

**UNIVERSIDADE DE BRASÍLIA
FACULDADE DE TECNOLOGIA
DEPARTAMENTO DE ENGENHARIA CIVIL E AMBIENTAL**

**SIMULAÇÃO NUMÉRICA DO ARMAZENAMENTO DE HIDROGÊNIO EM
RESERVATÓRIOS GEOLÓGICOS**

VINÍCIUS SILVA FEIJÓ

ORIENTADOR: PROF. MANOEL PORFÍRIO CORDÃO NETO, DSc.

COORIENTADORA: ANA CAROLINA LOYOLA, DSc.

DISSERTAÇÃO DE MESTRADO EM GEOTECNIA

**BRASÍLIA – DF
DEZEMBRO DE 2025**

**UNIVERSIDADE DE BRASÍLIA
FACULDADE DE TECNOLOGIA
DEPARTAMENTO DE ENGENHARIA CIVIL E AMBIENTAL**

**SIMULAÇÃO NUMÉRICA DO ARMAZENAMENTO DE HIDROGÊNIO EM
RESERVATÓRIOS GEOLÓGICOS**

VINÍCIUS SILVA FEIJÓ

**DISSERTAÇÃO DE MESTRADO SUBMETIDA AO DEPARTAMENTO DE
ENGENHARIA CIVIL DA UNIVERSIDADE DE BRASÍLIA COMO PARTE DOS
REQUISITOS NECESSÁRIOS PARA A OBTENÇÃO DO GRAU DE MESTRE.**

APROVADA POR:

**MANOEL PORFÍRIO CORDÃO NETO, DSc. (UnB)
(ORIENTADOR)**

**ANA CAROLINA LOYOLA CAETANO RIOS, DSc. (TU Delft)
(COORIENTADORA)**

**ANDRÉ PACHECO DE ASSIS, PhD. (UnB)
(EXAMINADOR INTERNO)**

**LUÍS CARLOS DE SOUSA JUNIOR, DSc. (Petrobras)
(EXAMINADOR EXTERNO)**

DATA: BRASÍLIA/DF, 18 DE DEZEMBRO DE 2025.

FICHA CATALOGRÁFICA

FEIJÓ, VINÍCIUS SILVA Simulação Numérica do Armazenamento de Hidrogênio em Reservatórios Geológicos [Distrito Federal] 2025. xx, 182 p., 297 mm (ENC/FT/UnB, Mestre, Geotecnia, 2025) Dissertação de Mestrado - Universidade de Brasília. Faculdade de Tecnologia Departamento de Engenharia Civil e Ambiental 1. Armazenamento Subterrâneo de H ₂ 2. Transição Energética 3. Modelagem Numérica 4. Análise de Fluxo I. ENC/FT/UnB
--

REFERÊNCIA BIBLIOGRÁFICA

FEIJÓ, V.S. (2025). Simulação Numérica do Armazenamento de Hidrogênio em Reservatórios Geológicos. Dissertação de Mestrado, Publicação G.DM-428/2025, Departamento de Engenharia Civil, Universidade de Brasília, Brasília, DF, 182 p.

CESSÃO DE DIREITOS

NOME DO AUTOR: Vinícius Silva Feijó

TÍTULO DA DISSERTAÇÃO DE MESTRADO: Simulação Numérica do Armazenamento de Hidrogênio em Reservatórios Geológicos.

GRAU / ANO: MESTRE / 2025

É concedida à Universidade de Brasília a permissão para reproduzir cópias desta dissertação de mestrado e para emprestar ou vender tais cópias somente para propósitos acadêmicos e científicos. O autor reserva outros direitos de publicação e nenhuma parte desta dissertação de mestrado pode ser reproduzida sem a autorização por escrito do autor.

Vinícius Silva Feijó

Brasília/DF - Brasil

DEDICATÓRIA

Ao meu primeiro melhor amigo, Pet.

AGRADECIMENTOS

Após esses curtos, porém intensos 7 anos de vida acadêmica, penso que o melhor e único jeito de iniciar minha expressão de gratidão é exaltando a Universidade de Brasília como instituição. Todos aqueles que de alguma forma contribuíram para a valorização do patrimônio intelectual, histórico e cultural a que se presta a UnB fazem parte disso e por isso, meus mais sinceros cumprimentos, em especial aos colegas e orientadores, Manoel e Ana, com quem pude dividir mais de perto essa jornada da pós graduação e absorver os mais valiosos conhecimentos.

E como um bom engenheiro – melhor com os números que com as palavras – divido esses agradecimentos em três pilares fundamentais, que não só permitiram construir e consolidar aprendizados que carregarei para a vida, mas ajudaram a suportar os momentos de sobrecarga e os períodos em que a fadiga desafia a condição física.

O alicerce de tudo está no apoio familiar irrestrito proporcionado pelos meus pais, meus maiores incentivadores. Só tenho a agradecer por estarem ao meu lado em todos os momentos e por dividirem comigo a experiência de vidas tão inspiradoras como as de vocês, Gilvânia e Cláudio. Aos irmãos Mateus, Lucas e Felipe pelos bons momentos no decorrer do caminho.

À minha companheira Bruna pela motivação diária que me proporciona e por todo o amor e carinho que preenchem os dias de desgaste e monotonia sentado em frente ao home-office. Um carinho especial aos sogro-avós Jorge e Ligia, com quem criei laços de genro, mas também de neto ao longo desses anos.

Por fim, agradeço aos amigos de infância, colégio e faculdade que iluminaram os dias felizes e fizeram dos dias cinzentos apenas pequenas nuvens passageiras. Em especial, aos que a vida colocou em meu caminho: Ana Clara, Paulo, Gabriel e Gustavo.

RESUMO

SIMULAÇÃO NUMÉRICA DO ARMAZENAMENTO DE HIDROGÊNIO EM RESERVATÓRIOS GEOLÓGICOS

Este trabalho apresenta um estudo de modelagem numérica relacionado ao armazenamento subterrâneo de H₂ (ASH) em reservatórios geológicos, sob o ponto de vista de fluxo em meios porosos. Não apenas é avaliada a aplicabilidade do programa DuMu^x para os problemas propostos, mas também abre-se a discussão sobre o avanço do ASH no Brasil e no mundo, buscando melhores condições de operação e desempenho. Essa temática se alinha com as metas de transição energética que vigoram desde o acordo de Paris e que têm ganhado maior destaque nos últimos anos em consequência do avanço de crises climáticas e eventos extremos, em parte provocados pelas crescentes emissões de CO₂. Inicialmente, o trabalho revisa o estado da arte do ASH, abordando potencial energético, limitações técnicas e iniciativas internacionais. Em seguida, a pesquisa é estruturada em duas etapas de modelagem: análises de sensibilidade em modelos sintéticos 2D – representando aquíferos (H₂-água) e reservatórios maduros (H₂-óleo) – e um estudo de caso tridimensional aplicado ao Campo de Namorado, um reservatório maduro de óleo na Bacia de Campos. Os resultados mostram que o DuMu^x é uma ferramenta eficaz para simular o fluxo e transporte do H₂ em condições geológicas diversas. Em aquíferos, observaram-se elevados fatores de recuperação (até 90%), porém com pureza reduzida do gás produzido (49-77%) em razão da coprodução de água – sendo o ângulo de mergulho o parâmetro mais relevante para a pureza e a profundidade para o fator de recuperação. Já em reservatórios maduros de óleo, a pureza manteve-se alta (90-99%) devido à baixa mobilidade do óleo, destacando-se a influência da viscosidade e da pressurização por gás colchão para estabilidade operacional. O estudo de caso no Campo de Namorado confirmou que o modelo tridimensional do reservatório pode ser representado com precisão no DuMu^x, reproduzindo os fenômenos multifásicos de fluxo e transporte observados nas análises sintéticas. A avaliação de viabilidade energética indicou que o campo possui potencial relevante para o armazenamento sazonal de hidrogênio, com capacidade para atender demandas regionais expressivas, demonstrando a adequação do reservatório Namorado para o ASH no contexto brasileiro.

Palavras-chave: Armazenamento subterrâneo de H₂, transição energética, modelagem numérica, análise de fluxo.

ABSTRACT

**NUMERICAL SIMULATION OF HYDROGEN STORAGE IN GEOLOGICAL
RESERVOIRS**

This work presents a numerical reservoir simulation study of Underground Hydrogen Storage (UHS) in geological formations, focusing on multiphase flow behavior in porous media from a geotechnical and reservoir engineering perspective. In addition to assessing the applicability of the open-source simulator DuMu^x to model the proposed scenarios, the study discusses the technological progress of UHS in Brazil and worldwide, especially regarding operational performance and efficiency. This topic aligns with the global energy transition goals established since the Paris Agreement, which have gained increasing relevance due to the intensification of climate change and extreme events driven by rising CO₂ emissions. A state-of-the-art review of UHS is first conducted, covering storage potential, technical challenges, and existing international experiences. The research is then structured into two main modeling stages: (i) sensitivity analyses in 2D synthetic domains representing aquifers (H₂-water systems) and depleted oil reservoirs (H₂-oil systems), and (ii) a 3D case study applied to the Namorado Field, a depleted offshore oil reservoir in the Campos Basin, Brazil. The results demonstrate that DuMu^x is an effective tool for simulating coupled multiphase flow and transport processes under different geological conditions. In aquifer storage scenarios, high hydrogen recovery factors (up to 90%) were achieved; however, gas purity at production was reduced (49-77%) due to water co-production. The reservoir dip angle showed the greatest influence on purity performance, while depth was the dominant factor affecting overall recovery. In depleted oil reservoirs, hydrogen purity remained consistently high (90-99%) because of limited oil mobility, emphasizing the role of oil viscosity and adequate cushion-gas pressurization in maintaining operational stability. The Namorado Field case study confirmed that the reservoir can be accurately represented in DuMu^x, reproducing the multiphase behaviors observed in the synthetic analyses. The energy feasibility assessment indicated that the Namorado reservoir has substantial potential for large-scale, seasonal hydrogen storage, with a production capacity capable of serving significant regional energy demand. These outcomes demonstrate the suitability of this type of geological structure for UHS deployment in the Brazilian energy landscape.

Key-words: Underground H₂ storage, energy transition, numerical modeling, flow analysis.

SUMÁRIO

1	INTRODUÇÃO.....	1
1.1	CONTEXTO E MOTIVAÇÃO.....	1
1.2	PROBLEMA E HIPÓTESE.....	2
1.3	OBJETIVOS.....	3
1.4	ESCOPO DO TRABALHO.....	4
2	FUNDAMENTAÇÃO TEÓRICA.....	5
2.1	TRANSIÇÃO ENERGÉTICA.....	5
2.1.1	MATRIZ ENERGÉTICA GLOBAL.....	6
2.1.2	PAPEL DO BRASIL NA TRANSIÇÃO.....	7
2.2	GÁS HIDROGÊNIO (H ₂).....	9
2.2.1	POTENCIAL E CLASSIFICAÇÃO.....	10
2.2.2	ARMAZENAMENTO SUBTERRÂNEO DE H ₂ (ASH).....	13
2.3	ASH EM RESERVATÓRIOS MADUROS.....	19
2.3.1	CONTEXTO BRASILEIRO E CAMPO DE NAMORADO.....	19
2.3.2	OPERAÇÃO.....	20
2.3.3	PROPRIEDADES INTRÍNSECAS (K e ϕ).....	23
2.4	PROBLEMAS DE FLUXO NO ASH.....	24
3	PREMISSAS PARA A MODELAGEM NUMÉRICA.....	30
3.1	FERRAMENTA NUMÉRICA – DUMU ^X	30
3.1.1	ESTRUTURA E ARQUIVOS ESSENCIAIS.....	32
3.2	EQUAÇÕES DO PROBLEMA MULTIFÁSICO TRANSIENTE.....	32
3.3	CONSERVAÇÃO DE MASSA.....	34
3.4	CONSERVAÇÃO DE MOMENTO LINEAR.....	35
3.5	MODELOS CONSTITUTIVOS.....	36
3.5.1	FLUXO (LEI DE DARCY).....	36
3.5.2	SATURAÇÃO (BROOKS-COREY).....	37
3.5.3	PROPRIEDADES DOS FLUIDOS.....	38

3.6	MECANISMOS DE TRANSPORTE	44
3.6.1	SOLUBILIDADE DO H ₂	44
3.6.2	DIFUSÃO.....	46
3.7	MÉTODO BOX DE DISCRETIZAÇÃO.....	47
3.8	CONDIÇÕES DE CONTORNO.....	49
4	METODOLOGIA.....	51
4.1	DEFINIÇÃO DAS ETAPAS DE ESTUDO	51
4.2	DESCRIÇÃO DAS ÁREAS DE ESTUDO	52
4.2.1	RESERVATÓRIO ARENÍTICO	52
4.2.2	CAMPO DE NAMORADO	54
4.3	IMPLEMENTAÇÃO DOS MODELOS	55
4.3.1	ETAPA 1: MODELO SINTÉTICO	57
4.3.2	ETAPA 2: CAMPO DE NAMORADO	61
4.4	MÉTRICAS DE AVALIAÇÃO DA PERFORMANCE	65
5	MODELOS SINTÉTICOS 2D: ANÁLISES DE SENSIBILIDADE	69
5.1	AQUÍFERO.....	69
5.1.1	COMPORTAMENTO DA PLUMA DE H ₂	69
5.1.2	PRESSÃO NO POÇO	73
5.1.3	MOBILIDADE DO H ₂	76
5.1.4	PERFORMANCE DO ASH.....	76
5.2	RESERVATÓRIO MADURO DE ÓLEO.....	84
5.2.1	COMPORTAMENTO DA PLUMA DE H ₂	85
5.2.2	PRESSÃO NO POÇO	88
5.2.3	MOBILIDADE DO H ₂	90
5.2.4	EFICIÊNCIA DO ASH	91
5.3	RESUMO DA SENSIBILIDADE.....	97
6	ETAPA 2: ESTUDO DE CASO BASEADO NO CAMPO DE NAMORADO	102
6.1	MODELO HOMOGÊNEO	102
6.1.1	ANÁLISE DE VIABILIDADE E POTENCIAL ENERGÉTICO	106

6.2	MODELO HETEROGÊNICO.....	108
6.3	COMPARAÇÃO DOS MODELOS.....	112
7	CONCLUSÃO.....	114
7.1	PRINCIPAIS CONCLUSÕES	114
7.2	LIMITAÇÕES DO ESTUDO	117
7.3	PERSPECTIVAS PARA TRABALHOS FUTUROS.....	119
	REFERÊNCIAS	121
	APÊNDICE I	136
	QUADROS RESUMO DO AQUÍFERO	136
	APÊNDICE II.....	151
	QUADROS RESUMO DO RESERVATÓRIO MADURO DE ÓLEO	151
	APÊNDICE III.....	166
	ARQUIVO <i>PROBLEM.HH</i>	166
	ARQUIVO <i>MAIN.CC</i>	173
	ARQUIVO <i>SPATIALPARAMS.HH</i>	180
	ARQUIVO <i>PARAMS.INPUT</i>	182

LISTA DE TABELAS

Tabela 2.1 – Comparação do diâmetro cinético e massa molar de diferentes componentes....	10
Tabela 2.2 – Classificação do H ₂ em cores e características associadas (De Blasio, 2024).....	11
Tabela 2.3 – Comparação do potencial calorífico de diferentes fontes de energia (World Nuclear Association, 2025).....	12
Tabela 2.4 – Recorte atual dos projetos de ASH no mundo (Hydrogen TCP-Task 42, 2025).	16
Tabela 2.5 – Coeficientes de Difusão molecular para H ₂ sob temperatura de 50 °C	24
Tabela 4.1 – Análises numéricas realizadas nas etapas 1 e 2	52
Tabela 4.2 – Modelos constitutivos adotados para as análises de fluxo.....	56
Tabela 4.3 – Características dos fluidos utilizados nas análises.....	56
Tabela 4.4 – Parâmetros operacionais do modelo simplificado.	57
Tabela 4.5 – Resumo dos parâmetros de fluxo da rocha arenítica usados no modelo 2D	60
Tabela 4.6 – Resumo dos cenários simulados no aquífero arenítico.....	60
Tabela 4.7 – Resumo dos cenários simulados no reservatório maduro de óleo	61
Tabela 4.8 – Resumo estatístico dos parâmetros adotados para o campo de Namorado na condição heterogênea.	63
Tabela 4.9 – Resumo dos parâmetros de fluxo da rocha arenítica usados no modelo 3D	65
Tabela 4.10 – Parâmetros operacionais do modelo de Namorado	65
Tabela 4.11 – Potencial de geração elétrica de usinas hidrelétricas por tipo (ANEEL, 2023).	67
Tabela 4.12 – Maiores geradoras hidrelétricas do Brasil em potência instalada (ANEEL, 2025; ITAIPU, 2023).....	68
Tabela 5.1 – Mobilidade do H ₂ para os cenários simulados (aquífero).....	76
Tabela 5.2 – Fator de Recuperação do H ₂ por ciclo (aquífero).	77
Tabela 5.3 – Pureza do H ₂ por ciclo de produção (aquífero).....	77
Tabela 5.4 – Mobilidade do H ₂ para os cenários simulados (reservatório maduro de óleo)	90
Tabela 5.5 – Fator de Recuperação do H ₂ por ciclo (reservatório maduro de óleo).....	91
Tabela 5.6 – Pureza do H ₂ por ciclo de produção (reservatório maduro de óleo).....	91
Tabela 6.1 – Eficiência do armazenamento no cenário homogêneo – Namorado	106
Tabela 6.2 – Conversão da massa produzida de H ₂ em energia gerada por ciclo para o campo de Namorado considerando o uso em células a combustível	107
Tabela 6.3 – Comparativo entre usinas hidrelétricas nacionais de grande porte (UHE) e o campo de Namorado.....	107
Tabela 6.4 – Eficiência do armazenamento no cenário heterogêneo – Namorado.....	112

LISTA DE FIGURAS

Figura 2.1 – Comparação entre a matriz energética global e a brasileira (IEA, 2022; EPE, 2025)	6
Figura 2.2 – Linha do tempo da indústria de hidrogênio no Brasil (Kakran et al., 2023).....	9
Figura 2.3 – Desenho esquemático do ASH em diferentes tipos de reservatórios geológicos (adaptado de Hydrogen TCP-Task 42, 2025).....	14
Figura 2.4 – Planta do projeto piloto “Sun Storage” (modificado de RAG, 2020).....	18
Figura 2.5 – Esquema representativo do efeito da diferença de densidade entre fluidos.....	25
Figura 2.6 – Esquema representativo do efeito da diferença de viscosidade entre fluidos	26
Figura 2.7 – Curvas de permeabilidade relativa mostrando comportamento de histerese (adaptado de Lysy et al., 2022).....	29
Figura 3.1 – Volume de Controle representado pelo elemento unitário tridimensional.....	34
Figura 3.2 – Delimitação das regiões e equações de estado para a água (IAPWS, 2012).....	39
Figura 3.3 – Viscosidade dinâmica do H ₂ (Lemmon et al., 2018).....	44
Figura 3.4 – Variação da constante de Henry com a temperatura para o sistema CO ₂ -óleo (adaptado de Marufuzzaman et al., 2014)	45
Figura 3.5 – Processo de obtenção do volume de controle 2D ao redor do nó i pelo Método BOX (adaptado de Loyola et al., 2024).....	47
Figura 4.1 – Malha de elementos finitos do reservatório 2D a 5°.....	53
Figura 4.2 – Malha de elementos finitos do reservatório 2D a 10°.....	53
Figura 4.3 – Malha de elementos finitos do reservatório 2D a 15°.....	54
Figura 4.4 – Malhas de elementos finitos do reservatório 3D de Namorado e vista superior do reservatório com seções para visualização de resultados.	54
Figura 4.5 – Localização da zona de injeção e produção e definição das condições de contorno do reservatório 3D.	55
Figura 4.6 – Curvas de permeabilidade relativa H ₂ -H ₂ O do aquífero arenítico	58
Figura 4.7 – Curva de retenção do aquífero arenítico	59
Figura 4.8 – Curvas de permeabilidade relativa H ₂ -óleo do reservatório maduro de óleo.....	59
Figura 4.9 – Curva de retenção do reservatório maduro de óleo.....	60
Figura 4.10 – Relação entre permeabilidade e porosidade a partir da função Kozeny-Carman.	62
Figura 4.11 – Curva de densidade de probabilidade das porosidades do campo de Namorado	63

Figura 4.12 – Mapa de porosidades adotado para o modelo heterogêneo do Campo de Namorado	64
Figura 4.13 – Campo de porosidades nas seções de interesse.....	64
Figura 5.1 – Pluma de H ₂ ao longo dos ciclos (mergulho = 5°).....	70
Figura 5.2 – Pluma de H ₂ ao longo dos ciclos (mergulho = 10°).....	71
Figura 5.3 – Pluma de H ₂ ao longo dos ciclos (mergulho = 15°).....	71
Figura 5.4 – Saturação residual de H ₂ após o último ciclo de produção (Cenário 1.1.1.1 - mergulho = 5°).....	72
Figura 5.5 – Saturação residual de H ₂ após o último ciclo de produção (Cenário 1.1.1.2 - mergulho = 10°).....	72
Figura 5.6 – Saturação residual de H ₂ após o último ciclo de produção (Cenário 1.1.1.3 - mergulho = 15°).....	73
Figura 5.7 – Pressão máxima atingida no aquífero – exemplo do cenário 1.1.1.2.....	74
Figura 5.8 – Influência da vazão de operação na pressão desenvolvida no poço (aquífero)....	74
Figura 5.9 – Influência do mergulho na variação de pressão desenvolvida no poço (aquífero).	75
Figura 5.10 – Análise de sensibilidade do mergulho do reservatório (aquífero).	78
Figura 5.11 – Pureza do H ₂ recuperado ao longo dos ciclos de produção: relação com o ângulo de mergulho do aquífero.....	79
Figura 5.12 – Influência da vazão de operação no FR (aquífero).	80
Figura 5.13 – Pureza do H ₂ recuperado ao longo dos ciclos de produção: relação com a vazão de operação.....	81
Figura 5.14 – Análise de sensibilidade da permeabilidade e porosidade do reservatório Cenários 1.1.2 e 1.1.3 (aquífero).	82
Figura 5.15 – Pureza do H ₂ recuperado ao longo dos ciclos de produção: relação com a permeabilidade e porosidade.	83
Figura 5.16 – Análise de sensibilidade da profundidade do reservatório (aquífero).....	83
Figura 5.17 – Comparação das plumas residuais nos cenários de menor e maior profundidade do aquífero (Cenário 1.1.1.2 e Cenário 1.4.1.1).	84
Figura 5.18 – Pluma de H ₂ ao longo dos ciclos no reservatório maduro de óleo pesado ($\mu = 0,15$ Pa·s).	86
Figura 5.19 – Saturação residual de H ₂ após o último ciclo de produção do reservatório maduro de óleo ($\mu = 0,003$ Pa·s).	87

