k_{rw}^0$ são os pontos finais das permeabilidades relativas do gás e da água, respectivamente. A saturação residual de uma fase, representa a quantidade mínima dessa fase que permanece no meio e cujo deslocamento é inviável. A Figura 4 apresenta um exemplo de permeabilidade relativa pelo modelo Corey-Brooks, seu valor varia conforme as características do meio poroso e dos fluidos.



Figura 4 – Gráfico das permeabilidades relativas de água e gás para as propriedades definidas como $S_{gr} = 0.15$, $S_{wc} = 0.24$, $k_{rg}^0 = 0.14$, $k_{rw}^0 = 0.40$, $n_g = 4$, $n_w = 2$.

A hidrodinâmica de problemas bifásicos, ou multifásicos, é influenciada pela interação entre as fases nas interfaces. A fase que exibe maior atração pela superfície é denominada fase molhante, enquanto a outra é a fase não-molhante. A definição de qual fase é ou não molhante depende das fases envolvidas na interação e do meio com o qual elas interagem (CASSIE; BAXTER, 1944; HIRASAKL, 1991). A fase molhante tende a formar uma área de contato maior com a superfície, resultando em um deslocamento em direção à fase não-molhante. Esse fenômeno, conhecido como capilaridade, é acentuado quando a área da superfície é maior em relação à quantidade de fluido, destacando a importância dos efeitos capilares no fluxo em meios porosos. No caso de um escoamento água-óleo, por exemplo, a água é a fase molhante, enquanto o óleo é a fase não-molhante.

A pressão capilar P_c pode ser definida como a diferença de pressão das fases nãomolhante e molhante, respectivamente, e é assumida como função apenas da saturação da fase molhante (CHEN; HUAN; MA, 2006). Nos experimentos tratados neste trabalho, que são bifásicos com água e gás, a fase aquosa é molhante e a gasosa é não-molhante. Portanto:

$$P_c = P_c(S_w) = P_g - P_w.$$
 (2.14)

Lei de conservação é um princípio que afirma que a massa total de um sistema isolado permanece constante ao longo do tempo. Em sistemas mais complexos, onde múltiplos processos estão ocorrendo simultaneamente, a sua aplicação pode ser fundamental para entender e prever o comportamento do sistema. Expressa através de uma equação diferencial parcial, a lei de conservação de uma quantidade escalar v é definida por:

$$\frac{\partial v}{\partial t} + \nabla \cdot \mathbf{f}(v) = 0, \qquad (2.15)$$

onde **f** é o fluxo volumétrico de v por unidade de área (LEVEQUE, 2002). A equação (2.15) determina que, para qualquer região definida no espaço, a variação temporal da quantidade v depende exclusivamente do fluxo que entra ou sai desta região.

No contexto da hidrodinâmica de meios porosos, a lei de conservação de massa é formulada considerando as fases fluidas presentes no sistema e pode ser escrita em termos das saturações das fases. Como este trabalho considera fluidos imiscíveis, ou seja, quando não há transferência de massa entre as fases, pode-se escrever uma lei de conservação para a massa de cada fase separadamente. Para uma fase α , com massa m_{α} e massa específica ρ_{α} nos poros de uma região com volume V, tem-se que:

$$m_{\alpha} = \rho_{\alpha}(V\phi S_{\alpha}). \tag{2.16}$$

Para uma fase α , pode-se expressar a lei de conservação de massa em meios porosos a partir da equação (2.15), ao se definir o fluxo mássico por unidade de área como $\mathbf{f}(m_{\alpha}) = m_{\alpha} \mathbf{v}_{\alpha}$ e adotar $v = m_{\alpha}$, através da Equação 2.8, o que resulta em:

$$\frac{\partial}{\partial t}(\rho_{\alpha}\phi S_{\alpha}) + \nabla \cdot (\rho_{\alpha}\mathbf{u}_{\alpha}) = 0.$$
(2.17)

De acordo com características dos problemas, simplificações podem ser adotadas, como ρ_{α} constante para fases incompressíveis, e ϕ constante no tempo para meios rígidos.

2.2 ESCOAMENTO BIFÁSICO INCLUINDO ESPUMA

Espuma é definida como a aglomeração de bolhas de gás que estão separadas umas das outras por um filme líquido, chamado lamela (BIKERMAN, 2013; HIRASAKI, 1989). No entanto, as lamelas são termodinamicamente instáveis e eventualmente se rompem. Essa estrutura de bolhas não ocorre facilmente quando as lamelas são compostas apenas por água devido à sua tensão superficial. Uma alternativa para se obter bolhas estáveis em um meio aquoso é reduzir a tensão superficial pela adição de agentes ativos de superfície (surfactantes) à solução (SCHRAMM et al., 1992; ROSSEN, 2017).

A utilização de espuma na recuperação de petróleo é motivada por duas razões principais: a redução da mobilidade da fase gasosa e o desvio de fluidos subsequentes para regiões com menor permeabilidade ou maior saturação de óleo (KAM, 2008). Surfactantes, também conhecidos como tensoativos, são moléculas que atuam na redução da tensão superficial de soluções aquosas (EVANS; WENNERSTRÖM, 1999). Essas moléculas possuem uma estrutura hidrofílica em uma extremidade e hidrofóbica em outra. Essa configuração faz com que o surfactante tenda a se acumular nas interfaces entre as fases, permitindo a redução da tensão superficial da água e facilitando a formação de lamelas estáveis (WANG; LI, 2016). A tensão superficial da solução diminui à medida que aumenta a concentração de surfactante no meio, porém, quando a superfície está saturada de surfactante, as moléculas começam a se agregar no interior do líquido, formando configurações esféricas conhecidas como micelas. O ponto a partir do qual isso ocorre é denominado concentração micelar crítica (CMC). Portanto, concentrações de surfactante acima da CMC não apresentam alterações significativas na tensão superficial (KILE; CHIOU, 1989).

Os surfactantes são classificados em várias categorias, incluindo aniônicos, catiônicos, não iônicos, biossurfactantes e zwitteriônicos. É crucial entender qual categoria é mais adequada para cada situação, considerando fatores que afetam o seu desempenho como os fluidos envolvidos no escoamento, concentração do surfactante, solvente, tipo de rocha, temperatura, pressão, entre outros. Por exemplo, surfactantes aniônicos geralmente não apresentam bom desempenho em reservatórios carbonáticos, e sua combinação com surfactantes catiônicos pode reduzir a produção (NEGIN; ALI; XIE, 2017). Análises econômicas detalhadas sobre o uso de surfactantes e como o aumento na produção proporcionado por eles supera seus custos são apresentadas em estudos como Cenk et al. (2017) e Putra, Aprizal e Marpaung (2018).

2.2.1 Textura de Espuma

Para quantificar o número de lamelas ou bolhas por unidade de área ou volume, é introduzido o conceito de textura da espuma. Em geral, espumas com uma maior quantidade de bolhas, e, consequentemente, mais lamelas, tendem a reduzir mais a mobilidade do gás (AFSHARPOOR; LEE; KAM, 2010). De acordo com essa definição, o tamanho da bolha é inversamente proporcional à textura da espuma em baixa saturação de água.

As espumas podem ser classificadas com base na redução da mobilidade da fase gasosa em três categorias distintas: fraca, intermediária e forte. As espumas com poucas lamelas são esparsamente texturizadas e causam uma ligeira redução na mobilidade do gás (ou um ligeiro aumento no gradiente de pressão) com a saturação de água relativamente alta, enquanto que as que têm muitas lamelas causam uma redução significativa na mobilidade do gás (ou, equivalentemente, um aumento significativo no gradiente de pressão) com saturação de água relativamente baixa. Dessa forma, quanto maior a textura da espuma (ou mais fina), maior é a redução da mobilidade do gás e mais forte é a espuma, ou seja, espumas com muitas lamelas são denominadas espumas fortes, enquanto a presença de poucas lamelas caracteriza uma espuma fraca (KOVSCEK; RADKE, 1993; ROSSEN, 2017). Vale ressaltar que a textura da espuma depende de muitos fatores, como características do meio poroso, surfactante, taxa de fluxo, etc (MA, 2013).

2.2.2 Qualidade de Espuma

A espuma forte pode ser classificada em dois regimes de fluxo estacionário distintos: regime de baixa qualidade (LQR, do inglês *Low Quality Regime*) e regime de alta qualidade (HQR, do inglês *High Quality Regime*) (ALVAREZ; RIVAS; ROSSEN, 2001; KAM, 2008). No HQR, também conhecido como regime de lamelas individuais (HIRASAKI; LAWSON, 1985) ou regime seco, o gradiente de pressão em estado estacionário é independente da taxa de fluxo de gás e as bolhas que atravessam os poros estão próximas e separadas por lamelas individuais. Em contrapartida, no LQR, ou regime úmido, o gradiente de pressão é independente da taxa de fluxo líquido e as bolhas de gás estão amplamente espaçadas no meio poroso e são separadas por lentes líquidas espessas (OSTERLOH; JR, 1992; ALVAREZ; RIVAS; ROSSEN, 2001).

A qualidade da espuma é definida como a razão entre a taxa de fluxo de injeção de gás q_g e a taxa de fluxo de injeção total $(q_g + q_w)$, ou seja:

$$f_g = \frac{q_g}{q_g + q_w}.\tag{2.18}$$

Em cada regime de espuma, diferentes fatores contribuem mais para a influência da espuma sobre o fenômeno. No regime de alta qualidade, o controle é exercido pela pressão capilar crítica P_c^* , que determina o tamanho da bolha e, consequentemente, a mobilidade do gás. A habilidade do surfactante para estabilizar bolhas é crucial para este regime de coalescência, contudo, as características do meio poroso também são relevantes.

2.2.3 Modelo de Escoamento de Espuma

A equação governante do escoamento, aqui considerado, é baseada no princípio de conservação da massa das fases água e gás, considerando fluidos imiscíveis e incompressíveis em um escoamento em um meio poroso. A hipótese de incompressibilidade para a fase gasosa é usualmente adotada para simplificar a modelagem matemática e a obtenção de soluções analíticas e, visando comparações com este tipo de solução, a mesma também foi adotada em outros trabalhos, como em Igreja (2015) e Lozano et al. (2022). Considera-se um escoamento bifásico totalmente saturado, isto é, onde $S_w + S_g = 1$ é satisfeito, e S_w e S_g representam as saturações da água e do gás, respectivamente.

$$\frac{\partial}{\partial t} \left(\phi \rho_{\alpha} S_{\alpha} \right) + \nabla \cdot \left(\rho_{\alpha} \mathbf{u}_{\alpha} \right) = q_{\alpha}, \qquad (2.19)$$

$$\mathbf{u}_{\alpha} = -\boldsymbol{\kappa}\lambda_{\alpha}\left(\nabla P_{\alpha} - \rho_{\alpha}\mathbf{g}\right), \qquad (2.20)$$

onde **g** é o vetor aceleração da gravidade e \mathbf{u}_{α} , P_{α} e q_{α} são a velocidade, a pressão e o termo fonte da fase α . O fluxo fracionário da fase água f_w , é dado por

$$f_w = \frac{k_{rw}}{k_{rw} + \frac{\mu_w}{\mu_g} k_{rg}^f},\tag{2.21}$$

onde $k_{rg}^f = k_{rg}^f(S_w)$ e $k_{rw} = k_{rw}(S_w)$ são as funções de permeabilidade relativa adotadas para o escoamento bifásico. Vale ressaltar que k_{rg}^f denota a permeabilidade relativa da fase gás incluindo os efeitos da espuma.

No contexto deste trabalho, a espuma é considerada como uma mistura de água e gás contendo surfactante diluído na fase líquida, uma vez que esta não apresenta efeitos na mobilidade da fase água (EFTEKHARI; FARAJZADEH, 2017). Portanto, esses efeitos na modelagem podem ser considerados por meio da alteração da permeabilidade relativa do gás (LOTFOLLAHI et al., 2016). Na presença da espuma, k_{rg}^f é descrito como

$$k_{rg}^f = \frac{k_{rg}}{MRF},\tag{2.22}$$

onde k_{rg} é a permeabilidade relativa da fase gasosa na ausência de espuma e MRF é um termo conhecido como fator de redução de mobilidade, o qual é introduzido para representar os efeitos da espuma.

O uso de *softwares* comerciais é comum na literatura (FARAJZADEH et al., 2015b), onde a abordagem predominante é representar o efeito da espuma no deslocamento de fluido usando um modelo de espuma implícito. Existem diferentes modelos que consideram os efeitos da espuma dessa forma, porém foi empregado neste trabalho o modelo matemático utilizado no simulador comercial CMG-STARS (CMG, 2019), devido à sua ampla utilização pela indústria e em outros trabalhos de quantificação de incertezas e análise de sensibilidade (VALDEZ et al., 2021; MIRANDA et al., 2022; VALDEZ et al., 2022). O simulador UTCHEM também é amplamente utilizado (DELSHAD et al., 2002; JANSSEN; MENDEZ; ZITHA, 2020), pois oferece amplas possibilidades para análise de processos de injeção tridimensionais e gerencia dinâmicas multicomponentes e multifásicas.

2.2.4 Modelo STARS

O modelo STARS para espumas é o modelo matemático empregado para descrever o efeito da espuma em escoamentos em meios porosos utilizado no simulador comercial CMG-STARS (CMG, 2019). Nesse modelo, os efeitos da espuma são descritos de forma implícita considerando-se um fator de redução de mobilidade do gás denotado por MRF, o que pode ser influenciado por diversos fatores. O MRF é dado por:

$$MRF = 1 + fmmob \prod_{i} F_i, \qquad (2.23)$$

onde F_i são termos que podem ser incluídos para representar os diversos efeitos na espuma, como efeitos da concentração de surfactante, da saturação de água, da saturação de óleo,

efeitos não-newtonianos, entre outros. Em particular, por simplicidade, neste trabalho considerou-se apenas os efeitos da saturação de água (dry-out). Neste caso, a mobilidade do gás λ_g , considerando os efeitos da espuma expressados pela Equação (2.22), é alterada como segue:

$$\lambda_g = \frac{k_{rg}^f}{\mu_g}.\tag{2.24}$$

Os efeitos de dry-out (espuma seca) são representados pelo termo F_{dry} , dado por:

$$F_{dry} = \frac{1}{2} + \frac{1}{\pi} \arctan(sfbet(S_w - sfdry)), \qquad (2.25)$$

onde fmmob descreve a redução máxima de mobilidade do gás que pode ser alcançada levando-se em conta os efeitos da espuma, sfbet, a inclinação no efeito de dry-out, ou seja, caracteriza a transição entre os regimes de qualidade de espuma (valores maiores indicam uma transição mais acentuada, enquanto valores menores resultarão em uma transição mais suave) e sfdry, a saturação de água crítica abaixo da qual a espuma colapsa, devido à influência da pressão capilar.

