UNIVERSIDADE DE SÃO PAULO
INSTITUTO DE FÍSICA DE SÃO CARLOS

Gustavo Solcia

**Dinâmica de fluidos computacional através de imagens
por ressonância magnética: fluxo em *wormholes***

São Carlos

2020

Gustavo Solcia

**Dinâmica de fluidos computacional através de imagens
por ressonância magnética: fluxo em *wormholes***

Dissertação apresentada ao Programa de Pós-Graduação em Física do Instituto de Física de São Carlos da Universidade de São Paulo, para obtenção do título de Mestre em Ciências.

Área de concentração: Física Aplicada

Orientador: Prof. Dr. Fernando Fernandes Paiva

Versão corrigida
(Versão original disponível na Unidade que aloja o Programa)

São Carlos
2020

AUTORIZO A REPRODUÇÃO E DIVULGAÇÃO TOTAL OU PARCIAL DESTE TRABALHO, POR QUALQUER MEIO CONVENCIONAL OU ELETRÔNICO PARA FINS DE ESTUDO E PESQUISA, DESDE QUE CITADA A FONTE.

Solcia, Gustavo

Dinâmica de fluidos computacional através de imagens por ressonância magnética: fluxo em wormholes / Gustavo Solcia; orientador Fernando Fernandes Paiva - versão corrigida -- São Carlos, 2020.

86 p.

Dissertação (Mestrado - Programa de Pós-Graduação em Física Aplicada) -- Instituto de Física de São Carlos, Universidade de São Paulo, 2020.

1. Imagens por ressonância magnética. 2. Dinâmica de fluidos computacional. 3. Petrofísica. I. Paiva, Fernando Fernandes, orient. II. Título.

Este trabalho é dedicado aos meus pais Claudia e Geraldo.

AGRADECIMENTOS

Ao meu orientador Prof. Dr. Fernando Fernandes Paiva, por me guiar no meio acadêmico e me incentivar com novos desafios.

Ao Prof. Dr. Tito José Bonagamba, por me acolher em seu grupo e sempre compartilhar com entusiasmo toda sua experiência.

Ao Dr. Bernd Uwe Foerster, por me tirar da minha zona de conforto e me levar a sempre melhorar.

À Dra. Mariane Barsi Andreeta, pelos conselhos e ajuda durante as extensas horas de simulações.

Ao Dr. Elton Tadeu Montrazi, pela paciência ao me guiar nos primeiros passos da relaxometria por ressonância magnética nuclear.

Aos meus pais Cláudia da Silva Solcia e Geraldo Solcia, pelo apoio e amor incondicional mesmo nos momentos mais difíceis.

À minha amada namorada Bárbara Roque da Silva, pelo carinho, pelo companheirismo e reciprocidade com meu amor.

Ao meu amigo de infância Mateus Stuchi Barnabé, pelos momentos de descontração e sinceridade.

Aos meus amigos de grupo, pelos momentos de alegria e amizade: Aparecido Donizeti Fernandes de Amorim, Camila Cardoso, Arthur Gustavo de Araújo Ferreira, Éverton Lucas de Oliveira, Renan Rossetti Pezzatti e Adriane Leal.

O presente trabalho foi realizado com o apoio da Coordenação de Aperfeiçoamento de Pessoal de Nível Superior - Brasil (CAPES) - Código de Financiamento 001.

*"It gets easier.
Everyday, it gets a little easier.
But you gotta do it everyday.
That's the hard part.
But it does get easier."
-Jogging Baboon from BoJack Horseman*

RESUMO

SOLCIA, G. **Dinâmica de fluidos computacional através de imagens por ressonância magnética: fluxo em *wormholes***. 2020. 86p. Dissertação (Mestrado em Ciências) - Instituto de Física de São Carlos, Universidade de São Paulo, São Carlos, 2020.

A técnica de acidificação em poços de petróleo cria canais de alta permeabilidade denominados *wormholes* com o objetivo de aumento em sua produtividade. Entretanto, a variabilidade de estrutura e as consequências em seu fluxo são dependentes da injeção de ácido empregada. O objetivo desse trabalho é utilizar técnicas não invasivas de imagens por ressonância magnética para a reconstrução dos *wormholes* e simulação da dinâmica de fluidos para estimativas de vazão. Foram utilizadas imagens volumétricas de ressonância magnética ponderadas por T_2 que passaram por um processo de segmentação estatístico. A reconstrução e suavização tridimensional foi feita através da biblioteca *Vascular Modeling Toolkit* para a aplicação da dinâmica de fluidos computacional em volumes finitos pelo *software* OpenFOAM. O estudo da estrutura resultante da segmentação em conjunto com as simulações de linhas de corrente e vazão revelou que caminhos principais afunilados restringem o fluxo global. Além disso, os canais de calibres mais regulares e menos tortuosos facilitam a maximização da vazão. O maior fluxo de injeção de ácido mostrou ramificar e interconectar o *wormhole*. Este trabalho mostrou a perspectiva de complementaridade das imagens de ressonância magnética e análise por outras técnicas de parâmetros estruturais do meio poroso para determinação indireta de vazão.

Palavras-chave: Imagens por ressonância magnética. Dinâmica de fluidos computacional. Petrofísica.

ABSTRACT

SOLCIA, G. **Computational fluid dynamics through magnetic resonance imaging: flow in wormholes.** 2020. 86p. Dissertação (Mestrado em Ciências) - Instituto de Física de São Carlos, Universidade de São Paulo, São Carlos, 2020.

The reservoir acidification is a technique that creates high permeability channels called wormholes to increase their productivity. However, the structure variability and its flow results are dependent on the acid injection employed. The objective of this study is to use noninvasive magnetic resonance imaging techniques for wormholes reconstruction and simulation of fluid dynamics for flow estimates. Volumetric magnetic resonance images weighted by T_2 that experienced a statistical segmentation process were used. The three-dimensional reconstruction and smoothing were done through the Vascular Modeling Toolkit library for the application of computational fluid dynamics in finite volumes by OpenFOAM software. The study of the structure resulting from segmentation in conjunction with current and flow line simulations revealed that the main path reduction restricts the overall flow. Besides, more regular and less tortuous gauge channels facilitate flow maximization. The largest acid injection flow was shown to branch and interconnect the wormhole. This study showed the perspective of complementarity of magnetic resonance images and structural parameters analysis of the porous medium for indirect flow determination.

Keywords: Magnetic resonance imaging. Computational fluid dynamics. Petrophysics.

LISTA DE FIGURAS

Figura 1 – Diagrama de técnicas experimentais e ferramentas computacionais com suas respectivas ordens de aplicação neste estudo.	31
Figura 2 – Exemplo de plugue carbonático não acidificado do tipo Edward White disponível para análise.	32
Figura 3 – Plugue carbonático acidificado do tipo Indiana Limestone.	32
Figura 4 – Padrão de selamento das amostras com material termo retrátil transparente e tampa de teflon.	33
Figura 5 – Exemplo de imagem composta por níveis de cinza e respectiva segmentação em duas classes ($L = 2$).	36
Figura 6 – Identificação de voxel (cubo) entre dois cortes consecutivos da imagem.	37
Figura 7 – Padrões de triangulação do algoritmo.	37
Figura 8 – Numeração de arestas e vértices para indexação.	38
Figura 9 – Grafo para exemplo numérico de ponderação entre contração e expansão de vértices vizinhos.	40
Figura 10 – Organização genérica de diretório para simulações com OpenFOAM. Pastas são referenciadas em negrito e arquivos em itálico.	41
Figura 11 – Superfície de wormhole inserida em malha volumétrica criada através da funcionalidade blockMesh.	43
Figura 12 – Ilustração de identificação da geometria de base e exclusão de células fora de seu domínio. Em vermelho está representado um caminho de wormhole bidimensional.	44
Figura 13 – Representação de extração em malha com dois níveis de refinamento.	44
Figura 14 – Exemplo de sistema com a matrix global baseado em segmentação da figura 5.	45
Figura 15 – Amostra 3C renderizada e com identificação de cortes coronal, sagital e axial respectivamente pelas cores vermelho, verde e azul.	49
Figura 16 – Cortes coronais do conjunto de amostras estudadas.	50
Figura 17 – Cortes sagitais do conjunto de amostras estudadas.	51
Figura 18 – Cortes axial do conjunto de amostras estudadas.	51
Figura 19 – MIPs dos grupos de amostras com diferentes vazões.	52
Figura 20 – Imagem comparativa ampliada de segmentação em 3 classes com cortes originais.	53
Figura 21 – Corte coronal das amostras 1A e 3C com comparação entre segmentações em uma (cima) e duas etapas (baixo).	53

Figura 22 – Superfícies de fluxo A, B e C das amostras do grupo 1. No lado esquerdo estão as superfícies da segmentação em uma etapa e no direito de duas etapas. As setas em vermelho indicam principais diferenças em suas geometrias.	54
Figura 23 – Superfícies de fluxo A, B e C das amostras do grupo 2. No lado esquerdo estão as superfícies da segmentação em uma etapa e no direito de duas etapas. As setas em vermelho indicam principais diferenças em suas geometrias	55
Figura 24 – Superfícies de fluxo A, B e C das amostras do grupo 3. No lado esquerdo estão as superfícies da segmentação em uma etapa e no direito de duas etapas. As setas em vermelho indicam principais diferenças em suas geometrias	55
Figura 25 – Triangulação de superfície da amostra 1C em perspectiva de ampliação.	56
Figura 26 – Corte normal ao eixo de maior dimensão da malha volumétrica referente à amostra 1A. Em ampliação destaca-se o refinamento em quatro camadas de células delimitadas por suas arestas.	57
Figura 27 – Reconstrução volumétrica sem refinamento (cima) e com quatro níveis (baixo). As ultimas imagens da direita são cortes normais ao plano para vizualização do interior da malha.	58
Figura 28 – Linhas de corrente dos wormholes criados com vazão de $0,1 \text{ ml/min}$. . .	60
Figura 29 – Linhas de corrente dos wormholes criados com vazão de 1 ml/min . . .	61
Figura 30 – Linhas de corrente dos wormholes criados com vazão de 10 ml/min . . .	61
Figura 31 – Comparação de fluxo em ampliação das amostras 2B e 3C.	62
Figura 32 – Evolução da vazão de água no conjunto de amostra estudadas.	63
Figura 33 – Sistema e regiões de interesse localizadas no volume de controle.	73
Figura 34 – Detalhe das subregiões entre o VC e o sistema.	74

LISTA DE TABELAS

Tabela 1 – Base do sistema de unidades utilizado pelo OpenFOAM.	42
Tabela 2 – Volume dos domínios em relação aos dois tipos de segmentação implementados.	56

LISTA DE ABREVIATURAS E SIGLAS

ANP	Agência Nacional do Petróleo, Gás Natural e Biocombustíveis
BOPD	Barris de Óleo Por Dia
CAM	Campos Aleatórios de Markov
CENPES	Centro de Pesquisas Leopoldo Américo Miguel de Mello
DFC	Dinâmica de Fluidos Computacional
IRM	Imagem por Ressonância Magnética
MC	Massa de Controle
ME	Maximização de Expectativa
MIP	Maximum Intensity Projection
NIfTI	Neuroimaging Technology Initiative
PSIF	mirrored Free Induction Steady Precession
SC	Superfície de Controle
SIMPLE	Semi Implicit Method for Pressure Linked Equations
TE	Tempo ao Eco
TR	Tempo de Repetição
VC	Volume de Controle
VMTK	Vascular Modeling Toolkit

LISTA DE SÍMBOLOS

m	Massa
$\mathbf{v}$	Velocidade do fluido
$\mathbf{f}$	Força atuante no fluido
ρ	Densidade
u_i	Componente cartesiana da velocidade
p	Pressão
f_i	Componente cartesiana da força
τ_{ij}	Interações viscosas do tensor de stress
μ	Viscosidade
δ_{ij}	Delta de Kroeneker
ν	Viscosidade cinemática
ϕ	Propriedade intensiva conservada
Φ	Propriedade extensiva conservada
Ω_{MC}	Volume ocupado pela massa de controle
$\mathbf{T}$	Tensor de stress
$\mathbf{D}$	Tensor de deformação
I	Domínio da imagem
N	Termos de discretização
$\mathbf{y}$	Campo de intensidades da imagem
L	Número de classes
$\mathbf{x}$	Campo de segmentação
$f(\mathbf{x} \mathbf{y})$	Função de probabilidade a posteriori
$f(\mathbf{x})$	Função de probabilidade a priori
$f(\mathbf{y} \mathbf{x})$	Função de verossimilhança

$f(\mathbf{y})$	Termo de normalização
λ_j	Valor médio
σ_j	Variância
γ_j	Fator de mistura
Z	Constante de normalização
$\mathcal{N}_i$	Vizinhos no domínio da imagem
β	Parâmetro de peso para os CAM
$\mathcal{V}$	Lista de vértices
ξ	Parâmetro de expansão
ζ	Parâmetro de contração
$\mathcal{K}$	Matriz de suavização
$\mathcal{W}$	Matriz de movimentação de vértices
$\mathbf{E}$	Matriz de adjacencia
$\mathbf{D}$	Matriz de ponderação entre vizinhos próximos
$\mathbf{L}$	Matriz triangular inferior
$\mathbf{U}$	Matriz triangular superior
$\mathbf{F}$	Matriz de discretização das equações de Navier-Stokes
$\mathbf{B}$	Matriz de discretização das equações de Navier-Stokes
$\mathbf{D}$	Matriz de discretização das equações de Navier-Stokes

SUMÁRIO

1	INTRODUÇÃO	23
2	EXPOSIÇÃO CONCEITUAL	25
2.1	Dinâmica de fluidos computacional	25
2.1.1	Equações de Navier-Stokes e simplificações	25
2.1.2	OpenFOAM	27
2.2	Imagens por ressonância magnética	28
3	MÉTODOS	31
3.1	Amostras	31
3.2	Imagens por ressonância magnética	33
3.3	Segmentação	34
3.4	VMTK	36
3.4.1	Marching cubes	37
3.4.2	Filtro de Taubin	38
3.5	OpenFOAM	40
3.5.1	Processo de discretização	42
3.5.2	Algoritmo SIMPLE	44
3.5.3	Pós-processamento	46
4	RESULTADOS	49
4.1	Imagens	49
4.2	Segmentação	52
4.3	Malhas	53
4.3.1	Superficiais	54
4.3.2	Volumétricas	57
4.4	Simulações	59
4.4.1	Linhas de corrente	59
4.4.2	Curvas de vazão	62
5	CONSIDERAÇÕES FINAIS	65
	REFERÊNCIAS	67

APÊNDICES	71
APÊNDICE A – DESENVOLVIMENTO MATEMÁTICO PARA NAVIER-STOKES	73
APÊNDICE B – DICIONÁRIOS PARA DIRETÓRIO SYSTEM . .	77

1 INTRODUÇÃO

O estudo de meios porosos é de interesse em diversas áreas do conhecimento. Atualmente existem pesquisas que abordam o problema na medicina¹, construção civil² e principalmente na petrofísica.³ Uma vez que os reservatórios de óleo são formações geológicas porosas, a indústria do petróleo busca compreender a conectividade do meio de forma a determinar o espaço poroso efetivo de armazenamento ou até mesmo a habilidade de se transmitir fluidos.