Figura 5.20 – Saturação residual de H ₂ após o último ciclo de produção do reservatório maduro de óleo ($\mu = 0,06 \text{ Pa}\cdot\text{s}$).	87
Figura 5.21 – Saturação residual de H ₂ após o último ciclo de produção do reservatório maduro de óleo ($\mu = 0,15 \text{ Pa}\cdot\text{s}$).	87
Figura 5.22 – Pressão máxima atingida no reservatório maduro – exemplo do cenário 2.1.3.	88
Figura 5.23 – Influência da vazão de gás colchão na pressão desenvolvida no poço (reservatório maduro de óleo).	89
Figura 5.24 – Discrepância entre pressão mínima no poço calculada e pressão mínima estabelecida como critério de parada da produção (reservatório maduro de óleo).	89
Figura 5.25 – Análise de sensibilidade da viscosidade dinâmica do óleo (reservatório maduro de óleo).	93
Figura 5.26 – Análise de sensibilidade da vazão de gás colchão (reservatório maduro de óleo).	94
Figura 5.27 – Impacto das pressões médias desenvolvidas no poço no fator de recuperação do cenário 2.2.1.3.	95
Figura 5.28 – Efeito da vazão de operação nas métricas de eficiência (cenários com óleo pesado e leve).	96
Figura 5.29 – Efeito da vazão de operação no FR (cenários com óleo muito leve).	97
Figura 5.30 – Resumo da sensibilidade do $FR_{\text{méd}}$ aos parâmetros do aquífero arenítico.	98
Figura 5.31 – Resumo da sensibilidade do $FR_{\text{últ}}$ aos parâmetros do aquífero arenítico.	98
Figura 5.32 – Resumo da sensibilidade da $P_{\text{méd}}$ aos parâmetros do aquífero arenítico.	99
Figura 5.33 – Resumo da sensibilidade da $P_{\text{últ}}$ aos parâmetros do aquífero arenítico.	99
Figura 5.34 – Resumo da sensibilidade do $FR_{\text{méd}}$ aos parâmetros dos reservatórios maduros de óleo pesado e leve.	100
Figura 5.35 – Resumo da sensibilidade do $FR_{\text{últ}}$ aos parâmetros dos reservatórios maduros de óleo pesado e leve.	100
Figura 6.1 – Pluma de H ₂ após ciclo de gás colchão – Namorado homogêneo.	103
Figura 6.2 – Pluma de H ₂ após ciclo 1 – Namorado homogêneo.	103
Figura 6.3 – Pluma de H ₂ após ciclo 2 – Namorado homogêneo.	103
Figura 6.4 – Pluma de H ₂ após ciclo 3 – Namorado homogêneo.	104
Figura 6.5 – Pluma de H ₂ após ciclo 4 – Namorado homogêneo.	104
Figura 6.6 – Pluma de H ₂ após ciclo 5 – Namorado homogêneo.	104

Figura 6.7 – Saturação residual de H ₂ após o último ciclo de produção – Namorado homogêneo	105
Figura 6.8 – Campo de pressões nas seções x e y – Namorado homogêneo.....	105
Figura 6.9 – Quadro resumo do ASH no modelo homogêneo de Namorado.....	106
Figura 6.10 – Pluma de H ₂ após ciclo de gás colchão – Namorado heterogêneo.....	108
Figura 6.11 – Pluma de H ₂ após ciclo 1 – Namorado heterogêneo	109
Figura 6.12 – Pluma de H ₂ após ciclo 2 – Namorado.....	109
Figura 6.13 – Pluma de H ₂ após ciclo 3 – Namorado heterogêneo	109
Figura 6.14 – Pluma de H ₂ após ciclo 4 – Namorado heterogêneo	110
Figura 6.15 – Pluma de H ₂ após ciclo 5 – Namorado heterogêneo	110
Figura 6.16 – Saturação residual de H ₂ após o último ciclo de produção – Namorado heterogêneo.....	111
Figura 6.17 – Campo de pressões nas seções x e y – Namorado heterogêneo.....	111
Figura 6.18 – Quadro resumo do ASH no modelo heterogêneo de Namorado.....	112
Figura 6.19 – Comparação dos modelos homogêneo e heterogêneo de Namorado.....	113

LISTA DE SÍMBOLOS, NOMENCLATURAS E ABREVIações

ANEEL	Agência Nacional de Energia Elétrica.
ANP	Agência Nacional do Petróleo, Gás Natural e Biocombustíveis.
API	American Petroleum Institute gravity (Gravidade API).
ASH	Armazenamento Subterrâneo de Hidrogênio.
ASG	Armazenamento de Gás Natural.
c	Fator de forma dos grãos .
CCUS	Captura, Utilização e Armazenamento de Carbono.
CCS-EOR	Captura de Carbono com Recuperação Avançada de Petróleo.
CDF	Curva de Densidade de Probabilidades.
CEPETRO	Centro de Estudos de Petróleo (UNISIM).
CGH	Central Geradora Hidrelétrica.
δ_{ij}	Delta de Kronecker.
D_{ij}	Coefficiente de difusão molecular.
DP	Drenagem Primária.
DS	Drenagem Secundária .
DUNE	Ambiente Numérico Distribuído e Unificado.
EDP	Equações Diferenciais Parciais.
E_{H_2}	Energia gerada pelo H_2 .
EOR	Recuperação Avançada de Petróleo (Enhanced Oil Recovery).
EPE	Empresa de Pesquisa Energética.
$F_{ext,i}$	Vetor de forças externas.
F_{IJ}	Fluxo que atravessa as faces dos elementos.
FR	Fator de Recuperação.
$FR_{méd}$	Fator de recuperação médio.

$FR_{\text{últ}}$	Fator de recuperação último.
g	Aceleração da gravidade.
H	Profundidade.
IAPWS	International Association for the Properties of Water and Steam.
IEA	International Energy Agency.
INUN	Inundação.
J_j	Fluxo de massa por difusão .
K	Permeabilidade absoluta.
k_B	Constante de Boltzmann.
k_H	Constante de Henry.
K_D	Constante de distribuição vapor-líquido.
k_{rf}	Permeabilidade relativa da fase f.
k_{rn}	Permeabilidade relativa da fase não molhante.
k_{rw}	Permeabilidade relativa da fase molhante.
κ_{H_2O}	Compressibilidade da água.
κ_o	Compressibilidade isotérmica do óleo.
λ	Índice de distribuição de poros.
λ	Viscosidade volumétrica.
m	Massa molecular.
$m_{1,i}^{\text{inj}}$	Massa de H_2 injetada no ciclo i.
$m_{1,i}^{\text{prod}}$	Massa de H_2 produzida no ciclo i.
$m_{2,i}^{\text{prod}}$	Massa de fluido secundário produzida no ciclo i.
\dot{m}_{sai}	Massa líquida que sai do volume de controle.
MEF	Método dos Elementos Finitos.
MME	Ministério de Minas e Energia.

MPFA	Multi-Point Flux Approximation.
Mslv	Massa molar do solvente.
μ	Viscosidade dinâmica.
$\mu_0(T)$	Viscosidade no limite de baixa densidade.
$\Delta\mu(T,\rho)$	Contribuição da viscosidade devido a interações moleculares em altas pressões.
MVF	Método dos Volumes Finitos.
NIST	National Institute of Standards and Technology.
NOx	Óxidos de Nitrogênio.
N_{cic}	Número de ciclos completos.
P	Pureza do H ₂ .
p_b	Pressão de bolha.
p_c	Pressão capilar.
PCH	Pequena Central Hidrelétrica
p_e	Pressão de entrada de ar.
$P_{méd}$	Pureza média.
$P_{mín}$	Limite mínimo de pressão.
p_{nw}	Pressão da fase não molhante.
P_0	Pressão inicial/de referência.
p_{H_2}	Pressão parcial do H ₂ .
$P_{últ}$	Pureza última.
p^*	Pressão de vapor da água.
p_w	Pressão da fase molhante.
$p_{máx}$	Limite máximo de pressão.
PROCAC	Programa Brasileiro de Células a Combustível e Hidrogênio.

PROH ₂	Renomeação do PROCAC.
Q	Termo de fonte/sumidouro (vazão).
Q _c	Vazão de gás colchão.
Q _i	Vazão operacional de injeção.
Q _p	Vazão operacional de produção.
r	Raio hidrodinâmico da partícula.
R	Constante universal dos gases.
REFPROP	Banco de dados termofísicos (NIST).
r _p	Raio efetivo dos poros.
S	Saturação.
\bar{S}_w	Saturação efetiva da fase molhante.
S _f	Saturação da fase f.
S _m	Saturação residual da fase não molhante.
SNG	Metano Sintético.
S _w	Saturação da fase molhante.
S _{rw}	Saturação residual da fase molhante.
σ	Tensão interfacial.
σ_{ij}	Tensor de tensões.
T	Temperatura.
T*	Temperatura reduzida.
T _{colch}	Período de injeção do gás colchão.
T _{fech}	Período de fechamento.
T _{inj}	Ciclo de injeção do gás de trabalho.
T _{prod}	Ciclo de produção do gás de trabalho.
τ_{ij}	Tensões viscosas.

UHE	Usina Hidrelétrica.
UNISIM	Grupo de pesquisa da UNICAMP.
v	Velocidade.
VC	Volume de Controle.
V_p	Volume de poros.
V_{slt}	Volume molar do soluto no ponto de ebulição.
V_t	Volume total.
X_{fc}	Fração molar do componente c na fase f.
X_{H_2}	Fração molar do H_2 .
x_i	Vetor direção i.
Z	Fator de compressibilidade.
ϕ	Porosidade.
ϕ_{slv}	Parâmetro de associação do solvente.
ρ	Densidade.
ρ_{ob}	Densidade do óleo em condições de referência.
ρ_o	Densidade do óleo.
θ	Ângulo de contato com a superfície.
$\dot{\omega}_{H_2}$	Taxa reativa do H_2 .

1 INTRODUÇÃO

O gás hidrogênio (H_2) é visto atualmente como um dos elementos centrais relacionados à transição energética global. Nesse sentido, o presente trabalho tem como seu eixo temático principal a modelagem numérica de estocagem do H_2 em estruturas geológicas, com foco no seu uso para armazenamento de energia em larga escala sob uma perspectiva de engenharia de reservatórios e por meio de análises de fluxo.

Ainda, o trabalho dialoga com diversas áreas do conhecimento, passando pela engenharia geotécnica até a engenharia de energia, por exemplo. Essa multidisciplinaridade amplia a complexidade desse tipo de estrutura, o que torna fundamental o aprofundamento sobre os principais problemas que envolvem a sua segurança e eficiência.

Ao longo do capítulo introdutório, são colocados os principais norteadores do desenvolvimento da pesquisa. Inicialmente, é abordada a contextualização e motivação do tema (Seção 1.1), seguidas pela elaboração dos principais questionamentos e hipóteses para resolução dos problemas propostos (Seção 1.2) e, por último, pela delimitação dos objetivos geral e específicos (Seção 1.3), bem como do escopo da dissertação (Seção 1.4).

1.1 CONTEXTO E MOTIVAÇÃO

O atual cenário mundial e as crises climáticas impostas pelas contradições e conflitos do mundo contemporâneo exigem que seja aprimorada a eficiência dos sistemas energéticos utilizados pelos países, reduzindo seu impactos ao meio ambiente. Aliado à necessidade de reduzir as emissões de CO_2 , existe hoje uma série de entraves que dificultam a efetivação desse processo, seja em termos de capacidade produtiva, seja em termos de desenvolvimento de novas tecnologias que se mostrem viáveis.

Um dos grandes desafios para a redução das emissões de CO_2 está relacionado à produção de energia renovável, que, em 2023, representou apenas 30% da produção global, segundo dados da Energy Institute (2024). Embora fontes limpas como energia hidrelétrica, eólica e solar sejam fundamentais para superar crises energéticas e ambientais, elas podem enfrentar limitações geográficas e ineficiências na oferta e demanda devido à intermitência de seus ciclos produtivos (Kim et al., 2024). Com isso, tornam-se necessárias fontes alternativas e estruturas de armazenamento adequadas para suprir o consumo de energia.

O hidrogênio (H_2) é um gás que, quando utilizado como fonte de energia, reage com o oxigênio em um processo de combustão, liberando calor e água como subproduto, sem emissão

de carbono. Contudo, além do alto custo de produção do H₂, o custo elevado do armazenamento desse gás em tanques apresenta um limitador significativo para a produção em larga escala, devido às suas baixas capacidades.

Nesse cenário, o Armazenamento Subterrâneo de Hidrogênio (ASH) surge como uma alternativa viável, especialmente em reservatórios maduros de óleo e gás, que podem oferecer uma solução econômica e eficiente. A exemplo disso, Navaid et al. (2023) estimam que o custo desse método seja de apenas 1,23 USD/kg de H₂, tornando-o uma alternativa de armazenamento de energia sazonal em larga escala, que pode evitar o descarte de eventuais excedentes energéticos, bem como suprir períodos com baixa produtividade de energia.

Mas para além da viabilidade econômica do ASH, é fundamental garantir que os reservatórios são bons armazenadores e seguros – características que ainda carecem de embasamento científico para aplicação no Brasil e no mundo (ANP, 2024). Nesse sentido, a modelagem numérica é uma ferramenta que pode auxiliar no entendimento de uma operação de estocagem de H₂, contribuindo para o desenvolvimento tecnológico do ASH e sua aplicação.

1.2 PROBLEMA E HIPÓTESE

As simulações de ASH em reservatórios maduros exigem a consideração de possíveis problemas relacionados ao fluxo multifásico estabelecido entre o H₂ e os outros fluidos presentes. Fatores como segregação por gravidade (devido à baixa densidade do H₂), baixa viscosidade, processos de difusão, dispersão e adsorção do hidrogênio em contato com a água, outros gases e a própria rocha reservatório podem comprometer a eficiência do armazenamento e a pureza do H₂ produzido (Hassanpouryouzband et al., 2021, 2022; Zeng et al., 2022; Rhouma et al., 2024; Sadkhan et al., 2024).

Atualmente diversos estudos têm sido conduzidos com o intuito de viabilizar a operação de ASH em termos de segurança e eficiência, considerando diferentes aspectos de fluxo, transporte, geomecânicos e bioquímicos (Hagemann et al. 2015, 2016, Pfeiffer et al. 2017, Luboń et al. 2021, Hassanpouryouzband et al. 2021, 2022, Rhouma et al. 2024, Wang et al. 2024). Isso porque o ASH ainda se encontra em estágio incipiente ao redor do mundo. Segundo (Zivar et al., 2021), até 2020, existiam apenas quatro estruturas de estocagem de H₂ puro em operação. Mais recentemente, foram implementados alguns projetos-piloto, como o Hychico (Argentina) e o Sun Project (Áustria), embora o ASH em escala real ainda permaneça pouco explorado.

No Brasil, o cenário é ainda menos desenvolvido nesse sentido, tendo em vista a grande

dependência das termelétricas para suprir a demanda energética dos períodos de seca, quando as barragens a fio d'água podem não fornecer energia hidrelétrica suficiente. Há ainda empecilhos regulatórios e de entendimento sobre o funcionamento dessas estruturas no Brasil, o que dificulta a implantação de novas tecnologias para armazenamento de H₂ em subsuperfície, conforme destaca o relatório de implementação do marco regulatório de hidrogênio de baixo carbono (ANP, 2024).

Conforme apresentado pelo relatório elaborado pelo Programa de Colaboração em Tecnologia de Hidrogênio (Hydrogen TCP-Task 42, 2025), há hoje a necessidade de avaliar projetos de demonstração em escala real e iniciativas comerciais pioneiras de ASH, especialmente em reservatórios porosos, a fim de definir perfis operacionais viáveis e condições ideais para sua implementação no sistema energético.

Com base nessas indefinições e nos potenciais identificados para estratégias sustentáveis no setor de energia, são levantadas as seguintes hipóteses quanto à eficiência e ao potencial de simulação do ASH por meio de modelagem numérica:

- O DuMu^x pode se mostrar uma ferramenta eficaz para simular o processo de ASH, fornecendo resultados representativos e relevantes para a análise e otimização da estocagem.
- A eficiência do armazenamento está atrelada às variáveis operacionais e parâmetros dos fluidos e rochas envolvidas no ASH.
- O Campo de Namorado, apresenta potencial para o armazenamento de hidrogênio, reforçando a viabilidade e o potencial dessa estratégia no país frente à demanda energética nacional.

1.3 OBJETIVOS

Diante das hipóteses, o presente trabalho tem como objetivo geral simular os problemas de fluxo e transporte mais importantes que envolvem estocagem de H₂, com auxílio da ferramenta computacional DuMu^x (Koch et al., 2021).

Ainda, considerando os desafios propostos para esse tipo de simulação, os objetivos específicos do trabalho são:

- Avaliar o potencial de ASH de reservatórios geológicos, considerando diferentes aspectos operacionais, como: vazões de injeção e extração, limites operacionais de pressão e número de ciclos operacionais;

- Capturar os efeitos das propriedades do maciço rochoso no comportamento dos fluidos e na eficiência do ASH;
- Avaliar como as propriedades dos fluidos presentes no reservatório podem afetar a capacidade de armazenamento, fator de recuperação e a pureza do H₂;
- Avaliar de forma preliminar a aplicabilidade do modelo desenvolvido ao contexto brasileiro, levando em conta as demandas energéticas locais e as características do reservatório Namorado, na Bacia de Campos, como indicativo do potencial de armazenamento.

1.4 ESCOPO DO TRABALHO

A estrutura do trabalho se divide em quatro etapas principais que antecedem as conclusões do estudo. São elas: fundamentação teórica, premissas da simulação numérica, metodologia, análises de sensibilidade iniciais e estudo de caso.

O embasamento teórico, apresentado no Capítulo 2, fornece o arcabouço para o desenvolvimento das ideias centrais relacionadas ao tipo de problema abordado, bem como a revisão da bibliografia existente e sua relação com o tema. O objetivo dessa etapa é apresentar aspectos sobre a transição energética no Brasil e no mundo bem como as principais características que envolvem o ASH e que vem sendo estudadas por diferentes autores.

Na parte de definição das premissas de modelagem (Capítulo 3), é apresentado o software DuMu^x, que é usado para as simulações de fluxo e geomecânicas. Nessa etapa, são apresentados a formulação matemática e os métodos que estão implementados na ferramenta numérica e que regem a simulação. O objetivo dessa etapa é discutir os modelos hidromecânicos e sua aplicabilidade ao problema estudado, além de mostrar vantagens, desvantagens e funcionalidades do DuMu^x.

Com o desenvolvimento da metodologia no Capítulo 4, pretende-se apresentar os detalhes sobre as análises de fluxo realizadas nos modelos, os dados de entrada e saída das simulações, a forma como os modelos foram construídos no DuMu^x e as métricas para obtenção da eficiência do sistema estudado. Após essa etapa, são apresentados os resultados das análises feitas para o modelo simplificado de reservatório e para o estudo de caso realizado no reservatório Namorado, nos Capítulos 5 e 6, respectivamente. Com isso, é possível abordar as principais discussões e conclusões do estudo, bem como pontos de limitação e perspectivas para trabalhos futuros (Capítulo 7).

2 FUNDAMENTAÇÃO TEÓRICA

Neste capítulo, são desenvolvidos os conceitos fundamentais para o embasamento teórico do trabalho e para o entendimento mais aprofundado sobre o objeto de estudo e aspectos relacionados. Inicialmente, na Seção 2.1, propõe-se uma discussão sobre o atual estágio da transição energética no Brasil e no mundo, bem como sua relação com a produção de H₂ e desenvolvimento de novas tecnologias.

Nas Seções 2.2 e 2.3, são apresentadas as características do gás hidrogênio e dos reservatórios geológicos, com destaque para os campos maduros. O objetivo é descrever como o armazenamento subterrâneo de H₂ se relaciona com o contexto geotécnico, abordando conceitos, trabalhos e estudos que possam fornecer informações relevantes para o desenvolvimento das modelagens. Nesse sentido, também são revisados os principais projetos e casos de aplicação de ASH no mundo, identificando suas limitações a nível de normatização, modelagem e operação.

Por fim, a Seção 2.4 aborda de maneira mais detalhada os problemas mais comuns relacionados ao ASH em reservatórios geológicos. Nessa seção, são discutidos trabalhos recentes que exploraram diferentes problemas de fluxo em operações dessa natureza e qual o impacto na viabilidade operacional.

2.1 TRANSIÇÃO ENERGÉTICA

Ao longo da história, a produção e consumo de energia estiveram diretamente relacionados ao desenvolvimento das grandes economias mundiais. Isso porque a geração de energia está ligada a setores estratégicos, impactando direta ou indiretamente os mais importantes ramos da economia. Com a Revolução Industrial, intensificou-se o uso do carvão como principal fonte energética o que levou, por exemplo, à criação da Comunidade Europeia do Carvão e do Aço – embrião da atual União Europeia – com o objetivo de estabelecer condições favoráveis ao desenvolvimento europeu.

No entanto, esse modelo mostrou-se insustentável ao longo dos anos, na medida em que cresceram substancialmente os eventos climáticos extremos, junto com o aquecimento global e as emissões de CO₂, que passaram de aproximadamente 19,4 bilhões de toneladas em 1980 para cerca de 37,8 bilhões em 2024 (Mehmood et al., 2024).

A transição energética é baseada na substituição dos processos de produção, armazenamento, distribuição e consumo de energia – que hoje são majoritariamente

relacionados a fontes fósseis – por sistemas baseados em fontes renováveis. Esse conceito é hoje utilizado mundialmente para definir metas de descarbonização como a “*Net Zero*”, que busca limitar o aumento da temperatura do planeta a 1,5 °C até 2050, por meio de estratégias como a renovação da matriz energética.

2.1.1 MATRIZ ENERGÉTICA GLOBAL

No contexto global, as principais fontes de energia ainda estão baseadas no uso de combustíveis fósseis como carvão e gás natural. A matriz energética mundial contrasta com a brasileira em especial no que diz respeito a essas fontes, conforme mostra a Figura 2.1. Segundo dados da Agência Internacional de Energia (IEA) e da Empresa de Pesquisa Energética (EPE), cerca de 86% da energia no mundo provém de fontes não renováveis, enquanto no Brasil, as renováveis chegam a representar quase 50% do total de energia gerada no país (IEA, 2022; EPE, 2025).