2.2.5 Modelo Cinético de Primeira Ordem

O modelo cinético linear proposto por Ashoori, Marchesin e Rossen (2010b) é um modelo de espumas mecanicista, no entanto, compartilha semelhanças com o modelo STARS. Nele, considera-se uma redução significativa e quase constante na mobilidade do gás em regiões de alta saturação de água e um enfraquecimento abrupto ou colapso da espuma na pressão capilar crítica (ou, equivalentemente, na saturação de água crítica). Os efeitos da espuma são refletidos nele através da redução da mobilidade do gás, modificando a permeabilidade relativa do gás k_{rg} da seguinte forma:

$$k_{rg}^f(S_w, n_D) = \frac{k_{rg}(S_w)}{MRF}, \quad MRF = 1 + C_{\rm mrf} n_D,$$
 (2.26)

onde $n_D \equiv n_f/n_{max}$ representa a textura de espuma normalizada, para a qual n_f é a textura de espuma e n_{max} é o limite superior para textura de espuma. No estudo original de Ashoori, Marchesin e Rossen (2010b), o valor de C_{mrf} foi fixado em 18500. Neste modelo, a permeabilidade relativa do gás é linearmente alterada pela presença de espuma, portanto, nesse contexto, o gás é tratado como um fluido newtoniano. A geração dinâmica de espuma é dada por uma abordagem de primeira ordem para textura de bolhas em equilíbrio local em qualquer saturação (ZITHA, 2006), conforme segue:

$$[r_g - r_c] = k_c n_{max} [n_D^{LE} - n_D], \qquad (2.27)$$

onde k_c é a taxa de geração de espuma, n_{max} é a textura de espuma máxima, r_g é a taxa de geração de espuma e r_c é a taxa de coalescência. A textura de espuma em equilíbrio

local n_D^{LE} é função da saturação de água, dada por:

$$n_D^{\rm LE} = \begin{cases} \tanh(A(S_w - S_w^*)), & \text{se } S_w > S_w^*, \\ 0, & \text{se } S_w \le S_w^*, \end{cases}$$
(2.28)

onde A é uma constante que controla o comportamento da transição de espuma fraca para espuma forte e $C_{\rm mrf}$ é a redução máxima de mobilidade.

Particularmente, quando se assume que $n_D = n_D^{\text{LE}}$, o que indica que n_D está sempre em equilíbrio local, os parâmetros C_{mrf} , $A \in S_w^*$ podem ser estimados de maneira semelhante aos parâmetros do modelo STARS (VALDEZ et al., 2021).

2.3 IMPLEMENTAÇÃO COMPUTACIONAL

Os experimentos computacionais deste trabalho foram implementados na linguagem de programação Python para quantificação de incertezas e análise de sensibilidade, enquanto que as simulações de escoamento foram feitas através do simulador FOSSIL (PAULA et al., 2020).

A implementação Python foi realizada com suporte para computação científica através das bibliotecas NumPy e SciPy. Além disso, a biblioteca FEniCS (ALNÆS et al., 2015; LOGG; MARDAL; WELLS, 2012) foi utilizada para processamentos associadas ao cálculo da expansão KL, enquanto a biblioteca UQLab (MARELLI; SUDRET, 2015) foi utilizada para a construção dos emuladores e para a realização das quantificações de incertezas diretas e análises de sensibilidade.

2.3.1 Foam diSplacement SImuLator (FOSSIL)

O FOSSIL (*FOam diSplacement SImuLator*), desenvolvido no LAMAP da UFJF, consiste em um simulador baseado nos métodos dos volumes finitos e no método dos elementos finitos para simulações de escoamentos bifásicos bidimensionais incluindo a presença de espuma (PAULA et al., 2020; PAULA et al., 2023). O seu desenvolvimento foi fundamentado em três etapas: a definição do modelo matemático, a seleção dos métodos numéricos empregados para a aproximação desse modelo e a implementação computacional das discretizações resultantes dos métodos numéricos selecionados. O simulador foi projetado para lidar com variados cenários de escoamento em meios porosos, incluindo espuma e outras complexidades como, por exemplo, heterogeneidades do meio poroso, presença do componente surfactante e sua adsorção, pressão capilar, compressibilidade e outras.

A solução numérica do problema (Eq. 2.19) é feita através de uma formulação baseada no conceito de pressão global. Para a discretização é utilizado um método dos volumes finitos (MVF) de alta ordem e discretização temporal feita por um método implícito (*backward differentiation formula* - BDF), enquanto para a solução do campo de velocidades e pressão pelo problema de Darcy é utilizada uma formulação do MEF (Método dos Elementos Finitos) híbrida. Do ponto de vista da implementação computacional, o FOSSIL foi desenvolvido com base em duas bibliotecas de código aberto:

- SUNDIALS: conjunto de códigos computacionais avançados para resolver sistemas de equações diferenciais ordinárias e algébricas (HINDMARSH et al., 2005);
- deal.II: biblioteca escrita em C++ orientada a objetos projetada para resolver sistemas de equações diferenciais parciais usando o MEF (ARNDT et al., 2021).

A partir das condições de simulação adequadas para reproduzir o experimento desejado, um arquivo de entrada é configurado e utilizado com o simulador para se obter saídas típicas como a queda de pressão, produção de água, perfis de saturação, dentre outras.

Um ponto importante a ser ressaltado é que, devido às limitações de processamento e armazenamento de dados que vem com o extenso número de simulações necessários para os experimentos de UQ e SA, sobretudo nos casos 2D, uma configuração para os arquivos de saída do FOSSIL foi feita. Os resultados são salvos em 100 arquivos do tipo VTK contendo as saídas da simulação, independente do tempo total escolhido para as simulações. Dessa forma, ao se calcular determinadas quantidades de interesse diretamente pelos arquivos VTK, sua precisão pode ser afetada.

2.4 QUANTIDADES DE INTERESSE

Para avaliar a incerteza paramétrica na resposta do modelo dada pela Equação (2.19), algumas saídas ou quantidades de interesse (QoIs) foram analisadas. Essas QoIs incluem produção de água acumulada Q, queda de pressão ΔP e tempo de *breakthrough* (irrupção) t_{BT} . No contexto deste trabalho, elas podem ser definidas conforme a seguir.

A produção de água acumulada Q(t) (ou fator de recuperação) consiste no volume total de água que é retirada do meio (reservatório), através do poço produtor, ao longo de toda a simulação. A sua determinação é realizada através do cálculo da vazão de água na saída. É importante notar que os experimentos de fluxo bifásico geralmente mostram uma redução na produção após a irrupção, pois, após esse instante, parte do fluido de injeção começa a ser produzido também.

A queda de pressão $\Delta P(t)$ denota a diferença de pressão entre os pontos de injeção e produção, ao longo do tempo em que o fenômeno é observado. Dessa forma, pode ser expressa por

$$\Delta P = P_{entrada} - P_{saida}.$$
 (2.29)

Neste trabalho, ela foi obtida através desse cálculo simples para as diferenças de pressão entre as faces do domínio para cada instante de tempo. Porém, seu cálculo pode ser realizado de outras maneiras, que valem a pena serem expostas a fim de melhorar a percepção acerca de outras propriedades que tem influência sobre essa quantidade. Uma delas é através da Lei de Darcy para cada fase. Ao se calcular a velocidade total $u_t = u_w + u_q$, temos:

$$u_t = -\frac{kk_{rw}}{\mu_w}\frac{dP}{dx} - \frac{kk_{rg}}{\mu_g}\frac{dP}{dx} = -\left(\frac{k_{rw}}{\mu_w} + \frac{k_{rg}}{\mu_g}\right)k\frac{dP}{dx} = -(\lambda_w + \lambda_g)k\frac{dP}{dx} = -\lambda_t k\frac{dP}{dx},$$

de onde pode-se escrever

$$\frac{dP}{dx} = -\frac{u_t}{k} \frac{1}{\lambda_t}.$$
(2.30)

Assim, ΔP , também pode ser calculada como

$$\Delta P = \int_0^L \frac{dP}{dx} dx = \frac{u_t}{k} \int_0^L \frac{1}{\lambda_t} dx.$$
(2.31)

O tempo de *breakthrough* é o período necessário para que um fluido injetado alcance a saída do domínio, que representa o poço de produção no reservatório, marcando assim o início da produção desse fluido. No contexto deste trabalho, esse cálculo foi feito observando-se o instante da simulação em que a saturação de gás atinge uma saturação maior que uma tolerância ε no contorno direito (saída). Nesse trabalho, essa tolerância foi definida como $\varepsilon = 10^{-5}$.

Essas QoIs são fundamentais para compreender o comportamento do escoamento bifásico em meios porosos. Através delas, a avaliação das características de cada experimento e dos diferentes cenários paramétricos, bem como seus impactos sobre o escoamento, foram quantificadas.

2.5 FUNDAMENTOS PARA QUANTIFICAÇÃO DE INCERTEZAS

Na quantificação de incertezas são avaliadas métricas estatísticas como média, variância, desvio padrão, percentil e coeficiente de variação, as quais serão brevemente descritas a seguir.

O valor esperado (também chamado de média ou primeiro momento) de uma quantidade \mathcal{Y} é uma medida de tendência central que indica o valor médio dos dados, e é definido como:

$$\mathbb{E}[\mathcal{Y}] = \mu[\mathcal{Y}] = \int_{\Omega_{\mathcal{Y}}} y \rho_{\mathcal{Y}}(y) dy, \qquad (2.32)$$

onde $\rho_{\mathcal{Y}}(y)$ é a função densidade de probabilidade.

O desvio padrão é uma medida de dispersão que indica a variabilidade dos dados em relação à média, e é dado por:

$$\sigma[\mathcal{Y}] = \sqrt{\mathbb{V}[\mathcal{Y}]},\tag{2.33}$$
onde a variância $\mathbb{V}[\mathcal{Y}]$ é o segundo momento de \mathcal{Y} :

$$\mathbb{V}[\mathcal{Y}] = \int_{\Omega_{\mathcal{Y}}} (y - \mathbb{E}[\mathcal{Y}])^2 \rho_{\mathcal{Y}}(y) dy.$$
(2.34)

O coeficiente de variação é a razão entre a média e o desvio padrão, e pode ser definido apenas para quantidades positivas, conforme a seguir:

$$CoV = \frac{\sigma}{\mu}.$$
(2.35)

O $(\beta \cdot 100)$ -ésimo percentil de \mathcal{Y} , denotado como $y[\beta]$, é uma medida estatística que indica a porcentagem de observações de \mathcal{Y} sob o qual $(\beta \cdot 100)\%$ das observações se encontram. Para ilustrar, o 10° percentil de \mathcal{Y} fornece um \mathcal{Y} para o qual 10% das avaliações do modelo darão um resultado inferior ao valor dele. O $(\beta \cdot 100)$ -ésimo percentil de \mathcal{Y} é definido por:

$$\beta = \int_{-\infty}^{\mathcal{Y}_{\beta}} \rho_{\mathcal{Y}}(y) dy.$$
(2.36)

Ao se combinar dois percentis, um intervalo de previsão (IP) de $(\beta \cdot 100)\%$ das saídas I_{β} é definido tal que a probabilidade de encontrar um valor y fora desse intervalo é $(\beta \cdot 50)\%$ em cada lado. Por exemplo, o intervalo de previsão de 90% nos fornece o intervalo no qual 90% dos resultados de \mathcal{Y} ocorrem, implicando que 5% dos resultados estão acima e 5% estão abaixo deste intervalo. Para este cenário, o IP que abrange 90% das avaliações de \mathcal{Y} é definido como o intervalo $I_{0.1} = [y_{[0.05]}, y_{[0.95]}].$

3 MÉTODOS COMPUTACIONAIS

Neste capítulo, serão apresentados conceitos e definições para os métodos e ferramentas utilizados nos experimentos computacionais de quantificação de incertezas e análise de sensibilidade.

3.1 EMULADORES OU MODELOS SUBSTITUTOS

Também chamado de modelo substituto (ou *surrogate model*, no inglês), um emulador consiste em uma função cujo objetivo é aproximar a saída de um problema complexo de modo mais rápido. Sua avaliação é pouco custosa, pois consiste na estimação das saídas do modelo original, ou seja, entregam resultados próximos daqueles obtidos através da resolução do problema direto para um mesmo conjunto de dados de entrada. Assim, representam uma alternativa computacionalmente vantajosa e útil.

Ao tomar o problema descrito pela Equação (2.19) como exemplo, principalmente quando se usa uma malha de elementos finitos mais refinada (alto número de elementos) na solução numérica em um problema 2D, a simulação tem um alto custo computacional.

A partir do momento em que se precisa realizar estudos que necessitam de uma amostragem mínima do problema direto para convergência dos resultados, como UQ e SA, essa maneira mais preliminar de realização das simulações através da resolução do problema direto, se torna bastante custosa, por vezes até inviabilizando o desenvolvimento dos experimentos. Em vista disso, surgiram técnicas para minimizar a quantidade de amostras necessárias para se atingir resultados convergentes. Um exemplo bastante empregado, é o uso de emuladores (XIU; KARNIADAKIS, 2002; SMITH, 2013).

Como é ilustrado na Figura 5, com algumas amostras resolvidas pelo problema direto, é possível construir um emulador para obter uma alternativa menos custosa para estimar os resultados de um conjunto de amostras dos parâmetros exigidos em análises de UQ e SA.



Figura 5 – Fluxograma do funcionamento de um emulador.

Existem diferentes alternativas de técnicas disponíveis para a construção de emuladores, incluindo processos gaussianos (GP) (RASMUSSEN, 2003), redes neurais artificiais (YANG; PERDIKARIS, 2019), expansão em caos polinomial (XIU; KARNIADAKIS, 2002), entre outras abordagens. No contexto da engenharia de petróleo, a expansão em caos polinomial (PCE) foi empregada com êxito na quantificação de incertezas e na análise de sensibilidade em alguns trabalhos (VALDEZ et al., 2020; CIRIELLO; FEDERICO, 2012; LI; SARMA; ZHANG, 2011; HAJIZADEH, 2011; MIRANDA et al., 2022). Por esta razão, optou-se por empregá-la no desenvolvimento dos estudos deste trabalho.

3.2 QUANTIFICAÇÃO DE INCERTEZAS

A quantificação de incertezas (UQ, do termo em inglês *uncertainty quantification*), constitui um procedimento essencial para avaliar a incerteza inerente aos resultados de modelos matemáticos dependentes de parâmetros de entrada sujeitos a incertezas. Existem diferentes métodos para realizar a propagação de incertezas, sendo que a escolha do método é condicionada às características do modelo em questão e às incertezas associadas aos seus parâmetros. No âmbito desta investigação, os métodos de UQ são categorizados, de maneira abrangente, em métodos locais e globais. Enquanto os métodos locais concentramse na análise do efeito provocado por pequenas variações em torno de um valor de referência de uma entrada do modelo, mantendo as demais constantes, os métodos globais abarcam uma abordagem mais abrangente, buscando compreender as interações sistêmicas em um contexto mais amplo.

Neste estudo, optou-se por métodos globais não-intrusivos, caracterizados pela

obtenção dos resultados do modelo através de um solucionador determinístico operado em um conjunto de amostras de entradas distintas. Tal abordagem não-intrusiva, alheia a intervenções no código numérico dos modelos existentes, mostra-se particularmente adequada para a personalização de modelos de escoamento em meios porosos em que simuladores já existentes podem ser usados sem a necessidade de alteração em seu código. Exemplos de métodos globais não-intrusivos são o método de Monte Carlo (FISHMAN, 2013) e a expansão em Caos Polinomial (SUDRET, 2008).

O objetivo da UQ é caracterizar a distribuição probabilística subjacente ao modelo estocástico f e sua saída \mathcal{Y} , resultante das incertezas associadas aos parâmetros de entrada \boldsymbol{X} , como ilustrado na Figura 5. Para tanto, métricas, como os momentos estatísticos, os percentis e os intervalos de confiança, são amplamente empregadas na quantificação de incertezas (XIU; KARNIADAKIS, 2002; SULLIVAN, 2015; SMITH, 2013).