O destaque para as pesquisas petrofísicas se dá justamente pelo impacto que a extração de óleo e gás é capaz de causar na economia de um país. Esta influência ocorre tanto pela dependência dos setores de transporte, alimentação e energia quanto pelas compensações financeiras, os royalties, pagos pelas empresas que exploram os campos. Segundo a Agência Nacional do Petróleo, Gás Natural e Biocombustíveis (ANP)⁴, a estimativa de arrecadação entre os anos de 2019 e 2023 é de em média 29,4 bilhões de reais por ano para todo o país e de 554,5 milhões de reais por ano para o estado de São Paulo.

Entretanto, a exploração leva à redução da pressão de um poço e com isso sua vazão de produção é comprometida. Assim, o aumento de produtividade na exploração de petróleo é um grande motivador na aplicação de métodos de estimulação que utilizam técnicas de acidificação. O procedimento de dissolver a matriz rochosa envolve o estudo da injeção de ácidos em diversas taxas de vazão. Os canais de fluxo resultantes destes processos são denominados *wormhole* e possuem geometrias irregulares e ramificadas.⁵

Um exemplo do efeito desse tipo de estimulação é retratado em estudos como o do poço Obign-2T que é localizado no golfo da Guiné.⁶ Antes do tratamento ácido, em novembro de 1997, a produção era de 633 barris de óleo por dia (BOPD) e que alcançou em março de 1998 a marca de 4780 BOPD.

Este resultado ocorre devido a alteração local das propriedades de porosidade e permeabilidade. A injeção de ácido reage com os minerais que compõem a estrutura da superfície do poro, aumentando sua área transversal. Atualmente existem modelos que procuram descrever o comportamento do crescimento dos poros de modo a facilitar a formação de *wormholes*.⁷

Entretanto, uma vez que o *wormhole* é formado, existe a necessidade de se estudar o comportamento do fluxo e da vazão nesses canais. Isto ocorre pois a condição ótima de criação das estruturas é gerada através de taxas de injeção de ácido que dependem da distribuição de poros da amostra. Assim, a geometria final do canal pode ter alterações que levam a diferentes rendimentos para os mesmos tipos de rocha. Portanto, o estudo fluído

dinâmico neste tipo de estrutura de alta complexidade poderia prever o comportamento do seu fluxo e, por consequência, as melhores condições para o aumento da vazão de fluidos pelas suas extremidades.

Dada a complexidade geométrica desses canais e o interesse econômico associado ao seu estudo, é necessário um método não invasivo e qualitativo que consiga determinar informações em conjunto sobre a estrutura e a dinâmica associada. Existem trabalhos que tratam este problema através da microtomografia computadorizada para a análise estrutural⁸ que podem servir como base para a Dinâmica de Fluidos Computacional (DFC), uma abordagem em ascensão no estudo de meios porosos.⁹

O estado da arte de simulações em meios porosos é relacionado à modelagem de acidificações de matrizes. Trabalhos recentes¹⁰ simulam a formação dos *wormholes* no sentido de aplicação no poço diretamente através de dados petrofísicos. Mesmo assim, ainda existe o interesse de compreender a dinâmica neste tipo de estrutura em diferentes escalas.

Entretanto, através das técnicas de Imagem por Ressonância Magnética (IRM) podemos gerar informações estruturais das rochas que venham alimentar simulações assim como realizar medidas de fluxo com imagens 4D com contraste de fase.¹¹ A aplicação em conjunto de IRM e DFC para o estudo de rochas não foi encontrada em outros trabalhos da literatura. Portanto, baseado em estudos biológicos^{12, 13}, busca-se utilizar técnicas de IRM em conjunto com DFC.

A simulação computacional surge como um método capaz de cruzar as informações obtidas através de dados por ressonância magnética, consequentemente as duas técnicas se complementam. Portanto procuramos estudar um método capaz de utilizar a estrutura do *wormhole* para prever a dinâmica e o rendimento resultante de diferentes processos de acidificação rochosa. Desta forma, inicia-se um estudo que apresenta a perspectiva de complementariedade entre DFC e IRM.

2 EXPOSIÇÃO CONCEITUAL

Visto que este trabalho condensa informações de áreas diversas, neste capítulo trataremos todos os conceitos que orientem o leitor a uma contextualização. Desta forma, iniciaremos a discussão sobre a DFC e sua base de fluidodinâmica teórica com as equações de Navier-Stokes. Entretanto, como utilizamos as IRM (sendo a estrutura da construção topológica do *wormhole*), discutiremos as restrições e os efeitos do experimento na modelagem do domínio em que simulamos.

2.1 Dinâmica de fluidos computacional

Apesar das análises teóricas em conjunto com os métodos experimentais resolverem diversos problemas acadêmicos e industriais, eles possuem suas limitações. Sendo estas quanto à abordagem experimental, os equipamentos necessários, o tempo de montagem, a escala e consequentemente o custo do processo, os quais podem inviabilizar a medição. Já a análise teórica, mesmo sendo uma abordagem mais geral, é necessariamente restrita a problemas com geometrias simples.

O progresso do processamento computacional nas últimas décadas viabilizou a simulação numérica como mais um método de estudo para a mecânica dos fluidos. Entretanto, suas limitações se estabelecem quanto aos erros de truncamento numérico, a determinação das condições de contorno e principalmente aos custos computacionais. Desta maneira as simulações surgem como um complemento para as bases teóricas e experimentais com suas próprias vantagens e desvantagens.

Deste modo, a próxima sessão trata as leis de conservação para o surgimento das equações de Navier-Stokes. Este formalismo, que tem como finalidade atuar no domínio fluidodinâmico, pode admitir certas restrições a sua complexidade. Consequentemente, argumentos como a incompressibilidade e regime de baixas velocidades, que podem ser justificados através de condições experimentais, servem para viabilizar a simulação quanto aos seus custos computacionais em meios complexos.

2.1.1 Equações de Navier-Stokes e simplificações

Através das três componentes de velocidade, da pressão e da densidade podemos determinar o estado de um fluido. Entretanto, para obtermos as equações que governam a fluídodinâmica, precisamos de considerações obtidas através das leis de conservação.

Uma vez que a massa não pode ser criada ou destruída durante o processo de fluxo,

sua equação de conservação pode ser escrita da forma

$$\partial_t m = 0. \quad (2.1)$$

Em contrapartida, o momento pode sofrer alterações devido à ação de forças e portanto sua equação de conservação é dada pela segunda lei de Newton

$$\partial_t(m\mathbf{v}) = \sum \mathbf{f}, \quad (2.2)$$

na qual m é a massa, $\mathbf{v}$ a velocidade do fluido e $\mathbf{f}$ são as forças geradoras de alterações no momento.

Por conveniência estas equações são tratadas em determinada região de fluxo denominada volume de controle. Este processo envolve a aplicação do teorema de transporte de Reynolds em conjunto com o teorema da divergência de Gauss em uma forma integral para propriedades intensivas generalizadas, este desenvolvimento se encontra no Apêndice A e acarreta nas equações de Navier-Stokes independentes do sistema de coordenadas.

Em consequência desses procedimentos, conseguimos expressar as equações de Navier-Stokes em coordenadas cartesianas pela convenção de Einstein. Assim, as equações de conservação de massa e momento são respectivamente expressas por

$$\partial_t \rho + \partial_i(\rho u_i) = 0 \quad (2.3)$$

e

$$\partial_t(\rho u_i) + \partial_j(\rho u_j u_i) = \partial_j \tau_{ij} - \partial_i p + \rho f_i, \quad (2.4)$$

em que ρ é a densidade, p a pressão, u_i as componentes cartesianas do vetor velocidade e f_i as forças atuantes. O τ_{ij} é relacionado com as interações viscosas do tensor de stress e é dado por

$$\tau_{ij} = \mu[(\partial_j u_i + \partial_i u_j) - 2/3 \delta_{ij} \partial_j u_j] \quad (2.5)$$

no qual μ é a viscosidade do fluido e δ_{ij} o delta de Kroneker.

Para a aplicação deste estudo a densidade do fluido pode ser dada como constante e, conseqüentemente, as equações de Navier-Stokes podem ser reduzidas para

$$\partial_i u_i = 0 \quad (2.6)$$

e

$$\partial_t u_i + \partial_j(u_j u_i) = \partial_j(\nu \partial_j u_i) - \rho^{-1} \partial_i p + f_i \quad (2.7)$$

através da equação simplificada de conservação de massa e com ν sendo a viscosidade cinemática, definida pela razão da viscosidade absoluta pela densidade.

Entretanto este modelo ainda pode ser simplificado para o regime de baixas velocidades imposto em condições de laboratório. Assim, ignoramos os termos relacionados

à inércia do fluido e a conservação do momento toma a forma

$$\mu \partial_j \partial_j u_i - \rho^{-1} \partial_i p + f_i = 0. \quad (2.8)$$

Finalmente construímos a estrutura matemática para o estudo dos fluidos em diferentes níveis de complexidade. Entendendo isso, passamos para a motivação de aplicação dessas equações em um ambiente de simulações computacionais.

2.1.2 OpenFOAM

Atualmente existem programas comerciais como o ANSYS Fluent e o COMSOL Multiphysics que são capazes de lidar com uma série de aplicações fluidodinâmicas. Especificamente para a petrofísica, o PerGeos possui ferramentas específicas para trabalhar com rochas reconstruídas computacionalmente em imagens de múltiplas escalas. Entretanto, estes *softwares* são de alto custo e uma alternativa que vem sendo utilizada é o OpenFOAM.¹⁴

O software livre e de código aberto OpenFOAM é uma ferramenta que surgiu no meio acadêmico e que está sendo intensivamente aplicada na indústria. Seu diferencial em comparação com os *softwares* comerciais é que ele apresenta uma curva de aprendizado lenta, pois por não possuir uma interface gráfica torna a simulação de sistemas complexos trabalhosa e dependente de um usuário especializado. Suas simulações utilizam o método de discretização de volumes finitos, utilizando as equações em subdivisões do objeto estudado.¹⁵

O método de volumes finitos é responsável pela aplicação de equações algébricas referentes as formas de conservação em um elemento de volume. Devido ao método, algumas grandezas conservativas são definidas como o fluxo na face das células. Assim ganha-se uma propriedade de conservação pela continuidade do fluxo no meio. A grande vantagem dos volumes finitos é sua flexibilidade em relação a geometrias complexas por permitir a implementação numérica em qualquer elemento poligonal.

Uma particularidade do OpenFOAM é a utilização de técnicas em computação orientada ao objeto através da linguagem em C++ de bibliotecas para operações tensoriais. Assim, a aplicação de modelos físicos complexos em simulações se resume a utilizar expressões matemáticas em alto nível pela linguagem de programação C++.¹⁴

Em consequência da implementação em cálculo tensorial, existirá a classe finiteVolumeCalculus (fvc), que realiza o cálculo explícito do dado em um campo tensorial geométrico, e finiteVolumeMethod (fvm), efetuando a representação matricial da operação para solução em termos da variável dependente em um intervalo de tempo.

É comum na DFC utilizar uma equação de conservação generalizada para a exem-

plificação dos métodos computacionais. Assim, tomamos a equação integral

$$\partial_t \int_{\Omega_{VC}} \rho \phi d\Omega + \int_{SC} \rho \phi \mathbf{v} \cdot d\mathbf{S} = \int_{SC} \Gamma^\phi (\nabla \phi) \cdot d\mathbf{S} + \int_{\Omega_{VC}} q_\phi d\Omega, \quad (2.9)$$

na qual os termos à direita são, respectivamente, devidos à difusão com Γ^ϕ sendo a difusividade para a propriedade ϕ e q_ϕ uma fonte ou sorvedouro da mesma quantidade. Em consequência da aplicação do teorema da divergência de Gauss, assim como no caso específico tratado no Apêndice A, é possível obter

$$\partial_t(\rho \phi) + \nabla \cdot (\rho \mathbf{v} \phi) = \nabla \cdot (\Gamma^\phi \nabla \phi) + q_\phi. \quad (2.10)$$

Assim, um exemplo para a aplicação das classes na linguagem de alto nível é a matriz de discretização da propriedade ϕ no código de um solucionador, podendo ser observado abaixo, no qual identificamos seus termos referentes à instabilidade, convecção, difusão e fonte ou sorvedouro.

```
fvMatrixVector Ueqn
(
    fvm::ddt(phi)
    +fvm::div(vrho, phi)
    -fvm::laplacian(Dphi, phi)
);
solve(Ueqn == fvc::(qphi));
```

Uma vez que possuímos o conhecimento sobre como a DFC é uma nova abordagem no estudo de fluidos, foi introduzido o OpenFOAM em conjunto com sua discretização e técnicas numéricas. Assim, nos orientamos para a determinação do domínio geométrico em que a DFC será aplicada. Para isso, é possível criar geometrias simplificadas com *softwares* de manipulação 3D ou adquirir imagens que possam ser reconstruídas no ambiente computacional.