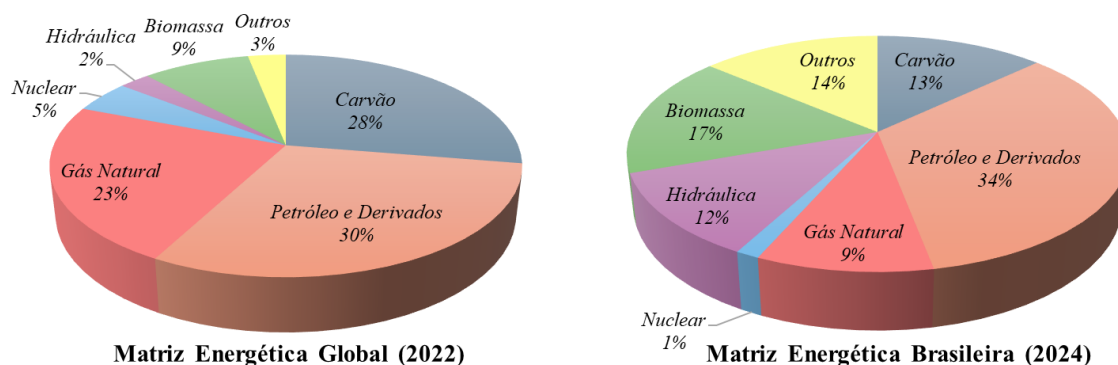


Figura 2.1 – Comparação entre a matriz energética global e a brasileira (IEA, 2022; EPE, 2025)

Nos últimos anos, o aumento das emissões de CO₂ deve-se especialmente às contribuições de China e Estados Unidos, que ocupam o topo da lista de países com maior emissão de CO₂ no mundo. Estimativas recentes indicam que a China é responsável por cerca de 27% das emissões globais de CO₂, enquanto os EUA contribuem com aproximadamente 11%. Além disso, entre 1980 e 2013, as emissões globais aumentaram 84%, reforçando o crescimento vertiginoso observado nas últimas décadas (Mehmood et al., 2024).

O Brasil, na contramão da tendência global, possui uma das matrizes energéticas mais limpas do mundo, graças ao grande potencial hidrelétrico do país. Cerca de 41% da produção total da energia gerada em território nacional advém de fontes renováveis, com destaque para

as hidrelétricas e para fontes que têm ganhado relevância nos últimos anos, como a biomassa, a energia eólica e a energia solar fotovoltaica (EPE, 2025).

Se por um lado o Brasil é referência no que diz respeito à geração de energia limpa, por outro, a dependência das hidrelétricas a fio d'água pode acarretar crises energéticas e conflitos quanto ao uso múltiplo das águas, vide as crises hídricas de 2014 e 2021 (Borges, 2021; Galvão et al., 2015; Santos et al., 2021). Esse cenário reforça a necessidade do Brasil em aderir a novas tecnologias no setor de energia que visem estocar suas reservas energéticas e proporcionar soluções que superem eventos críticos como secas extremas observadas nesses anos.

2.1.2 PAPEL DO BRASIL NA TRANSIÇÃO

Novas tecnologias têm sido desenvolvidas como forma de superar dificuldades relacionadas ao armazenamento e produção de energia, visando estabelecer uma matriz energética sustentável. O aprimoramento de estruturas de geração de energia limpa, desenvolvimento dos biocombustíveis, técnicas de captura de carbono, entre outros avanços têm se mostrado promissores para atingir essa meta. Somado a isso, a ideia de combinar múltiplas fontes renováveis é uma possibilidade ainda mais atrativa para países com grande disponibilidade de recursos, vide o caso brasileiro.

Uma técnica interessante e inovadora que tem auxiliado na descarbonização de diversos processos industriais é a captura, utilização e armazenamento de carbono (CCUS). Esse processo permite que o CO₂ seja capturado e, dependendo da aplicação, possa ser utilizado em diferentes processos industriais, como a fabricação de produtos químicos, a carbonatação mineral, a cura de cimento e a produção de biometano, ou simplesmente armazenado por meio da injeção em reservatórios geológicos. Em alguns casos específicos, o CO₂ também pode ser injetado em reservatórios para recuperação avançada de petróleo (EOR) (De et al., 2015; Orita et al., 2022; Jahanbakhsh et al., 2024).

No Brasil, as empresas de petróleo têm adotado essa tecnologia nos últimos anos como uma alternativa para impulsionar seus planos de redução de emissões até 2050. A exemplo disso, a Petrobrás detém um dos maiores projetos de CCS-EOR (captura de carbono com recuperação avançada de petróleo) do mundo (Netto et al., 2021). Nos campos do pré-sal, o gás produzido é composto majoritariamente por gás natural, contendo também parcelas significativas de CO₂. A tecnologia de CCUS envolve a separação desses componentes e a posterior reinjeção do CO₂ no reservatório de origem, onde permanece armazenado.

Embora essa prática tenha um potencial reconhecido na redução de emissões e na

geração de valor agregado ao CO₂, ela não substitui efetivamente o petróleo e derivados como uma das fontes de energia mais utilizadas no planeta. Nesse contexto, uma possibilidade a ser explorada é a injeção subsequente de H₂ no reservatório, utilizando o CO₂ como gás colchão, que é um componente fundamental em operações de ASH que visa garantir a pressurização adequada para o armazenamento (Seção 2.3.2.1).

Quanto ao armazenamento de energia, as recentes inovações visam permitir o melhor aproveitamento de fontes limpas e superar seus problemas de intermitência. Tais problemas não se restringem apenas às fontes eólicas e solares, mas também às hidrelétricas construídas a fio d'água, sem uso de grandes reservatórios e, nesse cenário, o Brasil ocupa uma posição de destaque. Alternativas como barragens reversíveis podem proporcionar benefícios técnicos e econômicos nesses casos, embora ainda existam empecilhos regulatórios, de custo e de incertezas associadas que limitam a experiência com esse tipo de solução no Brasil (EPE, 2021).

Nesse viés, o hidrogênio se destaca como uma solução energética inovadora e com grande potencial para descarbonizar setores-chave da indústria, especialmente se combinado a outras fontes e processos sustentáveis. O que se tem feito em países que buscam renovar sua matriz energética é estudar alternativas de armazenamento do excedente de energia limpa gerado em períodos de baixa demanda, utilizando o gás hidrogênio como vetor (Li et al., 2025; Wang et al., 2025).

Seguindo essa linha, o mais recente relatório do Conselho de Hidrogênio (Hydrogen Council, 2024) destaca que o investimento comprometido em projetos de hidrogênio limpo cresceu mais de sete vezes, passando de USD 10 bilhões em 102 projetos em 2020 para cerca de USD 75 bilhões em 434 projetos em 2024. Esse aumento reflete um início de amadurecimento da indústria e reforça a importância de aprimorar práticas de engenharia e inovação para expandir o uso do hidrogênio.

No Brasil, a produção de H₂ para armazenamento de energia pode reduzir significativamente as emissões de gases de efeito estufa e alinhar o Brasil aos compromissos do Acordo de Paris. Ciente disso, o Plano Nacional de Energia 2050 (MME, 2023) posiciona o hidrogênio como um vetor essencial para uma matriz mais limpa, mas sua implementação enfrenta desafios como infraestrutura insuficiente, incertezas regulatórias e altos custos de produção e armazenamento.

Em termos de regulamentação, conforme mostra a linha do tempo apresentada na Figura 2.2, o Brasil ainda se encontra na fase inicial de discussão sobre a produção de hidrogênio em larga escala. Ao que indicam os marcos regulatórios e estratégicos vigentes o foco principal é no hidrogênio azul até 2050, buscando parcerias internacionais para pesquisa e

desenvolvimento do setor (Kakran et al., 2023).



Figura 2.2 – Linha do tempo da indústria de hidrogênio no Brasil (Kakran et al., 2023)

2.2 GÁS HIDROGÊNIO (H₂)

O hidrogênio é o elemento químico mais abundante do universo, possuindo características singulares que o tornam um importante vetor energético. Embora o hidrogênio seja encontrado em pequena quantidade na forma gasosa na atmosfera, é mais comum obtê-lo associado a outros elementos como o carbono dos hidrocarbonetos (CH₄), e o oxigênio da água (H₂O).

Quando isolado, em condições padrão, ele se comporta como um gás ideal, apresentando baixa densidade e elevada difusividade. Sua molécula diatômica (H₂) é composta por dois átomos de hidrogênio ligados por uma ligação covalente, resultando em um gás incolor, inodoro e altamente inflamável. Essas propriedades, aliadas à sua versatilidade, fazem do hidrogênio um candidato promissor para diversas aplicações energéticas, especialmente na transição para uma matriz mais sustentável.

Outra característica bastante relevante do gás hidrogênio diz respeito ao seu tamanho, que chega a apenas 0,289 nm de diâmetro cinético. Em comparação a outros gases como o metano e o gás carbônico, por exemplo, o H₂ possui tamanho molecular consideravelmente menor, conforme mostra a Tabela 2.1. Esse fator, associado a uma massa molar baixa, facilita ainda mais sua mobilidade e difusão em meios porosos, o que exige que os reservatórios para armazenamento possuam materiais selantes competentes nas rochas capeadoras para evitar possíveis vazamentos (Raza et al., 2022; Bade et al., 2024).

Além disso, o pequeno diâmetro molecular do hidrogênio está associado a desafios metalúrgicos, como a fragilização, um processo de degradação mecânica decorrente da interação do hidrogênio com a rede cristalina dos materiais metálicos. Esse fenômeno pode

comprometer tubulações, poços e sistemas de injeção ao favorecer a difusão do hidrogênio para regiões de elevada concentração de tensões e defeitos estruturais, reduzindo a ductilidade e a resistência mecânica e potencializando a iniciação e propagação de trincas, mesmo em ligas tradicionalmente empregadas na indústria de óleo e gás (Behvar, 2024).

Tabela 2.1 – Comparação do diâmetro cinético e massa molar de diferentes componentes

Molécula	Massa molar (g/mol)	Diâmetro cinético (nm)
CH ₄	16	0,380
N ₂	28	0,364
O ₂	32	0,346
CO ₂	44	0,330
H ₂	2	0,289
H ₂ O	18	0,265

Em diversos países, o hidrogênio já se destaca como um vetor energético versátil, desempenhando um papel essencial em setores estratégicos da economia. Na área de transportes, por exemplo, os veículos movidos a células de combustível e as estações de abastecimento de hidrogênio têm ganhado maior espaço na Coreia do Sul, Estados Unidos, China, Japão, Alemanha e Índia (Kakran et al., 2023; Yao et al., 2025).

Na China e nos Estados Unidos, observa-se um interesse crescente no uso do hidrogênio para descarbonizar indústrias de difícil abatimento, que englobam setores fortemente dependentes de combustíveis fósseis e de processos químicos geradores de gases de efeito estufa. Entre os principais exemplos estão as indústrias química, petroquímica, siderúrgica e de cimento. Nesses setores, o hidrogênio verde ou azul é ser empregado para reduzir emissões associadas ao refino de petróleo, para o fornecimento de calor em altas temperaturas e como agente redutor ou matéria-prima na produção de compostos como amônia, metanol e gás de síntese, contribuindo para diminuir as emissões desses processos (Li et al., 2025; Zhu et al., 2025).

2.2.1 POTENCIAL E CLASSIFICAÇÃO

Até 2024, aproximadamente 95% do hidrogênio produzido no mundo era proveniente da reforma do gás natural, que consiste em um processo de obtenção do H₂ a partir do metano (CH₄). Isso se deve principalmente à eficiência energética que se obtém a partir desse processo, que varia de 74% a 85%, com um consumo energético de cerca de 2 kWh/Nm³ de H₂. Embora a eletrólise, especialmente com tecnologias mais avançadas, possa atingir eficiências de até

75%, seu consumo energético é significativamente maior (cerca de 4 kWh/Nm³) (Komarov et al., 2021).

Entretanto, há de se considerar que o uso de combustíveis fósseis para a obtenção do hidrogênio gera emissões de carbono. Uma maneira de atenuar tais emissões é por meio de sistemas de captura e utilização de carbono (CCUS) ou métodos como a eletrólise da água com uso de energia renovável, que elimina a necessidade de combustíveis fósseis e torna a produção mais sustentável.

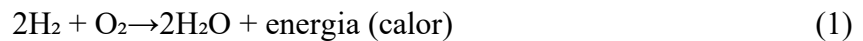
Esses diferentes processos de obtenção do H₂ levaram à sua classificação em cores, que permitem identificar os níveis de sustentabilidade associados a esses processos. O mais comum é o hidrogênio cinza, derivado de fontes fósseis como o metano, carvão, petróleo e biomassa e que emite grandes quantidades de CO₂. O hidrogênio azul também vem de origem fóssil, porém utiliza de tecnologias de captura de carbono para mitigar emissões. A opção mais limpa é o hidrogênio verde, obtido a partir de fontes renováveis, como solar e eólica, que é o mais sustentável por não gerar gases de efeito estufa em sua produção. A Tabela 2.2 sintetiza as possibilidades de cores atribuídas ao H₂ associadas ao seu método de produção, nível de impacto ambiental e eficiência energética.

Tabela 2.2 – Classificação do H₂ em cores e características associadas (De Blasio, 2024)

Cor	Método de obtenção	Emissão de carbono (tCO ₂ /tH ₂)
Verde	Eletrólise da água utilizando fontes renováveis (solar, eólica, hídrica etc.)	0
Amarelo	Eletrólise da água utilizando exclusivamente energia solar	0
Rosa/roxo/ vermelho	Eletrólise da água utilizando energia nuclear	0
Branco	Gerado por processos geológicos e extraído diretamente do subsolo, sem etapa industrial de produção	0
Azul	Reforma do gás natural com captura e armazenamento de carbono	1 – 4
Cinza	Reforma do gás natural sem captura de carbono	10 – 19
Preto	Gaseificação de carvão betuminoso	≈19
Marrom	Gaseificação de carvão linhito	≈19
Turquesa	Pirólise do metano, gerando hidrogênio + carbono sólido (em desenvolvimento)	<i>Não consolidado</i>
Laranja	Processos emergentes utilizando resíduos plásticos (pirólise, micro-ondas, foto-reforming etc.)	<i>Não consolidado</i>

Após produzida a molécula de H₂, é possível obter energia em forma de calor por meio da sua combustão. Esse processo gera apenas vapor de água como subproduto, sem emissão de CO₂. No entanto, devido às altas temperaturas e a presença do ar como comburente, há o risco

de formação de óxido de nitrogênio (NO_x), um poluente nocivo. A reação global é definida por:



Uma alternativa mais cara, porém, mais segura em relação à combustão simples do H₂ é o uso de células de combustível, que possibilitam a conversão do hidrogênio diretamente em eletricidade gerando menos calor e conseqüentemente temperaturas mais baixas, evitando a formação de NO_x (Livshits et al., 2006).

Quanto à eficiência energética as células a combustível geralmente operam com eficiências de 50 – 60%, em comparação com 20 – 25% dos motores de combustão interna, devido à conversão eletroquímica direta do hidrogênio em eletricidade, que evita as perdas de energia associadas à combustão (Livshits et al., 2006). Veículos de células de combustível por exemplo, podem ser quase duas vezes mais eficientes do que veículos de combustão interna de H₂ (Durkin et al., 2024).

Em resumo, a obtenção de energia a partir do hidrogênio pode ser substancialmente menos nociva ao meio ambiente do que o uso de fontes fósseis, independente do modelo de geração de energia adotado. No entanto, para avaliar a viabilidade do hidrogênio como vetor energético, é necessário considerar também o seu potencial calorífico, que representa a quantidade de energia liberada por quantidade do gás. Nesse sentido, em comparação a outros combustíveis, o H₂ se destaca como uma fonte com elevado potencial em termos de massa, como mostra a Tabela 2.3.

Tabela 2.3 – Comparação do potencial calorífico de diferentes fontes de energia (World Nuclear Association, 2025)

Combustível	Valor calorífico (MJ/kg)
Hidrogênio	120 – 142
Metano	50 – 55
Gás Natural	42 – 55
Gasolina, Diesel e	42 – 47
Dimetil Éter	29
Metanol	22,7
Carvão	10 – 25
Madeira	16

É importante ressaltar que, embora o hidrogênio apresente um alto teor de energia por unidade de massa, sua densidade energética volumétrica é muito baixa – na forma gasosa sob pressão de 35 MPa o H₂ tem cerca de 2 a 5 MJ/L. Para colocar em perspectiva: o metano possui densidade energética volumétrica da ordem de 10 MJ/L a 25 MPa, e combustíveis líquidos

como gasolina ou diesel alcançam ordens de magnitude superiores (32 a 38 MJ/L) (EUA, 2025). Por essa razão, para usar hidrogênio de modo prático é imprescindível que ele seja comprimido, para aumentar sua densidade energética e viabilizar um armazenamento e transporte com requisitos de volume compatíveis aos combustíveis tradicionais.

2.2.2 ARMAZENAMENTO SUBTERRÂNEO DE H₂ (ASH)

A estocagem de H₂ em larga escala exige que o armazenamento seja realizado com o gás comprimido em estruturas como aquíferos, cavernas de sal, cavernas em rochas e reservatórios maduros de óleo e gás (Sadkhan et al., 2024). As principais vantagens e limitações de cada tipo de reservatório são:

Cavernas de sal: formações artificiais, construídas por meio de injeções de água em depósitos salinos. Nessas formações, os aspectos mais importantes que controlam a viabilidade da estocagem de H₂ são: profundidade e espessura do depósito, composição e distribuição das rochas do reservatório e solubilidade da rocha. Em geral, as cavernas de sal tendem a apresentar menos reações com o H₂, o que preserva a pureza do gás, quando comparado a aquíferos e depósitos maduros. Em contrapartida, são estruturas que apresentam menor capacidade de ASH e costumam necessitar de maior investimento (Sadkhan et al., 2024). Os custos para o armazenamento nesse tipo de formação são estimados em USD 1,61/kg de H₂ e a capacidade armazenável de energia gira em torno de 100 a 250 GWh (Hydrogen TCP-Task 42, 2025; Tarkowski, 2019).

Cavernas em Rochas Revestidas: câmaras subterrâneas escavadas em rochas duras, com revestimento especial para garantir armazenamento seguro e sem vazamentos. Suas vantagens incluem maior controle das velocidades de injeção e extração do gás, versatilidade na localização, facilidade de monitoramento e manutenção da qualidade do gás. No entanto, apresentam desafios como alto custo inicial – até USD 2,77/kg de H₂ (Tarkowski, 2019) – possível degradação de vedação e equipamentos ao longo do tempo e a pouca experiência da indústria com essa tecnologia (Masoudi et al., 2024). Além disso, em termos de capacidade armazenável, essa estrutura é a menor opção, com potencial de geração de energia de 10 a 30 GWh (Hydrogen TCP-Task 42, 2025).

Reservatórios maduros: formações geológicas onde hidrocarbonetos se acumulam em rochas porosas, seladas por camadas de baixa permeabilidade. Já explorados para petróleo e gás, possuem infraestrutura adequada para ASH e uma estrutura bem conhecida. A presença

natural de gás ajuda a manter a pressão mínima, otimizando a injeção de H₂. No entanto, podem apresentar maior reatividade química devido a hidrocarbonetos remanescentes, especialmente em depósitos maduros de óleo. O custo estimado para armazenamento nesse tipo de reservatório é de USD 1,23/kg de H₂, enquanto a capacidade energética armazenada varia de 100 a 20.000 GWh, similar aos aquíferos (Tarkowski, 2019; Hydrogen TCP-Task 42, 2025).

Aquíferos rochosos: formações geológicas que armazenam água em rochas porosas, geralmente arenitos. Em comparação aos reservatórios maduros, exigem maior investimento em infraestrutura e estudos geológicos para o armazenamento de H₂. Assim como nos reservatórios maduros, é essencial uma rocha porosa para estocagem e uma camada selante de menor permeabilidade para evitar vazamentos. O custo estimado é de USD 1,29/kg de H₂ e a capacidade energética pode variar de 100 a 20.000 GWh (Tarkowski, 2019; Hydrogen TCP-Task 42, 2025).

A Figura 2.3 apresenta os diferentes tipos de reservatórios geológicos, indicando suas profundidades típicas e a capacidade energética associada a cada tipo.

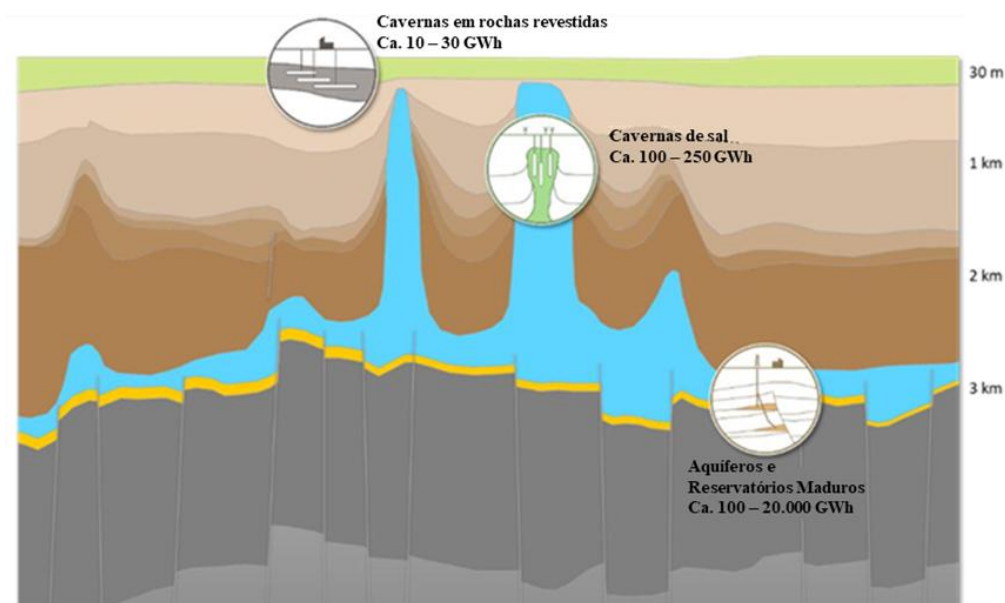


Figura 2.3 – Desenho esquemático do ASH em diferentes tipos de reservatórios geológicos (adaptado de Hydrogen TCP-Task 42, 2025).

2.2.2.1 LEGISLAÇÃO E BOAS PRÁTICAS

É notória a evolução da regulamentação quanto às diretrizes para produção e armazenamento de H₂ em larga escala e desenvolvimento da indústria ao redor do mundo. No entanto, não há atualmente exemplos concretos de legislações que tratam especificamente do

ASH e de seus aspectos técnicos, aspectos sociais, segurança, projeto, instalações, questões operacionais e ambientais, entre outros (Jafari Raad et al., 2022; Bade et al., 2024; Taiwo et al., 2024). Não há, portanto, um arcabouço legal no Brasil e no mundo que oriente o desenvolvimento desse tipo de solução de maneira disseminada, tampouco experiências suficientes para a determinação de um consenso quanto às melhores práticas a serem adotadas.