3.2.1 Método Monte Carlo

Dentre os métodos de propagação de incertezas, o mais difundido devido à sua simplicidade e aplicabilidade abrangente é o Método de Monte Carlo (MC) (FISHMAN, 2013). O método básico pode ser facilmente implementado em qualquer linguagem de programação com suporte para geração de números aleatórios e envolve três etapas principais:

- 1. Amostragem de um conjunto de N_s entradas $\{X\}_{i=1}^{N_s}$ do espaço de entrada Ω_X , definido pela função de densidade de probabilidade conjunta ρ_X de X utilizando algum método de amostragem;
- 2. Avaliação do modelo determinístico $f(\mathbf{X})$ para cada amostra \mathbf{X}_i , resultando em um conjunto de saídas $\{y\}_{i=1}^{N_s}$;
- 3. Estimação direta de medidas de incerteza e índices de sensibilidade a partir de $\{y\}_{i=1}^{N_s}$.

O erro de aproximação assintótica para medidas calculadas com MC é $\varepsilon_Y = \frac{\sigma_Y}{\sqrt{N_s}}$, onde σ_Y é o desvio padrão da saída e N_s é o número total de amostras. No entanto, a amostragem exigida para obter estimativas precisas e os momentos estatísticos é alta, então, se, além disso, a avaliação do modelo f for computacionalmente custosa, se torna inviável a execução do método para se obter resultados precisos.

No caso do método MC, devido a sua implementação, algumas métricas apresentadas na Seção 2.5 são calculadas de maneira discreta. A seguir são descritos os cálculos de média, variância e percentil dentro desse contexto. A média, definida na Equação (2.32), pode ser estimada a partir das avaliações de \mathcal{Y} da seguinte maneira:

$$\mathbb{E}[\mathcal{Y}] \approx \mathbb{E}_{\mathrm{MC}}[\mathcal{Y}] = \frac{1}{N_s} \sum_{s=1}^{N_s} y^{(s)}.$$
(3.1)

Da mesma forma, a variância, definida em (2.34) pode ser estimada como:

$$\mathbb{V}[\mathcal{Y}] \approx \mathbb{V}_{\mathrm{MC}}[\mathcal{Y}] = \frac{1}{N_s - 1} \sum_{s=1}^{N_s} \left(y^{(s)} - \mathbb{E}_{\mathrm{MC}}[\mathcal{Y}] \right)^2.$$
(3.2)

Os IPs, conforme definido na Seção 2.5, são facilmente estimados classificando inicialmente as avaliações $\{y\}_{s=1}^{N_s}$ em ordem crescente. A partir da reordenação, os valores correspondentes aos percentis desejados no intervalo $(\beta 100/2, 100 - \beta 100/2)\%$, conforme definido na Equação (2.36), são estimados como:

$$I_{\beta} \approx \left[y'^{(N_s \beta/2)}, y'^{(N_s(1-\beta/2))} \right].$$
 (3.3)

3.3 EXPANSÃO EM CAOS POLINOMIAL

A expansão em caos polinomial (PCE) consiste em uma técnica para gerar aproximações computacionais e de baixo custo para uma quantidade de interesse \mathcal{Y} , geralmente obtida após a resolução das equações governantes (o problema direto), por meio de sua representação espectral em uma base adequadamente construída de funções polinomiais. Por isso, tem sido utilizada em diversas aplicações como alternativa ao método clássico de Monte Carlo (MC), devido a suas propriedades de convergência rápida. Ela permite criar uma relação da resposta do modelo e as variáveis aleatórias (ou parâmetros de entrada do modelo) através de uma expansão polinomial, que possui um baixo custo de avaliação. O detalhamento de sua construção e teoria não serão abordados aqui, para mais detalhes veja Marelli, Lüthen e Sudret (2022).

Seja $f(\mathbf{X})$ o simulador da quantidade de interesse \mathcal{Y} , onde \mathbf{X} é vetor de parâmetros de entrada. Esta quantidade é expandida em uma série de polinômios ortogonais Ψ_j com entradas aleatórias. O PCE para \mathcal{Y} é dado por:

$$\mathcal{Y} = \sum_{j=0}^{\infty} b_j \Psi_j(\mathbf{X}) = f_{PCE}(\mathbf{X}), \qquad (3.4)$$

onde b_j são os coeficientes e $\Psi_j(\mathbf{X})$ são os polinômios ortogonais com suas respectivas variáveis aleatórias X_1, X_2, \ldots, X_n . Na prática, a expansão é truncada em um número finito de termos, e a aproximação de \mathcal{Y} , obtida pelo emulador f_{PCE} , é denotada por $\hat{\mathcal{Y}}$ e dada por:

$$f(\mathbf{X}) = \mathcal{Y} \approx \hat{\mathcal{Y}} = \sum_{j=0}^{N_s - 1} c_j \Psi_j(\mathbf{X}) = f_{PCE}(\mathbf{X}), \qquad (3.5)$$

onde c_j são os coeficientes da expansão a ser determinada e N_s é o número de amostras.

Descrições detalhadas de famílias de polinômios ortogonais e as distribuições para as quais eles são ortogonais são fornecidas em Xiu e Karniadakis (2002). Neste trabalho, foi aplicada apenas a distribuição normal $\mathcal{N}(\mu, \sigma)$. Também chamada de distribuição gaussiana, sua família polinomial é a Hermite e sua distribuição é dada por $\frac{1}{\sqrt{2\pi}}e^{-x^2/2}$.

As configurações da biblioteca UQLab (MARELLI; SUDRET, 2014; SUDRET, 2014) possibilitam uma escolha de grau adaptativa para cada cenário e construção de polinômios esparsos. Além disso, após a construção dos emuladores, a biblioteca disponibiliza momentos estatísticos, índices de sensibilidade de Sobol e métricas de precisão.

3.3.1 Quantificação de Incertezas através da Expansão em Caos Polinomial

Através de um emulador PCE, a obtenção dos momentos estatísticos se dá mediante cálculos com base nos coeficientes da expansão, com implementação simples e direta. Tratase de uma alternativa muito menos custosa e muito mais rápida que outros métodos, como o MC. Por exemplo, para o cálculo da média usa-se a propriedade de ortogonalidade das funções de base $\Psi_j(\mathbf{X})$ da PCE e a propriedade de média zero, pelo fato de que $\mathbb{E}[\Psi_0] = 1$. Assim, o valor esperado é calculado conforme a seguir:

$$\mathbb{E}[\mathcal{Y}] \approx \mathbb{E}[f_{PCE}(\mathbf{X})] = \mathbb{E}\left[\sum_{j=0}^{N_s-1} c_j \Psi_j(\mathbf{Z})\right] = c_0[\Psi_0] + c_1[\Psi_1] + \dots + c_{N_s-1}[\Psi_{N_s-1}] = c_0.$$
(3.6)

Um desenvolvimento similar permite o cálculo da variância a partir dos coeficientes da seguinte forma:

$$\mathbb{V}[\mathcal{Y}] \approx \mathbb{V}[f_{PCE}(\mathbf{X})] = \mathbb{E}[(f_{PCE}(\mathbf{X}) - \mathbb{E}[f_{PCE}(\mathbf{X})])^2] = \sum_{j=1}^{N_s-1} c_j^2 \mathbb{E}[\Psi_j^2(\mathbf{Z})]. \quad (3.7)$$

Para maiores detalhes veja (ECK et al., 2016).

3.3.2 Métricas

Para avaliar a qualidade dos ajustes dos parâmetros e dos emuladores, algumas métricas foram adotadas neste trabalho. O coeficiente de determinação, R^2 , que é uma medida de ajuste para um modelo linearizado, foi utilizado para avaliar a relação entre o resultado do experimento com o seu resultado esperado. É definido pela Equação (3.8) e quanto mais próximo de 1, melhor é a aproximação (DUBREUIL et al., 2014).

$$R^{2} = 1 - \frac{\sum_{i=1}^{N_{s}} \left(f(\mathbf{x}^{(i)}) - f_{PCE}(\mathbf{x}^{(i)}) \right)^{2}}{\sum_{i=1}^{N_{s}} \left(f(\mathbf{x}^{(i)}) - \mu_{\hat{y}} \right)^{2}}, \quad \text{onde} \quad \mu_{\hat{y}} = \frac{1}{N_{s}} \sum_{i=1}^{N_{s}} f(\mathbf{x}^{(i)}).$$
(3.8)

Outra métrica utilizada, principalmente para avaliação de emuladores, foi a validação cruzada utilizando o método k-fold, adotando k = 1. Este caso específico k é chamado de *leave-one-out* (LOO), originalmente proposto por Allen (1971) e Geisser (1975). Trata-se de dividir os dados a serem avaliados pelo emulador em N_s subconjuntos, com tamanho $N_s - 1$, construindo assim, metamodelos da forma $f_{PCE\setminus i}(\mathbf{X}\setminus\mathbf{x}^{(i)})$, tal que $\mathbf{X}\setminus\mathbf{x}^{(i)} = {\mathbf{x}^{(j)}, j = 1, ..., N_s, j \neq i}$. Dessa forma, o emulador é criado usando cada subconjunto e deixando um dado de fora. Assim, a previsão do ponto $\mathbf{x}^{(i)}$ é avaliada para cada ponto e comparada com o valor real $y^{(i)}$ e um erro associado ϵ_{LOO} é obtido (BLATMAN; SUDRET, 2010). Ele pode ser obtido, após calculados os erros, da seguinte maneira:

$$\epsilon_{LOO} = \frac{1}{N_s} \sum_{i=1}^{N_s} \left(f(\mathbf{x}^{(i)}) - f_{PCE \setminus i}(x^{(i)}) \right)^2.$$
(3.9)

3.4 ANÁLISE DE SENSIBILIDADE

Para se realizar uma avaliação de como os parâmetros de entrada \mathbf{X} e suas interações contribuem para as variações de uma determinada quantidade de interesse escalar \mathcal{Y} , utilizou-se de análise de sensibilidade (SA, do inglês *Sensitivity Analysis*) global baseada em variância. Através dela, é possível analisar os parâmetros escolhidos a fim de identificar qual deles possui a maior influência direta sobre determinada quantidade de interesse e quais não influenciam a quantidade de forma significativa.

Neste estudo, optou-se por utilizar os índices Sobol como técnica de análise de sensibilidade global (SALTELLI et al., 2008). O índice Sobol de primeira ordem (ou índice de Sobol principal) expressa como um parâmetro de entrada X_i contribui diretamente para a variância da saída \mathcal{Y} , e é dado por:

$$S_{i} = \frac{\mathbb{V}[\mathbb{E}[\mathcal{Y}|\mathbf{x}_{i}]]}{\mathbb{V}[\mathcal{Y}]},$$
(3.10)

onde \mathbb{E} denota o valor esperado (ou esperança), \mathbb{V} , a variância e $\mathbb{E}[\mathcal{Y}|\mathbf{x}_i]$, o valor esperado da saída \mathcal{Y} quando o parâmetro \mathbf{x}_i é conhecido.

O índice Sobol de primeira ordem não leva em consideração possíveis interações entre os parâmetros e os seus efeitos na variância da saída, pois representa a redução esperada na variância da quantidade analisada quando o parâmetro \mathbf{x}_i é fixo. Sendo assim, pode ser utilizado o índice de Sobol total para estimar as mudanças em $\mathbb{V}[\mathcal{Y}]$ considerando as interações de primeira e de alta ordem do *i*-ésimo parâmetro com os demais. O índice de Sobol total relativo a \mathbf{x}_i para a quantidade \mathcal{Y} é denotado por S_{Ti} e é dado por:

$$S_{Ti} = \frac{\mathbb{E}[\mathbb{V}[\mathcal{Y}|\mathbf{x}_{\sim i}]]}{\mathbb{V}[\mathcal{Y}]} = 1 - \frac{\mathbb{V}[\mathbb{E}[\mathcal{Y}|\mathbf{x}_{\sim i}]]}{\mathbb{V}[\mathcal{Y}]},$$
(3.11)

onde $x_{\sim i}$ denota o conjunto de todos os parâmetros de entrada, exceto o parâmetro \mathbf{x}_i .

Existem diferentes maneiras para se calcular os índices de Sobol descritas na literatura (HERMAN; USHER, 2017; SALTELLI, 2002). Para as análises deste trabalho, os

índices de Sobol principal (S_i) e total (S_{Ti}) foram calculados através do emulador construído com a PCE, utilizando o pacote UQLab, disponível para a linguagem de programação Python (MARELLI et al., 2022). Vale destacar que os índices de Sobol podem ser obtidos de forma analítica a partir da representação do emulador PCE sem a necessidade de simulação via Monte Carlo (SUDRET, 2008).

3.5 EXPANSÃO DE KARHUNEN-LOÉVE

Neste trabalho, com o objetivo de representar a perturbação aleatória e correlacionada para quantificar e avaliar o impacto de incertezas no campo de permeabilidade $k(\mathbf{x})$ foi utilizada a expansão de Karhunen-Loève (KL), desenvolvida por Karhunen (1947), Loève (1977) e Kac e Siegert (1947). Para ser considerado um parâmetro de entrada do modelo que apresenta variação espacial, o valor da permeabilidade será representado como um campo aleatório.

No que segue, vamos considerar um campo escalar como a soma de um campo aleatório, representando por K e o valor original do campo (ou caso de referência) em cada ponto k_{campo} . Sendo assim, temos que:

$$k(\mathbf{x}, \theta) = k_{campo}(\mathbf{x}) + K(\mathbf{x}, \theta), \qquad (3.12)$$

onde θ representa a dependência de k com relação a alguma propriedade aleatória. Qualquer campo aleatório de segunda ordem $K(\mathbf{x}, \theta)$ definido sobre um domínio D pode ser representado pela expansão de Karhunen-Loève, desde que definidos um valor esperado para ele e uma função de covariância. Também conhecida como decomposição ortogonal própria, uma vez que é definida por uma combinação linear de funções de bases ortogonais, ela pode representar a perturbação K como um campo aleatório da seguinte forma:

$$K(\mathbf{x},\theta) = \bar{K}(\mathbf{x}) + \sum_{i=1}^{\infty} \eta_i(\theta) \sqrt{\lambda_i} \phi_i(\mathbf{x}), \qquad (3.13)$$

onde $\bar{K}(\mathbf{x})$ é o valor esperado do campo estocástico em \mathbf{x} e { $\eta_i(\theta)$ } representa um conjunto de variáveis aleatórias independentes e ($\lambda_i, \phi_i(\mathbf{x})$) são os autovalores e autofunções da seguinte integral, conhecida como integral de Fredholm (GRATIET; MARELLI; SUDRET, 2017):

$$\int_{D} C(\mathbf{y}, \mathbf{x}) \phi_i(\mathbf{y}) \mathrm{d}\mathbf{y} = \lambda_i \boldsymbol{\phi}_i(\mathbf{x}), \qquad (3.14)$$

onde D é o domínio de interesse e $C(\mathbf{y}, \mathbf{x})$ é a função de covariância, que será detalhada posteriormente. No contexto de implementação, a série infinita na Equação (3.13) deve ser truncada considerando os termos correspondentes aos n_{KL} maiores autovalores.

$$K(\mathbf{x},\theta) \approx \bar{K}(\mathbf{x}) + \sum_{i=1}^{n_{KL}} \eta_i(\theta) \sqrt{\lambda_i} \phi_i(\mathbf{x}), \qquad (3.15)$$

44

As variáveis aleatórias η_i , em contextos de representação de campos gaussianos, são definidas como distribuições normais. Elas podem ser estabelecidas como $\mathcal{N}(0, \sigma)$ ou como distribuições normais padrão. Neste último caso, o grau de incerteza é ajustado através de um parâmetro σ que multiplica todo o somatório, conforme abordado em detalhes por Sudret (2014).