2.2 Imagens por ressonância magnética

Este trabalho se baseia na aplicação da DFC discutida no capítulo anterior em um domínio geométrico definido por técnicas de aquisição de imagens. Entretanto, uma vez que discutimos a estrutura e dificuldades dos métodos computacionais precisamos abordar as limitações das imagens que possam interferir nas simulações. A seguir faremos uma discussão sobre a técnica de IRM. Entretanto, como os aspectos específicos das aquisições não fazem parte do escopo deste estudo, o leitor que desejar maior aprofundamento pode se orientar através de livros^{16, 17} e trabalhos mais específicos de Tannús A.¹⁸ e Foerster B. U..¹⁹

Apesar de apresentar menor resolução, comparada com outras técnicas como a microtomografia computacional, a IRM possui a vantagem do sinal obtido para a reconstrução do *wormhole* ser correlacionado com o fluido permeante. Entretanto, existem diversas formas de se adquirir uma imagem e elas envolvem a aplicação de pulsos de radiofrequência e gradientes. Estes métodos de aquisição são denominados sequências de pulsos e eles determinam a qualidade da imagem e até mesmo a ponderação que irá resultar em seu contraste.

Os principais fatores determinantes na qualidade da imagem são a relação sinal ruído, a resolução espacial e o tempo de aquisição. Estas características são vinculadas através dos parâmetros de temporização das sequências de pulsos, como o Tempo de Repetição (TR) e o Tempo ao Eco (TE). Estes parâmetros são respectivamente o tempo entre o pulso inicial de radiofrequência e o pulso da próxima repetição e o tempo até o máximo do sinal da magnetização.

A relação sinal ruído é definida pela razão da amplitude do sinal recebido pelo desvio padrão do ruído. Seu principal efeito no resultado final das simulações é que a flutuação do ruído entre ramificações próximas gere uma conexão inexistente entre os canais. Para evitar este tipo de problema é preciso aumentar o valor do sinal com relação ao ruído. A maneira mais direta de se fazer isso é aumentando o número de repetições da imagem, além de aplicar um TR e TE que maximize o sinal na ponderação desejada. Entretanto, este processo acarreta no aumento do tempo de aquisição.

Já a resolução espacial é a capacidade de se diferenciar dois pontos distintos pelo tamanho do voxel, que é uma representação de intensidades volumétrica e de preferência isotrópica. Se a resolução for baixa, temos o problema de volume parcial e sinais distintos serão misturados em um único voxel. Assim, ao reconstruir a imagem não será possível resolver estruturas pequenas. Entretanto, conforme a resolução aumenta, obtemos complicações tanto de tempo de aquisição pelo aumento da quantidade de decodificação de fase, frequência e corte quanto de custo computacional devido a quantidade de memória RAM exigida para resolver a malha volumétrica. Além disso, quanto maior a resolução espacial, menor a relação sinal ruído para um mesmo número de médias.

Agora nos deparamos com uma aparente solução dos problemas de relação sinal ruído e de resolução espacial, em que bastaria esperar tempo o suficiente para adquirir a imagem na máxima resolução requisitada. Entretanto, com o aumento do tempo de aquisição, a água tende a evaporar dada à transferência de energia por radiação dos pulsos de radiofrequência. Assim, teremos uma quantidade de sinal que seria perdido durante o tempo e que aumentaria as incertezas quanto às estruturas internas da amostra.

Portanto, para que exista qualidade suficiente a fim de se realizar a reconstrução de uma topologia para simulações precisamos ponderar o que foi discutido. A imagem precisa ser adquirida em um tempo que não comprometa sua saturação e ter uma relação sinal

ruído que não crie desconexões entre ramificações. Além disso, a resolução máxima que se poderá atingir vai depender do poder computacional que estará disponível. Entretanto, é interessante determinar previamente o tipo de estrutura para se levar em consideração nas simulações

3 MÉTODOS

Os métodos empregados neste trabalho consistem na correlação e aplicação dos softwares: Atropos²⁰, Vascular Modeling Toolkit (VMTK)²¹ e OpenFOAM²² em IRM de amostras de rochas carbonáticas acidificadas. No decorrer das próximas seções serão especificados os detalhes das amostras e dos algoritmos já, segundo a ordem lógica apresentada na Figura 1, e suas aplicabilidades. Assim, começamos explicando as características das amostras e da técnica de ressonância magnética para então focar na compreensão das ferramentas computacionais já aplicadas e estabelecidas em suas respectivas plataformas.

Figura 1 – Diagrama de técnicas experimentais e ferramentas computacionais com suas respectivas ordens de aplicação neste estudo.

Fonte: Elaborada pelo autor.

Desta forma podemos classificar cada uma das ferramentas como uma etapa diferente. Assim, o Atropos é responsável pelo pré-processamento das imagens ao realizar a segmentação e conseguir separar o *wormhole* do restante da matriz porosa. Quanto ao VMTK, ele irá processar estas imagens de maneira a criar uma malha superficial sobre nossa região de interesse. Finalmente, o OpenFOAM ficará encarregado do pós-processamento ao gerar uma malha volumétrica em que ele é capaz de realizar as simulações fluidodinâmicas.

3.1 Amostras

As amostras utilizadas neste estudo são de formações carbonáticas e foram acidificadas pelo Centro de Pesquisas Leopoldo Américo Miguel de Mello (CENPES), que é uma unidade de pesquisa e desenvolvimento da Petrobras. Suas características geométricas são dadas de acordo com a resolução nº 71/2014 da ANP, que trata justamente da regulamentação de dados para a pesquisa de petróleo e gás. A principal amostragem da

característica estrutural dos poços são os chamados testemunhos, que são identificados por profundidade e fornecidos por comprimento nominal de um metro.

Entretanto, para as imagens utilizamos os denominados plugues e que são definidos no artigo 2º da resolução citada acima como "Frações, de formato geralmente cilíndrico, obtidas a partir de testemunhos e utilizadas normalmente em ensaios petrofísicos para a determinação da porosidade e permeabilidade de uma rocha reservatório, por exemplo;". O padrão dos plugues não acidificados pode ser visto através da figura 2, eles possuem um comprimento de até 8 centímetros.

Figura 2 – Exemplo de plugue carbonático não acidificado do tipo Edward White disponível para análise.

Fonte: Elaborada pelo autor.

Foram fornecidos para este estudo 9 plugues de rochas carbonáticas acidificados com diferentes vazões de ácido HCl com concentração de 1,5%. As amostras tiveram origem de três tarugos comerciais do tipo Indiana Limestone como da figura 3, que são porções de rochas com o mesmo diâmetro dos plugues só que com comprimento de 30 cm e diâmetro de 3.8 cm foram cortadas em três pedaços cada de aproximadamente 7cm, sendo chamados respectivamente de 1, 2 e 3. Os tratamentos tiveram vazões de 0, 1, 1 e 10 *ml/min*, nos quais foram denominados, respectivamente, como A, B e C.

Figura 3 – Plugue carbonático acidificado do tipo Indiana Limestone.

Fonte: Elaborada pelo autor.

Desta forma, a nomenclatura das amostras ocorre pela combinação dos cortes das porções 1, 2 e 3 com as diferentes vazões. Os dados fornecidos pela Petrobras prévios à injeção de ácido indicam que entre os grupos numéricos a porosidade se mantém próxima,

com média e desvio padrão de 16.4 ± 0.9 . Portanto, o parâmetro de distinguibilidade entre as rochas se torna a vazão de acidificação.

3.2 Imagens por ressonância magnética

As imagens por ressonância magnética foram obtidas por um magneto supercondutor horizontal com campo de 2T da Oxford Instruments, modelo 8510HR, que opera em conjunto com um espectrômetro Bruker Avance III (Bruker-BioSpin, Inc., Billerica, MA, EUA). As aquisições são resultado de um trabalho feito pelo companheiro de grupo Dr. Bernd Uwe Foerster. Nos próximos parágrafos serão descritos detalhes das técnicas de saturação aplicadas e a sequência de pulso utilizada.

Para se realizar o processo de saturação com água, as amostras foram inicialmente seladas. Esta etapa busca dificultar o processo de evaporação da água durante os experimentos, além de impedir qualquer tipo de escoamento mecânico. Utilizou-se um material termo retrátil que não apresenta hidrogênio em sua composição e que é do tipo *fluorinated ethylene propylene*. Em seguida, a amostra é submersa em água e exposta a uma pressão relativa de $-650mmHg$ por 60 minutos. Após a saturação e com a rocha em submersão utiliza-se uma tampa de teflon nas extremidades conforme exposto na figura 4 para uma vedação completa.

Figura 4 – Padrão de selamento das amostras com material termo retrátil transparente e tampa de teflon.

Fonte: Elaborada pelo autor.

Neste trabalho utilizaremos imagens do tipo gradiente eco 3D por possuírem a vantagem de parâmetros como o TE e TR serem mais curtos. A técnica de imagem tridimensional escolhida foi a sequência *mirrored Free Induction Steady Precession* (PSIF) ²³ devido ao seu contraste por T_2 acentuado. Esta escolha é interessante para criar uma maior distinção na imagem com relação à estruturas com tempo de relaxação longo, o que é equivalente ao *wormhole* e macro poros.

A resolução das imagens era isotrópica de $300\mu m$ e seguiu um protocolo de PSIF com a duração de 5 horas. Foram feitas 64 médias com parâmetros de temporização de 4.5 e 10.5 *ms*, respectivamente, para TE e TR. Além disso como a sequência é do tipo gradiente eco os pulsos possuíam ângulo de excitação de 40° . Os dados eram gerados no formato *Neuroimaging Informatics Technology Initiative* (NIfTI), uma extensão comum da área de IRM.

Durante os resultados serão apresentadas imagens que utilizam a técnica *Maximum Intensity Projection* (MIP). Este é um método para a análise de dados tridimensionais que projeta em um plano os voxels de máxima intensidade que estão na direção de visualização. Uma vez que as imagens de MIP são utilizadas em estudos angiográficos ²⁴ para uma análise estrutural de artérias, utilizaremos a técnica para visualizar as estruturas internas da rocha antes das etapas de processamento da imagem.

Utilizando a característica de contraste da imagem por T_2 , a próxima seção procura economizar processamento computacional. Assim, segmentaremos as regiões de maior intensidade para revelar somente o *wormhole* e suas principais ramificações. Portanto, as estruturas que podem ser visualizadas pelas imagens de MIP serão preparadas para se tornar um novo domínio computacional.

3.3 Segmentação

A segmentação de imagens pode ser dada pela separação por níveis de cinza ou classificação por propriedades locais. Entretanto, ao determinar um nível de cinza para identificar regiões de interesse ou classificar estruturas, as imagens podem estar sujeitas à subjetividade do usuário. Os métodos de segmentação Bayesiana ^{25, 26} levam em conta o número de classes a serem atribuídas, consequentemente sua implementação busca iterativamente maximizar uma probabilidade de melhor ajuste na imagem.

Para descrever matematicamente essa técnica definimos o domínio da imagem como I em que temos a discretização de N termos com $i \in \{1, 2, \dots, N\}$, consequentemente podemos caracterizar a intensidade da imagem como um campo $\mathbf{y} = \{y_1, y_2, \dots, y_N\}$. Como seleciona-se um número L de classes, também definimos o campo de segmentação $\mathbf{x} = \{x_1, x_2, \dots, x_N\}$ para cada $x_i \in L$. Assim, quando nos direcionamos para o teorema de Bayes podemos escrever

$$f(\mathbf{x}|\mathbf{y}) = f(\mathbf{y}|\mathbf{x})f(\mathbf{x})\frac{1}{f(\mathbf{y})} \quad (3.1)$$

em que $f(\mathbf{x}|\mathbf{y})$ e $f(\mathbf{x})$ são respectivamente as funções de probabilidade *a posteriori* e *a priori*, $f(\mathbf{y}|\mathbf{x})$ é a função de verossimilhança e finalmente $f(\mathbf{y})$ o termo de normalização. Consequentemente, $\hat{\mathbf{x}}$ é a classificação que maximiza a probabilidade posterior

$$\hat{\mathbf{x}} = \operatorname{argmax}_{\mathbf{x}} \{f(\mathbf{y}|\mathbf{x})f(\mathbf{x})\}. \quad (3.2)$$

De um modo mais específico, a verossimilhança por classe é modelada como uma gaussiana na forma

$$f_j(y_i|\mu_j, \sigma_j) = \frac{1}{\sqrt{2\pi\sigma_j^2}} \exp \left[\frac{-(y_i - \lambda_j)^2}{2\sigma_j^2} \right] \quad (3.3)$$

com λ_j e σ_j sendo respectivamente o valor médio e a variância do modelo em uma j -ésima classe. Portanto temos a probabilidade global

$$f(\mathbf{y}|\mathbf{x}) = \prod_{i=1}^N \sum_{j=1}^L \gamma_j f_j(y_i|\lambda_j, \sigma_j) \quad (3.4)$$

no qual γ_j é chamado de fator de mistura das gaussianas, calculado iterativamente como uma média normalizada da função de verossimilhança.