Conforme mostra o relatório da Hydrogen TCP-Task 42 (2025), as boas práticas para o ASH derivam em grande parte da experiência com o armazenamento de gás natural (ASG) e a exploração de hidrocarbonetos, abrangendo desde a seleção de locais até o projeto e o desenvolvimento do campo. No entanto, embora muitos princípios de engenharia sejam transferíveis, o H₂ exige materiais mais resistentes e compatíveis com sua natureza reativa, por exemplo.

Nos Estados Unidos, a PHMSA (Administração de Segurança de Materiais Perigosos e Tubulações) possui autoridade exclusiva sobre instalações de armazenamento conectadas a dutos interestaduais de gás ou petróleo e, desde 2020, aplica suas normas de segurança também a instalações subterrâneas em nível estadual. Embora essas normas tenham sido elaboradas para o armazenamento de gás natural, é possível que venham a ser aplicadas ao hidrogênio em instalações ligadas a gasodutos, já que ambas utilizam a mesma base legal (K & L Gates, 2020).

Na Alemanha, o planejamento e as avaliações para o ASH estão fortemente baseados na experiência e nos dados da operação de reservatórios de hidrocarbonetos e instalações de armazenamento de gás natural e CO₂ (Alms et al., 2023). Essa é uma tendência que se estabeleceu nos países que buscam explorar o ASH nos próximos anos, como é o caso de China, Canadá, Reino Unido, Austrália, Noruega e outros (Lysy et al., 2021; Wallace et al., 2021; Alms et al., 2023; Amirthan et al., 2023).

Do ponto de vista geotécnico e de boas práticas, as rochas que compõem depósitos maduros possuem características específicas que precisam ser consideradas para garantir um armazenamento seguro e eficiente. A exemplo disso, é crucial assegurar a estanqueidade das rochas capeadora e de fundo, evitando vazamentos (Pfeiffer et al., 2017). Ademais, o potencial de migração do H₂ nas regiões de fratura da rocha pode representar um problema a depender das taxas de injeção adotadas e dos parâmetros de resistência da rocha

Segundo Muhammed et al. (2023), reservatórios maduros precisam atender requisitos básicos para o armazenamento de gases, como: (i) uma formação porosa e permeável para alojar o gás (como arenitos), (ii) uma camada selante eficiente para impedir a migração vertical induzida pela flutuabilidade (formada por sal, argilas, folhelhos, siltitos ou carbonatos densos), e (iii) uma configuração estrutural que limite o fluxo lateral do gás, sendo preferenciais as

estruturas anticlinais de geometria íngreme.

Heinemann et al. (2021) destacam que, no planejamento do ASH em aquíferos, é fundamental considerar o gás colchão como investimento inicial essencial para manter a pressão operacional, assegurar a produção e prevenir o influxo de água, sendo a sua quantidade dependente de parâmetros geológicos. Ressalta-se também a importância da caracterização detalhada do reservatório, privilegiando maior profundidade, alta permeabilidade, forma anticlinal do reservatório e heterogeneidade, fatores que afetam injetividade, produtividade e dissipação de pressão. A gestão operacional deve incluir controle de pressões, monitorização da água produzida e planejamento de múltiplos ciclos, já que ciclos subsequentes demandam menos gás colchão e geram menor produção de água.

2.2.2.2 EXPERIÊNCIA NO MUNDO

Não obstante a ausência de regulamentação específica para o ASH, a experiência mundial com esses sistemas ainda é bastante limitada (Navaid et al., 2023; Réveillère et al., 2024). Em um panorama mais recente e voltado especificamente ao armazenamento de hidrogênio, o Hydrogen Technology Collaboration Programme divulgou uma lista com os projetos de ASH existentes e em fase de desenvolvimento. No total, são 45 projetos identificados, sendo 5 nos Estados Unidos, 1 na Argentina, 1 na Austrália e 38 na Europa. A Tabela 2.4 apresenta um compilado dos principais projetos de ASH no mundo, abrangendo desde testes piloto e projetos em desenvolvimento até casos históricos em operação há décadas, como a caverna salina de Teesside, no Reino Unido.

Tabela 2.4 – Recorte atual dos projetos de ASH no mundo (Hydrogen TCP-Task 42, 2025)

Nº	Projeto	País	Estrutura
1	Advanced Clean Energy Storage (ACES)	EUA	Caverna de sal
2	Entergy Salt Cavern	EUA	Caverna de sal
3	US Clemens Dome	EUA	Caverna de sal
4	Moss Bluff	EUA	Caverna de sal
5	Spindle Top	EUA	Caverna de sal
6	Teesside	Reino Unido	Caverna de sal
7	Aldbrough	Reino Unido	Caverna de sal
8	HyNet NW Keuper	Reino Unido	Caverna de sal
9	HySecure	Reino Unido	Caverna de sal
10	HyGeo and HySow	França	Caverna de sal
11	H ₂ Storage North 1	França	Caverna de sal
12	H ₂ Storage North 2	França	Caverna de sal
13	Carrico	Portugal	Caverna de sal

N°	Projeto	País	Estrutura
14	Cerville (Emil'Hy)	França	Caverna de sal
15	HyPSTER	França	Caverna de sal
16	HyGreen Provence	França	Caverna de sal
17	GeoH ₂	França	Caverna de sal
18	Green Hydrogen Hub Denmark	Dinamarca	Caverna de sal
19	WestKuste 100	Alemanha	Caverna de sal
20	Kiel	Alemanha	Caverna de sal
21	SaltHy	Alemanha	Caverna de sal
22	H ₂ CAST	Alemanha	Caverna de sal
23	Krummhorn	Alemanha	Caverna de sal
24	HyStock	Países Baixos	Caverna de sal
25	Astora H ₂ Jemgum	Alemanha	Caverna de sal
26	Get H ₂ Nukleus	Alemanha	Caverna de sal
27	H ₂ Storage Xanten	Alemanha	Caverna de sal
28	H ₂ Storage Stassfurt	Alemanha	Caverna de sal
29	Bad Lauchstädt	Alemanha	Caverna de sal
30	HyCAVmobil	Alemanha	Caverna de sal
31	UGS Damastawlk	Polônia	Caverna de sal
32	HyChico	Argentina	Reservatório de gás
33	H ₂ RESTORE	Austrália	Reservatório de gás
34	Angus+	Reino Unido	Reservatório de gás
35	Rough	Reino Unido	Reservatório de gás
36	Green Hydrogen @ Kinsale	Irlanda	Reservatório de gás
37	Loenhout Hydrogen	Bélgica	Reservatório de gás
38	Hystorage	Áustria	Reservatório de gás
39	Underground Sun Storage	Alemanha	Reservatório de gás
40	North Adriatic Hydrogen Valley	Itália	Reservatório de gás
41	UGS Velke Kapusany	Romênia	Reservatório de gás
42	Aquamarine	Hungria	Reservatório de gás
43	Undergy	Espanha	Caverna revestida
44	HyBrit	Suécia	Caverna revestida
45	GEO Gaz H ₂	França	Caverna revestida

Apesar de serem frequentemente utilizados para o armazenamento de gás natural, os reservatórios maduros de gás e principalmente os de óleo, ainda não são amplamente utilizados para armazenamento de H₂. As experiências atuais se restringem principalmente a projetos pilotos, como o projeto pioneiro “Sun Storage” realizado entre 2013 e 2017, em um campo maduro de gás de Lehen, na Áustria (Figura 2.4). Nesse estudo, a integridade do armazenamento foi comprovada e o teste de campo resultou em recuperação de 82% do hidrogênio injetado, com as perdas restantes (18%) atribuídas à difusão, solubilidade e perdas por reações microbianas (RAG, 2020; Abdellatif et al., 2025).

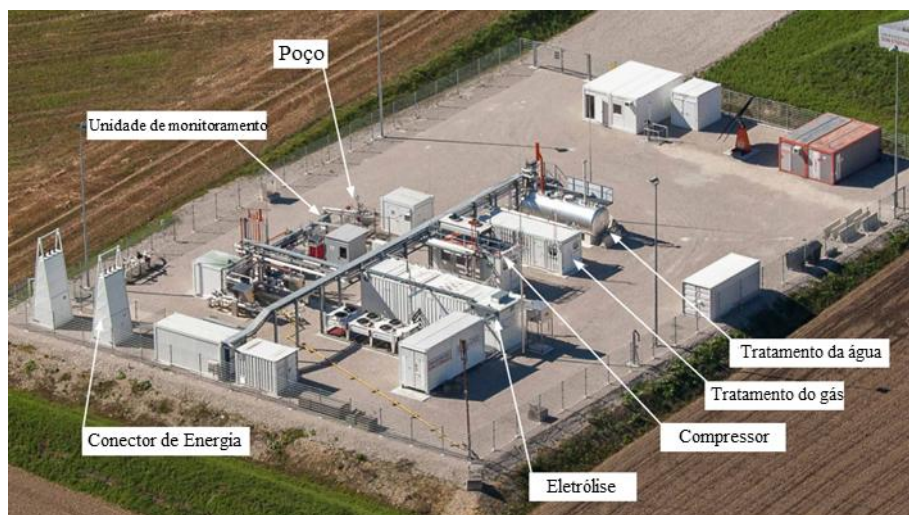


Figura 2.4 – Planta do projeto piloto “Sun Storage” (modificado de RAG, 2020)

Atualmente, outros projetos estão em curso com previsão de execução de ciclos de injeção e produção em campos maduros de gás, como é o caso do projeto HyStorage, na Alemanha. Nesse projeto, a primeira fase de testes foi concluída com sucesso, envolvendo a injeção de hidrogênio em rochas porosas profundas e sua posterior extração. Segundo a Uniper (uma das responsáveis pelo projeto de pesquisa), os resultados indicaram uma taxa de recuperação próxima a 90%, demonstrando a viabilidade técnica e eficiência do armazenamento.

Um projeto piloto de destaque é o Projeto Eólico-Hidrogênio da, liderado pela Hychico S.A., que busca produzir hidrogênio verde em larga escala na Patagônia argentina, aproveitando seu elevado potencial eólico (Pérez et al., 2016). O projeto conta com um sistema de ASH instalado em um reservatório maduro de gás na Bacia do Golfo de San Jorge, considerado uma alternativa viável para o armazenamento de energia em grandes proporções.

Em decorrência das condições favoráveis observadas nesse reservatório, a Hychico, em parceria com o Serviço Geológico Francês, passou a desenvolver um projeto piloto de metanação, que investiga o uso de processos biológicos (metanogênese) para converter hidrogênio e dióxido de carbono em metano sintético (SNG), conforme a reação:



O metano resultante apresenta propriedades equivalentes às do gás natural convencional, podendo ser integrado diretamente às redes de distribuição existentes.

Desde 2008, o projeto Hychico, na Patagônia argentina, produz cerca de 52 t/ano de hidrogênio a partir de energia eólica, utilizando parte do gás para geração elétrica e armazenando o excedente em uma instalação subterrânea dedicada – o primeiro sistema de ASH

da América Latina (IEA, 2021).

2.3 ASH EM RESERVATÓRIOS MADUROS

Os reservatórios maduros são estruturas geológicas que, ao longo de sua formação, contiveram quantidades armazenadas de hidrocarbonetos remanescentes da decomposição da matéria orgânica e cujo processo de produção já se encontra no fim. Essa característica permitiu que tais estruturas pudessem ser exploradas pela atividade minerária com o principal intuito de produzir matéria prima para o setor petrolífero. Essa prática se deu a partir do século XIX e continua até hoje como uma das principais atividades econômicas no mundo (Boyce et al., 2011; Craig et al., 2018).

No entanto, por se tratar de um sistema não renovável, a exploração de petróleo pode implicar na redução expressiva ou até esgotamento da fonte fóssil, limitando o uso dos reservatórios de óleo e gás. É nesse contexto que surge a possibilidade de se utilizar o volume remanescente dos depósitos maduros para armazenamento de gases como CO₂, metano, gás natural e H₂. Até 2018, por exemplo, dos 662 campos de armazenamento de gás natural, 73,4% estavam localizados em reservatórios maduros (Tarkowski et al., 2021), o que evidencia a importância desses reservatórios mesmo após sua exploração.

2.3.1 CONTEXTO BRASILEIRO E CAMPO DE NAMORADO

Estudos de Ciotta et al. (2023) indicam que os reservatórios maduros de gás offshore no Brasil possuem uma capacidade de armazenamento de aproximadamente 5483 TWh de hidrogênio, o que equivale a cerca de dez vezes o consumo de eletricidade do país em 2021. Assim, o uso desses reservatórios pode representar uma alternativa economicamente viável, aproveitando a infraestrutura geológica existente e as estruturas prévias de exploração. Embora os custos iniciais de adaptação e testes sejam altos, o reaproveitamento de reservatórios maduros pode minimizar investimentos em novas infraestruturas.

Ademais, o Brasil, por ser um grande produtor de petróleo, conta com diversos reservatórios maduros de óleo que apresentam potencial para serem utilizados como estruturas de armazenamento de hidrogênio. Esse potencial se deve, em grande parte, à ampla disponibilidade de informações sobre essas formações, fornecidas por grupos de pesquisa, agências reguladoras e empresas do setor.

Um exemplo interessante é o Campo de Namorado, localizado a cerca de 80 km da costa

do Rio de Janeiro, com uma área de aproximadamente 20 km² na porção central-norte da Bacia de Campos, entre as latitudes 21° e 23° S e lâminas d'água de 140 a 250 m. A bacia é delimitada pelos altos de Cabo Frio (ao sul) e Vitória (ao norte). Descoberto em 1975 pelo poço 1-RJS-19, perfurado em 166 m de lâmina d'água, o campo marcou um marco histórico por ser o primeiro a produzir óleo em arenitos turbidíticos da Bacia de Campos, originalmente prospectados como carbonatos da Formação Macaé.

Os reservatórios encontram-se entre 2.940 e 3.300 m de profundidade, com 150 a 200 m de espessura total. O campo possui cerca de 106×10⁶ m³ de óleo provado e 42×10⁶ m³ recuperável (fator de recuperação de 40%). Esse reservatório se destaca por sua estrutura arenítica com excelentes características petrofísicas apresentando porosidade média de 26% e permeabilidade média de 400 mD (Barboza et al., 2005).

O grupo de pesquisa UNISIM, vinculado à UNICAMP com apoio do CEPETRO, especializa-se em simulação e gerenciamento de reservatórios, disponibilizando bancos de dados como o UNISIM-I-D baseado no Campo de Namorado para estudos de estratégias de exploração. Suas pesquisas englobam desde o desenvolvimento de metodologias de acoplamento hidromecânico, como demonstrado no trabalho de Albuquerque et al. (2014) que utilizou simuladores IMEX e ECLIPSE, até investigações sobre a influência da perda de carga em campos de óleo pesado conforme estudo de Bento (2010). O grupo mantém cooperação com a Petrobras na aplicação de fluxos de trabalho de simulação hidromecânica em modelos do Campo de Namorado, visando otimizar análises em reservatórios reais de hidrocarbonetos.

2.3.2 OPERAÇÃO

A operação de ASH em reservatórios maduros pode ser resumida em 3 etapas principais: injeção do gás colchão, injeção de hidrogênio e produção. Para que o armazenamento seja eficiente, é necessário considerar as particularidades de cada etapa, já que os padrões operacionais muitas vezes são definidos com base nas especificidades de cada caso. Em reservatórios maduros de gás, por exemplo, a etapa de injeção de gás colchão pode ser reduzida ou até eliminada.

Para entender como as características operacionais impactam no ASH, Okere et al. (2024) analisaram a influência das dimensões de um reservatório retangular sintético e das taxas de injeção e produção no Fator de Recuperação de H₂. O estudo mostrou que a geometria do reservatório impacta a eficiência, mas fatores como pressão têm influência ainda maior.

Quando a pressão de injeção é muito elevada e a pressão de produção é muito baixa, ou

seja, quando há uma grande diferença entre essas pressões, observa-se um maior acúmulo de H_2 no reservatório. No entanto, essa mesma condição reduz a taxa de recuperação, pois uma parcela menor do gás consegue retornar durante a produção. Reduzir a diferença de pressão em 50% melhorou a eficiência, embora metade da capacidade do reservatório tenha permanecido não utilizada.

Outro estudo que aborda o impacto dos parâmetros operacionais na capacidade de armazenamento de H_2 foi realizado por Wang et al. (2024). Nesse estudo, foi modelado o processo de estocagem e produção em um reservatório de gás fictício, com auxílio do software Petrel para a modelagem do reservatório e representação das fraturas e utilizando o modelo Black Oil para simulação de fluxo. Como principais resultados, o autor aponta que quanto maior a vazão de injeção, a eficiência do armazenamento reduz em razão do aumento da migração do H_2 através das fraturas.

Apesar disso, uma vazão alta de injeção faz com que a poropressão aumente, o que pode facilitar os estágios iniciais de produção, já que o reservatório passa a armazenar mais energia. Ainda, períodos menores de injeção tendem a aumentar a eficiência na produção, enquanto o tempo de fechamento influencia pouco nesse aspecto quando comparado às outras variáveis estudadas, uma vez que a migração de H_2 é limitada por conta da presença de água e forças capilares no caso de aquíferos Wang et al. (2024).

Já o estudo numérico realizado por Lysy et al. (2021) explorou o armazenamento sazonal de hidrogênio em um reservatório de hidrocarbonetos offshore, na costa da Noruega. O estudo considerou múltiplos ciclos de injeção e extração, envolvendo diferentes zonas do reservatório – gasosa, oleosa e aquífera – e evidenciou maior eficiência na zona inicialmente saturada por gás, que alcançou o maior fator de recuperação final (87%). A zona de água foi a menos recomendada devido ao baixo fator de recuperação final (49%), impactada pela produção de água e acúmulo de gás horizontalmente na parte superior da formação. A zona de óleo apresentou um fator de recuperação intermediário (77%).

Em reservatórios maduros, também é fundamental considerar os efeitos dos fluidos previamente existentes em uma operação de ASH. O óleo e o gás remanescentes do processo de exploração dessas estruturas podem interagir positiva e negativamente no processo e seus efeitos no ASH são objeto de diversos estudos (Heinemann et al., 2021; Kanaani et al., 2022; Rhouma et al., 2024; Saeed et al., 2024b; Hu et al., 2024.; Doan et al., 2025). Além disso, em termos de modelagem, as características desses componentes impacta diretamente a forma como o H_2 interage com o reservatório. Isso porque diferentes fluidos podem possuir diferentes

compressibilidades, viscosidades, densidades e diferentes reatividades com o H₂ e com as rochas do reservatório, por exemplo.

2.3.2.1 GÁS COLCHÃO

Como parte do sistema de injeção de hidrogênio em subsuperfície, o gás colchão é um componente fundamental para a manutenção da pressão no reservatório nos períodos de injeção e produção (Tarkowski, 2019; Lysyy et al., 2021). Funciona também como uma barreira à entrada de água e pode ajudar a reduzir o contraste extremamente acentuado de densidade entre o H₂ e a água da formação (Kanaani et al., 2022; Navaid et al., 2023). Este componente representa um dos principais custos em um projeto de armazenamento de gás, e nesse sentido, uma alternativa interessante é a utilização de gases de obtenção barata, como CO₂, CH₄ e N₂ (Pfeiffer et al., 2017).

Em particular os reservatórios maduros de gás, o gás remanescente pode ser aproveitado como colchão em muitos casos. Comparativamente, em geral, os reservatórios maduros de gás requerem 50% a 60% da capacidade total do reservatório de gás colchão, enquanto os aquíferos requerem 80% do volume total composto por gás colchão (Lord et al., 2014; Wallace et al., 2021). Embora o gás colchão proporcione vantagens operacionais para o ASH, também há de se considerar que ele afeta diretamente a pureza do gás produzido, um vez que ele se mistura, em parte, com o gás de trabalho (Kanaani et al., 2022).

Saeed et al. (2024b) investigaram o impacto do tipo de gás colchão no desempenho do ASH em um aquífero, utilizando o software CMG-GEM. Na análise comparativa, o CO₂ como gás colchão proporciona maior volume de H₂ armazenável, uma vez que pode levar à dissolução de minerais como feldspato e calcita na rocha do reservatório, levando a aumento da porosidade e permeabilidade da rocha. O uso de CH₄ e N₂ geraram melhores purezas e vazões de recuperação por apresentarem menor contraste de densidade com o H₂. O estudo identificou ainda que o uso de gás colchão pode aumentar em até 7% a taxa de recuperação de H₂.

Kanaani et al. (2022) investigou, por meio de simulações numéricas em um modelo de reservatório maduro de óleo, o desempenho ASH sob diferentes condições de gás colchão. A metodologia comparou um modelo base sem gás colchão com cenários que utilizaram diferentes gases colchão (CH₄, N₂ e CO₂), incluindo um ciclo inicial de injeção do gás antes dos ciclos de hidrogênio para analisar seus efeitos na pressurização e no deslocamento dos fluidos residentes.

Os resultados da pesquisa demonstraram que o gás colchão é crucial para a eficiência do ASH, pois eleva a pressão do reservatório e mitiga a segregação gravitacional do hidrogênio. O metano (CH₄) obteve o melhor desempenho, com uma recuperação de hidrogênio de 89,7%, que se deve principalmente ao seu menor peso molecular em comparação aos demais gases. O estudo também verificou que maiores volumes e vazões de injeção do gás colchão melhoram a recuperação, mas identificou como desvantagem a contaminação do hidrogênio produzido, exigindo etapas adicionais de purificação.

2.3.3 PROPRIEDADES INTRÍNSECAS (K e ϕ)

As propriedades intrínsecas do meio poroso são características fundamentais que determinam a resposta hidráulica e mecânica de um reservatório sujeito a variações de pressão, especialmente em sistemas de ASH. A porosidade e a permeabilidade são parâmetros fundamentais, pois dizem respeito à capacidade de armazenamento e a mobilidade dos fluidos na rocha.

A porosidade (ϕ) é a fração do volume total de uma rocha ocupada por espaços vazios (poros) e pode ser expressa pela equação:

$$\phi = \frac{V_p}{V_t} \quad (3)$$

Onde V_p é o volume de poros e V_t é o volume total do elemento.

A permeabilidade absoluta é uma medida geométrica intrínseca geralmente dada em m² ou mD, que se refere à capacidade do meio de permitir o escoamento de um fluido através de sua rede de poros interconectados.

A combinação entre porosidade e permeabilidade é determinante para a eficiência de estocagem e de operação em sistemas de ASH. Uma porosidade adequada assegura volume útil suficiente para o armazenamento, enquanto uma permeabilidade moderada a elevada permite vazões de injeção e produção viáveis, sem que sejam atingidos limites de pressão capazes de comprometer a integridade da rocha.