De forma prática, para se calcular a expansão KL da equação (3.12), o seguinte problema de autovalores generalizado precisa ser resolvido:

$$\mathbf{T}\boldsymbol{\phi}_i = \lambda_i \mathbf{M}\boldsymbol{\phi}_i, \tag{3.16}$$

onde \mathbf{M} é dado pela seguinte equação:

$$M_{ij} = \int_D v_i(\mathbf{x}) v_j(\mathbf{x}) d\mathbf{x}, \qquad (3.17)$$

e ${\bf T}$ é a matriz dada pela equação a seguir:

$$\mathbf{T} = \mathbf{M}^T \mathbf{Q} \mathbf{M},\tag{3.18}$$

onde \mathbf{Q} é a matriz de covariância, obtida através da resolução da função de covariância para cada ponto, ou seja, $\mathbf{Q}_{ij} = C(\mathbf{x}_i, \mathbf{x}_j)$. O cálculo de \mathbf{M} foi realizado através da biblioteca FENICS (ALNÆS et al., 2015).

A expansão KL truncada reduz a dimensionalidade do espaço estocástico de infinito para n_{KL} e fornece uma representação paramétrica do campo aleatório $K(\mathbf{x}, \theta)$ através de n_{KL} variáveis aleatórias. A incerteza (ou aleatoriedade) no campo de permeabilidade passa a ser oriunda das n_{KL} variáveis aleatórios independentes $\eta_1, \ldots, \eta_{n_{KL}}$.

Essa é uma abordagem interessante para introduzir dispersão no campo, pois leva em conta a correlação espacial dos elementos no domínio e, como mencionado, reduz a dimensionalidade do problema. Em contrapartida, o seu cálculo também é custoso, pois, apesar de a matriz de massa \mathbf{M} ser esparsa na maioria dos casos, a matriz \mathbf{Q} é densa. Neste trabalho, nenhum tratamento especial para reduzir as operações e armazenamento das matrizes \mathbf{Q} e, consequentemente, \mathbf{T} foi adotado, o que tornou a aplicação da expansão KL altamente custosa, sobretudo nos experimentos em 2D.

Na prática, ao modelar propriedades de materiais, como a permeabilidade absoluta de uma rocha, que são naturalmente valores positivos, a expansão KL tradicional poderia incluir resultados negativos, que não fazem sentido fisicamente. A abordagem adotada neste trabalho envolve a aplicação da expansão conforme definida na Equação (3.15), porém, aplicada a um campo *log-permeabilidade*. Isso implica que a expansão é realizada após o campo ser submetido a essa transformação.

3.5.1 Função de Covariância

A função de covariância $C(\mathbf{y}, \mathbf{x})$ normalmente não é conhecida previamente. Muitas vezes se levanta a hipótese de uma forma geral com coeficientes que quantificam propriedades do campo aleatório ou se constrói por meio de amostragem (SMITH, 2013).

Existem escolhas de funções que são comumente empregadas nas expansões de Karhunen-Loève e a sua determinação é influenciada por diversos fatores relacionados ao problema. A função de covariância exponencial quadrada, que pode ser interpretada como uma função de base radial, é comumente empregada em modelos substitutos de Processos Gaussianos (GP) e outros algoritmos de aprendizado de máquina. Essa função é dada por:

$$C(\mathbf{y}, \mathbf{x}) = \sigma_{\mathrm{KL}}^2 \exp\left(-\frac{|\mathbf{y} - \mathbf{x}|^2}{2l_{KL}^2}\right) \quad \forall \mathbf{x}, \mathbf{y} \in D.$$
(3.19)

onde l_{KL} é o tamanho de correlação que define a escala espacial sobre a qual o campo exibe correlação significativa e σ_{KL}^2 denota a variância de um ruído de observação ϵ , ou seja, é a variância do campo (RODRÍGUEZ-CANTANO; SUNDNES; ROGNES, 2019).

A função de covariância exponencial é outro exemplo bastante utilizado na literatura, porém, a função de covariância exponencial quadrada apresenta uma ligeira vantagem, devido ao fato de seus autovalores decaírem mais rapidamente. Outros exemplos de funções de covariância podem ser encontrados em Ghanem e Spanos (2003) e em Smith (2013).

Para ilustrar a função de covariância em um caso unidimensional, a partir da equação (3.19), considera-se a função de covariância $q(x) = exp(\frac{-(x-s)^2}{2l_{KL}^2})$, onde s é um ponto do domínio de D = [-1, 1]. Ela é representada na Figura 6 (a esquerda), utilizando os parâmetros $l_{KL} = \frac{4}{5}$ e $\sigma_{KL} = 1$. A visualização para a correlação espacial para a função (3.19) como uma matriz pode ser observada ao lado direito da Figura 6.





Figura 6 – Gráficos da função de covariância exponencial quadrada para três valores diferentes de s (esquerda) e do mapa de cor da covariância (direita), correspondentes à função da Equação (3.19).

3.5.2 Exemplo Unidimensional com Solução Analítica

Dentre as possibilidades de funções de covariância normalmente empregadas, outro exemplo é a função exponencial absoluta, dada por:

$$C(x,y) = \sigma_{\rm KL}^2 \exp\left(-\frac{|x-y|}{l_{KL}}\right) \quad \forall x,y \in D.$$
(3.20)

Em Ghanem e Spanos (2003) foi apresentada uma solução analítica onde os seus autovalores λ_n e autovetores $\phi_n(x)$ (solução do problema (3.16)) são dados, em função de v_n , conforme a seguir:

$$\lambda_{n} = \sigma_{KL}^{2} \frac{2l_{KL}}{1 + l_{kl}^{2} v_{n}^{2}}, \quad \phi_{n}(x) = \begin{cases} \frac{\sin(v_{n}x)}{\sqrt{1 - \frac{\sin(2v_{n})}{2v_{n}}}}, \text{ se n \acute{e} par,} \\ \frac{\cos(v_{n}x)}{\sqrt{1 + \frac{\sin(2v_{n})}{2v_{n}}}}, \text{ se n \acute{e} impar,} \end{cases}$$
(3.21)

onde v_n é obtido como

$$v_n = \begin{cases} l_{KL}v + \tan(v) = 0, \text{ se n \'e par,} \\ 1 - l_{KL}v \tan(v) = 0, \text{ se n \'e impar.} \end{cases}$$
(3.22)

Tomando como base um exemplo 1D, no qual $l_{KL} = \frac{4}{5}$ e $\sigma_{KL}^2 = 1$, ao plotar as curvas $y = \frac{1}{l_{KL}v}$, $y = -l_{KL}v$ e $y = \tan(v)$, como mostrado na Figura 7, pode-se perceber que as raízes são os valores de v_n .



Figura 7 – Solução analítica do problema de autovalor da expansão KL para o caso 1D com função de covariância dada por (3.20).

Para este caso específico, assumiu-se $\sigma^2 = 1$ para simplificar expressões e é possível se considerar $l_{KL} \to \infty$, assim, o caso é considerado totalmente correlacionado resultando em $C(\boldsymbol{x}, \boldsymbol{y}) = 1$, o que indica conhecimento completo $\forall \boldsymbol{x} \in D$. Dessa forma, a expansão KL pode ser truncada após um termo. O problema de autovalor resultante é:

$$\int_D \phi_n(y) dy = \lambda_n \phi_n(x) = k_n,$$

onde k_n é uma constante. Da relação

$$C(\boldsymbol{x}, \boldsymbol{y}) = 1 = \sum_{n=1}^{\infty} \lambda_n \phi_n(x) \phi_n(y),$$

segue que

$$\lambda_1 = 2, \quad \phi_1(y) = \frac{\sqrt{2}}{2},$$

 $\lambda_n = 0, \quad n = 2, 3, \dots$

Desta forma, conclui-se que, para este caso específico a solução analítica é possível e é consistente com a observação da correlação completa.

3.5.3 Implementação Computacional

O objetivo de resolver analiticamente este caso particular 1D do problema descrito na Seção 3.5.2 consiste em verificar a solução numérica implementada, que também será explicada ao longo desta seção.

A solução numérica foi implementada de acordo com as equações apresentadas no início desta seção, através das ferramentas mencionadas na Seção 2.3. Em relação à expansão KL, deve-se ressaltar que ela deve ser truncada para implementação devido ao tratamento computacional e ao custo de se resolver o problema de autovalor para muitos termos. As Figuras 8 e 9 apresentam o decaimento dos autovalores e as autofunções, respectivamente. A função de covariância utilizada é a da Equação (3.20), com os parâmetros $l_{KL} = 0,75$ e $\sigma_{KL} = 1$. É possível visualizar como as soluções numérica e analítica chegam em resultados satisfatoriamente próximos para autovalores e autofunções.



Figura 8 – Decaimento dos autovalores do exemplo 1D para as resoluções analítica e numérica.



Figura 9 – Comparação dos cálculos analítico e numérico das autofunções dos modos $n = \{1, 2, 3, 4, 5, 15\}$ da expansão KL para o caso unidimensional.

De forma similar, um caso bidimensional pode ser observado com um domínio unitário discretizado em 360 elementos, e considerando $l_{KL} = 0, 5$ e $\sigma_{KL} = 0, 5$. A Figura 10 ilustra as autofunções associadas aos modos $n = \{1, 2, 3, 5, 7, 10, 12, 14, 16\}$.



Figura 10 – Autofunções da expansão KL para o caso bidimensional.

Na Figura 9 são ilustrados alguns modos da expansão. Como mostrado na Equação (3.15), cada ϕ_i está relacionado a um termo do somatório e sua contribuição no resultado está vinculada também a $\lambda_i \in \eta_i$. A contribuição aditiva de cada termo está ilustrada na Figura 11 em um exemplo de aplicação em um campo de permeabilidade 1D, ou seja, são ilustradas construções utilizando diferentes números de termos da expansão para uma única realização do processo em que o campo original é definido como uma constante, isto é, k(x) = 0.



Figura 11 – Realização única do processo da Equação (3.15) usando diferentes números de termos da expansão KL.

A Figura 12 apresenta cinco realizações da expansão KL com diferentes números de termos.



Figura 12 – Cinco realizações do processo da Equação (3.15) para diferentes números de termos da expansão KL $(n_{KL} = \{2, 5, 10, 15, 20\}).$

3.5.4 Truncamento da Expansão Karhunen-Loève

Ao realizar o truncamento da expansão KL, a escolha de um valor maior para n_{KL} resulta em uma melhor aproximação, uma vez que mais termos do somatório estão sendo considerados. No entanto, isso acarreta em um aumento significativo no custo computacional. Tal escolha é ditada pelos autovalores, relacionados com a função de covariância e com l_{KL} escolhidos. Uma maneira de analisar essa escolha é diretamente através da análise do decaimento dos autovalores (RODRÍGUEZ-CANTANO; SUNDNES; ROGNES, 2019). Outra maneira, utilizada neste trabalho, é através do cálculo da energia, que indica a contribuição proporcional que o somatório truncado em n_{KL} tem em relação àquele de dimensionalidade máxima, conforme definido na seguinte equação:

$$E = \frac{\sum_{j=1}^{n_{KL}} \lambda_j}{\sum_{j=1}^{N} \lambda_j},$$
(3.23)

onde N o número total de pontos em que o domínio D está discretizado. Na Figura 13 é possível visualizar os exemplos das análises de decaimento dos autovalores e cálculo da energia descritas nesta seção, onde para $n_{KL} = 16$ tem-se aproximadamente E = 0.8.



Figura 13 – Análises usadas como critério de truncamento para a Expansão KL, decaimento dos autovalores (esquerda) e a energia dos autovalores (direita).

3.5.5 Influência dos Parâmetros da Função de Covariância

Foi realizado um estudo para ilustrar a influência dos parâmetros σ_{KL} e l_{KL} da expansão KL sobre o problema de autovalor definido pelas Eqs. (3.13), (3.14) e (3.19). Os resultados são ilustrados na Figura 14 para um mesmo domínio definido por $\Omega = [-1, 1]$, onde é possível observar que quanto maior é a razão entre o valor do tamanho de correlação do campo l_{KL} e o tamanho do domínio, mais rápido é o decaimento dos autovalores e quanto maior o valor da variância do campo σ_{KL} , maiores são os autovalores, o que é esperado pela Equação (3.19).



Figura 14 – Influência dos parâmetros l_{KL} (esquerda) e σ_{KL} (direita) sobre os autovalores.

A Figura 15 ilustra a influência desses parâmetros por meio de exemplos de campos aleatórios gerados para diferentes valores. Observa-se que para o parâmetro l_{KL} que há uma tendência de suavização à medida que o seu valor aumenta, enquanto para o parâmetro σ_{KL} nota-se que quanto maior o seu valor, maior sua influência na perturbação aplicada ao campo.



Figura 15 – Exemplos de campos aleatórios gerados variando apenas os parâmetros l_{KL} (esquerda) e σ_{KL} (direita).

4 RESULTADOS

Este capítulo apresenta os resultados de quantificação de incertezas e análise de sensibilidade realizados no escoamento bifásico de água e gás na presença de espuma em meios porosos. Inicialmente, como etapa de verificação do simulador, dos modelos, dos dados de entrada e da técnica de UQ implementada, foi realizado um experimento inicial sobre os parâmetros escalares de espuma do modelo implementado em CMG/STARS. Este estudo, juntamente com os primeiros experimentos de incertezas ligadas a variação no campo de permeabilidades, através da técnica KL com emuladores PCE, foram conduzidos em domínios unidimensionais (1D) para simplificar o tratamento e verificação. Posteriormente, os estudos de incerteza no campo de permeabilidade foram expandidos para domínios bidimensionais (2D) aplicados a campos do projeto SPE-10 para analisar os diferentes impactos de incertezas na permeabilidade absoluta no escoamento com espuma.

Em resumo, os experimentos e resultados apresentados aqui estão organizados da seguinte forma:

- estudo em domínio unidimensional considerando incerteza nos parâmetros escalares do modelo STARS (Seção 4.2);
- estudo em domínio unidimensional considerando incertezas no campo de permeabilidade (Seção 4.3);
- estudo em domínio bidimensional considerando incertezas no campo de permeabilidade para um caso de espuma fraca e um caso de espuma forte (Seção 4.4).

4.1 CONFIGURAÇÕES

Os experimentos unidimensionais consideraram efeitos de gravidade (direção -x) e pressão capilar. Como visto em (CHANG; YORTSOS, 1992), esses efeitos deixam mais pronunciados as características da heterogeneidade em perfis de saturação ou na queda de pressão. Além de, particularmente no caso 2D, serem causa ou realce de fenômenos como fingering e gravity override.

O modelo de permeabilidade relativa usado foi de Corey-Brooks. O modelo de pressão capilar adotado em Paula et al. (2020) e nos experimentos deste trabalho foi o proposto em Kovscek, Patzek e Radke (1995), dado por:

$$P_c = \sigma_{wg} \sqrt{\frac{\phi}{k(\mathbf{x})}} \left(\frac{0.022}{S_w - 0.15}\right)^{0.2},$$
(4.1)

onde σ_{wg} denota a tensão interfacial gás-líquido.

As condições de simulação para o estudo da espuma foram estabelecidas com base nos resultados de experimentos de laboratório apresentados por Valdez et al. (2021), considerando três parâmetros do modelo de espuma STARS. Para analisar a sensibilidade global, foram utilizados os índices de Sobol, com as quedas de pressão e a produção acumulada de água como quantidades de interesse.