Entretanto, ainda não geramos uma correlação espacial na segmentação e para isso utilizamos a formulação de Campos Aleatórios de Markov (CAM)²⁷

$$f(x_i|x_{I-\{i\}}) = f(x_i|x_{\mathcal{N}_i}), \quad (3.5)$$

no qual a condição de propriedades locais é dada pelo voxel i e seus vizinhos $\mathcal{N}_i$ no domínio I da imagem. A base deste problema é modelada pela distribuição de probabilidade

$$f(\mathbf{x}) = Z^{-1} \exp \left(-\beta \sum_{i=1}^N \sum_{q \in \mathcal{N}_i} \delta_{iq} \right) \quad (3.6)$$

com β sendo um parâmetro de peso, determinado pelo usuário, para a contribuição dos CAM e δ_{iq} sendo 0 quando $x_i = x_q$ e 1 ao contrário. Consequentemente o algoritmo de Maximização de Expectativa (ME)²⁸ consegue trabalhar com iterações baseadas na equação

$$f(\mathbf{y}|\mathbf{x})f(\mathbf{x}) = Z^{-1} \prod_{i=1}^N \sum_{j=1}^L \gamma_j \frac{1}{\sqrt{2\pi\sigma_j^2}} \exp \left[\frac{-(y_i - \lambda_j)^2}{2\sigma_j^2} - \beta \sum_{q \in \mathcal{N}_i} \delta_{iq} \right] \quad (3.7)$$

e finalmente retornar a condição exposta pela equação 3.2.

Podemos resumir o que foi apresentado em um exemplo como o da figura 5, na qual temos uma imagem com $N = 16$ termos e desejamos segmentá-la em $L = 2$ classes. O papel da gaussiana introduzida pela equação 3.3 vai ser de gerar uma maior contribuição para a maximização quando y_i e λ_j são próximos, favorecendo esta condição de uma maneira global. Assim conseguimos compreender como os pixels com intensidades entre 128 e 255 integram a mesma classe, entretanto a distinção de intensidades como 35 e 75 é mais sutil devido à baixa distinguibilidade nas bordas gaussianas.

A importância da correlação local entre as intensidades surge com a adição do termo exposto na equação 3.6. Quando o fator local é adicionado na equação 3.7, a contribuição para a minimização vai ser a mesma do que a causada pela equação 3.3 quando $x_i = x_q$ e

Figura 5 – Exemplo de imagem composta por níveis de cinza e respectiva segmentação em duas classes ($L = 2$).

Fonte: Elaborada pelo autor.

diminuir no caso contrário. Portanto, para os píxeis de intensidade 35 e 75 o parâmetro β que vai ponderar a imagem ao suavizar ou acentuar a contribuição dos vizinhos na diferença entre classes.

Assim, descreve-se o processo matemático envolvido na aplicação do Atropos. Um detalhe de processamento é que o software foi utilizado em dois modos. Primeiramente, de forma mais direta com a segmentação em quatro classes para a distinção entre fundo, micro poros, macro poros e *wormhole*. Além disso, para obter a mesma separação de classes é possível aplicar o Atropos em duas etapas de segmentação.

Desta forma, ao aplicar uma máscara retangular em conjunto com a imagem era possível separar o ruído de fundo de todo o fluido que permeava a amostra. Em seguida, a segmentação do fluido servia como máscara em conjunto com a imagem original para poder resultar nas classes 1,2 e 3 sendo respectivamente de de micro poros, macro poros e *wormhole*. Assim, torna-se importante discutir sobre a diferença na malha e as consequências da simulação com dois métodos diferentes que serão capazes de gerar malhas distintas sobre o mesmo *wormhole*.

3.4 VMTK

A utilização do VMTK se justifica pela sua coleção de bibliotecas em python que envolvem algoritmos e classes em C++ para reconstrução e manipulação geométrica de imagens. Apesar de que seu desenvolvimento e principal aplicação estejam relacionados com redes vasculares e hemodinâmica¹³, as similaridades em padrões geométricos e escala das artérias com *wormholes* nos permite aplicação direta dos algoritmos sem perda de generalidade.

3.4.1 Marching cubes

A primeira etapa de processamento da imagem é a aplicação do algoritmo de construção de superfícies tridimensionais denominado *marching cubes*.²⁹ Seu objetivo é criar um modelo triangular de superfície através de imagens volumétricas. Em consequência, o algoritmo busca reconhecer os voxels entre cortes consecutivos de imagens tridimensionais como mostrado na figura 6.

Figura 6 – Identificação de voxel (cubo) entre dois cortes consecutivos da imagem.

Fonte: Elaborada pelo autor.

Ao se deparar com um voxel, o algoritmo determina um cubo lógico no qual o valor um é admitido no vértice caso o dado seja contido na superfície, estando em seu interior ou fronteira. Consequentemente, o valor zero é dado para todos os vértices fora da superfície. Assim, teríamos 256 modos lógicos de preencher o cubo e uma vez que a topologia é invariante por reversão de valores ou rotação, simplificamos os casos para os exibidos pela figura 7.

Figura 7 – Padrões de triangulação do algoritmo.

Fonte: Elaborada pelo autor.

Para cada padrão de triangulação cria-se um índice de oito bits em que cada bit corresponde a um vértice, assim como indicado pela figura 8. Assim, este índice indicará quais arestas serão subdivididas para dada configuração de vértices. Finalmente, deixamos

o domínio de imagens tridimensionais para um conjunto de vértices e arestas capazes de definir a superfície do *wormhole*.

Figura 8 – Numeração de arestas e vértices para indexação.

Fonte: Elaborada pelo autor.

3.4.2 Filtro de Taubin

Uma vez que temos a superfície criada com o algoritmo da seção anterior, sendo ela uma malha superficial, é necessário realizar uma suavização da sua geometria para que ela seja utilizada na criação da malha volumétrica em que ocorrerá as simulações. Nesta etapa, aplica-se o filtro de Taubin ³⁰ pois sua principal propriedade inclui realizar a suavização minimizando os efeitos de contração das paredes. Assim nos certificamos que o calibre tanto do caminho principal quanto das ramificações do *wormhole* não sejam alterados por efeitos de processamento.

Para que a suavização ocorra sem o estreitamento da geometria, são realizadas N iterações de contração e expansão, tipicamente é aplicado 100 repetições, da lista de vértices originais $\mathcal{V}$ em que o resultado final $\mathcal{V}^N$ pode ser dado pela equação

$$\mathcal{V}^N = [(\mathcal{I} - \xi\mathcal{K})(\mathcal{I} - \zeta\mathcal{K})]^N \mathcal{V}. \quad (3.8)$$

Nesta expressão, ξ e ζ , com $-1 < \xi < 0$ e $0 < \zeta < 1$ são respectivamente os parâmetros de expansão e contração enquanto $\mathcal{I}$ é a matriz de identidade. Já a definição de $\mathcal{K}$ é dada por

$$\mathcal{K} = \mathcal{I} - \mathcal{W}, \quad (3.9)$$

na qual $\mathcal{W}$ terá o papel de ponderar a movimentação entre vértices vizinhos.

O $\mathcal{W}$ é fatorizado pela multiplicação de ED , sendo elas matrizes simétricas respectivamente definidas por

$$E_{ij} = \begin{cases} 1 & \text{se } v_j \in v_{i^*} \\ 0 & \text{se não} \end{cases} \quad (3.10)$$

e

$$D_{ij} = \begin{cases} 1/i^* & \text{se } i = j \\ 0 & \text{se não} \end{cases} . \quad (3.11)$$

Os iteradores j e i estão contidos dentro do número de vértices da estrutura, entretanto i^* representa a soma dos vizinhos próximos em cada ponto. Desta forma é possível traduzir a lista de vértices em uma interpretação que leve em conta sua conectividade.

Para exemplificar podemos definir um grafo que é composto pela lista de vértices

$$\mathcal{V} = \begin{pmatrix} 0 & 0 \\ 1/2 & \sqrt{3}/2 \\ 1 & 0 \\ 3/2 & \sqrt{3}/2 \\ 2 & 0 \end{pmatrix} \quad (3.12)$$

e conseguimos graficamente visualiza-lo pela figura 9. Suas respectivas matrizes de adjacência e poderação entre vizinhos próximos dadas as definições anteriores são

$$E = \begin{pmatrix} 0 & 1 & 1 & 0 & 0 \\ 1 & 0 & 1 & 1 & 0 \\ 1 & 1 & 0 & 1 & 1 \\ 0 & 1 & 1 & 0 & 1 \\ 0 & 0 & 1 & 1 & 0 \end{pmatrix}$$

e

$$D = \begin{pmatrix} 1/2 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 1/3 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1/4 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 1/3 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 1/2 \end{pmatrix} .$$

Assim, diferente de como ocorre o processo de filtragem em imagens, aplica-se uma transformação de matrizes que representem propriedades estruturais do nosso objeto de estudo.

Em seu artigo, Taubin entra em mais detalhes e prova que a equação 3.8 funciona como um filtro. Assim o usuário fornece um parâmetro de banda que interfere em ξ e ζ devido à função de transferência demonstrada no artigo descritivo do algoritmo.³⁰ Para caso dos *wormholes*, o valor 0,7 mostrou uma suavização suficiente sem que o método interfira na estrutura de modo a deixa-la artificial.

Figura 9 – Grafo para exemplo numérico de ponderação entre contração e expansão de vértices vizinhos.

Fonte: Elaborada pelo autor.

3.5 OpenFOAM

Nas seções anteriores foram discutidos os detalhes desde o processo de preparação da amostra até a construção de uma malha superficial que representasse o *wormhole*. Estes procedimentos podem ser classificados como uma única etapa de simulação do domínio físico que temos interesse em estudar. Entretanto, a modelagem ainda não é suficiente para se realizar o processo de simulação numérica em volumes finitos. Portanto iremos abordar a técnica de discretização para uma malha volumétrica, assim como o *Semi Implicit Method for Pressure Linked Equations* (SIMPLE), um algoritmo de solução para fluidos incompressíveis e estacionários implementado no acervo de métodos numéricos do OpenFOAM.

No entanto, uma simulação utilizando o OpenFOAM exige determinada organização no diretório de estudo, assim como pode ser visto na figura 10. Neste caso, esta é uma representação geral para qualquer um dos *wormholes* trabalhados. Isto é válido pois sempre tratamos um fluido incompressível com fluxo laminar em uma malha com nomenclatura fixa em seções do domínio.

Cada pasta dentro do diretório possui uma função, assim **0** contém as informações sobre condições de contorno tanto para a velocidade quanto para a pressão. Em sequência, **constant** comporta os arquivos de vértices, arestas e células da malha volumétrica na pasta **polymesh** enquanto **trisurface** armazena as superfícies geradas nas etapas anteriores.

Uma particularidade do OpenFOAM é que ele possui uma classe denominada dicionário que define parâmetros importantes para o processo numérico. A pasta **constant** possui o dicionário de propriedade de transporte que pode ser visto logo abaixo. Este arquivo tem a função de estabelecer a viscosidade do fluido utilizado para a simulação. Além disso é identificado um modelo de transporte newtoniano pois o solucionador numérico lida com as equações de Navier-Stokes incompressíveis.

Figura 10 – Organização genérica de diretório para simulações com OpenFOAM. Pastas são referenciadas em negrito e arquivos em itálico.

Fonte: Elaborada pelo autor.

```

FoamFile
{
    version      2.0;
    format       ascii;
    class        dictionary;
    object       transportProperties;
}
transportModel Newtonian;
nu              nu [ 0 2 -1 0 0 0 0 ] 1.18e-06;
  
```

Notemos que a viscosidade utilizada é cinemática e possui o valor de $1,18 \times 10^{-6} m^2/s$. A unidade apresentada é exposta pelo o vetor de números inteiros que antecede o valor. Cada item corresponde ao expoente de uma unidade do sistema internacional, assim como pode ser observado na tabela 1.

Do mesmo modo, existe a possibilidade da modelagem de turbulência através do dicionário *turbulenceProperties*. Entretanto, neste trabalho utilizamos fluxos laminares na condição de baixas velocidades, buscando a simplificação das equações de Navier-Stokes e sendo traduzido segundo o trecho de código abaixo.

Tabela 1 – Base do sistema de unidades utilizado pelo OpenFOAM.

Índice do vetor	Propriedade	Unidade
1	Massa	kilograma (Kg)
2	Comprimento	metro (m)
3	Tempo	segundo (s)
4	Temperatura	kelvin (K)
5	Quantidade	mol (mol)
6	Corrente	ampere (A)
7	Intensidade luminosa	candela (cd)

Fonte: Elaborada pelo autor.

```

FoamFile
{
    version    2.0;
    format     ascii;
    class      dictionary;
    object     turbulenceProperties;
}
simulationType laminar;

```

Finalmente, ao analisar a pasta **system** percebe-se que ela possui a maior parte dos dicionários necessários em um diretório de estudo. Os arquivos como *controlDict*, *fvSchemes* e *fvSolution* são respectivamente encarregados de acomodar as variáveis de controle da simulação, os esquemas de solução numérica e parâmetros de convergência. Além desses, existem os dicionários *blockMesh* e *snappyHexMesh* que são relacionados ao processo de discretização e discutidos em detalhes na próxima seção. Os arquivos relativos a **system** podem ser encontrados por completos no apêndice B.

3.5.1 Processo de discretização

O OpenFOAM possui funcionalidades específicas para a construção de malhas volumétricas simples e complexas, em que estas são respectivamente o *blockMesh* e *snappyHexMesh*. Entretanto, para o uso da ferramenta que gere maior complexidade precisamos criar uma malha mais simples que será a base para construção do domínio de simulação do *wormhole*.

Utilizando o *blockMesh* somos capazes de criar geometrias básicas como blocos regulares ou cilindros. Assim, define-se os vértices e as arestas que tem a finalidade de envolver a região que pretendemos inserir a malha superficial. Este processo é necessário

para que o `snappyHexMesh` identifique a geometria de interesse e separe os voxels em seu interior para modelar a malha, assim como ilustrado pela figura 11.

Figura 11 – Superfície de wormhole inserida em malha volumétrica criada através da funcionalidade `blockMesh`.

Fonte: Elaborada pelo autor.