Embora altos valores de porosidade e permeabilidade sejam geralmente favoráveis ao ASH, essas condições podem representar desafios operacionais. A maior mobilidade dos fluidos tende a intensificar os efeitos viscosos e a segregação gravitacional, o que aumenta a fração de gás não recuperável. Assim, é essencial que os valores de porosidade e permeabilidade se mantenham dentro de faixas que atendam aos limites de pressão do reservatório, sem

promover mobilidade excessiva do gás.

Diversos estudos na literatura discutem as características de permeabilidade e porosidade de meios porosos potenciais para o armazenamento subterrâneo de hidrogênio e outros gases como CO₂ e gás natural. A Tabela 2.5 reúne valores observados em diferentes tipos de reservatórios geológicos descritos em trabalhos de referência.

Tabela 2.5 – Coeficientes de Difusão molecular para H₂ sob temperatura de 50 °C

Litologia / Local	Porosidade	Permeabilidade (mD)	Referência
Arenito de Gosford	0,18	-	Jha et al. (2021)
Arenito de Fontainebleau	0,1	190	Al-Yaseri et al. (2022)
Arenito de Vosges	0,19	44	Yekta et al. (2018)
Arenito	0,16	34	Rezaei et al. (2022)
Arenito de Berea	0,2	203	Boon et al. (2022)
Arenito de Berea	0,18	107	Lysy et al. (2022)
Arenito de Berea	0,23	804	Li (2010)
Arenito de Berea	0,21	300	Christoffersen et al. (1995)
Arenito de Clashach	0,13–0,14	-	Thaysen et al. (2021)
Arenito de Bentheimer	0,23	2900	Jangda et al. (2023)
Arenito de Bentheimer	0,23	653	Higgs et al. (2024)
Carbonato Majiagou	0,02 - 0,19		Zeng et al. (2022)
Carbonato	0,13	33	Rezaei et al. (2022)
Carbonato Wolonghe	0,16	420	Xie et al. (2025)

Uma maneira comum de relacionar essas duas grandezas em meios porosos é usando a função de Kozeny-Carman, expressa pela equação:

$$K = \frac{\phi^3}{S^2 c (1-\phi)^2} \quad (4)$$

Nessa formulação, S representa a área superficial total dos grãos por unidade de volume de sólidos e c é um fator de forma dos grãos (tipicamente 5 para meios porosos com grãos arredondados).

2.4 PROBLEMAS DE FLUXO NO ASH

Quando observamos o comportamento do fluxo em um meio multifásico composicional, existem diversos mecanismos que podem ser originados pela interação entre fluidos e o ambiente. Simular esses mecanismos é fundamental para compreender como os fluidos se movem no interior do reservatório e como otimizar a operação de ASH a partir disso. Nesse sentido, é importante conhecer como ocorrem os processos de aprisionamento, segregação

gravitacional, formação de dedos viscosos, histerese de permeabilidade relativa, difusão e dispersão dos fluidos e o consumo de H_2 por reações microbianas, por exemplo.

Aprisionamento: Para que o gás seja armazenado, na fase de migração do H_2 , é necessário que haja o aprisionamento do gás por meio de armadilhas estruturais e estratigráficas (rocha capeadora, anticlinais, falhas impermeáveis etc.). No entanto, Muhammed et al. (2023) descrevem os seguintes processos de aprisionamento, que são indesejáveis por resultarem em possível perda permanente do hidrogênio a ser recuperado:

- **Aprisionamento residual ou capilar:** baseado na molhabilidade do meio poroso, ocorre quando bolhas e gânglios de gás injetado permanecem aprisionados de forma irreversível após a passagem do fluido nativo.
- **Aprisionamento por dissolução:** em que o gás se dissolve no fluido da formação (como a água ou óleo), tornando-se parte de uma fase líquida mais densa e estável.
- **Aprisionamento mineral:** o mais duradouro, envolve a reação do gás dissolvido com minerais da rocha hospedeira, formando precipitados sólidos estáveis ao longo de escalas de tempo geológicas.

Segregação gravitacional (gravity override): Em razão de sua baixa densidade, o gás hidrogênio tende a se deslocar de maneira instável na porção superior de reservatórios geológicos que contenham outros fluidos mais densos. Esse comportamento pode representar um problema no caso de operações de ASH, dado que o deslocamento do H_2 passa a ser descontrolado no topo do reservatório, afastando a pluma da região de produção e dificultando a extração a longo prazo. A Figura 2.5 apresenta um esquema que exemplifica essa dinâmica.

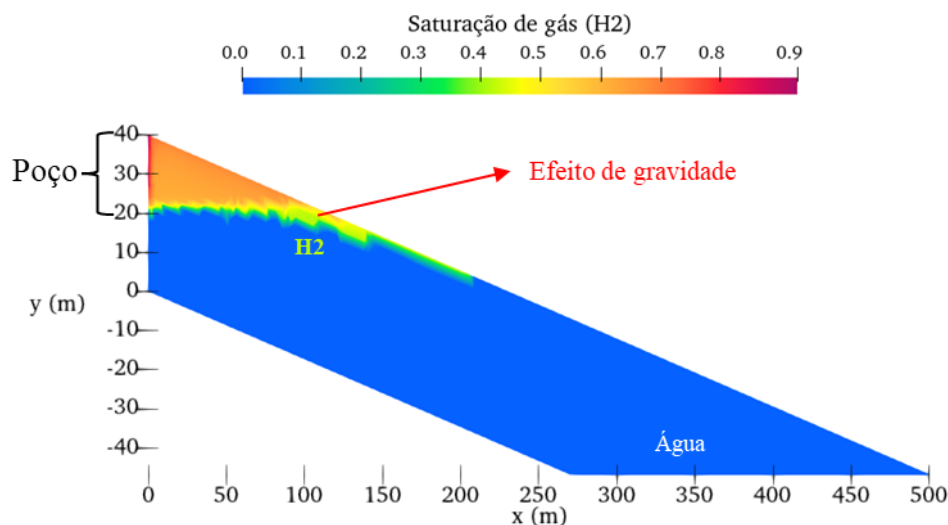


Figura 2.5 – Esquema representativo do efeito da diferença de densidade entre fluidos.

Okoroafor et al. (2022) identificou que reservatórios com mergulho acentuado possibilitam melhor recuperação do hidrogênio, desde que apresentem boa permeabilidade (superior a 100 mD) e o poço de injeção/produção esteja localizado na parte ascendente da estrutura do reservatório. Isso ocorre devido à mitigação do efeito de segregação gravitacional, por manter o fluido mais denso nas zonas inferiores.

Bo et al. (2024) também investigaram o efeito do mergulho da rocha armazenadora na recuperação do H₂, chegando a conclusões similares para um reservatório maduro de gás. Nesse estudo, o gás metano é usado como gás remanescente do reservatório, servindo como gás colchão. A medida em que os ciclos são executados, a produção desse gás torna-se necessária para aumentar a concentração de H₂ armazenado a longo prazo. Em reservatórios mais íngremes (14°), esse efeito mostrou-se mais pronunciado, indicando melhor eficiência do sistema.

Efeito de viscosidade (viscous fingering): Feldmann et al. (2016) utilizaram o DuMu^x para simular operações de ASH focadas nos processos hidrodinâmicos e de mistura de gases. Um resultado interessante desse estudo diz respeito à interação entre fluidos de viscosidades discrepantes como o gás e a água. Em aquíferos, a injeção do H₂ provoca formação de “dedos viscosos”, especialmente quando há heterogeneidades na permeabilidade do meio. Esse efeito pode levar a uma propagação lateral significativa do hidrogênio sob a rocha capeadora, dificultando a produção do gás. A Figura 2.6 apresenta um esquema que exemplifica esse comportamento.

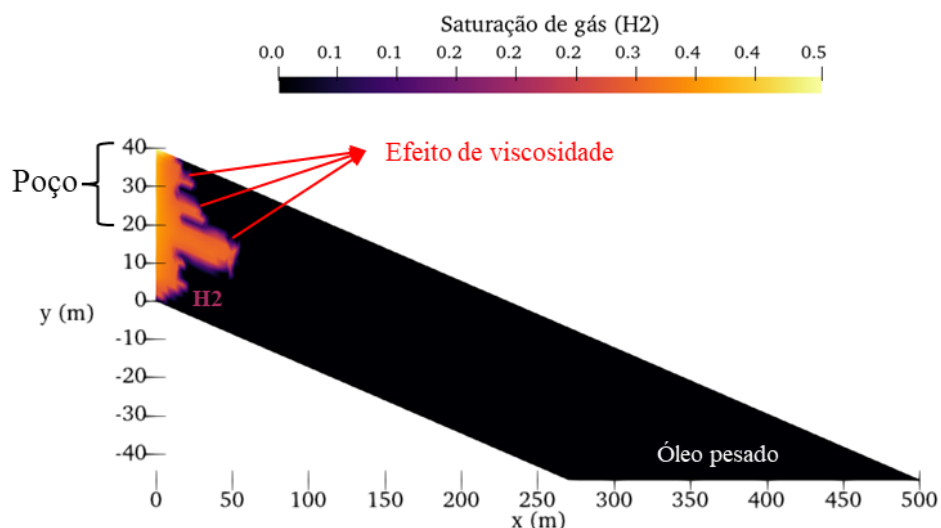


Figura 2.6 – Esquema representativo do efeito da diferença de viscosidade entre fluidos

Difusão e dispersão: Uma particularidade do H₂ que o diferencia dos demais gases encontrados na natureza é o seu alto potencial de difusão, que se deve principalmente ao

tamanho e peso reduzido de suas moléculas. Em virtude disso, um dos problemas que estão relacionados ao ASH é a perda de parte do H₂ por solubilidade e difusão, uma vez que o gás dissolvido dificilmente é recuperado.

Doan et al. (2025) realizaram simulações numéricas para prever o efeito dessa difusão em água e nos gases N₂, CO₂ e CH₄ sob diferentes temperaturas (300–373 K) e pressões (1–50 MPa). Os resultados mostraram que, em CH₄ e N₂, a difusividade do H₂ aumenta com a temperatura e diminui com a pressão, enquanto em água é influenciada apenas pela temperatura. Entre os meios analisados, o H₂ apresentou maior difusão em N₂, intermediária em CH₄ e menor em água. Esses resultados contribuem para o entendimento dos processos de transporte e armazenamento subterrâneo de hidrogênio.

Outro estudo que investiga a perda de H₂ por mecanismos de transporte como a difusão foi conduzido por Feldmann et al. (2016), usando a ferramenta DuMu^x. Como conclusão do estudo, verificou-se que a dispersão, em conjunto com a difusão, intensificam o processo de mistura do gás com os fluidos do reservatório. Isso porque, sob velocidades mais altas, da ordem de metros por dia, como é o caso dessas estruturas, a mistura causada pela dispersão mecânica tende a ser muito mais intensa do que aquela resultante apenas da difusão molecular. Mesmo assim,

Em contraste, Amid et al. (2016) realizaram uma avaliação preliminar da viabilidade do ASH em um reservatório de gás maduro no Reino Unido. A difusão do gás na água presente nos poros da rocha capeadora e no aquífero subjacente foi analisada utilizando o Phreeqc, software de modelagem geoquímica desenvolvido pelo U.S. Geological Survey. Os resultados indicaram que as perdas de hidrogênio por difusão e dissolução são inferiores a 0,1%, demonstrando que esses mecanismos representam impacto mínimo no balanço de massa. Embora o estudo não tenha considerado possíveis vazamentos por falhas ou fraturas, concluiu-se que as perdas físicas associadas à difusão e dissolução são praticamente insignificantes.

Quanto aos reservatórios maduros de óleo, Khanjani et al, (2026) ressaltam que ainda são necessários estudos mais abrangentes sobre a difusividade do hidrogênio para compreender e controlar sua migração subterrânea na presença de óleos com diferentes graus de viscosidade.

Consumo por reações microbianas: Conforme já mencionado, a dissolução significativa de H₂ em água salina ou em óleo resulta em uma perda irreversível do gás armazenado. Ao mesmo tempo, o H₂ dissolvido atua como fonte de energia para microrganismos hidrogenotróficos e como reagente em interações H₂-mineral (Xiong et al., 2025). O estudo de Thaysen et al. (2021) analisou 42 campos maduros de petróleo e gás e cinco locais de teste para injeção de hidrogênio, avaliando parâmetros físico-químicos (temperatura,

pH, pressão, salinidade e nutrientes) e a presença de microrganismos hidrogenotróficos, bactérias redutoras de sulfato e homoacetógenos.

Foram determinadas as condições ótimas de crescimento microbiano e estimado o consumo potencial de H₂ nos reservatórios. Os resultados mostraram que as condições típicas desses ambientes subterrâneos podem favorecer a proliferação microbiana, levando a perdas de 10 a 20% do H₂ armazenado em 7 meses, constituindo um risco relevante para o ASH. As taxas de consumo estimadas são de 0,02 a 1205 nano mols por hora em escala de reservatório.

O trabalho de Wang et al. (2024) utilizou simulações de fluxo acopladas a biorreações para avaliar o impacto da metanogênese (formação de CH₄ a partir do consumo de H₂ e CO₂) no ASH em reservatórios maduros de gás. Sem reação, 30% do H₂ é recuperado sendo 17% com pureza maior que 98%. Com metanogênese, esses valores caem para 26% e 10%, respectivamente, e em cenários de maior taxa de reação o H₂ com alta pureza cai para apenas 4% e a recuperação total para 24%. Além disso, a produção de CH₄ pode alcançar até 25% da fração molar do gás, contaminando o H₂.

Histerese de permeabilidade relativa (HPR): A histerese é definida como a irreversibilidade da permeabilidade relativa dependente do caminho de fluxo. Ela ocorre porque as curvas de permeabilidade relativa diferem entre os processos de drenagem (injeção de H₂) e inundação (retirada de H₂). No ASH, isso resulta no aprisionamento capilar de parte do gás durante a retirada, reduzindo a recuperação total de H₂. Por outro lado, a HPR pode elevar a pureza inicial do gás produzido, já que as bolhas descontínuas de H₂ dificultam a invasão do fluido secundário e mantêm maior concentração de hidrogênio próximo ao poço (Pan et al., 2022, 2023).

Uma maneira usual de determinar a permeabilidade relativa é por meio do ensaio de injeção em amostra de rocha, onde a amostra é saturada por água ou óleo e em seguida é submetida a um fluxo de outro fluido (H₂, por exemplo). Lysy et al. (2022) realizou experimentos dessa natureza em um arenito de Berea, para avaliar a interação entre as fases nas etapas de inundação (INUN), drenagem primária (DP) e drenagem secundária (DS). A sequência experimental foi organizada em três estágios para capturar os efeitos de histerese, conforme mostra a Figura 2.7.

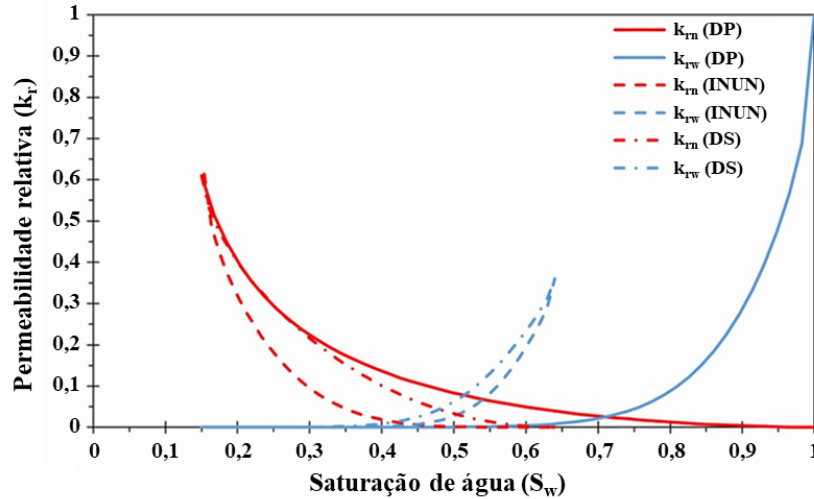


Figura 2.7 – Curvas de permeabilidade relativa mostrando comportamento de histerese (adaptado de Lysy et al., 2022)

Os resultados mostraram baixa permeabilidade relativa do gás ($k_{r,g}$), com valores mínimos de 0,04 na drenagem primária e 0,08 na secundária, enquanto a permeabilidade relativa da água ($k_{r,w}$) atingiu 0,36 como maior valor durante o processo de inundação, associado a uma saturação residual de gás ($S_{r,g}$) de 0,36. Observa-se que a permeabilidade relativa do gás é maior nas fases de drenagem (injeção de H_2), o que indica maior facilidade de escoamento do gás quando este desloca a água presente no meio poroso. Em contrapartida, durante os períodos de produção (inundação), a mobilidade do gás diminui devido à presença da saturação residual, reduzindo sua contribuição ao fluxo e, conseqüentemente, afetando a produtividade do sistema.

Outro estudo que aborda esse fenômeno de interação entre os fluidos e o meio poroso é o de Bo et al. (2023). Nesse trabalho, foram realizadas simulações numéricas de ASH com e sem a consideração da histerese na permeabilidade relativa, utilizando o arenito Berea, caracterizado por permeabilidade de 203 mD e porosidade de 19%. Os autores concluíram que a histerese das fases gás e líquido exerce papel significativo no comportamento do ASH, independentemente da vazão de injeção ou produção. Além disso, verificou-se que desconsiderar a histerese do gás pode gerar incertezas de até 338% na produção cumulativa de hidrogênio, dependendo da intensidade do efeito histerético.

3 PREMISSAS PARA A MODELAGEM NUMÉRICA

Neste capítulo, são abordados os aspectos referentes às formulações necessárias para a simulação dos problemas de fluxo utilizando a ferramenta numérica DuMu^x. Inicialmente, na Seção 3.1, a ferramenta e suas funcionalidades são apresentadas, incorporando aspectos relativos à estrutura essencial dos códigos e às suas vantagens e desvantagens em comparação com outros softwares consagrados para esse tipo de aplicação.

Nas seções seguintes, são mostradas as equações governantes e os modelos constitutivos empregados na modelagem do escoamento multifásico. Na Seção 3.2, apresenta-se uma visão geral das equações que descrevem o problema multifásico em meios porosos. Em seguida, na Seção 3.3, é detalhada a equação de conservação de massa para cada fase fluida, enquanto na Seção 3.4 é apresentada a conservação de momento linear com as equações de Navier–Stokes adaptadas ao regime de escoamento em meios porosos.

A Seção 3.5 trata dos modelos constitutivos necessários para o fechamento matemático do problema, incluindo o modelo de fluxo, as relações de saturação, as propriedades dos fluidos (densidades, compressibilidades e viscosidades) e as correlações de permeabilidade relativa. Posteriormente, a Seção 3.6 discute os mecanismos adicionais de transporte considerados no modelo, com ênfase na difusão do hidrogênio dissolvido na fase líquida.

Na Seção 3.8, descreve-se o esquema Box (Control Volume Finite Element) de discretização, destacando sua formulação e forma de construção dos elementos. Por fim, na Seção 3.7, são trazidos os conceitos das condições de contorno e iniciais, discutindo sua formulação matemática e a função desempenhada dentro do código para a correta representação física do domínio.

3.1 FERRAMENTA NUMÉRICA – DUMU^x

O DuMu^x é uma ferramenta de código aberto projetada para simulação de fluxo e transporte em meios porosos, baseada no Ambiente Numérico Distribuído e Unificado (DUNE) e implementada na linguagem C++ (Bastian et al., 2021; Flemisch et al., 2011.; Koch et al., 2021). O software permite resolver problemas de escoamento em meios porosos empregando o método dos volumes finitos, com diferentes esquemas de discretização para o cálculo dos fluxos, tais como o esquema Box, denominado nas versões mais recentes como método dos elementos finitos baseado em volumes de controle (Control Volume Finite Element, CVFE), o TPFA (Two-Point Flux Approximation) e o MPFA (Multi-Point Flux Approximation).

No DuMu^x, os problemas são formulados combinando módulos preexistentes, e os objetos são instanciados durante a compilação com base em rótulos (*tags*) de tipo definidas pelo usuário. As *tags* são elementos identificadores que servem para acessar e modificar configurações da simulação e propriedades específicas, como permeabilidade, viscosidade e condições de contorno. Assim, esses rótulos permitem que as classes e funções possam ser especializadas para diferentes aplicações sem precisar alterar o código principal.

A utilização de *tags* de tipo no DuMu^x promove uma estrutura modular que aplica o conceito de polimorfismo durante a compilação. Por exemplo, quando a *tag* “BoxModel” é definida para o método de discretização espacial, as classes responsáveis pela criação da malha, pelo cálculo de resíduos e por outros procedimentos dependentes dessa discretização são especializadas, ajustando-se ao método escolhido (Loyola, 2022). Esse processo de especialização otimiza a simulação e elimina a sobrecarga de verificações condicionais (*branching*) durante a execução, garantindo uma maior eficiência computacional.

O DUNE oferece a infraestrutura e as ferramentas numéricas gerais para resolução de problemas numéricos com elementos finitos, como malhas e solvers, enquanto o DuMu^x é uma aplicação que utiliza essa infraestrutura para resolver problemas específicos relacionados a fluxo e transporte em meios porosos utilizando métodos de volumes finitos. Assim, a maior parte do desenvolvimento do DuMu^x pode se concentrar na implementação de modelos físicos e matemáticos (Flemisch et al., 2011).

Quanto à sua capacidade e aplicabilidade, o DuMu^x é uma ferramenta que já vem sendo testada em diversos problemas relacionados à estocagem em subsuperfície (Hagemann et al., 2015, 2016; Feldmann et al., 2016; Vasile, 2024). Sua principal vantagem reside no fato de que é um software livre e de código aberto, o que proporciona maior flexibilidade para colaboração e criação de módulos, bem como maior adaptabilidade a problemas não convencionais (Karmakar et al., 2022; Loyola et al., 2024).

Karmakar et al. (2022) compararam o DuMu^x com softwares comerciais, como COMSOL Multiphysics e FEFLOW, em simulações de fluxo e transporte de solutos, destacando que, por ser um software acadêmico de código aberto, o DuMu^x oferece maior controle sobre a formulação do problema e apresenta desempenho mais eficiente e estável em análises multifásicas, em especial para valores baixos de dispersividade, nas quais os simuladores baseados em elementos finitos apresentaram problemas de convergência.

Os autores também observaram menor demanda computacional do DuMu^x e resultados mais consistentes em malhas refinadas. Contudo, em situações de baixa dispersividade, o método de Volumes Finitos tende a apresentar maiores erros numéricos, o que pode suavizar

as frentes de transporte e reduzir a precisão em casos que exigem alta resolução espacial.

Como outras vantagens, Saeed et al. (2024a) destacam ainda que o DuMu^x permite fazer modelagens geomecânicas acopladas, ao contrário de softwares comerciais como Eclipse e TOUGH, além de possibilitar menor custo computacional do que os programas Eclipse, Intersect, CMG, TOUGH, OpenGeoSys e COMSOL.