No conjunto de estudos sobre incerteza na permeabilidade em domínio unidimensional, as condições de simulação se mantiveram para valores fixos dos parâmetros de espuma, tratando apenas o campo de permeabilidades com a expansão KL e emuladores PCE.

Os experimentos numéricos em domínios bidimensionais foram conduzidos em dois contextos distintos, o primeiro foi realizado de acordo com as condições de simulação propostas por Paula et al. (2023), usando o modelo de espuma de Ashoori, Marchesin e Rossen (2010b); já o segundo considerou apenas a mudança na configuração de espuma, utilizando o modelo implementado em CMG/STARS. Para essas configurações, o volume total de fluido injetado foi de 0,8544PV (do inglês *Porous Volume*). Todas as simulações computacionais foram realizadas utilizando o simulador FOSSIL (PAULA et al., 2020).

O método usado para construir os emuladores foi o LARS (do inglês *Least Angle Regression*), o qual é o método padrão na implementação através da biblioteca UQLab. Uma abordagem padrão adotada neste trabalho, para a produção de água acumulada, foi analisar essas métricas que avaliam a qualidade de previsão dos emuladores apenas após o tempo de *breakthrough*, devido à baixa variabilidade dos dados antes desse instante.

Nos estudos de incerteza no campo de permeabilidade, que utilizam a expansão KL, escolheu-se o número de termos n_{KL} como 8, devido ao alto custo computacional enfrentado, especialmente nos casos 2D. Considerar um número maior de variáveis aleatórias tornaria o problema mais custoso.

Diante disso, a função de covariância utilizada em todos os experimentos foi a exponencial quadrada (Eq. 3.19), devido ao rápido decaimento dos autovalores que ela proporciona (AKBARABADI et al., 2015).

4.2 ESTUDO DOS PARÂMETROS ESCALARES DO MODELO STARS

Esse estudo considerou os parâmetros fmmob, sfdry e sfbet do termo F_{dry} do modelo STARS como variáveis aleatórias para se realizar estudos de quantificação de incertezas e análise de sensibilidade usando emuladores PCE. Com base nas condições de simulação descritas em Valdez et al. (2021), foram elaboradas simulações em 1D para utilizar a PCE implementada na UQLab para fins de quantificação de incerteza. O escoamento de água e gás na presença de espuma ocorre em uma amostra de rocha de comprimento 0, 1486 m, que foi discretizada com 100 elementos. A gravidade foi definida como $g = 9,81m/s^2$. O campo de permeabilidade é constante $k(x) = 2,7 \times 10^{-13}m^2$, assim como a porosidade $\phi = 0,1548$. O fluxo fracionário de injeção de gás foi $f_{ginj} = 0,5$. As propriedades dos fluidos envolvidos no escoamento e parâmetros do modelo podem ser observadas na Tabela 1.

Propriedade	Descrição	Valor
k_{rq}^0	Endpoint permeabilidade relativa fase gás	0,04
k_{rw}^{0}	Endpoint permeabilidade relativa fase água	0,302
n_g	Expoente do modelo Corey-Brooks fase gás	0,96
n_w	Expoente do modelo Corey-Brooks fase água	2,98
S^0_w	Saturação de água inicial	0,707
S_{gr}	Saturação de gás residual	0,293
S_{wc}	Saturação de água conata	0,4
$ ho_g$	Densidade do gás $[kg/m^3]$	1,165
$ ho_w$	Densidade da água $[kg/m^3]$	1000
μ_q^0	Viscosidade do gás $[Pa.s]$	$2,112\times10^{-5}$
$\mu_w^{ m J}$	Viscosidade da água $[Pa.s]$	5×10^{-4}
σ_{wg}	Tensão interfacial entre as fases água e gás $\left[N/m\right]$	0,033
u_t	Velocidade $[m/s]$	$1,45\times10^{-5}$

Tabela 1 – Propriedades dos fluidos consideradas para os estudos unidimensionais, baseadas no trabalho de Valdez et al. (2021).

Foram realizadas simulações a partir de diferentes conjuntos dos parâmetros de F_{dry} , considerados como variáveis aleatórias que seguem as distribuições normais descritas na Tabela 2, as quais foram escolhidas com base em Valdez et al. (2021). O tempo total simulado foi de 2000s, e o *breakthrough* ocorreu, em média, por volta de 780s.

Parâmetro	Distribuição
sfdry	$\mathcal{N}(0, 437664; 0, 01)$
fmmob	$\mathcal{N}(269, 342; 60, 0)$
sfbet	$\mathcal{N}(787, 458; 240)$

Tabela 2 – Distribuições escolhidas para os parâmetros do termo F_{dry} do modelo STARS

A Figura 16 mostra os gráficos dos perfis de saturação para diferentes instantes de tempo para o caso de referência deste estudo, ou seja, os parâmetros escalares do termo F_{dry} utilizados foram os valores médios das distribuições apresentadas na Tabela 2.



Figura 16 – Saturação de água para diferentes instantes de tempo de simulação do caso de referência do escoamento bifásico unidimensional com espuma.

A Figura 17 mostra os gráficos de queda de pressão e produção de água acumulada referentes ao caso analisado na Figura 16. É possível observar que o tempo de *breakthrough* acontece por volta de 780s e que há uma mudança de comportamento do escoamento neste tempo.



Figura 17 – Queda de pressão (esquerda) e produção de água acumulada (direita) de um caso de referência do escoamento bifásico com espuma unidimensional.

Foram feitas 500 simulações para se realizar quantificações de incertezas pelo método MC como referência e como forma de verificação dos emuladores PCE obtidos pelo UQLab. Através de N_s amostras geradas a partir das distribuições da Tabela 1, foi realizada a construção dos emuladores PCE para conduzir os estudos de UQ e SA. Ao todo foram construídos 48 emuladores, em 24 instantes de tempo diferentes para cada QoI, queda de pressão e produção de água acumulada. Esses instantes de tempo foram selecionados de forma a capturar o tempo de *breakthrough*.

Na Figura 18 são apresentados o erro LOO e o coeficiente R^2 para a queda de pressão e para a produção de água acumulada. Os emuladores foram construídos considerando um número de amostras $N_s = 170$, uma vez que essa quantidade já é suficiente para construí-los de maneira precisa e utilizando de uma quantidade reduzida em relação ao método MC, que utilizou $N_s = 500$. Os valores das métricas indicam emuladores confiáveis, pois o coeficiente de determinação R^2 está bastante próximo de 1 e o erro *LOO* é pequeno, para ambas as QoIs. Algumas flutuações podem ser observadas, resultado das características do fenômeno, que apresenta maior estabilidade após o instante de *breakthrough*, e também devido ao método de escolha adaptativa de graus do polinômio. O UQLab, permite especificar um intervalo de valores inteiros para o grau do polinômio a ser criado, sendo determinado o mais adequado por métodos e métricas próprias. Neste estudo, o grau variou entre 2 e 5.



Figura 18 – Erro LOO e Coeficiente R^2 dos PCEs do estudo da espuma 1D para a queda de pressão (esquerda) e para a produção de água acumulada (direita).

Em seguida, utilizando os emuladores construídos pelo UQLab, foi feita a propagação de incertezas para ambas as quantidades de interesse. Foram feitas comparações entre os valores médios e os intervalos de confiança [5%, 95%] para os métodos PCE e MC, como forma de verificação dos emuladores. Pode-se notar que os emuladores entregaram resultados próximos e consistentes aos resultados do MC, sobretudo com relação aos valores médios. Nota-se também que, neste estudo, mais incerteza é propagada para a queda de pressão do que para a produção, que apresenta pouca variabilidade.



Figura 19 – Quantificação de incertezas do estudo da espuma 1D, através do PCE e do MC, para queda de pressão (esquerda) e produção de água acumulada (direita).

A análise de sensibilidade realizada através dos cálculos dos índices de Sobol principais obtidos a partir dos emuladores é apresentada a seguir. Nota-se que o parâmetro fmmob domina o impacto em queda de pressão e produção em todos os instantes analisados. Há uma flutuação antes do instante do t_{BT} para os índices da produção devido à baixa variabilidade que essa quantidade apresenta neste estudo, sobretudo nesse momento do fenômeno, como pode ser observado na UQ.



Figura 20 – Análise de sensibilidade via índices de Sobol do estudo da espuma 1D para queda de pressão (esquerda) e produção de água acumulada (direita).

4.3 CAMPO DE PERMEABILIDADE PARA DOMÍNIO UNIDIMENSIONAL

Após a implementação dos emuladores PCE pelo UQLab apresentada na seção anterior, foi realizado um estudo da incerteza no campo de permeabilidade absoluta. A configuração das simulações e propriedades do escoamento seguiu o mesmo padrão estabelecido no estudo anterior. Os valores dos parâmetros de F_{dry} foram considerados como as médias das distribuições apresentadas na Tabela 1. Especificamente para o caso unidimensional, os resultados foram gerados considerando tanto a presença quanto a ausência de espuma. Nesse cenário, as variáveis aleatórias dos emuladores foram os parâmetros η_i da expansão KL, responsáveis por gerar as amostras dos campos aleatórios, conforme ilustrado na Figura 12. A expansão foi truncada em 8 termos e considerou-se $l_{KL} = 0, 1 e \sigma_{KL} = 0, 5, o que proporcionou uma energia de 60%. O valor da permeabilidade$ $<math>k_{campo}$, dado na Equação (3.12), foi de 2, 7×10^{-13} m². Os parâmetros η_i foram criados como distribuição normal com média 0 e desvio padrão igual a $k_{campo}/2$, ou seja, CoV = 50%.

A saturação ao longo do tempo para o caso com espuma foi apresentada na Figura 16, enquanto, na ausência de espuma, é apresentada na Figura 21. Pode-se notar que, na ausência de espuma, os níveis de saturação de água são mais altos e o escoamento é mais rápido.



Figura 21 – Saturação de água para diferentes instantes de tempo de simulação de um caso de referência do escoamento bifásico unidimensional sem espuma.

A Figura 22 exibe os perfis médios da queda de pressão e da produção de água acumulada, tanto na presença quanto na ausência de espuma. Como esperado, os resultados indicam que os valores das QoIs são maiores quando há espuma. Além disso, pode-se notar um retardamento do tempo de *breakthrough*, que ocorre aproximadamente em 780s para o caso com espuma, enquanto para o caso sem espuma ocorre por volta de 110s.



Figura 22 – Valor médio da queda de pressão (esquerda) e da produção de água acumulada (direita) das amostras utilizadas na construção do estudo da incerteza na permeabilidade 1D para os casos com espuma e sem espuma.

Foram feitas 2000 simulações para se realizar quantificações de incertezas pelo método MC. Em seguida, emuladores PCE foram construídos utilizando um conjunto de amostras de tamanho $N_s = 300$ para os casos com e sem espuma, e sua precisão foi avaliada. Mais uma vez, a seleção dos graus do polinômio foi realizada usando os métodos do UQLab, variando entre os graus 2 e 5. Neste experimento, os emuladores foram construídos apenas para a queda de pressão, uma vez que a produção não apresentou variabilidades significativas. Devido ao maior número de variáveis aleatórias em comparação com a UQ dos parâmetros escalares da espuma (amostragem de campos de permeabilidade absoluta), foi necessária uma amostragem maior tanto para a construção dos PCEs quanto para o método MC. A Figura 23 mostra as métricas obtidas para os PCEs deste caso, onde é possível observar que o caso sem espuma obteve resultados mais precisos. No entanto, os emuladores de ambos os casos são considerados satisfatórios.



Figura 23 – Erro LOO (esquerda) e Coeficiente R^2 (direita) dos PCEs da queda de pressão do estudo da incerteza na permeabilidade 1D para os casos com espuma e sem espuma.

Novamente, pode-se comparar os resultados de UQ obtidos pelos métodos PCE e MC. A construção dos emuladores PCE teve um custo computacional reduzido, uma vez que exigiu menos amostras em sua construção (300, em comparação com as 2000 amostras utilizadas pelo MC). Podemos concluir que os emuladores forneceram previsões satisfatórias, dado que os momentos estatísticos obtidos são próximos aos obtidos pelo método MC.



Figura 24 – Quantificação de incertezas do estudo da incerteza na permeabilidade 1D, através do PCE e do MC, para a queda de pressão: caso sem espuma (esquerda) e caso com espuma (direita).

4.4 CAMPO DE PERMEABILIDADE PARA DOMÍNIO BIDIMENSIONAL

4.4.1 Campo de Permeabilidades SPE-10

O 10° Projeto de Solução Comparativa SPE, realizado pela Sociedade de Engenheiros de Petróleo (SPE, do inglês *Society of Petroleum Engineers*), disponibiliza um conjunto de dados¹ que consiste em uma grade cartesiana regular dividida em $60 \times 220 \times 85$ (totalizando 1.122.000) elementos, cobrindo um domínio de dimensões $365, 76 \times 670, 56 \times 51, 816$ m. Este conjunto de dados foi projetado para permitir comparações equivalentes entre métodos de simulação de escoamento em meios porosos e avaliar a capacidade de prever o comportamento do fluido em um grande número de elementos.

O modelo é composto por duas formações rochosas distintas: a formação Tarbert, que representa as 35 camadas superiores, caracteriza-se por rochas de águas rasas com permeabilidade relativamente uniforme; e a formação Upper-Ness, representada pelas 50 camadas inferiores, que retrata rochas de águas mais profundas, frequentemente contendo canais com permeabilidade mais destacada. Embora qualitativamente diferentes, ambas as formações apresentam ampla variação na permeabilidade, abrangendo de 8 a 12 ordens de magnitude.

Particularmente neste trabalho, os experimentos bidimensionais foram conduzidos utilizando o campo de permeabilidade heterogêneo e isotrópico da camada 36 (formação Upper-Ness), que apresenta um canal preferencial mais evidente, conforme ilustrado na Figura 25.



Figura 25 – Campo de permeabilidade referente à camada 36 do projeto SPE-10.

Essa característica reforça a tendência do escoamento em meios porosos heterogêneos de sofrer o impacto de fenômenos como segregação gravitacional e *fingering* viscoso. Dessa forma, espera-se observar a atenuação desses efeitos pela espuma. Além disso, será possível avaliar como a característica do restante do domínio, apesar do caminho preferencial, pode influenciar nas quantidades de interesse, considerando a análise de incertezas com campos aleatórios criados a partir dele.

¹ disponível em: <https://www.spe.org/web/csp/datasets/set02.htm>

4.4.2 Aplicação da Expansão Karhunen-Loève

Para o caso dos experimentos bidimensionais deste trabalho, o termo k_{campo} (Eq. 3.12) foi representado pela camada 36 do campo SPE-10. As variáveis aleatórias η_i foram construídas como distribuições normais com média 0 e desvio padrão baseado no desvio do campo original ($\sigma = 0, 44182$), resultando em um coeficiente de variação (CoV) de aproximadamente 3,82%. Foram considerados os parâmetros $l_{KL} = 0,5$ e $\sigma_{KL} = 0,5$. A expansão KL foi truncada utilizando 8 termos, o que corresponde a uma energia de aproximadamente 75% para esse cenário.

Com o objetivo de realizar o estudo com o método MC, 500 amostras foram geradas. A Figura 26 apresenta alguns casos gerados através do método, através do campo de permeabilidade obtido ao lado de seus respectivos histogramas e valores de permeabilidade médios. Pode-se notar que as amostras geradas preservam a característica principal do campo de conter um caminho preferencial bem pronunciado, além de considerar incertezas em outras regiões do domínio.



Figura 26 – Histogramas da permeabilidade com seus respectivos valores médios (esquerda) e campos de permeabilidade (direita) de 4 amostras aleatórias do caso 2D.