Incorpora-se na funcionalidade `snappyHexMesh` a capacidade de migrarmos da superfície gerada por IRM intermediada pela malha base de blocos isotrópicos. Inicialmente é preciso identificar um ponto qualquer no interior do domínio de interesse através do parâmetro `locationInMesh`. Em sequência, será excluído da malha de base todas as células que não pertencem a região em que o ponto está localizado, ilustrado em uma simplificação bidimensional na figura 12. Entretanto, pela proporção dos blocos, a geometria resultante perde características de sua curvatura.

Para adaptar a malha ao decorrer da tortuosidade de um *wormhole* é possível aumentar o nível de refinamento das células ao redor das arestas da superfície. Assim, a figura 13 retrata o ganho de fidelidade entre a superfície de base e a malha resultante com dois níveis de refinamento. Além desta utilidade, o `snappyHexMesh` possibilita a adição de camadas além das proximidades com a parede do domínio por regiões e definir parâmetros de qualidade da malha.

Neste trabalho foram utilizados três e quatro refinamentos para, respectivamente, segmentações em uma e duas etapas. Esta alteração vem da necessidade de identificação de pequenas estruturas para acompanhar a fidelidade com uma segmentação mais detalhada. Assim, de forma geral aplica-se o `snappyHexMesh` como descrito no dicionário do apêndice B para criar as malhas volumétricas do domínio interno aos *wormholes* para o escoamento de fluidos.

Uma vez que definimos a discretização em que serão aplicados os métodos numéricos, precisamos entender como esta representação pode ser traduzida em forma operacional. Como já foi dito, cada ponto, aresta ou elemento da malha é armazenado no diretório

Figura 12 – Ilustração de identificação da geometria de base e exclusão de células fora de seu domínio. Em vermelho está representado um caminho de wormhole bidimensional.

Fonte: Elaborada pelo autor.

Figura 13 – Representação de extração em malha com dois níveis de refinamento.

Fonte: Elaborada pelo autor.

constant/polymesh. O conjunto dessas informações é capaz de fornecer a conectividade entre os elementos da malha. Assim, vizinhos com primeiro grau de conectividade tem maior influência entre si e isso deve ter consequências diretas na solução das equações.

Com o conhecimento da conectividade local, o OpenFOAM constrói uma matriz global de elementos. A figura 14 utiliza como base o exemplo da sessão de segmentação em uma malha volumétrica sem refinamento e exemplifica a criação da matriz global. Assim, a discretização das equações de conservação pode agir somente nos elementos conectados pela matriz de coeficientes em iterações únicas para toda a malha. Consequentemente, é possível solucionar sistemas para um vetor desconhecido a partir de um vetor de origem, podendo ser por condições de contorno ou iterações.

3.5.2 Algoritmo SIMPLE

Para resolver as equações que governam os fluidos, é necessário um algoritmo que consiga lidar com o acoplamento entre pressão e velocidade. Como destacado no livro de

Figura 14 – Exemplo de sistema com a matrix global baseado em segmentação da figura 5.

Fonte: Elaborada pelo autor.

Moukalled³¹ podemos escrever as equações 2.3 e 2.4 em um sistema matricial. A essência do método SIMPLE³² é utilizar a decomposição triangular inferior ($\mathbf{L}$) e superior ($\mathbf{U}$) para desacoplar a pressão da velocidade e solucionar as equações discretizadas.

De maneira mais explícita o método SIMPLE pode ser escrito na forma

$$\mathbf{LU} \begin{pmatrix} \mathbf{v} \\ \mathbf{P} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \mathbf{f} \\ \mathbf{0} \end{pmatrix}. \quad (3.13)$$

A decomposição triangular inferior e superior são respectivamente expressas como

$$\mathbf{L} = \begin{pmatrix} \mathbf{F} & \mathbf{0} \\ \mathbf{B} & -\mathbf{BD}^{-1}\mathbf{B}^T \end{pmatrix} \quad (3.14)$$

e

$$\mathbf{U} = \begin{pmatrix} \mathbf{I} & \mathbf{D}^{-1}\mathbf{B}^T \\ \mathbf{0} & \mathbf{I} \end{pmatrix}, \quad (3.15)$$

em que as matrizes $\mathbf{D}$, $\mathbf{B}$ e $\mathbf{F}$ são representações da discretização das equações de Navier-Stokes. Consequentemente, o algoritmo pode ser decomposto na forma

$$\begin{pmatrix} \mathbf{I} & \mathbf{D}^{-1}\mathbf{B}^T \\ \mathbf{0} & \mathbf{I} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \mathbf{v} \\ \mathbf{P} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \mathbf{v}^* \\ \mathbf{P}^* \end{pmatrix} \quad (3.16)$$

seguido por

$$\begin{pmatrix} \mathbf{F} & \mathbf{0} \\ \mathbf{B} & -\mathbf{BD}^{-1}\mathbf{B}^T \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \mathbf{v}^* \\ \mathbf{P}^* \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \mathbf{f} \\ \mathbf{0} \end{pmatrix} \quad (3.17)$$

no qual o asterisco indica valores intermediários dentro do processo de iteração.

Finalmente, a lógica do algoritmo é utilizar a segunda decomposição para a solução dos vetores de velocidade e pressão e em seguida a primeira decomposição atualizar seus

valores. Desse modo, o primeiro passo é resolver

$$\mathbf{F}\mathbf{v}^* = \mathbf{f} \quad (3.18)$$

e consecutivamente processar

$$-\mathbf{B}\mathbf{D}^{-1}\mathbf{B}^T = -\mathbf{B}\mathbf{v}^*. \quad (3.19)$$

Assim, a atualização é feita sucessivamente pela velocidade

$$\mathbf{v} = \mathbf{v}^* - \mathbf{D}^{-1}\mathbf{B}^T\mathbf{p}^* \quad (3.20)$$

e pressão

$$\mathbf{p} = \mathbf{p}^*. \quad (3.21)$$

Para as simulações realizadas neste trabalho os dicionários referentes aos métodos numéricos foram importados de tutoriais referência para problemas de engenharia do OpenFOAM. Além disso, uma vez que a malha possui alta complexidade, os parâmetros de convergência foram ajustados para que o processo numérico seja lento e estabilizado. Uma vez que as simulações foram realizadas em diversas taxas de pressão, a convergência foi atestada para variações relativas do resíduo da velocidade menores do que 0,1.

3.5.3 Pós-processamento

Uma vez que a simulação foi processada, se faz necessário o uso de ferramentas de quantificação e visualização dos dados. Para investigar as propriedades fluidodinâmicas é preciso definir os objetos chamados de linhas de corrente e vazão, que serão intensivamente citados na seção de resultados. Suas aplicações são feitas respectivamente no software Paraview e na funcionalidade de pós-processamento via linha de comando do OpenFOAM chamada flowRatePatch.

A definição da linha de corrente de um determinado fluxo é dada por uma linha que possua um vetor tangencial tal que em cada ponto dessa linha o vetor tangente seja paralelo ao vetor velocidade. Consequentemente, este objeto pode ser definido pelo seu próprio sistema de equações diferenciais representadas por

$$\frac{d\mathbf{x}}{d\tau} = \mathbf{u}(x, t = t_0), \quad (3.22)$$

nas quais τ é um parâmetro temporal que é utilizado no processo de integração numérica para um dado tempo t_0 . No Paraview o cálculo é realizado através de uma fonte pontual no interior de esferas de raio com no máximo metade do comprimento total das amostras.

Uma forma de mensurar o resultado do fluxo como um todo é determinando os valores da vazão nas extremidades do wormhole. Dada uma seção transversal, a vazão é definida por

$$Q = \iint_A \mathbf{v} \cdot d\mathbf{A}. \quad (3.23)$$

Assim, a ferramenta `flowRatePatch` utiliza a soma do fluxo em todas as faces em determinada seção do domínio multiplicada pela área da mesma seção obtida pelas informações contidas em **constant/polymesh**. Neste trabalho foi utilizado a face de saída do fluido em diferentes gradientes de pressão para assim determinar a evolução da vazão nas estruturas estudadas.

4 RESULTADOS

Pela diversidade de métodos aplicados no decorrer deste trabalho, serão apresentados neste capítulo os produtos decorrentes de cada etapa em diferentes seções. Inicialmente as imagens são analisadas nas perspectivas axial, coronal e sagital demonstrando a complexidade dos meios pelos MIP's e seus respectivos agrupamentos. Além disso, apresentaremos comparações entre os dois processos de segmentação e suas consequências nas malhas superficiais e volumétricas. Finalmente, serão expostas as renderizações das linhas de corrente em conjunto com a evolução das vazões.

4.1 Imagens

Uma vez que possuímos um conjunto de imagens PSIF das amostras com propriedades expostas na seção anterior, iremos analisá-las com maiores detalhes. Para isso serão utilizados cortes como demonstrado na figura 15. Nesta imagem, a amostra 3C exemplifica as direções de exibição das figuras que serão discutidas a seguir.

Figura 15 – Amostra 3C renderizada e com identificação de cortes coronal, sagital e axial respectivamente pelas cores vermelho, verde e azul.

Fonte: Elaborada pelo autor.

Na figura 16 são expostos cortes coronais que buscam representar com maior intensidade os tempos de relaxação longos. Assim, vemos em suas extremidades a água confinada no interior das tampas de teflon que também fornece referência para a identificação visual do *wormhole*.

Figura 16 – Cortes coronais do conjunto de amostras estudadas.

Fonte: Elaborada pelo autor.

A organização dos cortes é dada de forma que o sentido da injeção do ácido que formou os *wormholes* seja da esquerda para a direita. Observando as imagens das amostras A, que possuem vazão de $0,1 \text{ ml/min}$, vemos uma invasão mais acentuada na extremidade esquerda do meio poroso, facilitando a visualização do sentido de injeção. Além disso, a granulidade apresentada nas imagens é referente aos poros das amostras.

Quanto à figura 17, além de observarmos as mesmas características apontadas na imagem anterior, é possível complementar informações. Em geral, as ramificações e tortuosidades mostram não possuir sentido preferencial. Entretanto, ao contrastar os cortes sagitais e coronais das amostras 2C e 3C, seus *wormholes* se mostram confinados em um plano.

As próximas características poderão ser determinadas pela face superior das amostras. Como pode ser visto na figura 15, os cortes sagitais estão localizados no início do *wormhole*. Assim, as faces dos objetos de estudo estão na figura 18 e conseqüentemente pode-se observar o aumento da área de acidificação, o que pode ser justificado pelos estudos de dissoluções de matrizes rochosas.^{33, 34} Isto pois para velocidades menores existe uma maior dissolução da face carbonática, já que o processo do ácido permear a amostra é mais lento.

Finalmente é possível visualizar as imagens do tipo MIP expressas na figura 19. Assim, conseguimos observar a morfologia dos *wormholes* através dos dados de IRM, gerando resultados para comparação das malhas após a segmentação. Portanto a próxima

Figura 17 – Cortes sagitais do conjunto de amostras estudadas.

Fonte: Elaborada pelo autor.

Figura 18 – Cortes axial do conjunto de amostras estudadas.

Fonte: Elaborada pelo autor.

etapa será responsável de separar as geometrias expostas pelas imagens MIP para a reconstrução tridimensional.

Figura 19 – MIPs dos grupos de amostras com diferentes vazões.

Fonte: Elaborada pelo autor.

4.2 Segmentação

Nesta sessão de segmentação serão expostos resultados referentes a aplicação de três e quatro classes nas imagens. Os cortes estudados serão coloridos segundo a marcação das regiões assim como foi exposto em contraste com uma imagem de tons de cinza na figura 20. A coloração das classes é em ordem crescente e diretamente proporcional a um mapa de cores do azul para o vermelho.

Essencialmente os métodos de segmentação se diferem pela classificação do ruído. A primeira técnica considera o fundo da imagem como uma das quatro classes, assim ela abrange em sua categorização toda a gama de tons de cinza da imagem original. Quanto a segunda técnica, a divisão de etapas primeiramente retira todo o ruído de fundo e atua como uma máscara somente para o sinal já reconhecido como meio poroso. Assim, a figura 21 exemplifica com cortes axiais das amostras 1A e 3C a distinção entre as etapas utilizando o mapa de cores descrito anteriormente.

Pela análise visual dos cortes não é possível ver desigualdades entre as classes de mais alta ordem, ou seja, a representação de classe em vermelho. Entretanto, a conectividade entre ramificações e pequenas estruturas acopladas aos *wormholes* serão afetadas. Isto ocorre pois flutuações do ruído localizadas entre ramificações ou em suas extremidades favorece o termo de correlação local da equação 3.7.

Figura 20 – Imagem comparativa ampliada de segmentação em 3 classes com cortes originais.

Fonte: Elaborada pelo autor.

Figura 21 – Corte coronal das amostras 1A e 3C com comparação entre segmentações em uma (cima) e duas etapas (baixo).

Fonte: Elaborada pelo autor.

4.3 Malhas

Nesta seção serão apresentadas as malhas tanto superficiais quanto volumétricas geradas a partir das segmentações discutidas. Consequentemente, as geometrias globais dos *wormholes* podem ser comparadas através das representações em MIP. Além disso, os detalhes da triangulação das superfícies assim como o refinamento do interior dos volumes.

4.3.1 Superficiais

Dado que a visualização dos cortes de segmentação não acarreta em grandes informações volumétricas globais, a seguir será discutido as características geométricas de cada grupo de amostra. A figura 22 acentua as desigualdades dos domínios uma vez que o resultado referente à uma etapa e de duas etapas de segmentação estão respectivamente à esquerda e direita. Além disso, as setas em vermelho apontam primeiramente um prolongamento das ramificações como pode ser visto na amostra 1A, uma nova ramificação em 1B ou um acoplamento de ramificações que tinham perdido sua conectividade.