3.1.1 ESTRUTURA E ARQUIVOS ESSENCIAIS

No DuMu^x, os principais componentes de uma simulação são representados por classes C++. Ao utilizar um modelo preexistente, o usuário normalmente implementa as classes “Problem”, que define as condições de contorno e iniciais, e “SpatialParams”, que descreve a distribuição espacial de parâmetros como porosidade e permeabilidade. Além disso, cada simulação requer a utilização de pelo menos uma tag, que especifica as diversas propriedades e configurações a serem aplicadas durante a execução da simulação.

Para modelar problemas multifásicos e composicionais, é fundamental implementar uma classe no DuMu^x que permita distinguir as características das fases e componentes e que defina a interação entre elas. Essa classe é denominada sistema de fluidos e serve como base para a definição dos modelos do aquífero, reservatório de óleo e gás. Nela, são definidos todos as propriedades dos fluidos envolvidos na simulação.

Feitas essas definições, o programa é então configurado e executado por meio da função principal (*main*), definida no arquivo “main.cc”. Este arquivo tem como função coordenar a execução, instanciando as classes previamente definidas, onde estão descritas as condições iniciais e de contorno, tags necessárias e demais configurações. A função principal também é responsável por inicializar a malha e os solvers, executar a simulação e processar os resultados gerados. Ele integra todos os componentes da simulação, permitindo ao usuário executar o modelo completo de forma organizada e eficiente. Os códigos completos dos arquivos essenciais encontram-se detalhados no Apêndice III desta dissertação.

3.2 EQUAÇÕES DO PROBLEMA MULTIFÁSICO TRANSIENTE

Por definição, problemas multifásicos transientes são problemas em que o fluido se encontra em duas ou mais fases e as variáveis do problema (pressão, saturação, velocidade etc.) variam com o tempo. Esse tipo de problema se aplica a operações de ASH, uma vez que as condições de fluxo impostas pelo poço alteram a condição inicial do reservatório à medida em

que o tempo de simulação evolui. Além disso, a compressibilidade do hidrogênio, bem como a alternância entre períodos de injeção, repouso e produção, podem ser naturalmente representadas nesse tipo de formulação transiente.

Neste capítulo é apresentada a base matemática para a descrição do problema multifásico transiente. As equações governantes do escoamento dos fluidos devem seguir os postulados matemáticos das leis de conservação da física newtoniana:

- A massa de um fluido é conservada;
- A taxa de variação do momento linear é igual à soma das forças aplicadas a uma partícula de fluido (segunda lei de Newton);
- A taxa de variação da energia é igual à soma da taxa de adição de calor e da taxa de trabalho realizado sobre uma partícula de fluido (primeira lei da termodinâmica).

No presente trabalho, adotou-se a hipótese de regime isotérmico, assumindo-se que a temperatura permanece constante ao longo de toda a simulação. Dessa forma, não há troca de calor no meio por condução, convecção ou fontes térmicas, o que permite desprezar os termos associados à variação da energia interna.

Nessa condição, a equação de conservação de energia reduz-se essencialmente ao termo relacionado ao trabalho de pressão, já incorporado às formulações de conservação de massa e de momento (via lei de Darcy), conforme mostrado nas Seções 3.3, 3.4 e 3.5.1. Assim, todos os efeitos mecânicos relevantes para o escoamento permanecem representados, ao passo que a temperatura deixa de ser uma variável dependente do sistema.

A hipótese do contínuo admite que as propriedades de um material de análise sejam contínuas ao longo de uma região delimitada. Do ponto de vista macroscópico, um material pode ser contínuo a depender do tamanho das discontinuidades. Em maciços fraturados, por exemplo, a região delimitada pela amostra deve ser grande o suficiente para que o material seja considerado homogêneo e pequena o suficiente para que seja infinitesimal. A essa região, dá-se o nome de volume representativo. A partir do momento em que as discontinuidades não satisfazem mais a condição de homogeneidade das propriedades do volume representativo, a hipótese do meio contínuo não é mais válida.

Para a resolução do problema de fluxo são necessários: a definição do domínio contínuo e sua devida discretização; a definição de condições de contorno (restrições) e eventuais condições iniciais; a resolução das equações de conservação de massa, energia e momento linear para as fases, considerando a discretização e as restrições impostas. Para definir as equações fundamentais, usamos um volume de controle (VC) representado por um elemento unitário no qual definimos as equações para as 3 direções (Figura 3.1).

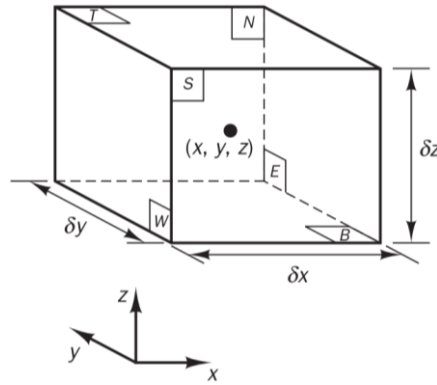


Figura 3.1 – Volume de Controle representado pelo elemento unitário tridimensional

3.3 CONSERVAÇÃO DE MASSA

A Lei de Conservação de Massa define que a taxa de acúmulo de massa de um fluido no volume de controle é igual à massa que entra menos a massa que sai pelas faces do elemento. O acúmulo de massa no VC com o tempo é expresso por:

$$\frac{\partial M_{VC}}{\partial t} = \frac{\partial \rho \phi}{\partial t} dV \quad (5)$$

Onde ϕ é a porosidade do meio, M_{VC} é a massa acumulada no VC, ρ é a densidade do fluido, dV é o volume do fluido no VC e t é o tempo de simulação.

Definindo a parcela de fluido que sai do VC:

$$m_{sai} = \left[\frac{\partial(\rho v_1)}{\partial x_1} + \frac{\partial(\rho v_2)}{\partial x_2} + \frac{\partial(\rho v_3)}{\partial x_3} \right] dV = - \frac{\partial(\rho v_i)}{\partial x_i} dV \quad (6)$$

Onde m_{sai} é a massa de fluido que sai pelas faces do VC, v é a velocidade do fluido e x é o vetor direção de movimento.

A Lei da Conservação de Massa é dada, portanto, por:

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} dV + \frac{\partial(\rho v_i)}{\partial x_i} dV = \frac{\partial \rho}{\partial t} + \frac{\partial(\rho v_i)}{\partial x_i} = 0 \quad (7)$$

Considerando um meio poroso sujeito a fluxo multifásico e multicomponente, a Lei da Conservação de Massa pode ser expressa pela equação:

$$\frac{\partial}{\partial t} \left(\phi \sum_f \rho_f S_f X_{fc} \right) + \frac{\partial}{\partial x_i} \left(\sum_f \rho_f X_{fc} v_{f,i} \right) = 0 \quad (8)$$

Onde S_f é a saturação da fase f e X_{fc} é a fração molar do componente c na fase f .

No regime estacionário a variação da densidade com o tempo é nula, logo a soma das taxas de fluxo de massa em cada direção deve ser igual à vazão imposta. No entanto, no regime

transiente para fluidos compressíveis isso não acontece, uma vez que há acúmulo de massa no volume elementar, alterando a densidade do fluido com o tempo.

3.4 CONSERVAÇÃO DE MOMENTO LINEAR

Conforme a segunda lei de Newton a variação do momento linear no VC (P_{VC}) é dada por:

$$\frac{\partial P_{VC}}{\partial t} = \sum F_{ext,i} - \dot{p} \quad (9)$$

Onde $\sum F_{ext,i}$ representa o somatório das forças externas atuando sobre a partícula de fluido, e \dot{p} corresponde ao momento linear líquido que atravessa as faces do volume de controle.

O momento linear é resultado do produto entre a velocidade da partícula e sua massa específica, portanto sua variação e a parcela total que sai pelas faces do volume de controle são dadas pelas equações:

$$\frac{\partial P_{VC}}{\partial t} = \frac{\partial \rho v_i}{\partial t} \quad (10)$$

$$\dot{p} = \frac{\partial \rho v_j v_i}{\partial x_j} \quad (11)$$

Podemos dividir as forças externas em forças de superfície, como as forças viscosas internas e as cargas externas aplicadas, e forças de corpo, que atuam distribuídas continuamente em todo o volume. Essas parcelas estão representadas no primeiro e segundo termos da equação:

$$F_{ext,i} = \frac{\partial \sigma_{ij}}{\partial x_j} + \rho g_i \quad (12)$$

Onde δ_{ij} é o delta de Kroenker, representado pela matriz identidade, σ_{ij} é o tensor de tensões e g_i é a componente gravitacional na direção i .

Ainda, o tensor de tensões é dado por:

$$\sigma_{ij} = -p \delta_{ij} + \tau_{ij} \quad (13)$$

Onde p é a parcela referente aos esforços normais e τ_{ij} é o tensor de tensões viscosas, relacionado aos esforços cisalhantes.

Substituindo os termos na Equação 9, tem-se a equação de conservação de momento linear:

$$\frac{\partial \rho v_i}{\partial t} + \frac{\partial \rho v_j v_i}{\partial x_j} = \rho g_i - \frac{\partial p}{\partial x_i} + \frac{\partial \tau_{ij}}{\partial x_j} \quad (14)$$

Em um fluido Newtoniano, o tensor de tensões viscosas relaciona-se com a taxa de deformação por meio da relação constitutiva:

$$\tau_{ij} = \mu \left(\frac{\partial v_i}{\partial x_j} + \frac{\partial v_j}{\partial x_i} \right) + \lambda \delta_{ij} \frac{\partial v_k}{\partial x_k} \quad (15)$$

Em que μ é a viscosidade dinâmica do fluido, relacionada ao cisalhamento e λ é a viscosidade volumétrica, relacionada à compressão ou expansão do fluido.

Substituindo-se a Equação 15 em 14, temos:

$$\frac{\partial \rho v_i}{\partial t} + \frac{\partial \rho v_j v_i}{\partial x_j} = \rho g_i - \frac{\partial p}{\partial x_i} + \frac{\partial}{\partial x_j} \left[\mu \left(\frac{\partial v_i}{\partial x_j} + \frac{\partial v_j}{\partial x_i} \right) + \lambda \delta_{ij} \frac{\partial v_k}{\partial x_k} \right] \quad (16)$$

Reorganizando os termos na Equação 17:

$$\frac{\partial \rho v_i}{\partial t} + \frac{\partial \rho v_j v_i}{\partial x_j} = \rho g_i - \frac{\partial p}{\partial x_i} + \mu \frac{\partial}{\partial x_j} \left(\frac{\partial v_i}{\partial x_j} + \frac{\partial v_j}{\partial x_i} \right) + \lambda \frac{\partial}{\partial x_j} \left(\delta_{ij} \frac{\partial v_k}{\partial x_k} \right) \quad (17)$$

Desenvolvendo e reorganizando os termos da equação, obtém-se as Equações de Navier-Stokes para fluidos compressíveis em escala microscópica:

$$\rho \left(\frac{\partial v_i}{\partial t} + v_j \frac{\partial v_i}{\partial x_j} \right) = \rho g_i - \frac{\partial p}{\partial x_i} + \mu \frac{\partial^2 v_i}{\partial x_j^2} + (\mu + \lambda) \frac{\partial}{\partial x_i} \left(\frac{\partial v_i}{\partial x_i} \right) \quad (18)$$

3.5 MODELOS CONSTITUTIVOS

Os modelos constitutivos apresentados nesta seção formam as relações fundamentais utilizadas para representar o comportamento do fluxo multifásico no meio poroso. A Seção 3.5.1 apresenta o modelo de fluxo baseado na Lei de Darcy, que define o escoamento das fases e estabelece a relação entre gradiente de pressão, permeabilidade e viscosidade. A Seção 3.5.2 descreve o modelo de saturação adotado, fundamentado na formulação de Brooks–Corey, que relaciona pressão capilar, saturação efetiva e permeabilidades relativas. Por fim, a Seção 3.5.3 introduz os modelos selecionados para representar as propriedades dos fluidos, incluindo densidade, viscosidade e compressibilidade.

3.5.1 FLUXO (LEI DE DARCY)

É possível obter uma forma simplificada das equações de movimento para escoamentos em meios porosos a partir da homogeneização das equações de Navier–Stokes, considerando um problema em escala macroscópica, com baixo número de Reynolds e meio poroso homogêneo. Nessas condições, as forças inerciais são desprezadas e o escoamento é dominado

pelo balanço entre forças viscosas e gradiente de pressão. O resultado desse processo de homogeneização é a Lei de Darcy, que descreve o fluxo médio no meio poroso em função das propriedades do fluido e da permeabilidade do meio (Bear, 1972):

$$0 = \rho g_i - \frac{\partial p}{\partial x_i} - \frac{\mu}{K_{ij}} v_i \quad (19)$$

Onde K_{ij} é o tensor de permeabilidade do meio poroso que traduz a resistência ao deslocamento do fluido dentro dos poros. Reorganizando os termos, chega-se no modelo constitutivo proposto pela Lei de Darcy:

$$v_i = - \frac{K_{ij}}{\mu} \left(\frac{\partial p}{\partial x_j} - \rho g_j \right) \quad (20)$$

Adicionando a conservação de massa para o regime transiente e fluido compressível em um meio poroso, tem-se:

$$\frac{\partial S \phi \rho}{\partial t} + \frac{\partial (\rho v_i)}{\partial x_i} = Q \quad (21)$$

Onde Q é o termo de fonte (vazão) no VC e S é a saturação e ϕ é a porosidade.

Substituindo-se a Lei de Darcy na equação 21, tem-se a equação de fluxo generalizada para os problemas propostos:

$$\frac{\partial S \phi \rho}{\partial t} - \frac{\partial}{\partial x_i} \left[\rho \frac{K_{ij}}{\mu} \left(\frac{\partial p}{\partial x_j} - \rho g_j \right) \right] = Q \quad (22)$$

Considerando um meio multifásico e multicomponente, a Lei de Darcy pode ser expressa por:

$$\frac{\partial}{\partial t} \left(\phi \sum_f \rho_f S_f X_{fc} \right) - \frac{\partial}{\partial x_i} \left[\sum_f \rho_f X_{fc} \frac{K_{ij} k_{rf}}{\mu_f} \left(\frac{\partial p_f}{\partial x_j} - \rho_f g_j \right) \right] = Q_c \quad (23)$$

Onde k_{rf} é a permeabilidade relativa da fase f , X_{fc} é a concentração molar da fase f e componente c .

3.5.2 SATURAÇÃO (BROOKS-COREY)

Em sistemas multifásicos, como é o caso dos reservatórios geológicos, a mobilidade de um fluido está diretamente associada à sua saturação no meio poroso. Tomando como exemplo um aquífero, a depender da quantidade de água presente nos poros da matriz rochosa, a pressão necessária para deslocar essa água pode variar significativamente. Na prática, à medida que outro fluido invade o meio, a água perde continuidade nos poros e o seu escoamento se torna mais restrito. Isso faz com que, embora a permeabilidade absoluta da rocha permaneça

constante, a permeabilidade efetiva de cada fase diminua. Essa fração é descrita pela permeabilidade relativa, que varia com a saturação e representa a porção da permeabilidade total disponível para o fluxo de cada fluido.

A relação entre as pressões das fases é definida pela pressão capilar (p_c), dada por:

$$p_c = p_{nw} - p_w = \frac{2 \sigma \cos \theta}{r_p} \quad (24)$$

Onde p_{nw} é a pressão da fase não molhante (gás), p_w é a pressão da fase molhante (água), σ é a tensão interfacial entre as duas fases, θ é o ângulo de contato, que reflete a molhabilidade da superfície e r_p é o raio efetivo dos poros.

Para obter a função de permeabilidade relativa entre as fases e a função de capilaridade, é usada a formulação de Brooks-Corey (1964), um modelo consagrado para descrever o comportamento hidráulico em meios contínuos rochosos (Christoffersen et al., 1995; Li, 2010; Pfeiffer et al., 2017; Rezaei et al., 2022; Higgs et al., 2024). Nesse modelo, a saturação efetiva da fase molhante (\bar{S}_w) é dada por:

$$\bar{S}_w = \left(\frac{P_e}{P_c} \right)^{\lambda_a} \quad (25)$$

Onde P_c é a pressão capilar, P_e é a pressão de entrada de ar, que indica a pressão mínima necessária para o avanço da fase não molhante no meio e λ_a é o índice de distribuição de poros que está relacionado com a heterogeneidade do meio poroso e com o raio efetivo dos poros.

Além disso, a saturação efetiva também é representada por:

$$\bar{S}_w = \frac{S_w - S_{rw}}{1 - S_{rw} - S_{rn}} \quad (26)$$

Onde S_w é a saturação da fase molhante, S_{rw} é a saturação residual da fase molhante e S_{rn} é a saturação residual da fase não molhante.

A permeabilidade relativa da fase molhante (k_{rw}) é:

$$k_{rw} = \bar{S}_w^{\frac{2+3\lambda_a}{\lambda_a}} \quad (27)$$

Por sua vez, a permeabilidade relativa da fase não molhante (k_{rn}) é dada por:

$$k_{rn} = (1 - \bar{S}_w)^2 \left(1 - \bar{S}_w^{\frac{2+\lambda_a}{\lambda_a}} \right) \quad (28)$$

3.5.3 PROPRIEDADES DOS FLUIDOS

Os modelos constitutivos também são ferramentas usadas para atribuir propriedades

materiais aos componentes de simulação como gases e óleos. Essa definição é importante pois permite diferenciar o comportamento de diferentes fluidos em um sistema multifásico sob as condições de estado a que está sujeito (pressão, volume, temperatura, energia interna etc.).

Neste item são relacionados os modelos constitutivos de compressibilidade e viscosidade dinâmica dos componentes adotados em cada etapa de simulação (H_2 , água, óleo leve, óleo pesado, N_2 , CO_2 e CH_4), bem como o modelo adotado para a solubilidade do H_2 em água, óleo e gás.

3.5.3.1 FASE ÁGUA

Compressibilidade: os modelos constitutivos relativos às propriedades de viscosidade e compressibilidade da água no DuMu^x podem ser definidos com base nas equações de estado definidas pela Associação Internacional para as Propriedades da Água e do Vapor (IAPWS, 2008, 2012), sendo as regiões:

- Região 1: Água comprimida/sub-resfriada (líquido).
- Região 2: Vapor superaquecido.
- Região 3: Região próxima do ponto crítico (fluido comprimido/denso).
- Região 4: Linha de saturação líquido–vapor (equilíbrio).
- Região 5: Altas temperaturas (até 2000 K) e pressões moderadas.

Diferentes equações de estado são utilizadas para cinco regiões diferentes que variam de acordo com a temperatura da água e a pressão, conforme mostra o gráfico da Figura 3.2.

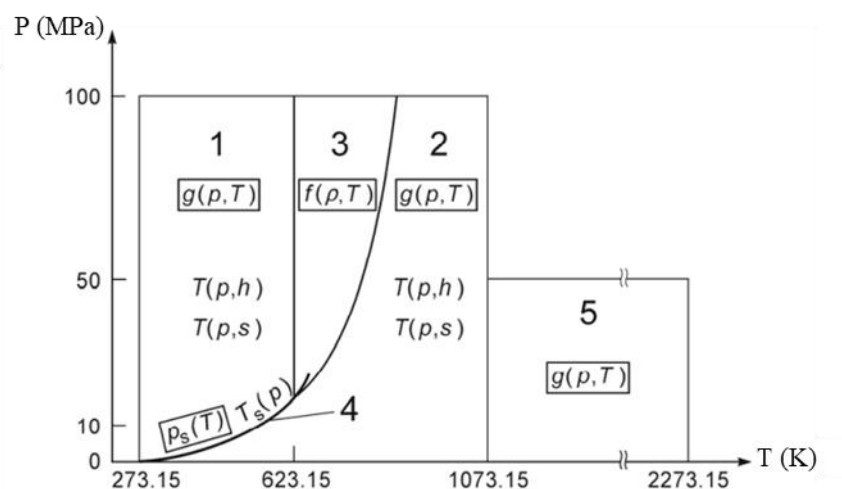


Figura 3.2 – Delimitação das regiões e equações de estado para a água (IAPWS, 2012).

Os problemas referentes à estocagem de H₂ em aquífero simulados nesse estudo estão na faixa de temperatura e pressão definidos pela região 1 (temperatura de 0 a 350 °C e pressão superior a 20 MPa), logo, a equação fundamental utilizada para determinar a compressibilidade e viscosidade da água é dada em função da temperatura e pressão (g(p,T)), podendo ser representada pela Equação de Energia Livre de Gibbs:

$$\frac{g(p,T)}{RT} = \gamma(\pi, \tau) = \sum_{i=1}^{34} n_i (7.1 - \pi)^{I_i} (\tau - 1.222)^{J_i} \quad (29)$$

Onde $\pi = \frac{p}{p^*}$ e $\tau = \frac{T}{T^*}$, com $p^* = 16,53$ MPa e $T^* = 1386$ K, $R = 0.461526$ kJ/(kg·K) e os coeficientes n_i , I_i e J_i são valores tabelados que podem ser consultados no documento de referência (IAPWS, 2012).

Da Equação de Gibbs, é possível determinar a equação da densidade da água:

$$\rho = \frac{p}{RT \pi \frac{\partial \gamma(\pi, \tau)}{\partial \pi}}, \quad \gamma(\pi, \tau) = \sum_i n_i \pi^{I_i} (\tau - 0.5)^{J_i} \quad (30)$$

A compressibilidade da água (κ_{H_2O}) pode ser obtida diferenciando-se a equação 30 em termos de p com temperatura constante, conforme a equação:

$$\kappa_{H_2O} = \frac{1}{\rho} \left(\frac{\partial}{\partial p} \left[\frac{p}{RT \pi \frac{\partial \gamma}{\partial \pi}} \right] \right)_T \quad (31)$$

Para a água líquida em 50 °C e 20 MPa, a compressibilidade típica é da ordem de $4,5 \times 10^{-10}$ Pa⁻¹.

Viscosidade Dinâmica: A definição da viscosidade dinâmica no modelo está baseada na equação empírica (IAPWS, 2008):

$$\mu = \left\{ \frac{100\sqrt{T}}{\sum_{i=0}^3 \frac{H_i}{T^i}} \right\} \cdot \left\{ \exp \left[\rho \sum_{i=0}^5 \left(\frac{1}{T} - 1 \right) \sum_{j=0}^6 H_{ij} (\rho - 1)^j \right] \right\} \quad (32)$$

Onde o primeiro termo representa a viscosidade no limite de gás diluído e o segundo representa a contribuição da densidade, sendo os coeficientes H_i e H_{ij} valores empíricos que podem ser consultados no documento de referência (IAPWS, 2008).