A seguir serão apresentados dois estudos de escoamento de espuma no domínio bidimensional. Foram utilizadas a formulação de espuma proposta por Paula et al. (2020), implementada através do modelo cinético de primeira ordem (ASHOORI; MARCHESIN; ROSSEN, 2010b) (Equação 2.26), e a formulação de Valdez et al. (2021), implementada através do modelo implementado em CMG/STARS (CMG, 2019) (Equação 2.23).

Os parâmetros utilizados nesses modelos, então, foram configurados conforme a seguir:

Parâmetros do modelo STARS	Valor
sfdry	$0,\!437664$
fmmob	269,342
sfbet	$787,\!458$
Parâmetros do modelo Ashoori	Valor
$\overline{S^*_w}$	0,16
C_{mrf}	3,2
A	400

Tabela 3 – Parâmetros escolhidos para os modelos de espuma utilizados no estudo bidimensional.

Vale ressaltar que, o objetivo não é comparar os dois modelos, mas sim, realizar a simulação de configurações de espuma diferentes (conforme a Tabela 3), e avaliar cenários onde se tem uma espuma mais forte do que a outra. Por fins de simplicidade, os estudos foram denominados da seguinte forma:

- Caso A: Espuma fraca (modelo cinético de primeira ordem);
- Caso B: Espuma forte (modelo implementado em CMG/STARS).

Embora os modelos sejam diferentes, o modelo cinético de primeira ordem compartilha semelhanças com o fator de redução de mobilidade empregado no modelo STARS quando se considera a hipótese de equilíbrio local para o modelo cinético de primeira ordem. Os parâmetros C_{mrf} , $A \in S_w^*$ da Equação (2.26) são similares aos parâmetros fmmob, sfbet e sfdry da Equação (2.23) (VALDEZ et al., 2021).

4.4.3 Espuma com o Modelo Cinético de Primeira Ordem (Caso A)

Esse experimento teve por base todas as configurações de simulação, modelos e propriedades de fluidos apresentadas em Paula et al. (2020), conforme mostrado pela Tabela 4. Um estudo de quantificação de incertezas sobre a queda de pressão, a produção de água acumulada e o tempo de *breakthrough* foi realizado. Para esse caso, o modelo de espuma utilizado foi o cinético de primeira ordem (Eq. 2.26) e o tempo total simulado foi de 40000s.

Inicialmente os resultados de 4 casos diferentes obtidos como os resultados do método MC são apresentados para destacar a diferença no escoamento devido às incertezas no campo de permeabilidade. A partir da análise das quantidades de interesse para diferentes campos de permeabilidade nas condições de escoamento do caso A, é possível observar como a variação apenas na permeabilidade tem um grande impacto sobre o fenômeno, principalmente devido às diferentes possibilidades de caminhos preferenciais. A

Propriedade	Descrição	Valor
k_{rq}^0	Endpoint permeabilidade relativa fase gás	1,0
k_{rw}^{0}	Endpoint permeabilidade relativa fase água	0,7
n_g	Expoente da permeabilidade relativa fase gás	3
n_w	Expoente da permeabilidade relativa fase água	3
S_w^0	Saturação de água inicial	1,0
S_{gr}	Saturação de gás residual	0,0
S_{wc}	Saturação de água conata	0, 38
σ_{wg}	Tensão interfacial entre as fases água e gás $[N/m]$	0,033
$ ho_g$	Densidade do gás $[kg/m^3]$	1,165
$ ho_w$	Densidade da água $[kg/m^3]$	1000
μ_q^0	Viscosidade do gás $[Pa.s]$	$1,8 imes 10^{-5}$
$\check{\mu_w}$	Viscosidade da água $[Pa.s]$	1×10^{-3}
n_D	Textura de espuma	0,5
n_D^0	Textura de espuma inicial	0,0
n_{max}	Textura de espuma máxima $[m^{-3}]$	1×10^{12}
K_c	Constante de tempo $[1/s]$	0,1
C_s	Concentração de surfactante	1,0
C_s^0	Concentração de surfactante inicial	1,0
u_t	Velocidade $[m/s]$	$1,4111 \times 10^{-5}$

Tabela 4 – Propriedades dos fluidos consideradas para os estudos bidimensionais, baseadas no trabalho de Paula et al. (2020)

queda de pressão, a produção e as saturações em seis instantes de tempo diferentes para os casos apresentados na Figura 26 podem ser observadas nas Figuras 27 e 28.



Figura 27 – Gráficos da queda de pressão (esquerda) e da produção (direita) para 4 amostras aleatórias do caso A.



Figura 28 – Evolução temporal da saturação para 4 amostras aleatórias do caso A.

No caso 2D, os emuladores para a queda de pressão e a produção foram desenvolvidos em 100 intervalos de tempo igualmente espaçados. Isso resultou em um total de 201 emuladores para análise, incluindo o emulador para o tempo de *breakthrough*. Um estudo comparativo foi realizado para avaliar a qualidade dos emuladores, analisando suas métricas para 6 construções, considerando diferentes números de amostras, conforme o conjunto:

 $N_s = \{50, 100, 150, 200, 300, 400, 500\}$. Para a construção dos resultados de referência através do método MC, foi utilizado $N_s = 500$. Neste caso, o método de escolha adaptativa selecionou graus entre 3 e 9 para os polinômios dos emuladores PCE. A Figura 29 apresenta, para a queda de pressão, o erro LOO e o coeficiente de determinação R^2 , enquanto a Figura 30 apresenta essas métricas referentes à produção. Nota-se que, com exceção das construções com 50 e 100 amostras, que os resultados são satisfatórios, pois apresentam valores próximos de 1 para R^2 e o LOO decai com o aumento das amostras. Portanto, escolheu-se $N_s = 150$ para a construção dos PCEs para a análise de incertezas.



Figura 29 – Erro LOO (esquerda) e coeficiente R^2 (direita) dos PCEs da queda de pressão dos emuladores do caso A, para diferentes números de amostras.



Figura 30 – Erro LOO (esquerda) e coeficiente R^2 (direita) dos PCEs da produção de água acumulada dos emuladores do caso A, para diferentes números de amostras.

A Figura 31 mostra o histograma do tempo de *breakthrough*, bem como os momentos estatísticos calculados através dos métodos MC e PCE. O tempo de *breakthrough* calculado revelou uma grande variação nos resultados, com um desvio padrão de aproximadamente 1027, 71s. O emulador PCE construído utilizando 150 amostras apresentou erro LOO igual a 0,0723 e coeficiente R^2 igual a 0,916, para esta QoI. Ao calcular o *breakthrough*, é importante considerar que, devido às limitações de armazenamento, os arquivos de saída

das simulações em formato VTK foram limitados a 100 para todo o tempo de simulação de 40000s. Isso resulta em uma resolução associada a essa quantidade de 400s, ou seja, o tempo de breakthrough médio é de $t_{BT} = (9081 \pm 400)s$. O desvio padrão dessa QoI neste caso foi $\sigma_{BT} = (1028 \pm 400)s$.



Figura 31 – Histograma do tempo de *breakthrough* das amostras do caso A.

A Figura 32 apresenta os resultados de UQ para a queda de pressão e para a produção de água acumulada. Ao se comparar os métodos MC e PCE, pode-se concluir que as previsões obtidas pela PCE são satisfatórias, pois concordam com aquelas do MC, porém, construídas com menos amostras. Pode-se notar que para a produção não há incerteza até o t_{BT} médio e que as incertezas ao redor deste são maiores. No tempo final de simulação, para a produção, observa-se que os resultados variam entre 0, 32188538 e 0, 345870785, sendo o valor médio igual a 0, 3396PV, ou seja, há uma assimetria que indica que o cenário otimista é mais provável.



Figura 32 – Quantificação de incertezas do caso A, através do PCE e do MC, para a queda de pressão (esquerda) e produção de água acumulada (direita).

4.4.4 Espuma com o Modelo STARS (Caso B)

Este experimento é similar ao caso A, a única diferença reside no modelo e na configuração de espuma, sendo os mesmos conforme o estudo de Valdez et al. (2021), no qual o modelo STARS foi utilizado e os parâmetros ajustados a dados experimentais de laboratório. O objetivo desse caso é compreender como as incertezas no campo de permeabilidade se propagam em um contexto em que a espuma é mais forte, conforme representado pelos parâmetros observados no estudo 1D anterior (Seção 4.3). Portanto, o estudo de UQ foi conduzido da mesma forma para todas as QoIs, ou seja, o método MC utilizou 500 amostras e a construção dos emuladores PCE foi feita com 150 amostras.

A Figura 33 mostra a quantificação de incertezas para o tempo de *breakthrough* no caso B. Os resultados revelam um tempo de *breakthrough* médio de $t_{BT} = (18260 \pm 400)s$, o que indica um *breakthrough* mais lento em comparação com o caso anterior. Além disso, observa-se um desvio padrão mais baixo (neste caso, $\sigma_{BT} = (893 \pm 400)s$), o que sugere uma maior consistência nos resultados. Essa tendência de um *breakthrough* mais lento é, conforme o esperado, devido à presença de uma espuma mais forte. Isso evidencia a capacidade da espuma mais forte de atenuar com maior eficácia as dificuldades da não-linearidade do escoamento e da heterogeneidade.



Figura 33 – Histograma do tempo de breakthrough das amostras do caso 2D STARS.

O estudo de UQ deste caso para a queda de pressão e para a produção de água acumulada também seguiu o mesmo padrão do caso A. A Figura 34 apresenta os gráficos de UQ dessas QoIs, evidenciando a precisão satisfatória dos emuladores para ambas as variáveis. Uma observação importante é que neste caso o desvio padrão das QoIs, especialmente da produção, foi menor.



Figura 34 – Quantificação de incertezas do caso A, através do PCE e do MC, para a queda de pressão (esquerda) e produção de água acumulada (direita).

4.4.5 Análise de Sensibilidade

Essa seção apresenta estudo de análise de sensibilidade através de índices de Sobol obtidos através da PCE para o caso bidimensional. Os resultados para os casos A e B são qualitativamente similares. Dessa forma, apenas aqueles obtidos para o caso A serão exibidos.

Como as variáveis aleatórias estão relacionadas ao problema de autovalor, os termos η_i mais influentes serão aqueles relacionados à autofunção que tem uma característica mais impactante para a QoI sob análise. A Figura 35 exibe as seis primeiras autofunções da expansão KL, que são as mais influentes, pois estão associadas aos maiores autovalores (ver Figura 13). Note que essas autofunções são ilustradas na Figura 10, porém foram obtidas para o domínio deste estudo, que é a camada 36 do SPE-10.



Figura 35 – Autofunções da expansão KL para o caso bidimensional no domínio SPE-10 camada 36.

A Figura 36 ilustra os índices de Sobol para a queda de pressão. Observa-se que o parâmetro dominante é aquele associado ao primeiro modo, enquanto o segundo modo exerce apenas alguma influência marginal. Além disso, o terceiro modo apresenta uma influência sutil em torno do instante de *breakthrough*. Pode-se notar que os autovalores associados exibem um padrão de decaimento exponencial, conforme demonstrado na Figura 13. Isso significa que as primeiras autofunções têm uma influência global maior sobre a permeabilidade do campo. Para este caso específico, os primeiros oito autovalores representam mais de 75% da energia total. Espera-se, portanto, que os modos que afetam de maneira mais consistente o valor médio do campo tenham uma influência mais pronunciada sobre a queda de pressão, uma vez que a permeabilidade, como demonstrado pela Equação (2.31), tem um impacto direto sobre esse parâmetro. Além disso, com exceção dos modos 1 e 5, os perfis das autofunções exibem uma característica simétrica, o que resulta em influências mínimas no valor médio do campo (efeito global).



Figura 36 – Análise de sensibilidade do caso A para a queda de pressão.

A Figura 37 mostra a análise de sensibilidade da produção e do tempo de *breakth*rough, respectivamente. Em ambos, os parâmetros mais influentes são o η_3 e η_4 . Sendo que o 4 domina para o t_{BT} e também para a produção até cerca de 1100s, ou seja, é mais influente próximo do *breakthrough* e nos momentos subsequentes a ela. Após esse instante, o termo η_3 passa a dominar e é possível notar um comportamento de estabilização à medida que o fenômeno se aproxima do estado estacionário. Os modos associados às variáveis aleatórias mais influentes para essas QoIs são aqueles que tem características mais favoráveis a dificultar ou facilitar o escoamento por determinadas regiões ou caminhos, ou sejam, estão associados à criação de caminhos preferencias (*viscous fingering*).



Figura 37 – Análise de sensibilidade do caso A para a produção de água acumulada (esquerda) e para o tempo de *breakthrough* (direita).

4.4.6 Discussões

Um ponto de destaque é para o aumento substancial nas incertezas das quantidades de interesse entre os casos 1D e 2D, especialmente para a produção, que para o caso unidimensional não apresentou variabilidades significativas. Diferentemente do domínio unidimensional, o caso 2D permite uma representação mais próxima dos fenômenos relacionados à heterogeneidade que impactam significativamente no escoamento e na produção de água, como a formação de caminhos preferenciais.

Com base nas observações dos casos bidimensionais, nos quais as análises foram feitas usando os mesmos campos de permeabilidade, é possível concluir que a varredura do caso B é significativamente mais eficiente. A Figura 38 ilustra comparativamente, como a produção é maior para o cenário de espuma mais forte (caso B) e como os efeitos da incerteza na permeabilidade foram atenuados de maneira mais eficaz por ela. É importante ressaltar que o prolongamento do tempo de *breakthrough* associado à espuma mais forte faz com que o volume de água presente no reservatório seja menor para este cenário. Esse aspecto também contribui para a redução das incertezas nessa análise.

Também é possível comparar os resultados da UQ do tempo de *breakthrough*, que indicam que o caso B demorou mais para atingir o t_{BT} . Isso sugere que a frente de onda percorreu o domínio de maneira mais uniforme e eficiente, como pode ser observado na Figura 39, que mostra uma comparação da saturação de água em diferentes instantes de tempo para uma mesma amostra de campo em ambos os casos.

Com relação ao desempenho computacional, as simulações unidimensionais para caso que levaram em consideração a presença de espuma tiveram tempo médio de execução de 90s, com o simulador dispondo de 6 núcleos de processamento. O espaço de armazenamento médio ocupado por cada caso foi de 1,7MB. Para as simulações bidimensionais, o tempo médio de execução de 90min, com o simulador dispondo de 6 núcleos de


Figura 38 – Comparação entre os resultados de quantificação de incertezas do caso A e do caso B para a produção de água acumulada.



Figura 39 – Evolução temporal da saturação para uma mesma amostra de campo no caso A (esquerda) e no caso B (direita).

processamento. O espaço de armazenamento médio ocupado por cada conjunto de dados de saída foi de 180MB.

Dessa forma, o custo computacional associado ao processamento e armazenamento dos arquivos representou desafios. Cada caso do experimento 2D exigiu 500 amostras para a realização do método MC, totalizando aproximadamente 1500 horas de processamento e 180GB de armazenamento. Em contrapartida, por meio da PCE, que exige apenas 150 amostras em cada caso, considerando também o tempo de construção dos emuladores, o custo total foi reduzido para aproximadamente 225,5 horas de processamento e 27GB de armazenamento.