Figura 22 – Superfícies de fluxo A, B e C das amostras do grupo 1. No lado esquerdo estão as superfícies da segmentação em uma etapa e no direito de duas etapas. As setas em vermelho indicam principais diferenças em suas geometrias.

Fonte: Elaborada pelo autor.

Para as amostras do grupo 2 as mesmas diferenças entre malhas se repetem, assim como pode ser visto na figura 23. Entretanto, para a amostra A surgem mais poros ao redor da região de maior tortuosidade enquanto para a amostra B surge uma bifurcação no final da ramificação mais extensa à esquerda. A ramificação paralela acoplada em 2C é menor do que na 1C, apesar de esta ainda ser a geometria mais complexa do grupo.

Finalmente, ao analisar o grupo 3 não é possível ver grandes alterações nas etapas de segmentação quanto às ramificações mesmo em uma amostra mais complexa como a C. Entretanto, pelas geometrias possuírem menor tortuosidade ou ramificações em perspectiva, já é possível constatar uma alteração no calibre do caminho principal entre as segmentações. Este resultado é devido ao algoritmo de segmentação acoplar as paredes do *wormhole* na mesma classe dos macro poros.

Uma vez que todas as superfícies das segmentações foram fechadas e preparadas para a simulação, é possível utilizar ferramentas das bibliotecas de manipulação de superfície para quantificar o volume dos *wormholes*. A tabela 2 condensa estes volumes e

Figura 23 – Superfícies de fluxo A, B e C das amostras do grupo 2. No lado esquerdo estão as superfícies da segmentação em uma etapa e no direito de duas etapas. As setas em vermelho indicam principais diferenças em suas geometrias

Fonte: Elaborada pelo autor.

Figura 24 – Superfícies de fluxo A, B e C das amostras do grupo 3. No lado esquerdo estão as superfícies da segmentação em uma etapa e no direito de duas etapas. As setas em vermelho indicam principais diferenças em suas geometrias

Fonte: Elaborada pelo autor.

utiliza a terminologia de segmentação 1 e 2 para o número de etapas de segmentação do processo. Com exceção da amostra 1C, que acopla um grande volume de ramificação que foi desconsiderado do caminho principal na primeira segmentação, as demais amostras reduzem seu volume. Assim, apesar do acréscimo de ramificações, a segmentação em duas etapas necessariamente reduziu o calibre do *wormhole*.

O que se pode interpretar desses resultados é que a segmentação em duas etapas é uma forma robusta para desassociar o ruído de fundo do sinal no meio poroso, mas pode

Tabela 2 – Volume dos domínios em relação aos dois tipos de segmentação implementados.

Volume (ml)	1A	1B	1C	2A	2B	2C	3A	3B	3C
Segmentação 1	0,78	0,59	0,67	0,70	0,69	1,35	0,37	0,75	1,24
Segmentação 2	0,55	0,44	1,25	0,60	0,57	0,97	0,30	0,57	1,15

Fonte: Elaborada pelo autor.

induzir erros quanto ao calibre do *wormhole*. Em contrapartida, a segmentação de uma única etapa de quatro classes agrupa com o ruído micro poros associados a extremidades de ramificações. Assim, como o objetivo deste trabalho é de lidar somente com a estrutura do *wormhole*, a segmentação em uma única etapa perturba menos a geometria e será a escolhida para gerar as malhas volumétricas. Entretanto, vale ressaltar que a outra estratégia seria a mais adequada para a reconstrução e simulação do meio como um todo, mas seu custo computacional é elevado.

Para justificar a demanda de processamento que uma malha pode gerar, destacamos os detalhes e a complexidade da malha superficial do wormhole na figura 25. Nesta imagem é exposto o resultado da suavização pelo filtro de Taubin da amostra 1C. As ampliações possuem em evidência as arestas da triangulação, revelando somente as faces da bifurcação principal do *wormhole*. Neste caso o domínio possuía $2,8 \times 10^5$ faces, mas em média as amostras A, B e C tinham respectivamente $2,9 \times 10^5$, $3,5 \times 10^5$ e $6,4 \times 10^5$ que pode chegar a $7,9 \times 10^5$ faces considerando a superfície 1C da segmentação em duas etapas para compor a média.

Figura 25 – Triangulação de superfície da amostra 1C em perspectiva de ampliação.

Fonte: Elaborada pelo autor.

4.3.2 Volumétricas

Ao analisar as malhas volumétricas obtidas retoma-se a discussão sobre a complexidade dos meios estudados pelo detalhamento da superfície e ordens de grandeza associadas aos seus dados. A figura 26 contém o resultado do emprego da ferramenta snappyHexMesh para a criação de uma geometria para a amostra 1A com quatro níveis de refinamento. Esta condição de resolução para as amostras foi consequência de um ajuste gradual tanto da quantidade de camadas quanto da resolução dos blocos na funcionalidade blockMesh.

A superfície da estrutura faz o papel de molde para o preenchimento do volume de simulação, assim como descrito pelo modelo simplificado da figura 13. Entretanto, o processo de extração e refinamento da malha desvincula a discretização superficial da volumétrica. Assim, surge a necessidade de ter uma métrica para avaliar a complexidade das estruturas ao mesmo tempo que consiga comparar o particionamento do domínio.

Neste contexto, após a reconstrução de todas as amostras, é contabilizado o número total de células e faces da malha. A média do número de faces para os grupos A, B e C foi respectivamente $2,8 \times 10^6$, $3,1 \times 10^6$ e $8,1 \times 10^6$. Este ganho numérico comparado com o valor da seção anterior se dá pelo refinamento da estrutura e elementos internos ao volume. Já para as células, os valores obtidos foram de $8,2 \times 10^5$, $8,5 \times 10^5$ e $2,2 \times 10^6$, novamente refletindo a crescente de complexidade provocada pela injeção de ácido em diferentes taxas.

Figura 26 – Corte normal ao eixo de maior dimensão da malha volumétrica referente à amostra 1A. Em ampliação destaca-se o refinamento em quatro camadas de células delimitadas por suas arestas.

Fonte: Elaborada pelo autor.

O caso da amostra 2B representado na figura 27 justifica a necessidade de refinamento do volume e introduzir a métrica utilizada para comparar a discretização das diferentes geometrias. Por possuir uma estrutura em formato de anel na primeira metade da sua estrutura, a amostra se torna interessante para constatar o nível de detalhe da discretização utilizada. Consequentemente, os principais efeitos do acréscimo de cama-

das em relação à superfície é a resolução para reconstruir ramificações e a fidelidade de representação de estruturas complexas.

Figura 27 – Reconstrução volumétrica sem refinamento (cima) e com quatro níveis (baixo). As ultimas imagens da direita são cortes normais ao plano para visualização do interior da malha.

Fonte: Elaborada pelo autor.

Para quantificar a caracterização visual das malhas e possibilitar a comparação de qualidade em diferentes estruturas, utilizou-se a razão entre a soma das faces pelo número total de células do *wormhole*. O caso tratado na figura 27 exemplifica o uso desta quantidade, já que para a malha sem refinamento a razão foi 5,8 enquanto que no caso mais refinado o valor foi de 6,6. Assim, esta razão é um indicador de complexidade

para as malhas pois o aumento do número de faces indica um melhor ajuste geométrico por curvatura das regiões mais detalhadas. Finalmente, para o conjunto das amostras estudadas, pode-se fazer uma estatística na qual a razão é de 6.51 ± 0.04 , o que mostra a equivalência da discretização das malhas de todos os grupos de *wormholes*.

4.4 Simulações

Uma vez que foi discutido nas seções anteriores os resultados referentes a reconstrução geométrica e discretização da mesma, esta sessão irá abordar as soluções do processamento das simulações. A princípio, o tratamento das linhas de corrente vai conter informações sobre a influência das condições de contorno para as ramificações. Em seguida, as curvas de vazão se apresentam como um tratamento amplo e quantitativo da resposta dos *wormholes* a diferentes estímulos de pressão.

4.4.1 Linhas de corrente

Anteriormente, as amostras foram agrupadas para a discussão de alterações geométricas de acordo com sua origem, ou seja, conjuntos 1, 2 e 3. Nesta seção as amostras serão agrupadas de acordo com sua categoria de fluxo, sendo eles A, B e C para 0, 1, 1 e 10 *ml/min*. Além disso, as linhas de corrente gerada para visualização através do paraview foram expostas a 0, 15 *bar*, o máximo gradiente de pressão aplicado nas simulações.

O fluxo de água resultante nos *wormholes* gerados a partir da menor injeção de ácido nas amostras é apresentado na figura 28. Uma característica resultante do seu processo de acidificação é que o calibre dos canais desta categoria de *wormhole* diminui com seu comprimento, o que implica em um ganho de velocidade devido ao processo de afunilamento. A tortuosidade, principalmente das amostras 1 e 2 se mostra como outra propriedade que é responsável pela irregularidade do fluxo.

O mapa de cores utilizado é dado em escala logarítmica com gradiente distribuído entre velocidades de 1 *cm/s* e 10 *cm/s*. Os volumes da malha mais externos possuem velocidades baixas pela condição de contorno com gradiente de velocidade nulo na parede. Entretanto, a tortuosidade dos canais modifica a ordem de grandeza das velocidades no domínio. Assim, em curvas acentuadas a distribuição de valores aumenta pela inversão de sentido no fluxo.

A queda brusca de velocidade nas ramificações é uma característica que também pode ser observada nas amostras B da figura 29. Este resultado ocorre pela condição de canais fechados impostos na construção do domínio. A justificativa desta escolha se apoia na estrutura do selamento para a saturação com água, uma vez que a pressão só poderia ser experimentalmente imposta de forma unidimensional. Assim, as simulações são projetadas visando a comparação de imagens de fluxo e com o mínimo de imposições sobre a conectividade do meio poroso.

Figura 28 – Linhas de corrente dos wormholes criados com vazão de $0,1 \text{ ml/min}$.

Fonte: Elaborada pelo autor.

Retomando a figura 29, é possível analisar que a propriedade fundamental de seu fluxo interno é que a velocidade ao longo do wormhole não varia em comparação com as amostras A no caminho principal do *wormhole*. Esta é uma consequência direta da injeção de ácido utilizada pois com 1 ml/min o calibre dos canais se manteve constante em comparação com a vazão anterior.

O conjunto de amostras B são exemplos das alterações nas velocidades causadas pelas separações e conexões do caminho principal. Pelo mapa de cores vemos na amostra 1B que a separação faz com que as linhas de corrente vermelhas se tornem amarelas, algo equivalente a uma queda na velocidade de 1 m/s para 0.1 m/s . Em geral, nas estruturas anelares de fluxo das amostras 2B e 4B, o padrão de velocidades é na ordem de 0.1 m/s .

Com as amostras C a estrutura dos *wormholes* fazem uma transição de complexidade. Uma consequência exposta na figura 30 são as ramificações que antes se isolavam da estrutura principal e agora passam a complementá-la. Entretanto, o fluxo se torna mais complexo e passa a ser subdividido em diversos canais. Assim, o fluxo resultante do tipo C está associado com a conectividade da amostra como um todo, ao invés de apenas possuir um *wormhole* com canal principal bem definido.

O principal comparativo que pode ser feito com relação ao fluxo resultante da disparidade na injeção de ácido é representado pelas amostras 2B e 3C na figura 31. Embora encontra-se uma separação e reunião do caminho, formando uma estrutura de

Figura 29 – Linhas de corrente dos wormholes criados com vazão de 1 ml/min .

Fonte: Elaborada pelo autor.

Figura 30 – Linhas de corrente dos wormholes criados com vazão de 10 ml/min .

Fonte: Elaborada pelo autor.

anel na amostra 2B, ainda existem ramificações perpendiculares. Consequentemente, a característica de possuir um canal principal não é afetada e assim o caminho do fluxo é bem definido. Entretanto, a injeção de ácido de 10 ml/min em C criou uma estrutura que conecta o fluxo entre grande parte das ramificações existentes.

Figura 31 – Comparação de fluxo em ampliação das amostras 2B e 3C.

Fonte: Elaborada pelo autor.

Esta diferença estrutural resulta em uma variação da distribuição global de velocidades no *wormhole*. O principal contraste se torna a ordem de grandeza associada às linhas de corrente, em que para a amostra 2B a velocidade de 0.1 m/s retoma o valor de 1 m/s após a junção do anel. Em contrapartida, as ramificações da amostra 3C sempre serão paralelas, como consecutivas separações no padrão da amostra 1B, resultando em velocidades da ordem de 0.05 m/s .

4.4.2 Curvas de vazão

Com a variação de pressão entre as extremidades da amostra obteve-se o processamento e a expectativa de sua respectiva vazão. A figura 32 compila os resultados para todas as amostras analisadas. O mapa de cores em vermelho, verde e azul simboliza respectivamente os grupos 1, 2 e 3. Como consequência, dados os mesmos gradientes de pressão, determinou-se a ordem em que os *wormholes* segmentados facilitam a passagem de fluxo em seu interior.

Uma característica das três menores curvas de vazão (1A, 3A e 2C) é que suas regiões de saída são as mais obstruídas e possuem um padrão geométrico cônico. Além disso, as amostras intermediárias (1C, 2A e 2B), que não possuíam grandes afunilamentos, mostraram sua tortuosidade como fator restrigente de fluxo. Consequentemente, os maiores ganhos de fluxo são relativos aos caminhos mais regulares e de maior calibre (3C, 1B e 3B).

Entretanto, este resultado não leva em consideração o meio poroso completo, uma vez que a imagem passou por um processo de segmentação em mais de duas classes. Assim,

Figura 32 – Evolução da vazão de água no conjunto de amostra estudadas.

Fonte: Elaborada pelo autor.

a curva de fluxo é referente às maiores estruturas no interior das amostras. No caso das acidificações A e B as curvas são mais representativas em relação a todo meio poroso pois caminhos perpendiculares de fluxo são ramificações fechadas.