Para temperatura de 323,15K e densidade de 1000 kg/m³, a viscosidade dinâmica da água se aproxima de 0,000547 Pa·s.

3.5.3.2 FASE ÓLEO

Compressibilidade: a compressibilidade isotérmica do óleo (κ_o) pode ser definida pela equação:

$$\kappa_o = \frac{1}{\rho} \left(\frac{\partial \rho}{\partial p} \right) \quad (33)$$

Reorganizando:

$$\kappa_o dp = \frac{1}{\rho} d\rho \quad (34)$$

Para fluidos muito pouco compressíveis, como é o caso do petróleo, a compressibilidade pode ser assumida como constante para uma determinada faixa de pressão. Portanto, ao integrar a equação 34, chega-se na equação:

$$\int_{p_0}^p \kappa_o dp = \int_{\rho_0}^{\rho} \frac{d\rho}{\rho} \quad (35)$$

Onde p_0 é a pressão de referência, usualmente definida como a pressão atmosférica.

Resolvendo a integral, tem-se:

$$\kappa_o(p-p_0) = \ln \frac{\rho}{\rho_0} \quad (36)$$

Onde ρ_0 é a densidade do óleo à temperatura e pressão de referência.

Reorganizando os termos:

$$\rho = \rho_0 \exp(\kappa_o(p-p_0)) \quad (37)$$

Considerando $\kappa_o(p-p_0)$ muito pequeno, é possível aproximar o termo por meio da expansão de primeira ordem da série de Taylor:

$$\exp(\kappa_o(p-p_0)) \approx 1 + \kappa_o(p-p_0) \quad \text{para } |\kappa_o(p-p_0)| \ll 1 \quad (38)$$

Substituindo a equação 38 na Equação 37, obtém-se a relação constitutiva linear que descreve a variação da densidade do óleo com a pressão:

$$\rho_o \approx \rho_{ob} [1 + \kappa_o(p-p_b)] \quad (39)$$

Diversos autores estudaram a compressibilidade de diferentes tipos de óleo sob condições variadas de pressão e temperatura. Neste estudo, a compressibilidade dos óleos leve e pesado usados nas simulações é fixada em $1 \times 10^{-8} \text{ Pa}^{-1}$, aproximando-se dos valores reportados por Bhoendie et al. (2014).

Viscosidade Dinâmica: para os óleos empregados nas análises, foram adotados valores fixos e constantes com a variação de temperatura e pressão. Essa premissa permitiu realizar

análises de sensibilidade do impacto desse parâmetro no comportamento dos fluidos durante o ASH, conforme detalhado no Item 4.3.2. Para isso, foi consultado o banco de dados composto por 75 amostras de óleos com diferentes viscosidades, disponibilizado por Stratiev et al. (2023).

Uma propriedade comumente relacionada à viscosidade dinâmica do óleo é a gravidade API (American Petroleum Institute gravity) que é uma medida adimensional utilizada para expressar a densidade relativa dos óleos em comparação com a água. Ela é calculada a partir da densidade medida a 60 °F (15,6 °C).

A gravidade API e a viscosidade são os principais critérios utilizados para classificar os óleos em leves, pesados e extrapesados, conforme os exemplos (Guo et al., 2016):

- Óleo leve: °API > 22, viscosidade < 0,1 Pa·s e densidade < 934 kg/m³;
- Óleo pesado: °API entre 10 e 22, viscosidade > 0,1 Pa·s e densidade entre 934 e 1000 kg/m³;
- Óleo extrapesado (betume): °API < 10, viscosidade > 100 Pa·s e densidade > 1000 kg/m³

No presente estudo, foram considerados três tipos distintos de óleo, abrangendo as faixas classificadas como muito leve, leve e pesado.

3.5.3.3 FASE GÁS

Compressibilidade: para os modelos propostos, o H₂ é assumido como gás ideal como hipótese simplificadora. Assim, esse componente obedece à Lei dos Gases Ideais:

$$P=Z \frac{\rho RT}{M} \quad (40)$$

Onde Z é o fator de compressibilidade, R é a constante universal dos gases (8,314 J/(mol·K)) e M é a massa molar do gás.

A compressibilidade é representada pelo fator de compressibilidade (Z), que considera o desvio do comportamento ideal por parte do gás. No entanto, como são ideais, Z = 1, o que reduz a formulação à equação:

$$P= \frac{\rho RT}{M} \quad (41)$$

Viscosidade Dinâmica: o cálculo da viscosidade dinâmica do H₂ foi feito com base nos dados obtidos no programa REFPROP (*Reference Fluid Thermodynamic and Transport Properties Database*), desenvolvido pelo National Institute of Standards and Technology (NIST) (Lemmon et al., 2018).

O código do REFPROP é baseado em uma combinação de modelos teóricos e

correlações empíricas. O programa utiliza formulações derivadas da teoria cinética dos gases diluídos, associadas a correções experimentais que permitem representar adequadamente o comportamento do fluido sob altas pressões e densidades.

O modelo empregado separa a viscosidade total em duas parcelas principais: uma componente associada ao regime de gás ideal e outra que corrige os efeitos de densidade, conforme expresso por:

$$\mu(T,\rho)=\mu_0(T)+\Delta\mu(T,\rho) \quad 42$$

Em que $\mu_0(T)$ representa a viscosidade no limite de baixa densidade e $\Delta\mu(T,\rho)$ corresponde à contribuição devido às interações moleculares em altas pressões.

A viscosidade no limite de baixa densidade é obtida a partir da teoria cinética de Chapman–Enskog, segundo a equação:

$$\mu_0(T)=\frac{5}{16}\frac{\sqrt{\pi mk_B T}}{\pi\sigma^2\Omega^{(2,2)*}} \quad (43)$$

Onde m é a massa molecular, k_B é a constante de Boltzmann ($1,346\cdot 10^{-23}\text{ J}\cdot\text{K}^{-1}$), σ é o diâmetro efetivo de colisão e $\Omega^{(2,2)*}$ é a integral reduzida de colisão, dependente da temperatura reduzida T^* .

Para pressões elevadas, o REFPROP adiciona uma correção empírica de densidade, dada genericamente pela equação:

$$\Delta\mu(T,\rho)=\rho[B_\mu(T)+C_\mu(T)\rho+\dots] \quad (44)$$

Em que os coeficientes $B_\mu(T)$ e $C_\mu(T)$ são determinados por regressão de dados experimentais de viscosidade em ampla faixa de temperatura e pressão. Esses coeficientes encontram-se tabulados internamente na base de dados do REFPROP e são específicos para cada substância.

O modelo completo utilizado pelo REFPROP combina de forma contínua as contribuições de baixa e alta densidade. Para o hidrogênio, as correlações seguem as formulações de Leachman et al. (2009), posteriormente refinadas por Assael et al. (2011), que ampliaram a validade do modelo para temperaturas entre 13,8 K e 1000 K e pressões de até 100 MPa. Mais informações sobre o modelo podem ser consultadas na página do programa: <https://www.nist.gov/srd/refprop>.

Como resultados desse modelo, o gráfico apresentado na Figura 3.3 apresenta a viscosidade dinâmica do H_2 para diferentes temperaturas e pressões. Foi realizado um ajuste linear entre os pontos calculados no modelo, obtendo a equação apresentada no gráfico para a viscosidade dinâmica do H_2 à temperatura de 50 °C.

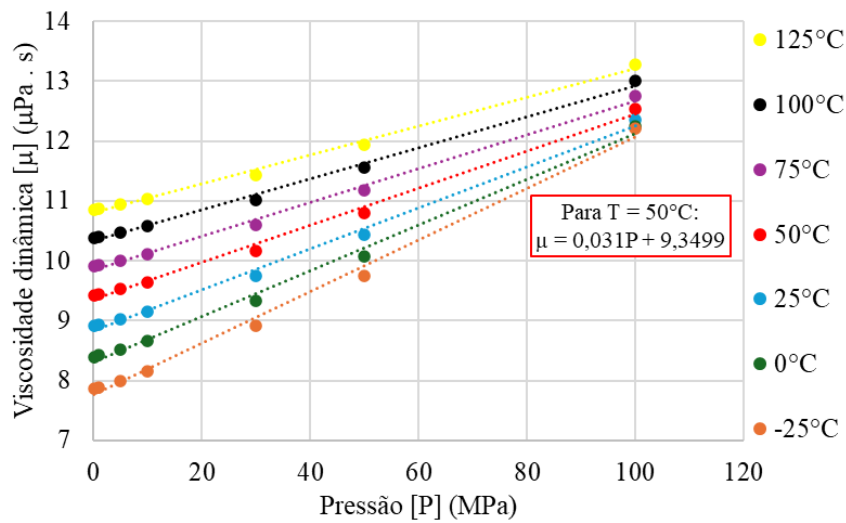


Figura 3.3 – Viscosidade dinâmica do H₂ (Lemmon et al., 2018)

3.6 MECANISMOS DE TRANSPORTE

Analogamente à equação de continuidade, podemos definir como princípio fundamental a conservação de massa de um determinado componente (por exemplo o H₂) dentro do VC quando este se encontra solubilizado em um outro componente.

A formulação geral pode ser descrita pela equação:

$$\frac{\partial \rho X_{H_2}}{\partial t} = - \frac{\partial \rho X_{H_2} v_j}{\partial x_j} - \frac{\partial J_{H_2}}{\partial x_j} + \dot{\omega}_{H_2} \quad (45)$$

Onde o termo convectivo depende da fração molar do H₂ (X_{H_2}), o termo difusivo (J_{H_2}) é representado pela Lei de Fick (conforme mostrado na Seção 3.6.2) e o termo reativo ($\dot{\omega}_{H_2}$) é nulo para os problemas propostos, uma vez que não é considerada a reação do H₂ dentro do volume de controle.

A variação local da concentração de H₂ é determinada pelo balanço entre seu transporte convectivo pelo escoamento, seu fluxo difusivo molecular e sua taxa de produção ou consumo por reações químicas.

3.6.1 SOLUBILIDADE DO H₂

A dissolução do gás hidrogênio ocorre na fronteira com o fluido molhante do sistema, que pode ser água, óleo ou outro gás nos casos simulados. Essa interação geralmente é descrita pela Lei de Henry, que estabelece a quantidade de gás que se dissolve em um líquido (X_{H_2}) a

partir da relação:

$$X_{H_2} = k_H \cdot P_{H_2} \quad (46)$$

Onde P_{H_2} é a pressão parcial do H_2 e k_H é a constante de Henry.

Por sua vez, para o sistema H_2 -água, a constante de Henry pode ser determinada por meio da equação abaixo (IAPWS, 2004):

$$k_H = K_D \cdot p^* \quad (47)$$

Onde p^* é a pressão de vapor da água e K_D é a constante de distribuição vapor-líquido, que relaciona a fugacidade do gás na fase vapor com a fração molar na fase líquida e a pressão de saturação de água.

As funções das constantes k_H e K_D foram obtidas empiricamente e as constantes de ajuste para os respectivos solventes e solutos estão descritos na documentação de referência (IAPWS, 2004). Para o caso do H_2 dissolvido em água a $50\text{ }^\circ\text{C}$, o valor de k_H está na faixa de 10^8 a 10^9 Pa.

Já para os sistemas H_2 -óleo, foi usado o valor de k_H com base em dados fornecidos por Marufuzzaman et al. (2014) para solubilidade de CO_2 em óleo. O gráfico da Figura 3.4 apresenta a extrapolação linear dos dados para a temperatura de $323,15\text{K}$, que foi usada nos modelos. Em destaque, está o valor da constante de Henry adotada para essa temperatura

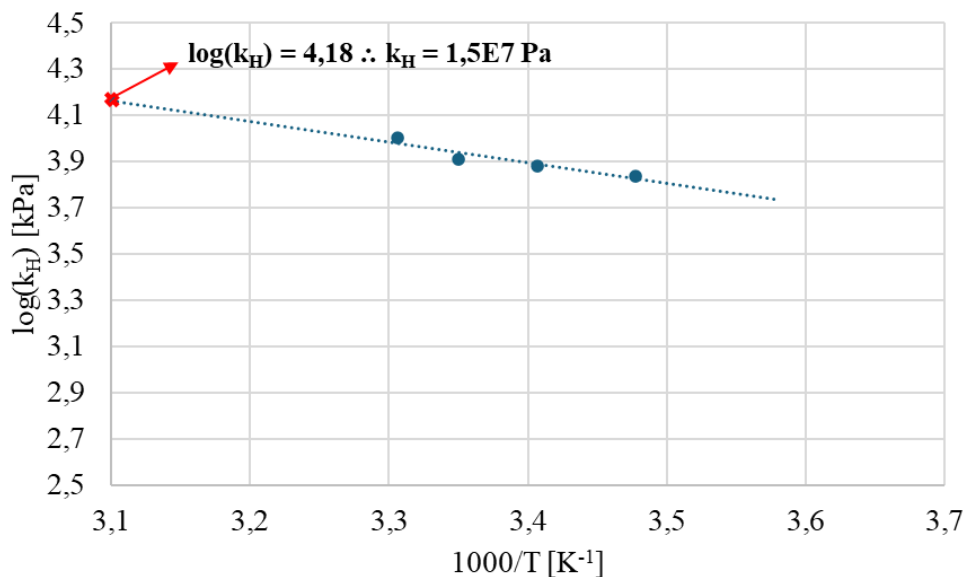


Figura 3.4 – Variação da constante de Henry com a temperatura para o sistema CO_2 -óleo (adaptado de Marufuzzaman et al., 2014)

3.6.2 DIFUSÃO

As moléculas de H₂ dissolvido movem-se livremente no fluido devido ao fenômeno conhecido como movimento browniano. Mesmo quando o fluido parece não se mover, as substâncias químicas difundem-se de regiões de maior concentração para regiões de menor concentração. Esse processo, que ocorre a baixas velocidades e resulta no aumento da entropia do sistema, é denominado difusão molecular (Perk, 2007).

A Lei de Fick, que determina que o fluxo de massa por difusão (J_j) é representado pela equação:

$$J_j = -D_{ij} \frac{\partial X_{cf}}{\partial x_j} \quad (48)$$

Onde X_{cf} é a fração molar do componente c na fase f , x é a distância onde é avaliado o gradiente de concentração e D_{ij} é o coeficiente de difusão molecular.

O coeficiente de difusão depende do tamanho e formato das partículas do soluto, da temperatura, da pressão e viscosidade do meio e das interações moleculares entre as partículas e o meio. Uma relação bastante conhecida que apresenta esses fatores é a equação de Einstein-Stokes:

$$D_{ij} = \frac{k_B T}{6\pi\mu r} \quad (49)$$

Onde k_B é a constante de Boltzmann e r é o raio hidrodinâmico da partícula.

Em formações geológicas porosas, a difusão é reduzida em comparação com a difusão em atmosfera livre, devido à ação da elevada pressão, da porosidade do meio e dos efeitos de tortuosidade (Oldenburg et al., 2004). Além disso a formulação Einstein-Stokes não é recomendada para moléculas com massa inferior a 1 kDa, como o H₂, que possui massa de aproximadamente 0,002 kDa (Evans et al., 2018).

Em razão disso, outro modelo amplamente utilizado para obter coeficiente de difusão de moléculas pequenas em líquidos é a formulação de Wilke-Chang (1955) (Reid et al., 1977; Miyabe et al., 2011). Portanto, para as simulações realizadas no aquífero e no reservatório de óleo do presente estudo, optou-se por essa formulação, descrita abaixo:

$$D_{ij} = 7.4 \times 10^{-12} \frac{\sqrt{\varphi_{slv} M_{slv}} T}{\mu_{slv} V_{slt}^{0.6}} \quad (50)$$

Onde φ_{slv} é o parâmetro de associação do solvente (2,6 para água e 1 para óleo, conforme Reid et al., 1997), M_{slv} é a massa molar do solvente, μ_{slv} é a viscosidade do solvente e V_{slt} é o volume molar do soluto no ponto de ebulição.

Para os problemas propostos, a difusão entra na Equação de Fluxo conforme a equação:

$$\frac{\partial}{\partial t} \left(\phi \sum_f \rho_f S_f X_{fc} \right) - \frac{\partial}{\partial x_i} \left[\sum_f \rho_f X_{fc} \frac{K_{ij} k_{rf}}{\mu_f} \left(\frac{\partial p_f}{\partial x_j} - \rho_f g_j \right) - \phi S_f \rho_f D_{ij} \frac{\partial X_{fc}}{\partial x_j} \right] = Q_c \quad (51)$$

3.7 MÉTODO BOX DE DISCRETIZAÇÃO

O método Box, introduzido por Helmig (2017), combina o Método dos Elementos Finitos (MEF) e o Método dos Volumes Finitos (MVF) para modelar problemas de fluxo e geomecânicos. Do MEF, ele utiliza as funções de forma de elementos finitos e a flexibilidade geométrica, permitindo a aplicação em grades não estruturadas. Do MVF, ele adota a conservação local de massa, garantindo que a massa dos fluidos seja conservada no nível dos elementos.

A construção do volume de controle nesse método é feita a partir de uma malha de elementos finitos, unindo o baricentro de cada elemento conectado por um mesmo vértice ao ponto médio de suas faces, formando sub-volumes de controle. Os volumes de controle, por sua vez, são formados pelo conjunto dos sub-volumes de controle, conforme mostra a Figura 3.5.

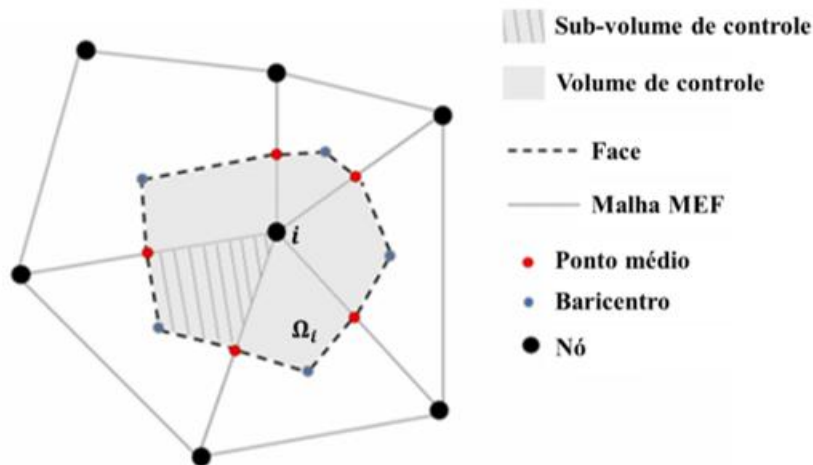


Figura 3.5 – Processo de obtenção do volume de controle 2D ao redor do nó i pelo Método BOX (adaptado de Loyola et al., 2024)

A ideia central do Método de Volumes finitos é integrar a equação diferencial sobre cada volume de controle (Ω_i). Isso transforma o problema de encontrar uma função contínua em encontrar valores médios nos volumes de controle.

No método Box, os fluxos são calculados no centro das faces dos volumes de controle, a partir dos gradientes obtidos pela interpolação das variáveis nos nós por meio das funções de forma dos elementos finitos. Os termos de armazenamento, por sua vez, são avaliados por integração sobre os sub-volumes associados a cada nó.

Tomando como exemplo a equação de fluxo (equação 22), integramos a expressão no tempo usando um método implícito e no espaço dentro dos volumes de controle:

$$\int_{t^n}^{t^{n+1}} \int_{\Omega_I} \left\{ \frac{\partial S\phi\rho}{\partial t} - \frac{\partial}{\partial x_i} \left[\rho \frac{K_{ij}}{\mu} \left(\frac{\partial p}{\partial x_i} - \rho g_i \right) \right] \right\} d\Omega dt = \int_{t^n}^{t^{n+1}} \int_{\Omega_I} Q d\Omega dt \quad (52)$$

A integral do termo de armazenamento pode ser escrita conforme a equação:

$$\int_{\Omega_I} \int_{t^n}^{t^{n+1}} \frac{\partial(S\phi\rho)}{\partial t} dt d\Omega = \int_{\Omega_I} [(S\phi\rho)^{n+1} - (S\phi\rho)^n] d\Omega \quad (53)$$

Onde o índice n indica o valor da grandeza no tempo anterior, enquanto n+1 representa o valor buscado no novo passo de tempo.

Conforme mencionado anteriormente, o termo de armazenamento pode ser representado pelo seu valor no nó central do volume de controle:

$$\int_{\Omega_I} [(S\phi\rho)^{n+1} - (S\phi\rho)^n] d\Omega \approx [(S_I\phi_I\rho_I)^{n+1} - (S_I\phi_I\rho_I)^n] \cdot V_I \quad (54)$$

Onde V_I é o volume do “box” centrado no nó I.

Aplicamos o Teorema da Divergência de Gauss ao termo de fluxo. Este teorema transforma a integral de volume Ω_I de um divergente em uma integral de fluxo sobre a superfície Γ_I que envolve o volume:

$$\int_{\Omega_I} - \frac{\partial}{\partial x_j} \left[\rho \frac{K_{ij}}{\mu} \left(\frac{\partial p}{\partial x_i} - \rho g_i \right) \right] d\Omega = \oint_{\Gamma_I} - \left[\rho \frac{K_{ij}}{\mu} \left(\frac{\partial p}{\partial x_i} - \rho g_i \right) \right] n_j d\Gamma \quad (55)$$

Assim, a integral de superfície é aproximada por uma soma sobre todas as faces (J) do volume de controle:

$$\oint_{\Gamma_I} - \left[\rho \frac{K_{ij}}{\mu} \left(\frac{\partial p}{\partial x_i} - \rho g_i \right) \right] n_j d\Gamma \approx - \sum_J \left[\rho \frac{K_{ij}}{\mu} \left(\frac{\partial p}{\partial x_i} - \rho g_i \right) \cdot n_j \right]_{IJ} A_{IJ} = F_{IJ} \quad (56)$$

Onde A_{IJ} é a área da superfície entre duas faces (no caso 3D) ou o comprimento da interface (no caso 2D) e F_{IJ} é o fluxo que atravessa as faces dos elementos.

Integrando o termo de fluxo no tempo, tem-se a equação:

$$\int_{t^n}^{t^{n+1}} F_{IJ} dt \approx F_{IJ}^{n+1} \cdot \Delta t \quad (57)$$

O termo de fonte pode ser discretizado no tempo e espaço conforme a equação:

$$\int_{t^n}^{t^{n+1}} \int_{\Omega_I} Q \, d\Omega dt \approx Q_I^{n+1} \cdot V_I \cdot \Delta t \quad (58)$$

Portanto, a formulação final da discretização do método Box considerando a equação de conservação de massa é dada por:

$$\left[(S_I \phi_I \rho_I)^{n+1} - (S_I \phi_I \rho_I)^n \right] V_I + \Delta t \sum_J F_{IJ}^{n+1} = \Delta t \cdot Q_I^{n+1} \cdot V_I \quad (59)$$

3.8 CONDIÇÕES DE CONTORNO

Para que o sistema de equações seja bem-posto, ou seja, para que o modelo matemático tenha representatividade física, é necessário satisfazer três requisitos:

1. Existência – existe pelo menos uma solução para o problema;
2. Unicidade – essa solução é única;
3. Estabilidade – a solução varia de maneira contínua com os dados de entrada (ou seja, pequenas mudanças nas condições iniciais/contorno não produzem grandes variações na solução).