5 CONCLUSÕES

Este trabalho apresentou um estudo de quantificação de incertezas e de análise de sensibilidade do campo de permeabilidade absoluta no escoamento em meios porosos na presença de espuma, explorando o efeito de diferentes formulações de espuma. A expansão de Karhunen-Loève foi empregada como método para a geração de campos aleatórios gaussianos correlacionados e mostrou-se uma estratégia eficaz na redução da dimensionalidade do problema. Complementarmente, a expansão em Caos Polinomial foi empregada na construção de modelos substitutos, proporcionando um método computacionalmente menos oneroso em comparação ao Monte Carlo, que é construído através de mais resoluções diretas através do simulador (FOSSIL). O alto custo computacional relacionado com os estudos de quantificação de incertezas e de análise de sensibilidade, principalmente no que tange processamento e armazenamento de dados, representou desafios, que através das ferramentas empregadas foram atenuados, permitindo que os estudos propostos fossem realizados com sucesso, fornecendo resultados satisfatórios que validaram os métodos e ferramentas utilizados no contexto da Recuperação Avançada de Petróleo.

Inicialmente, foram feitos estudos para verificação e calibração das técnicas de UQ e SA, através da expansão KL e da PCE, aplicadas em domínios unidimensionais. Os experimentos subsequentes foram conduzidos em um domínio bidimensional, com o objetivo de aprofundar a compreensão dos efeitos de incerteza e heterogeneidade considerando a presença de espuma no escoamento.

Dois cenários de espuma (fraca e forte) foram analisados em simulações de escoamento realizadas em campos aleatórios incluindo as incertezas gerados a partir de um campo realístico. Para o cenário de espuma forte, observou-se um maior controle sobre a heterogeneidade, resultando em uma menor variabilidade em todas as quantidades de interesse analisadas. Conforme esperado, a espuma pôde atenuar os efeitos das incertezas e heterogeneidades do meio poroso. Em particular, para a produção de água acumulada, houve um aumento na produção para o caso de espuma mais forte. Nos cenários examinados considerando incertezas no campo de permeabilidade, foi observado que o caso com espuma fraca resultou em uma produção de água final média de 0, 3396PV, enquanto para o caso de espuma forte foi de 0, 5665PV. Observou-se que a região de incertezas da produção de água final para o caso com a espuma fraca é aproximadamente 10 vezes maior do que a da espuma forte.

5.1 LIMITAÇÕES E TRABALHOS FUTUROS

Este trabalho possui algumas limitações que merecem ser mencionadas. As limitações da Expansão de Karhunen-Loève (KL) estão relacionadas ao custo associado ao processamento da matriz de covariância, que não é esparsa, e ao decaimento dos autovalores, que não é tão rápido quanto necessário para alcançar uma energia satisfatória dentro das restrições encontradas.

Para trabalhos futuros, algumas possíveis extensões a serem investigadas incluem a consideração dos parâmetros de espuma como variáveis aleatórias, juntamente com o campo de permeabilidades, para um estudo completo de UQ e SA, uma vez que os estudos deste trabalho avaliaram essas incertezas de maneira independente. Além disso, seria interessante realizar melhorias na implementação e uso da expansão KL, visando tratamento da matriz de covariância e do problema de autovalor, bem como comparar diferentes métodos de geração dos campos aleatórios. Por fim, outro estudo interessante seria a análise da influência do comportamento não newtoniano da espuma sobre os efeitos da heterogeneidade, visto que existem evidências na literatura acerca da interação entre essas características do escoamento.

REFERÊNCIAS

ABDELGAWAD, K. Z. et al. A literature review of strength and stability of foam and their relationship with the absolute permeability of porous media. *Journal of Petroleum Science and Engineering*, Elsevier, v. 211, p. 110195, 2022.

ABREU, E. C. d. et al. Modelagem e simulação computacional de escoamentos trifásicos em reservatórios de petróleo heterogêneos. Universidade do Estado do Rio de Janeiro, 2007.

AFSHARPOOR, A.; LEE, G.; KAM, S. Mechanistic simulation of continuous gas injection period during surfactant-alternating-gas (SAG) processes using foam catastrophe theory. *Chemical Engineering Science*, Elsevier, v. 65, n. 11, p. 3615–3631, 2010.

AKBARABADI, M. et al. A Bayesian framework for the validation of models for subsurface flows: synthetic experiments. *Computational Geosciences*, Springer, v. 19, p. 1231–1250, 2015.

ALLEN, D. M. Mean square error of prediction as a criterion for selecting variables. *Technometrics*, Taylor & Francis, v. 13, n. 3, p. 469–475, 1971.

ALNÆS, M. et al. The FEniCS project version 1.5. Archive of numerical software, v. 3, n. 100, 2015.

ALVAREZ, J.; RIVAS, H.; ROSSEN, W. Unified model for steady-state foam behavior at high and low foam qualities. *SPE journal*, OnePetro, v. 6, n. 03, p. 325–333, 2001.

AN, S. et al. Inverse modelling of core flood experiments for predictive models of sandstone and carbonate rocks. *Authorea Preprints*, Authorea, 2023.

ARNDT, D. et al. The deal. ii finite element library: Design, features, and insights. Computers & Mathematics with Applications, Elsevier, v. 81, p. 407–422, 2021.

ASHOORI, E.; MARCHESIN, D.; ROSSEN, W. Dynamic foam behavior in the entrance region of a porous medium. In: EUROPEAN ASSOCIATION OF GEOSCIENTISTS & ENGINEERS. *ECMOR XII-12th European Conference on the Mathematics of Oil Recovery*. [S.l.], 2010. p. cp–163.

ASHOORI, E.; MARCHESIN, D.; ROSSEN, W. Roles of transient and local equilibrium foam behavior in porous media–traveling wave. In: EUROPEAN ASSOCIATION OF GEOSCIENTISTS & ENGINEERS. *ECMOR XII-12th European Conference on the Mathematics of Oil Recovery*. [S.1.], 2010. p. cp–163.

BEAR, J. Modeling phenomena of flow and transport in porous media. [S.l.]: Springer, 2018. v. 1.

BENHAM, G. P.; BICKLE, M. J.; NEUFELD, J. A. Two-phase gravity currents in layered porous media. *Journal of Fluid Mechanics*, Cambridge University Press, v. 922, p. A7, 2021.

BIKERMAN, J. J. Foams. [S.l.]: Springer Science & Business Media, 2013. v. 10.

BLAKER, T. et al. Foam for gas mobility control in the snorre field: the FAWAG project. SPE Reservoir Evaluation & Engineering, SPE, v. 5, n. 04, p. 317–323, 2002.

BLATMAN, G.; SUDRET, B. An adaptive algorithm to build up sparse polynomial chaos expansions for stochastic finite element analysis. *Probabilistic Engineering Mechanics*, Elsevier, v. 25, n. 2, p. 183–197, 2010.

BORGES, M. et al. Scaling analysis for the tracer flow problem in self-similar permeability fields. *Multiscale Modeling & Simulation*, SIAM, v. 7, n. 3, p. 1130–1147, 2009.

BORGES, M.; PEREIRA, F. A novel approach for subsurface characterization of coupled fluid flow and geomechanical deformation: the case of slightly compressible flows. *Computational Geosciences*, Springer, v. 24, p. 1693–1706, 2020.

BORGES, M.; PEREIRA, F.; SOUTO, H. A. Efficient generation of multi-scale random fields: A hierarchical approach. *International Journal for Numerical Methods in Biomedical Engineering*, Wiley Online Library, v. 26, n. 2, p. 176–189, 2010.

BORGES, M. R. et al. Injeção de traçadores em reservatórios de petróleo: modelagem multi-escala e simulação numérica. Universidade do Estado do Rio de Janeiro, 2006.

BROOKS, R. H.; COREY, A. T. Properties of porous media affecting fluid flow. *Journal* of the irrigation and drainage division, American Society of Civil Engineers, v. 92, n. 2, p. 61–88, 1966.

BRUINING, H. Upscaling of Single-and Two-Phase Flow in Reservoir Engineering. [S.I.]: CRC Press, 2021.

BUCKLEY, S. E.; LEVERETT, M. Mechanism of fluid displacement in sands. *Transactions of the AIME*, SPE, v. 146, n. 01, p. 107–116, 1942.

CASSIE, A.; BAXTER, S. Wettability of porous surfaces. *Transactions of the Faraday* society, Royal Society of Chemistry, v. 40, p. 546–551, 1944.

CENK, T. et al. Economic comparison of hydrocarbon recovery under injection of different polymers. In: SPE. SPE Asia Pacific Oil and Gas Conference and Exhibition. [S.l.], 2017. p. D012S036R100.

CHANG, J.; YORTSOS, Y. C. Effect of capillary heterogeneity on Buckley-Leverett displacement. *SPE reservoir engineering*, OnePetro, v. 7, n. 02, p. 285–293, 1992.

CHEN, Z.; HUAN, G.; MA, Y. Computational methods for multiphase flows in porous media. [S.l.]: SIAM, 2006.

CHENG, L. et al. Simulating foam processes at high and low foam qualities. In: SPE. *SPE Improved Oil Recovery Conference*. [S.I.], 2000. p. SPE–59287.

CHIERICI, G. L. Novel relations for drainage and imbibition relative permeabilities. *Society of Petroleum Engineers Journal*, OnePetro, v. 24, n. 03, p. 275–276, 1984.

CIRIELLO, V.; FEDERICO, V. D. Similarity solutions for flow of non-newtonian fluids in porous media revisited under parameter uncertainty. *Advances in Water Resources*, Elsevier, v. 43, p. 38–51, 2012.

CMG. Computer Modelling Group: Stars users manual, Version 2019.10. CMG Ltd. Calgary, Canada, 2019.

DAGAN, G. Flow and transport in porous formations. [S.l.]: Springer Science & Business Media, 2012.

DARCY, H. Les fontaines publiques de la ville de Dijon: exposition et application des principes à suivre et des formules à employer dans les questions de distribution d'eau. [S.l.]: Victor dalmont, 1856. v. 1.

DAS, N.; MOHANTY, B.; EFENDIEV, Y. Characterization of effective saturated hydraulic conductivity in an agricultural field using Karhunen-Loève expansion with the Markov chain Monte Carlo technique. *Water Resources Research*, Wiley Online Library, v. 46, n. 6, 2010.

DELSHAD, M. et al. Simulations of chemical and microbial enhanced oil recovery methods. In: SPE. SPE Improved Oil Recovery Conference. [S.I.], 2002. p. SPE–75237.

DOUGLAS, C. et al. Dynamic data driven simulations in stochastic environments. *Computing*, Springer, v. 77, p. 321–333, 2006.

DUBREUIL, S. et al. Construction of bootstrap confidence intervals on sensitivity indices computed by polynomial chaos expansion. *Reliability Engineering & System Safety*, Elsevier, v. 121, p. 263–275, 2014.

ECK, V. G. et al. A guide to uncertainty quantification and sensitivity analysis for cardiovascular applications. *International journal for numerical methods in biomedical engineering*, Wiley Online Library, v. 32, n. 8, p. e02755, 2016.

EFTEKHARI, A. A.; FARAJZADEH, R. Effect of foam on liquid phase mobility in porous media. *Scientific reports*, Nature Publishing Group UK London, v. 7, n. 1, p. 43870, 2017.

EVANS, D. F.; WENNERSTRÖM, H. The colloidal domain: where physics, chemistry, biology, and technology meet. Wiley-Vch New York, 1999.

FARAJZADEH, R. et al. Simulation of instabilities and fingering in surfactant alternating gas (SAG) foam enhanced oil recovery. In: SPE. *SPE Reservoir Simulation Conference*. [S.I.], 2015. p. D011S001R005.

FARAJZADEH, R. et al. Effect of permeability on implicit-texture foam model parameters and the limiting capillary pressure. *Energy & fuels*, ACS Publications, v. 29, n. 5, p. 3011–3018, 2015.

FISHMAN, G. Monte Carlo: concepts, algorithms, and applications. [S.1.]: Springer Science & Business Media, 2013.

FRIAS, D. G.; MURAD, M. A.; PEREIRA, F. Stochastic computational modelling of highly heterogeneous poroelastic media with long-range correlations. *International Journal for Numerical and Analytical Methods in Geomechanics*, Wiley Online Library, v. 28, n. 1, p. 1–32, 2004.

FRITIS, G. C. et al. On the Riemann problem for the foam displacement in porous media with linear adsorption. *SIAM Journal on Applied Mathematics*, SIAM, v. 84, n. 2, p. 581–601, 2024.

FURTADO, F.; PEREIRA, F. Scaling analysis for two-phase immiscible flow in heterogeneous porous media. *Computational and Applied Mathematics*, BIRKHAEUSER, v. 17, n. 3, p. 237–263, 1998.

FURTADO, F.; PEREIRA, F. Crossover from nonlinearity controlled to heterogeneity controlled mixing in two-phase porous media flows. *Computational Geosciences*, Springer, v. 7, p. 115–135, 2003.

GASSARA, O. et al. Equivalence between semi-empirical and population-balance foam models. *Transport in Porous Media*, Springer, v. 120, p. 473–493, 2017.

GEISSER, S. The predictive sample reuse method with applications. *Journal of the American statistical Association*, Taylor & Francis, v. 70, n. 350, p. 320–328, 1975.

GELHAR, L. W. Stochastic subsurface hydrology from theory to applications. *Water Resources Research*, Wiley Online Library, v. 22, n. 9S, p. 135S–145S, 1986.

GENUCHTEN, M. T. V. A closed-form equation for predicting the hydraulic conductivity of unsaturated soils. *Soil science society of America journal*, Wiley Online Library, v. 44, n. 5, p. 892–898, 1980.

GERRITSEN, M. G.; DURLOFSKY, L. J. Modeling fluid flow in oil reservoirs. *Annu. Rev. Fluid Mech.*, Annual Reviews, v. 37, p. 211–238, 2005.

GHANEM, R. G.; SPANOS, P. D. Stochastic finite elements: a spectral approach. [S.1.]: Courier Corporation, 2003.

GIORDANO, R.; SALTER, S.; MOHANTY, K. The effects of permeability variations on flow in porous media. In: SPE. *SPE Annual Technical Conference and Exhibition*. [S.I.], 1985. p. SPE–14365.

GODOI, J. M. A.; MATAI, P. H. L. dos S. Enhanced oil recovery with carbon dioxide geosequestration: first steps at Pre-salt in Brazil. *Journal of Petroleum Exploration and Production*, Springer, v. 11, n. 3, p. 1429–1441, 2021.

GRATIET, L. L.; MARELLI, S.; SUDRET, B. Metamodel-based sensitivity analysis: Polynomial chaos expansions and gaussian processes. In: _____. Handbook of Uncertainty Quantification. Cham: Springer International Publishing, 2017. p. 1289–1325. ISBN 978-3-319-12385-1.

HAJIZADEH, Y. Population-based algorithms for improved history matching and uncertainty quantification of petroleum reservoirs. Tese (Doutorado) — Heriot-Watt University, 2011.

HEMATPUR, H. et al. Foam flow in porous media: Concepts, models and challenges. *Journal of Natural Gas Science and Engineering*, Elsevier, v. 53, p. 163–180, 2018.

HERMAN, J.; USHER, W. SALib: An open-source Python library for sensitivity analysis. *Journal of Open Source Software*, v. 2, n. 9, p. 97, 2017.

HINDMARSH, A. C. et al. SUNDIALS: Suite of nonlinear and differential/algebraic equation solvers. *ACM Transactions on Mathematical Software (TOMS)*, ACM New York, NY, USA, v. 31, n. 3, p. 363–396, 2005.

HIRASAKI, G. et al. Surfactant/foam process for aquifer remediation. In: SPE. SPE International Conference on Oilfield Chemistry. [S.I.], 1997. p. SPE–37257.