Caso as amostras C apresentem mais conexões com o meio poroso, suas curvas de vazão vão atingir valores mais elevados. Assim como indicado pela segmentação da amostra 1C, o processamento em classes da imagem em tons de cinza pode restringir os caminhos tomados pelas ramificações. Com uma maior conectividade, a quantidade de saídas para o fluxo também poderia aumentar, o que alteraria a ordem de rendimento das amostras. Isto ocorre pois as ramificações do tipo C geram caminhos de fluxo paralelo que sofrem a ação do gradiente de pressão.

5 CONSIDERAÇÕES FINAIS

A principal diferença entre o conjunto de amostras se baseou na injeção de ácido aplicada para a criação do *wormhole*. Pela segmentação e reconstrução tridimensional foi possível observar que com a mudança de 0,1 para 1 ml/min a dissolução da face deixa de existir junto com o afunilamento de fluxo. Como consequência a amostra 3B mostrou a maior evolução da vazão pelos gradientes de pressão aplicados.

Com a injeção de ácido variando em 1 para 10 ml/min os canais uniformes se tornam ramificados e interconectados. A estrutura complexa dessas amostras também prejudica o fluxo global, mas as ramificações passam a dividir o caminho principal. Entretanto, a segmentação feita para diminuir o custo computacional pode ter alterado o rendimento da vazão nas amostras do tipo C, uma perspectiva de avanço para o estudo é a otimização das simulações para sua aplicação no meio poroso como um todo.

Outra expectativa para pesquisa é a busca e aplicação de métricas como porosidade, tortuosidade e permeabilidade para parâmetros estruturais do *wormhole* e que se correlacionem com as curvas de fluxo obtidas. Consequentemente, medidas indiretas seriam capazes de prever o comportamento do fluxo em situações que não se possui tempo hábil para simulações ou condições experimentais.

De maneira geral este trabalho concatenou diversas técnicas computacionais para simulação de fluido dinâmica através de IRM. Utilizando o OpenFOAM, a DFC se mostrou capaz de quantificar e simular situações de fluxo com condições de contorno laboratoriais. Além disso, este estudo serve como base para a continuidade de aplicações teóricas e computacionais mais complexas em reconstrução e simulações de meios porosos.

Enquanto o processamento da vazão resultou na capacidade de quantificar as curvas de vazão para diferentes tipos de amostras, o cálculo das linhas de corrente determinou a ordem de grandeza das velocidades em diferentes estruturas. *Wormholes* que passam por um afunilamento no decorrer de seu comprimento vão possuir velocidades da ordem de 1 m/s em pressões de até 0,15bar. Para os canais mais homogêneos este valor se mantém constante por todo seu comprimento, mas as ramificações deste tipo de estrutura possuem fluxo igual ou menor à 0,01 m/s . Quanto maior a quantidade de ramificações paralelas, a velocidade padrão nessas estruturas pode cair a partir de 0,1 m/s .

Assim, com uma imagem do tipo MIP se torna possível identificar quais características de fluxo serão encontradas no perfil de velocidades da amostra. Consequentemente, este estudo serve de base para parâmetros de velocidade em técnicas de IRM 4D. Portanto, a DFC gera informações sobre a velocidade em imagens de fluxo, influenciando em sua sensibilidade. Simultaneamente, a IRM provém informações estruturais e quantitativos

para a DFC, caracterizando a complementaridade das técnicas.

REFERÊNCIAS

- 1 KHALED, A.-R.; VAFAI, K. The role of porous media in modeling flow and heat transfer in biological tissues. **International Journal of Heat and Mass Transfer**, v. 46, n. 26, p. 4989 – 5003, 2003.
- 2 CNUDDÉ, V.; CWIRZEN, A.; MASSCHAELE, B.; JACOBS, P. Porosity and microstructure characterization of building stones and concretes. **Engineering Geology**, v. 103, n. 3, p. 76 – 83, 2009.
- 3 WU, K.; DIJKE, M. I. J. V.; COUPLES, G. D.; JIANG, Z.; MA, J.; SORBIE, K. S.; CRAWFORD, J.; YOUNG, I.; ZHANG, X. 3d stochastic modelling of heterogeneous porous media – applications to reservoir rocks. **Transport in Porous Media**, v. 65, n. 3, p. 443–467, 2006.
- 4 ESTIMATIVA DE ROYALTIES. Disponível em: <http://www.anp.gov.br/royalties-e-outras-participacoes/estimativa-royalties>. Acesso em: 23 out. de 2019.
- 5 FREDD, C. N.; FOGLER, H. S. Alternative stimulation fluids and their impact on carbonate acidizing. **SPE Journal**, v. 3, n. 1, p. 34–41, 1998.
- 6 IFEANYI, O.; OGUNKUNLE, T. F.; OSEH, J. Effect of matrix acidizing on the performance of selected niger delta reservoirs. **International Journal of Oil Gas and Coal Technology**, v. 3, n. 2, p. 18–23, 2015.
- 7 DONG, K.; ZHU, D.; HILL, A. D. Mechanism of wormholing and its optimal conditions: a fundamental explanation. **Journal of Petroleum Science and Engineering**, v. 169, p. 126 – 134, 2018. doi:10.1016/j.petrol.2018.05.060.
- 8 APPOLONI, C.; FERNANDES, C.; RODRIGUES, C. X-ray microtomography study of a sandstone reservoir rock. **Nuclear Instruments and Methods in Physics Research Section A**, v. 580, n. 1, p. 629 – 632, 2007.
- 9 ANSONI, J. L.; SOUZA, L. F.; CASTELO, A. F.; AFONSO, A. M. A new approach to randomly generate porous media to perform cfd simulations. In: INTERNATIONAL CONGRESS OF MECHANICAL ENGINEERING, 24., 2017, Curitiba. **Anais [...]**. Curitiba: ABCM, 2017. p. 10.
- 10 WANG, L.; MOU, J.; MO, S.; ZHAO, B.; LIU, Z.; TIAN, X. Modeling matrix acidizing in naturally fractured carbonate reservoirs. **Journal of Petroleum Science and Engineering**, p. 106685, 2019. doi:10.1016/j.petrol.2019.106685.
- 11 STRÄTER, A.; HUBER, A.; RUDOLPH, J.; BERNDT, M.; RASPER, M.; RUMMENY, E.; NADJIRI, J. 4D-Flow MRI: technique and applications. **RöFo**, v. 190, n. 11, p. 1025 – 1035, 2018.
- 12 CASACUBERTA, J.; SOUDAH, E.; GAMEZ-MONTERO, P.; RAUSH, G.; CASTILLA, R.; PÉREZ, J. **Hemodynamics in the thoracic aorta using OpenFOAM: 4D PCMRI versus CFD**. 2015. Disponível em: <https://core.ac.uk/download/pdf/81582466.pdf>. Acesso em: 23 jan. de 2019.

- 13 ANTIGA, L.; PICCINELLI, M.; BOTTI, L.; ENE-IORDACHE, B.; REMUZZI, A.; STEINMAN, D. A. An image-based modeling framework for patient-specific computational hemodynamics. **Medical and Biological Engineering and Computing**, v. 46, n. 11, p. 1097–1112, 2008.
- 14 WELLER, H. G.; TABOR, G.; JASAK, H.; FUREBY, C. A tensorial approach to computational continuum mechanics using object-oriented techniques. **Computers in Physics**, v. 12, n. 6, p. 620–631, 1998.
- 15 BEAR, J.; BUCHLIN, J.-M.; DYNAMICS., V. K. I. for F. Book. **Modelling and applications of transport phenomena in porous media**. Boston: Kluwer Academic Publishers, 1991.
- 16 BROWN, R.; CHENG, Y.-C.; HAACKKE, M.; THOMPSON, M.; VENKATESAN, R. **Magnetic resonance imaging: physical principles and sequence design**. 2nd ed. New York: John Wiley and Sons, Inc., 1999.
- 17 MÜLLER-WARMUCH, W. C. p. slichter: Principles of magnetic resonance, 3rd enlarged and updated ed., vol. 1 aus der reihe: Springer series in solid state sciences, springer-verlag, berlin 1990. isbn 3-340.50157-6, 655 seiten, preis: Dm 89, -. **Berichte der Bunsengesellschaft für Physikalische Chemie**, v. 95, n. 3, p. 449–450, 1991.
- 18 TANNUS, A. **Desenvolvimento da tecnologia de tomografia por ressonância magnética nuclear**: 1987. Tese (Doutorado em Física Aplicada) - Instituto de Física e Química de São Carlos, Universidade de São Paulo, São Carlos, 1987. DOI:10.11606/T.54.1987.tde-21052007-164959.
- 19 FOERSTER, B. U. **Técnicas de espectroscopia localizada in vivo**: 1999. Tese (Doutorado em Física Aplicada) - Instituto de Física de São Carlos, Universidade de São Paulo, São Carlos, 1999. DOI:10.11606/T.76.1999.tde-10022015-170026.
- 20 ATROPOS. Disponível em: <http://www.github.com/antsx/ants> Acesso em: 20 fev. de 2020.
- 21 VASCULAR MODELING TOOLKIT. Disponível em: <http://www.vmtk.org>. Acesso em: 20 fev. de 2020.
- 22 OPENFOAM. Disponível em: <http://www.openfoam.org>. Acesso em: 20 fev. de 2020.
- 23 GYNGELL, M. L. The application of steady-state free precession in rapid 2DFT NMR imaging: FAST and CE-FAST sequences. **Magnetic Resonance Imaging**, v. 6, n. 4, p. 415 – 419, 1988.
- 24 REMONDA, L.; SENN, P.; BARTH, A.; ARNOLD, M.; LÖVBLAD, K.-O.; SCHROTH, G. Contrast-enhanced 3D MR angiography of the carotid artery: comparison with conventional digital subtraction angiography. **American Journal of Neuroradiology**, v. 23, n. 2, p. 213–219, 2002.
- 25 AVANTS, B. B.; TUSTISON, N.; WU, J.; COOK, P. A.; GEE, J. An open source multivariate framework for n-tissue segmentation with evaluation on public data. **Neuroinformatics**, v. 9, n. 4, p. 381–400, 2011.

-
- 26 SANJAY-GOPAL, S.; HEBERT, T. J. Bayesian pixel classification using spatially variant finite mixtures and the generalized EM algorithm. **IEEE Transactions on Image Processing**, v. 7, n. 7, p. 1014–1028, 1998.
- 27 GEMAN, S.; GEMAN, D. Stochastic relaxation, gibbs distributions, and the bayesian restoration of images. **IEEE Transactions on Pattern Analysis and Machine Intelligence**, PAMI-6, n. 6, p. 721–741, 1984.
- 28 HEBERT, T.; LEAHY, R. A generalized em algorithm for 3-d bayesian reconstruction from poisson data using gibbs priors. **IEEE Transactions on Medical Imaging**, v. 8, n. 2, p. 194–202, 1989.
- 29 LORENSEN, W. E.; CLINE, H. E. Marching cubes: a high resolution 3D surface construction algorithm. **SIGGRAPH Computer Graphics**, v. 21, n. 4, p. 163–169, 1987.
- 30 TAUBIN, G. Curve and surface smoothing without shrinkage. *In: INTERNATIONAL CONFERENCE ON COMPUTER VISION*, 1995, Cambridge. **Proceedings [...]**. Cambridge: IEEE, 1995. p. 852–857.
- 31 MOUKALLED, F.; MANGANI, L.; DARWISH, M. **The finite volume method in computational fluid dynamics: an advanced introduction with openFOAM® and Matlab®**. New York: Springer, 2015. (Fluid mechanics and its applications, v. 113).
- 32 PATANKAR, S. V. A calculation procedure for two-dimensional elliptic situations. **Numerical Heat Transfer**, v. 4, n. 4, p. 409–425, 1981.
- 33 LI, W.; EINSTEIN, H. H.; GERMAINE, J. T. An experimental study of matrix dissolution and wormhole formation using gypsum core flood tests. part I: permeability evolution and wormhole geometry analysis. **Journal of Geophysical Research: solid earth.**, v.124, n.11, p.11055, 2019. doi:10.1029/2018JB017238.
- 34 FREDD, C. N.; FOGLER, H. S. Influence of transport and reaction on wormhole formation in porous media. **AIChE Journal**, v. 44, n. 9, p. 1933–1949.

Apêndices

APÊNDICE A – DESENVOLVIMENTO MATEMÁTICO PARA NAVIER-STOKES

Sendo ϕ qualquer propriedade intensiva conservada, podemos representar a propriedade extensiva Φ como

$$\Phi = \int_{\Omega_{MC}} \rho \phi d\Omega, \quad (\text{A.1})$$

em que nossa quantidade de matéria é definida como massa de controle (MC) com Ω_{MC} sendo o volume ocupado pela massa. Dessa forma conseguimos representar as equações com integrais nas quais para a conservação de massa escrevemos $\phi = 1$ e quanto a conservação de momento tomamos $\phi = \mathbf{v}$.

Uma vez que podemos representar as propriedades de maneira generalizada em um volume ocupado pela massa de controle, o próximo passo se torna transformar estas equações dentro de um contexto de um volume de controle (VC). Desta forma, simplificamos o tratamento do problema físico aplicando o teorema de transporte de Reynolds e relacionamos a derivada temporal da propriedade extensiva em forma de integrais de conservação.

Tomamos nosso sistema assim como ilustrado na figura 33, assim podemos avaliar sua evolução de um instante t_0 para um determinado tempo $t_0 + \Delta t$. Neste caso, após um infinitésimo Δt o sistema se move e identificamos três regiões de interesse para o cálculo da taxa de variação temporal de Φ .

Figura 33 – Sistema e regiões de interesse localizadas no volume de controle.

Fonte: Elaborada pelo autor.