HIRASAKI, G. J. The steam-foam process. *Journal of Petroleum Technology*, SPE, v. 41, n. 05, p. 449–456, 1989.

HIRASAKI, G. J.; LAWSON, J. Mechanisms of foam flow in porous media: apparent viscosity in smooth capillaries. *Society of Petroleum Engineers Journal*, SPE, v. 25, n. 02, p. 176–190, 1985.

HIRASAKL, G. Wettability: fundamentals and surface forces. *SPE formation evaluation*, SPE, v. 6, n. 02, p. 217–226, 1991.

HOMSY, G. M. Viscous fingering in porous media. *Annual review of fluid mechanics*, Annual Reviews 4139 El Camino Way, PO Box 10139, Palo Alto, CA 94303-0139, USA, v. 19, n. 1, p. 271–311, 1987.

HU, J. et al. Foam flow model of municipal solid waste and its application in landfill gas pressure prediction. *Journal of Geotechnical and Geoenvironmental Engineering*, American Society of Civil Engineers, v. 149, n. 3, p. 04023004, 2023.

HUANG, S.; QUEK, S.; PHOON, K. Convergence study of the truncated Karhunen-Loève expansion for simulation of stochastic processes. *International journal for numerical methods in engineering*, Wiley Online Library, v. 52, n. 9, p. 1029–1043, 2001.

IGREJA, I. H. A. d. *Métodos de elementos finitos híbridos estabilizados para escoamentos de Stokes, Darcy e Stokes-Darcy acoplados.* Tese (Doutorado) — Laboratório Nacional de Computação Científica, 2015.

JANSSEN, M. T.; MENDEZ, F. A. T.; ZITHA, P. L. Mechanistic modeling of wateralternating-gas injection and foam-assisted chemical flooding for enhanced oil recovery. *Industrial & Engineering Chemistry Research*, ACS Publications, v. 59, n. 8, p. 3606–3616, 2020.

JONES, S.; GETROUW, N.; VINCENT-BONNIEU, S. Foam flow in a model porous medium: I. the effect of foam coarsening. *Soft matter*, Royal Society of Chemistry, v. 14, n. 18, p. 3490–3496, 2018.

KAC, M.; SIEGERT, A. An explicit representation of a stationary gaussian process. *The* Annals of Mathematical Statistics, JSTOR, v. 18, n. 3, p. 438–442, 1947.

KAM, S. I. Improved mechanistic foam simulation with foam catastrophe theory. *Colloids and Surfaces A: Physicochemical and Engineering Aspects*, Elsevier, v. 318, n. 1-3, p. 62–77, 2008.

KARHUNEN, K. Under lineare methoden in der wahr scheinlichkeitsrechnung. Annales Academiae Scientiarun Fennicae Series A1: Mathematia Physica, v. 47, 1947.

KILE, D. E.; CHIOU, C. T. Water solubility enhancements of ddt and trichlorobenzene by some surfactants below and above the critical micelle concentration. *Environmental Science & Technology*, ACS Publications, v. 23, n. 7, p. 832–838, 1989.

KLOET, M.; RENKEMA, W. J.; ROSSEN, W. R. Optimal design criteria for SAG foam processes in heterogeneous reservoirs. In: SPE. *SPE Europec featured at EAGE Conference and Exhibition*. [S.I.], 2009. p. SPE–121581.

KOVSCEK, A.; PATZEK, T.; RADKE, C. A mechanistic population balance model for transient and steady-state foam flow in boise sandstone. *Chemical Engineering Science*, Elsevier, v. 50, n. 23, p. 3783–3799, 1995.

KOVSCEK, A. R.; RADKE, C. J. Fundamentals of foam transport in porous media. [S.1.], 1993.

LAKE, L. W.; VENUTO, P. B. et al. A niche for enhanced oil recovery in the 1990s. *Oil* & *Gas Journal*, v. 88, n. 17, p. 62–67, 1990.

LEVEQUE, R. J. *Finite volume methods for hyperbolic problems*. [S.1.]: Cambridge university press, 2002. v. 31.

LI, C. et al. New fractal-dimension-based relation model for estimating absolute permeability through capillary pressure curves. *Journal of Petroleum Science and Engineering*, Elsevier, v. 196, p. 107672, 2021.

LI, C.-C.; KIUREGHIAN, A. D. Optimal discretization of random fields. *Journal of engineering mechanics*, American Society of Civil Engineers, v. 119, n. 6, p. 1136–1154, 1993.

LI, H.; SARMA, P.; ZHANG, D. A comparative study of the probabilistic-collocation and experimental-design methods for petroleum-reservoir uncertainty quantification. *SPE Journal*, SPE, v. 16, n. 02, p. 429–439, 2011.

LOÈVE, M. Elementary probability theory. [S.l.]: Springer, 1977.

LOGG, A.; MARDAL, K.-A.; WELLS, G. Automated solution of differential equations by the finite element method: The FEniCS book. [S.1.]: Springer Science & Business Media, 2012. v. 84.

LOTFOLLAHI, M. et al. Comparison of implicit-texture and population-balance foam models. In: SPE. SPE EOR Conference at Oil and Gas West Asia. [S.l.], 2016. p. D021S009R003.

LOZANO, L. F. et al. How simplifying capillary effects can affect the traveling wave solution profiles of the foam flow in porous media. *International Journal of Non-Linear Mechanics*, Elsevier, v. 139, p. 103867, 2022.

MA, K. Transport of surfactant and foam in porous media for enhanced oil recovery processes. [S.l.]: Rice University, 2013.

MA, K. et al. Mechanistic modeling of foam flow through porous media in the presence of oil: review of foam-oil interactions and an improved bubble population-balance model. In: SPE. *SPE Annual Technical Conference and Exhibition*. [S.1.], 2018. p. D031S031R004.

MA, K. et al. Modeling techniques for foam flow in porous media. *SPE Journal*, OnePetro, v. 20, n. 03, p. 453–470, 2015.

MARELLI, S. et al. UQLab user manual – Sensitivity analysis. [S.l.], 2022. Report UQLab-V2.0-106.

MARELLI, S.; LÜTHEN, N.; SUDRET, B. UQLab user manual – Polynomial chaos expansions. [S.1.], 2022. Report UQLab-V2.0-104.

MARELLI, S.; SUDRET, B. UQLab: A framework for uncertainty quantification in matlab. In: Vulnerability, uncertainty, and risk: quantification, mitigation, and management. [S.l.: s.n.], 2014. p. 2554–2563.

MARELLI, S.; SUDRET, B. UQLab user manual-polynomial chaos expansions. *Chair of risk, safety & uncertainty quantification, ETH Zürich, 0.9-104 edition*, p. 97–110, 2015.

MIRANDA, G. B. de et al. Characterization of foam-assisted water-gas flow via inverse uncertainty quantification techniques. In: SPRINGER. *International Conference on Computational Science*. [S.1.], 2022. p. 310–322.

MUALEM, Y. A new model for predicting the hydraulic conductivity of unsaturated porous media. *Water resources research*, Wiley Online Library, v. 12, n. 3, p. 513–522, 1976.

MURAD, M. A. et al. A new locally conservative numerical method for two-phase flow in heterogeneous poroelastic media. *Computers and Geotechnics*, Elsevier, v. 48, p. 192–207, 2013.

MUSKAT, M.; MERES, M. W. The flow of heterogeneous fluids through porous media. *Physics*, American Institute of Physics, v. 7, n. 9, p. 346–363, 1936.

MYERS, T. J.; RADKE, C. J. Transient foam displacement in the presence of residual oil: experiment and simulation using a population-balance model. *Industrial & engineering chemistry research*, ACS Publications, v. 39, n. 8, p. 2725–2741, 2000.

NEGIN, C.; ALI, S.; XIE, Q. Most common surfactants employed in chemical enhanced oil recovery. *Petroleum*, Elsevier, v. 3, n. 2, p. 197–211, 2017.

OSTERLOH, W.; JR, M. J. Effects of gas and liquid velocity on steady-state foam flow at high temperature. In: SPE. *SPE Improved Oil Recovery Conference*. [S.I.], 1992. p. SPE–24179.

PAULA, F. F. de et al. A numerical investigation into the influence of the surfactant injection technique on the foam flow in heterogeneous porous media. *Advances in Water Resources*, Elsevier, v. 171, p. 104358, 2023.

PAULA, F. F. de et al. A numerical algorithm to solve the two-phase flow in porous media including foam displacement. In: SPRINGER. *International Conference on Computational Science*. [S.1.], 2020. p. 18–31.

PEREIRA, T. J. et al. Estudo da quantificação de incertezas para o problema de contaminação de meios porosos heterogêneos. Universidade do Estado do Rio de Janeiro, 2012.

PORTOIS, C. et al. Foam for environmental remediation: generation and blocking effect. *Transport in Porous Media*, Springer, v. 124, n. 3, p. 787–801, 2018.

PUTRA, D.; APRIZAL, F.; MARPAUNG, B. Economic comparison of hydrocarbon recovery under surfactant injection of different schemes. *Journal IATMI*, 2018.

RASMUSSEN, C. E. Gaussian processes in machine learning. In: *Summer school on machine learning*. [S.l.]: Springer, 2003. p. 63–71.

RIBEIRO, L. et al. On the identifiability of relative permeability and foam displacement parameters in porous media flow. *Water Resources Research*, Wiley Online Library, v. 60, n. 3, p. e2023WR036751, 2024.

RODRÍGUEZ-CANTANO, R.; SUNDNES, J.; ROGNES, M. E. Uncertainty in cardiac myofiber orientation and stiffnesses dominate the variability of left ventricle deformation response. *International journal for numerical methods in biomedical engineering*, Wiley Online Library, v. 35, n. 5, p. e3178, 2019.

ROSSEN, W. R. Foams in enhanced oil recovery. In: *Foams*. [S.l.]: Routledge, 2017. p. 413–464.

ROSSEN, W. R.; SHEN, C. Gravity segregation in gas-injection ior. In: SPE. SPE Europec featured at EAGE Conference and Exhibition. [S.I.], 2007. p. SPE–107262.

RUBIN, Y. Applied stochastic hydrogeology. [S.l.]: Oxford University Press, 2003.

SÆLE, A. M.; GRAUE, A.; ALCORN, Z. P. Unsteady-state CO2 foam injection for increasing enhanced oil recovery and carbon storage potential. Yandy Scientific Press, 2022.

SALTELLI, A. Making best use of model evaluations to compute sensitivity indices. Computer physics communications, Elsevier, v. 145, n. 2, p. 280–297, 2002.

SALTELLI, A. et al. *Global sensitivity analysis: the primer*. [S.l.]: John Wiley & Sons, 2008.

SANTOS, B. de O. et al. Forward uncertainty quantification and sensitivity analysis of the Holzapfel-Ogden model for the left ventricular passive mechanics. In: SPRINGER. *International Conference on Computational Science*. [S.1.], 2022. p. 749–761.

SCHRAMM, L. L. et al. Fundamentals and applications in the petroleum industry. *Adv. Chem*, v. 231, p. 3–24, 1992.

SHI, J.-X.; ROSSEN, W. Simulation of gravity override in foam processes in porous media. SPE Reservoir Evaluation & Engineering, OnePetro, v. 1, n. 02, p. 148–154, 1998.

SHOJAEI, M. J.; OR, D.; SHOKRI, N. Localized delivery of liquid fertilizer in coarsetextured soils using foam as carrier. *Transport in porous media*, Springer, v. 143, n. 3, p. 787–795, 2022.

SHOJAEI, M. J. et al. Foam flow investigation in 3D-printed porous media: fingering and gravitational effects. *Industrial & engineering chemistry research*, ACS Publications, v. 57, n. 21, p. 7275–7281, 2018.

SMITH, D. H. Surfactant-based mobility control. [S.I.], 1988.

SMITH, R. C. Uncertainty quantification: theory, implementation, and applications. [S.I.]: Siam, 2013. v. 12.

SOBOL, I. M. Global sensitivity indices for nonlinear mathematical models and their Monte Carlo estimates. *Mathematics and computers in simulation*, Elsevier, v. 55, n. 1-3, p. 271–280, 2001.

STONE, H. L. Vertical, conformance in an alternating water-miscible gas flood. In: SPE. SPE Annual Technical Conference and Exhibition. [S.l.], 1982. p. SPE–11130.

SUDRET, B. Global sensitivity analysis using polynomial chaos expansions. *Reliability* engineering & system safety, Elsevier, v. 93, n. 7, p. 964–979, 2008.

SUDRET, B. Polynomial chaos expansions and stochastic finite element methods. *Risk and reliability in geotechnical engineering*, CRC Press Boca Raton, FL, USA, p. 265–300, 2014.

SUDRET, B.; KIUREGHIAN, A. D. Stochastic finite element methods and reliability: a state-of-the-art report. [S.l.]: Department of Civil and Environmental Engineering, University of California ..., 2000.

SULLIVAN, T. J. Introduction to uncertainty quantification. [S.I.]: Springer, 2015. v. 63.

SUNMONU, R. M.; ONYEKONWU, M. Enhanced oil recovery using foam injection; a mechanistic approach. In: SPE. *SPE Nigeria annual international conference and exhibition*. [S.I.], 2013. p. SPE–167589.

TAHA, M.; PATIL, P.; NGUYEN, Q. P. The effect of rock permeability and pore structure on foam in carbonate rocks. *Fuel*, Elsevier, v. 346, p. 128246, 2023.

THOMAS, J. E. et al. *Fundamentos de engenharia de petróleo*. [S.l.]: Editora Interciência ltda., 2001.

VALDEZ, A. R. et al. Uncertainty quantification and sensitivity analysis for relative permeability models of two-phase flow in porous media. *Journal of Petroleum Science and Engineering*, Elsevier, v. 192, p. 107297, 2020.

VALDEZ, A. R. et al. Assessing uncertainties and identifiability of foam displacement models employing different objective functions for parameter estimation. *Journal of Petroleum Science and Engineering*, Elsevier, v. 214, p. 110551, 2022.

VALDEZ, A. R. et al. Foam-assisted water–gas flow parameters: from core-flood experiment to uncertainty quantification and sensitivity analysis. *Transport in Porous Media*, Springer, p. 1–21, 2021.

WANG, C.; LI, H. A. Stability and mobility of foam generated by gas-solvent/surfactant mixtures under reservoir conditions. *Journal of Natural Gas Science and Engineering*, Elsevier, v. 34, p. 366–375, 2016.

WANG, M. et al. Mitigation of gravity segregation by foam to enhance sweep efficiency. *Applied Sciences*, MDPI, v. 13, n. 15, p. 8622, 2023.

WANG, S.; MULLIGAN, C. N. An evaluation of surfactant foam technology in remediation of contaminated soil. *Chemosphere*, Elsevier, v. 57, n. 9, p. 1079–1089, 2004.

XIU, D.; KARNIADAKIS, G. E. The Wiener–Askey polynomial chaos for stochastic differential equations. *SIAM journal on scientific computing*, SIAM, v. 24, n. 2, p. 619–644, 2002.

YANG, Y.; PERDIKARIS, P. Adversarial uncertainty quantification in physics-informed neural networks. *Journal of Computational Physics*, Elsevier, v. 394, p. 136–152, 2019.

ZITHA, P. L. J. A new stochastic bubble population model for foam in porous media. In: SPE. *SPE Improved Oil Recovery Conference*. [S.l.], 2006. p. SPE–98976.

ZITHA, P. L. J. et al. Numerical analysis of a new stochastic bubble population foam model. In: SPE. *SPE Improved Oil Recovery Conference*. [S.l.], 2006. p. SPE–99747.