Iniciamos o desenvolvimento através da definição de derivada, em que tomamos o limite da diferença entre a condição final e inicial do nosso sistema, como pode ser

observado na figura acima e redigido na equação

$$\left. \frac{d\Phi}{dt} \right|_S C = \lim_{\Delta t \rightarrow 0} \frac{(\Phi_{VC} - \Phi_I + \Phi_{III})_{t_0+\Delta t} - \Phi_{VC}|_{t_0}}{\Delta t}. \quad (\text{A.2})$$

Assim, podemos fazer uso da propriedade de soma dos limites e segmentar nossa equação na forma

$$\left. \frac{d\Phi}{dt} \right|_S C = \lim_{\Delta t \rightarrow 0} \frac{\Phi_{VC}|_{t_0+\Delta t} - \Phi_{VC}|_{t_0}}{\Delta t} + \lim_{\Delta t \rightarrow 0} \frac{\Phi_{III}|_{t_0+\Delta t}}{\Delta t} - \lim_{\Delta t \rightarrow 0} \frac{\Phi_I|_{t_0+\Delta t}}{\Delta t}. \quad (\text{A.3})$$

O primeiro termo da equação A.3 é simplificado pelo mesmo argumento de definição do limite que justifica a transformação de A.1 para A.2. Entretanto, agora estamos tratando a variação da propriedade extensiva referente ao volume de controle e consequentemente escrevemos

$$\lim_{\Delta t \rightarrow 0} \frac{\Phi_{VC}|_{t_0+\Delta t} - \Phi_{VC}|_{t_0}}{\Delta t} = \frac{\partial \Phi_{VC}}{\partial t} = \frac{\partial}{\partial t} \int_{\Omega_{VC}} \rho \phi d\Omega. \quad (\text{A.4})$$

Para o segundo termo, a figura 34 explicita um meio de se obter uma expressão para um diferencial localizado em uma subregião pela equação

$$d\Phi_{III}|_{t_0+\Delta t} = \rho \phi \mathbf{v} \cdot d\mathbf{S} \Delta t, \quad (\text{A.5})$$

no qual o limite pode ser expresso e simplificado na forma

$$\lim_{\Delta t \rightarrow 0} \frac{\Phi_{III}|_{t_0+\Delta t}}{\Delta t} = \lim_{\Delta t \rightarrow 0} \frac{\int_{SC_{III}} \phi \rho \mathbf{v} \cdot d\mathbf{S} \Delta t}{\Delta t} = \int_{SC_{III}} \rho \phi \mathbf{v} \cdot d\mathbf{S}. \quad (\text{A.6})$$

Figura 34 – Detalhe das subregiões entre o VC e o sistema.

Fonte: Elaborada pelo autor.

onde

O mesmo procedimento pode ser aplicado para o terceiro termo, com o detalhe de inversão da orientação do vetor normal à superfície. Portanto, obtemos uma simplificação dada pela equação

$$\lim_{\Delta t \rightarrow 0} \frac{\Phi_I|_{t_0+\Delta t}}{\Delta t} = - \lim_{\Delta t \rightarrow 0} \frac{\int_{SC_I} \phi \rho \mathbf{v} \cdot d\mathbf{S} \Delta t}{\Delta t} = - \int_{SC_I} \rho \phi \mathbf{v} \cdot d\mathbf{S} \quad (\text{A.7})$$

Com todos os termos da equação A.3 calculados, podemos unificar a solução com a equação

$$\left. \frac{d\Phi}{dt} \right|_S = \frac{\partial}{\partial t} \int_{\Omega_{VC}} \rho \phi d\Omega + \int_{SC} \rho \phi \mathbf{v} \cdot d\mathbf{S}, \quad (\text{A.8})$$

na qual a integral se torna relativa à superfície de controle (SC) pois devido as convenções de sinais adotadas, podemos somar as sub-regiões.

Finalmente, o resultado do teorema de transporte de Reynolds nos indica que a variação temporal de qualquer propriedade extensiva Φ de um sistema é equivalente à soma da variação temporal da quantidade de propriedade instantânea com fluxo de Φ que passa pela SC. Assim, obtemos a forma integral da conservação de massa

$$\frac{\partial}{\partial t} \int_{\Omega_{VC}} \rho d\Omega + \int_{SC} \rho \mathbf{v} \cdot d\mathbf{S} = 0 \quad (\text{A.9})$$

e de momento

$$\frac{\partial}{\partial t} \int_{\Omega_{VC}} \rho \mathbf{v} d\Omega + \int_{SC} \rho \mathbf{v} \mathbf{v} \cdot d\mathbf{S} = \sum \mathbf{f}. \quad (\text{A.10})$$

Uma vez que temos as equações de conservação no âmbito do volume de controle, é interessante aplicar o teorema da divergência de Gauss em que

$$\int_{\Omega} \nabla \cdot \mathbf{G} d\Omega = \oint_S (\mathbf{G} \cdot \mathbf{n}) dS \quad (\text{A.11})$$

resulta nas equações de Navier-Stokes independentes de coordenadas.

Finalmente, as equações de conservação tanto de massa quanto momento ficam respectivamente nas formas

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} + \nabla \cdot (\rho \mathbf{v}) = 0 \quad (\text{A.12})$$

e

$$\frac{\partial(\rho \mathbf{v})}{\partial t} + \nabla \cdot (\rho \mathbf{v} \mathbf{v}) = \nabla \cdot \mathbf{T} + \rho \mathbf{b}, \quad (\text{A.13})$$

com $\mathbf{b}$ sendo a força atuante no volume do corpo em que o tensor de stress é dado por

$$\mathbf{T} = - \left(p + \frac{2}{3} \mu \nabla \cdot \mathbf{v} \right) \mathbf{I} + 2\mu \mathbf{D} \quad (\text{A.14})$$

com μ sendo a viscosidade dinâmica, $\mathbf{I}$ o tensor unitário, p a pressão estática e $\mathbf{D}$ o tensor de deformação que é representado por

$$\mathbf{D} = \frac{1}{2} [\nabla \mathbf{v} + (\nabla \mathbf{v})^T]. \quad (\text{A.15})$$

APÊNDICE B – DICIONÁRIOS PARA DIRETÓRIO SYSTEM

Neste apêndice encontra-se a transcrição de dicionários contidos em **system**. Estes arquivos são referentes à rotina de simulação empregada nos *wormholes*. A ordem dos dicionários apresentados será *blockMeshDict*, *controlDict*, *fvSchemes*, *fvSolution* e *snappyHexMesh*.

No dicionário *blockMeshDict* são definidos as fronteiras da malha de base para a extração do *wormhole*. Primeiro é feita uma conversão para a escala da amostra e em seguida os parâmetros espaciais e geométricos são repassados para a ferramenta.

```

FoamFile
{
    version      2.0;
    format       ascii;
    class        dictionary;
    object       blockMeshDict;
}

convertToMeters 0.000001;

xmin -35000;
xmax 36000;
ymin -15000;
ymax 16000;
zmin -10000;
zmax 19000;

lx #calc "$xmax - $xmin";
dx 550;
xcells #calc "abs($lx/$dx)";

ly #calc "$ymax - $ymin";
dy 550;
ycells #calc "abs($ly/$dy)";

lz #calc "$zmax - $zmin";
dz 550;
zcells #calc "abs($lz/$dz)";

```

vertices

```
(  
    ($xmin $ymin $zmin)  
    ($xmax $ymin $zmin)  
    ($xmax $ymax $zmin)  
    ($xmin $ymax $zmin)  
    ($xmin $ymin $zmax)  
    ($xmax $ymin $zmax)  
    ($xmax $ymax $zmax)  
    ($xmin $ymax $zmax)  
);
```

blocks

```
(  
    hex (0 1 2 3 4 5 6 7) ($xcells $ycells $zcells) simpleGrading (1 1 1)  
);
```

patches

```
(  
    patch minX  
    (  
        (0 4 7 3)  
    )  
    patch maxX  
    (  
        (2 6 5 1)  
    )  
    patch minY  
    (  
        (1 5 4 0)  
    )  
    patch maxY  
    (  
        (3 7 6 2)  
    )  
    patch minZ  
    (  
        (0 3 2 1)  
    )  
    patch maxZ  
    (  

```

```

        (4 5 6 7)
    )
);

```

Quanto ao dicionário de controle, define-se o solucionador que será utilizado na simulação. O significado dos parâmetros de escrita das iterações muda para cada aplicação. Neste caso, deltaT não será a variação temporal como em uma solução transiente e sim passos de iterações.

```

FoamFile
{
    version      2.0;
    format       ascii;
    class        dictionary;
    object       controlDict;
}

application     simpleFoam;
startFrom       startTime;
startTime       0;
stopAt          endTime;
endTime         100;
deltaT          1;
writeControl     runtime;
writeInterval    1;
purgeWrite       0;
writeFormat      ascii;
writePrecision   8;
writeCompression off;
timeFormat       general;
timePrecision    8;
runtimeModifiable yes;

```

Os esquemas de solução são determinados pelo arquivo abaixo. Em *fvSchemes* são expressos os métodos numéricos para a ação de derivadas temporais, gradientes, divergentes, laplaciano e interpolação na equação dada pela aplicação utilizada.

```

FoamFile
{

```

```
    version    2.0;
    format     ascii;
    class      dictionary;
    object     fvSchemes;
}

ddtSchemes
{
    default    steadyState;
}

gradSchemes
{
    grad(p)     faceLimited leastSquares 1;

    grad(U)     faceLimited leastSquares 1;
}

divSchemes
{
    div(phi,U)   Gauss linearUpwindV grad(U);
}

laplacianSchemes
{
    default     Gauss linear limited 0.5;
}

interpolationSchemes
{
    default     linear;
}

snGradSchemes
{
    default     limited 0.5;
}
```

Já para o dicionário de *fvSolution* são definidos os métodos de solução para os campos de velocidade e pressão. Além disso, pode-se definir constantes de controle dos resíduos para convergência e interrupção do processamento.

```
FoamFile
{
    version      2.0;
    format       ascii;
    class        dictionary;
    object       fvSolution;
}

solvers
{
    p
    {
        solver          GAMG;
        tolerance        1e-6;
        relTol           0.001;
        smoother         GaussSeidel;
        nPreSweeps        0;
        nPostSweeps       2;
        cacheAgglomeration on;
        agglomerator      faceAreaPair;
        nCellsInCoarsestLevel 1000;
        mergeLevels       1;

        minIter          3;
    }

    pFinal
    {
        $p;
        relTol           0;
    }

    U
    {
        solver          PBiCGStab;
        preconditioner    DILU;
        tolerance        1e-8;
        relTol           0;
    }
}
```

```
SIMPLE
{
    nNonOrthogonalCorrectors 5;
    pRefCell      0;
    pRefValue     0;

    residualControl
    {
        p          0.001;
        U          0.001;
    }
}

relaxationFactors
{
    fields
    {
        p          0.3;
    }
    equations
    {
        U          0.1;
    }
}

}
```

Para o dicionário de elaboração da malha volumétrica é necessário transmitir os arquivos que serão utilizados no processo. Esta etapa separa as regiões para a condição de contorno de entrada, saída e parede da simulação. Em sequência define-se a localização da malha em relação à superfície e condiciona-se o total de quatro níveis de refinamento.

```
FoamFile
{
    version      2.0;
    format       ascii;
    class        dictionary;
    object       snappyHexMeshDict;
}
```

```
castellatedMesh true;
snap           true;
addLayers      true;

geometry
{
    1A_wormhole.stl
    {
        type triSurfaceMesh;
        name wormhole;
    }

    1A_inlet.stl
    {
        type triSurfaceMesh;
        name inlet;
    }

    1A_outlet.stl
    {
        type triSurfaceMesh;
        name outlet;
    }
};

castellatedMeshControls
{
    maxLocalCells 100000;
    maxGlobalCells 20000000;
    minRefinementCells 100;
    maxLoadUnbalance 0.10;
    nCellsBetweenLevels 2;

    features
    (
        {
            file "1A_wormhole.eMesh";
            level 3;
        }
    )
}
```

```
{
    file "1A_inlet.eMesh";
    level 3;
}

{
    file "1A_outlet.eMesh";
    level 3;
}
);
```

refinementSurfaces

```
{
    wormhole
    {
        level (4 4);
        regions
        {
            wormhole
            {
                level (4 4);
                patchInfo
                {
                    type wall;
                }
            }
        }
    }
}
```

inlet

```
{
    level (4 4);
    regions
    {
        inlet
        {
            level (4 4);

            patchInfo
            {
                type patch;
            }
        }
    }
}
```

```

    }
  }
}

outlet
{
  level (4 4);
  regions
  {
    outlet
    {
      level (4 4);
      patchInfo
      {
        type patch;
      }
    }
  }
}

planarAngle 30;
locationInMesh (-0.033 0.00212784784473 0.00682586118907405);
allowFreeStandingZoneFaces true;

}

snapControls
{
  nSmoothPatch 10;
  tolerance 2.0;
  nSolveIter 100;
  nRelaxIter 10;
  nFeatureSnapIter 10;
  implicitFeatureSnap false;
  explicitFeatureSnap true;
  multiRegionFeatureSnap false;
}

addLayersControls
{
  relativeSizes true;

```

```
expansionRatio 1.2;
finalLayerThickness 0.5;
minThickness 0.1;

layers
{
    wormhole
    {
        nSurfaceLayers 4;
    }
}

nGrow 0;
featureAngle 130;
maxFaceThicknessRatio 0.5;
nSmoothSurfaceNormals 1;
nSmoothThickness 10;
minMedialAxisAngle 90;
minMedianAxisAngle 90;
maxThicknessToMedialRatio 0.3;
nSmoothNormals 3;
slipFeatureAngle 30;
nRelaxIter 5;
nBufferCellsNoExtrude 0;
nLayerIter 50;
nRelaxedIter 20;

}

meshQualityControls
{
    #include "meshQualityDict"
    relaxed
    {
        maxNonOrtho 75;
    }
    nSmoothScale 4;
    errorReduction 0.75;
}

mergeTolerance 1e-6;
```