As condições de contorno correspondem a restrições impostas ao problema, necessárias para a resolução das Equações Diferenciais Parciais (EDP) nos elementos da malha, garantindo a representação adequada do equilíbrio hidráulico e mecânico do problema bem-posto.

O problema proposto em uma operação de ASH deve-se levar em conta condições de contorno que dependem das características operacionais. Em um problema de fluxo, em geral, essas condições são aplicadas para definir fluxos de entrada e saída de fluidos (Condição de Neumann) e/ou pressões nos limites da geometria proposta (Condição de Dirichlet).

As condições de Dirichlet, também chamadas de condições fundamentais, fornecem o valor exato de uma variável primária do sistema, podendo ser pressão, deslocamento, temperatura, saturação etc. Essa característica permite que o sistema de EDP seja bem-posto, sem necessidade de qualquer outra condição de contorno imposta, no caso de problemas estacionários.

Em problemas transientes, é fundamental definir uma condição inicial adequada em todo o domínio. Isso garante que a solução seja fisicamente consistente e numericamente estável ao longo do tempo. Isso ocorre porque a solução passa a depender do tempo, além do espaço, sendo necessário resolver a equação diferencial parcial em cada passo temporal. Além disso, o passo de tempo deve ser suficientemente pequeno para garantir a convergência e a precisão da simulação.

Por sua vez, as condições de Neumann determinam fluxos ou derivadas das variáveis primárias do problema e todas as medidas associadas a esses gradientes: deformação, tensão, velocidade, vazão etc. Por esse motivo, não é possível construir um sistema bem-posto apenas com condições de contorno de Neumann, uma vez que haveria infinitas soluções para o mesmo problema.

4 METODOLOGIA

Neste capítulo, são elaboradas as premissas necessárias para o desenvolvimento dos modelos numéricos. Os modelos visam simular o processo de injeção de H_2 em operações de ASH sob diferentes condições e em diferentes ambientes. A abordagem é fundamentada em critérios específicos organizados em quatro eixos principais: definição das etapas de estudo (Seção 4.1), contemplando análises de sensibilidade em cenários hipotéticos e aplicação a um reservatório real; definição dos dados de entrada dos modelos, incluindo propriedades do meio poroso e dos fluidos (Seção 4.2); implementação dos modelos no DuMu^x, com as respectivas simplificações e configurações (Seção 4.3); descrição das métricas de eficiência e métricas de avaliação do potencial energético do modelo 3D (Seção 4.4).

4.1 DEFINIÇÃO DAS ETAPAS DE ESTUDO

As análises de sensibilidade se baseiam na variação de dados de entrada do modelo numérico e na observação das mudanças nos resultados. No presente estudo, procura-se identificar os aspectos mais relevantes para o funcionamento eficaz do sistema energético de um reservatório subterrâneo de H_2 , levando em conta as métricas de avaliação da performance da operação de estocagem.

Inicialmente, o estudo foca na análise de um modelo simplificado bidimensional que representa as características de um reservatório formado por um maciço rochoso hipotético. Nessa etapa, o objetivo é verificar as premissas iniciais de aplicabilidade do software para o problema proposto, além de proporcionar uma visão geral sobre o comportamento hidráulico do reservatório fictício sob diferentes condições de operação e considerando diversas propriedades dos fluidos e rochas envolvidas. Nessa fase, serão desenvolvidos os modelos de H_2 -água (aquífero) e H_2 -óleo (reservatório maduro de óleo).

Em uma segunda etapa, a operação do ASH é simulada no depósito maduro de óleo Namorado. O objetivo é avaliar a aplicabilidade do modelo de injeção de H_2 desenvolvido no DuMu^x para um projeto no Brasil. Além disso, são avaliados impactos da heterogeneidade do meio no comportamento dos fluidos durante a operação. Para isso, adotou-se com hipótese a existência de apenas dois componentes e duas fases no meio poroso, conforme detalhado no Item 4.3.2. A Tabela 4.1 apresenta um resumo das análises e os respectivos parâmetros de sensibilidade considerados.

Tabela 4.1 – Análises numéricas realizadas nas etapas 1 e 2

Etapa	Índice	Componentes	Domínio	Parâmetros de sensibilidade
Etapa 1	1	H ₂ e água	2D	Mergulho, vazão operacional, profundidade, permeabilidade e porosidade
	2	H ₂ e óleo	2D	Viscosidade do óleo, vazão de gás colchão e vazão operacional
Etapa 2	3	H ₂ e óleo	3D	Heterogeneidade.

4.2 DESCRIÇÃO DAS ÁREAS DE ESTUDO

Definidas as etapas de estudo, inicialmente é necessário caracterizar a área onde são realizados os testes. Para isso, são introduzidos no modelo os arquivos contendo a malha de elementos finitos, as relações entre fluidos presentes e os parâmetros espaciais do meio poroso. A seguir, serão apresentadas as características definidas para cada análise, no que tange a esses aspectos.

4.2.1 RESERVATÓRIO ARENÍTICO

Reservatórios de arenito são principalmente formados por quartzo, que apresenta propriedades estáveis e baixa reatividade com o hidrogênio (Perera, 2023; L. Wang et al., 2023). Em razão disso, reações geoquímicas não são consideradas nos modelos deste estudo. Além disso, esses reservatórios geralmente não apresentam fraturas naturais significativas, e as camadas selantes acima e abaixo são tipicamente folhelhos ou argilitos de baixa permeabilidade, facilitando o aprisionamento estratigráfico do H₂ (Zou et al., 2012). Nesse sentido, a escolha de um reservatório arenítico para as simulações é coerente com a finalidade de obter cenários mais otimizados de ASH.

Visando simplificar a análise em termos computacionais e minimizar a influência de irregularidades do reservatório nos resultados, nas análises da etapa 1 foram adotadas geometrias de quadriláteros. Além disso, como forma de avaliar o impacto do mergulho da rocha armazenadora no ASH, foram simuladas as análises com o domínio inclinado a 5°, 10° e 15°, valores indicados como ótimos para o ASH (Okoroafor et al., 2022).

No modelo bidimensional, as dimensões do domínio adotadas foram de 40 m de espessura (eixo y) por 2000 m de comprimento (eixo x) e inclinações variadas do domínio. Com relação à zona de injeção e produção, foi considerado um comprimento de 20 m na parte superior da face esquerda do domínio, representando a região onde está alocado o poço. Quanto

à discretização, foram definidas malhas de elementos finitos não estruturadas com auxílio da ferramenta *Gmsh*, com número aproximado de 3000 elementos.

Ressalta-se que a discretização foi feita de forma a aumentar a densidade de elementos nas proximidades do poço, visando melhorar a precisão da informação e a resolução dos efeitos que são observados na região, onde há maiores variações de comportamento dos fluidos. Na região mais afastada do poço, foi adotada uma discretização mais grosseira como forma de reduzir o tempo de simulação sem afetar consideravelmente os resultados de maneira geral. A Figura 4.1, Figura 4.2 e Figura 4.3 apresentam as geometrias e malhas de cada análise e suas respectivas dimensões e condições de contorno impostas.

As condições de contorno foram estabelecidas considerando a operação do reservatório com controle de vazão no poço, associado a limites de pressão máxima e mínima para injeção e produção, respectivamente. Nas demais fronteiras do domínio, adotou-se condição de não fluxo, representando o efeito de uma rocha capeadora e armadilhas estratigráficas ou estruturais selantes que confinam o reservatório.

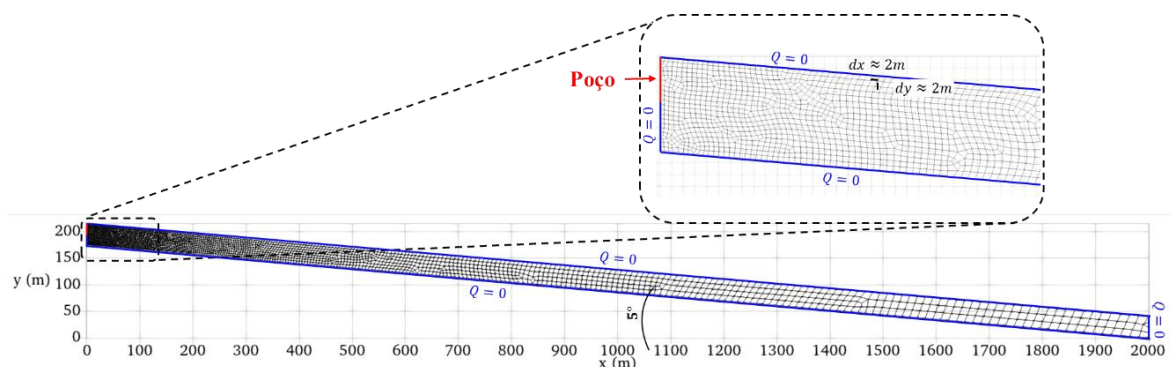


Figura 4.1 – Malha de elementos finitos do reservatório 2D a 5°.

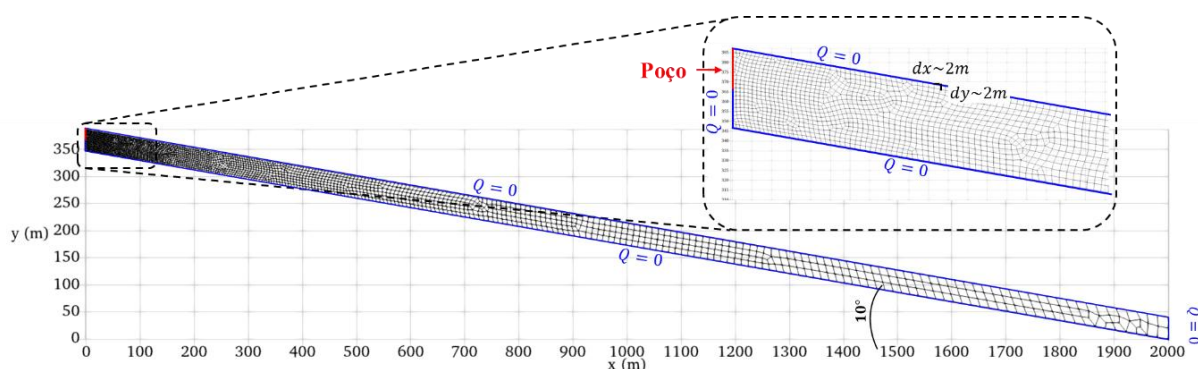


Figura 4.2 – Malha de elementos finitos do reservatório 2D a 10°.

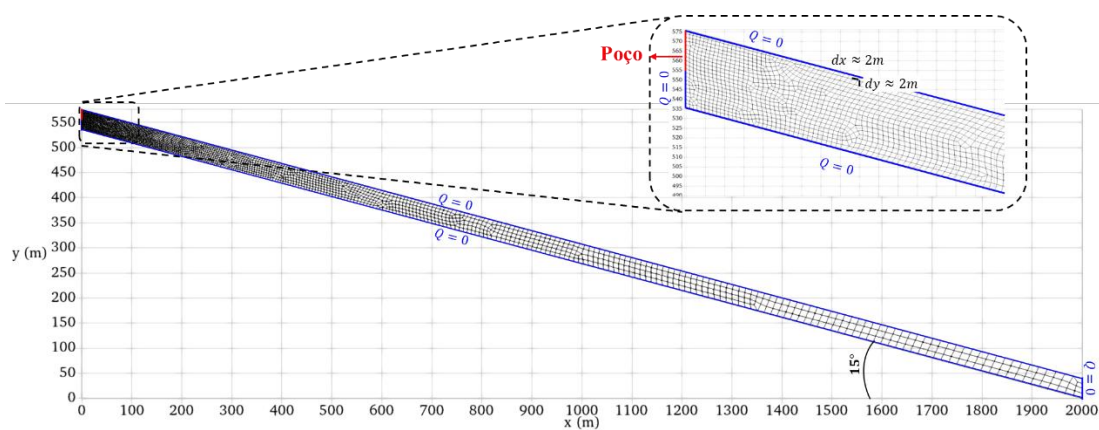


Figura 4.3 – Malha de elementos finitos do reservatório 2D a 15°.

4.2.2 CAMPO DE NAMORADO

Para simular o ASH no reservatório maduro de óleo e gás de Namorado, foi usada a malha de elementos finitos disponibilizada pelo grupo UNISIM, contendo 46680 elementos. A extensão total do reservatório tem 8061 m na direção x, 5771 na direção y, e 502 m na direção z, com uma espessura de aproximadamente 140 m para toda a camada de rocha do reservatório. Os elementos possuem dimensões de aproximadamente 100 m de largura, 100 m de comprimento e 7 m de altura.

Para melhor visualização dos resultados em vista 3D, foram definidas as seções “x” e “y” que passam pelo poço. A Figura 4.4 apresenta a malha discretizada nas vistas isométrica e em planta, sendo as seções x e y as linhas azuis tracejadas na vista em planta.

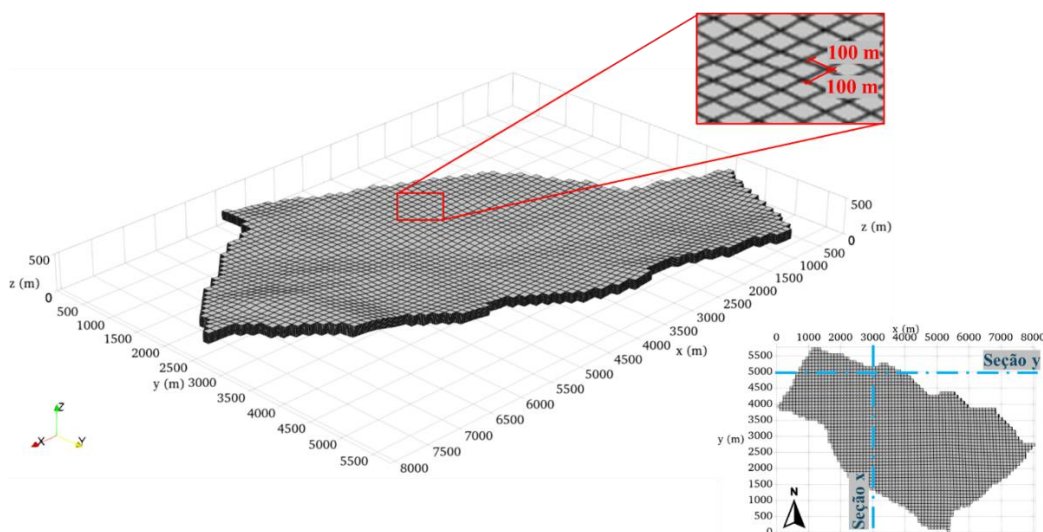


Figura 4.4 – Malhas de elementos finitos do reservatório 3D de Namorado e vista superior do reservatório com seções para visualização de resultados.

Como condições de contorno, definiu-se condições de fluxo zero (Neumann) nas fronteiras do domínio. Na região do poço, foram definidos fluxos com base nos ciclos de operação e respeitando os limites de pressão estabelecidos a uma profundidade de 3000 m, condizente com a profundidade do reservatório de Namorado. Para isso, foram atribuídas condições de contorno do tipo Neumann na linha que passa pelo ponto $x = 3000$ m e $y = 5000$ m, começando da elevação $z = 300$ até a superfície do reservatório. A Figura 4.5 apresenta a disposição do poço e das condições de contorno utilizadas no modelo.

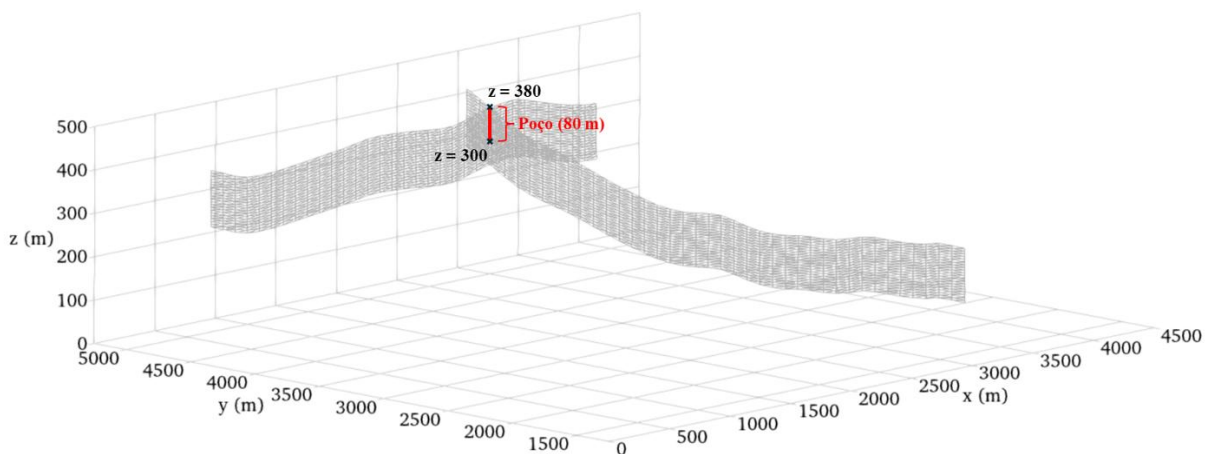


Figura 4.5 – Localização da zona de injeção e produção e definição das condições de contorno do reservatório 3D.

4.3 IMPLEMENTAÇÃO DOS MODELOS

As análises de sensibilidade dos parâmetros de operação têm como objetivo avaliar sua viabilidade para o armazenamento de hidrogênio sob diferentes condições. Para isso, as simulações da operação de ASH abrangem quatro etapas principais: injeção do gás colchão, fechamento, injeção do gás de trabalho, e produção.

A injeção do gás colchão é simulada em período fixo de 365 dias e vazão constante igual às vazões definidas para a etapa de injeção e produção do gás de trabalho. Essa premissa visa reduzir os possíveis efeitos dessa etapa no contexto global da análise, uma vez que o foco principal do estudo não trata das especificidades que envolvem a injeção do gás colchão.

A etapa de fechamento consiste em um período de espera pós injeção do gás colchão, representando um momento onde não há excedente de energia ou demanda por produção de H_2 . Nessa etapa, o poço é fechado e as pressões no reservatório são reequilibradas.

Na fase de injeção, o gás é introduzido pelo poço sob controle de vazão e monitoramento da pressão, com limite máximo estabelecido na região de injeção a depender a profundidade do reservatório (Tabela 4.4). A injeção é feita sob vazão constante e diferentes valores de vazão são avaliados em cada cenário para verificar o impacto dessa variável no modelo.

Por fim, a fase de produção é simulada para avaliar a viabilidade da extração do hidrogênio, considerando o limite mínimo de pressão no poço. Para os modelos, as vazões de produção são fixadas com valores iguais às vazões de injeção. Além disso, como premissa de modelagem, também foram adotados tempos equivalentes de injeção e produção em todos os cenários.

Para as análises, foram considerados os modelos constitutivos apresentados na Tabela 4.2. Já os parâmetros considerados para cada componente estão apresentados na Tabela 4.3.

Tabela 4.2 – Modelos constitutivos adotados para as análises de fluxo.

Propriedade / Modelo	Formulação	Referência
Fluxo em meio poroso	Lei de Darcy	Equação 23
Saturação – Capilaridade	Brooks & Corey	Equações 25 a 28
Difusão	Lei de Fick	Equação 48
Solubilidade do H ₂	Lei de Henry	Equação 46
Compressibilidade – Água	IAPWS	Equação 31
Compressibilidade – Óleo	Modelo isotérmico linear	Equação 39
Compressibilidade – H ₂	Gás Ideal	Equação 52
Viscosidade – Água	IAPW	Equação 32
Viscosidade – Óleo	Constante	Stratiev et al. (2023); Guo et al. (2016)
Viscosidade – H ₂	Modelo linear com base em Lemmon et al. 2018	Figura 3.3

Tabela 4.3 – Características dos fluidos utilizados nas análises.

Propriedade	Fluido	Valor	Fonte
Densidade de referência (kg/m ³)	H ₂	0,0899	-
	Água	1000	IAPWS
	Óleo muito leve	0,821	Stratiev (2023)
	Óleo leve	0,94	Stratiev (2023)
	Óleo pesado	0,964	Stratiev (2023)
Massa molar (kg/mol)	H ₂	0,00216	-
	Água	0,01802	IAPWS
	Óleo muito leve	0,186	Stratiev (2023)
	Óleo leve	0,342	Stratiev (2023)

Propriedade	Fluido	Valor	Fonte
Massa molar (kg/mol)	Óleo pesado	0,369	Stratiev (2023)
	H ₂	Gás ideal	Gás ideal
	Água	$4,50 \times 10^{-10}$	IAPWS
Compressibilidade isotérmica (Pa ⁻¹)	Óleo muito leve	$1,00 \times 10^{-9}$	Bhoendie (2024)
	Óleo leve	$1,00 \times 10^{-9}$	Bhoendie (2024)
	Óleo pesado	$1,00 \times 10^{-9}$	Bhoendie (2024)
	H ₂	$\sim 10^{-5}$	Lemmon (2018)
Viscosidade dinâmica (Pa·s)	Água	$5,47 \times 10^{-4}$	IAPWS
	Óleo muito leve	$3,0 \times 10^{-3}$	Stratiev (2023)
	Óleo leve	$6,0 \times 10^{-2}$	Stratiev (2023)
	Óleo pesado	$1,5 \times 10^{-1}$	Stratiev (2023)
	Água	$6,0 \times 10^{-4}$	Wilke–Chang (1955)
Coeficiente de difusão do H ₂ (m ² /s)	Óleo muito leve	$2,1 \times 10^{-4}$	Wilke–Chang (1955)
	Óleo leve	$1,4 \times 10^{-5}$	Wilke–Chang (1955)
	Óleo pesado	$6,0 \times 10^{-6}$	Wilke–Chang (1955)

4.3.1 ETAPA 1: MODELO SINTÉTICO

A proposta das análises de sensibilidade da etapa 1 é verificar o impacto da mudança de parâmetros básicos de operação e parâmetros de fluxo, dado que, essas características podem apresentar grande variabilidade e conseqüentemente baixa confiabilidade a depender do modelo adotado.

Os parâmetros operacionais que foram definidos como objeto dessa análise são: Vazões operacionais (injeção, produção e colchão), profundidade do reservatório, mergulho da rocha armazenadora e pressão inicial do reservatório. A Tabela 4.4 apresenta os inputs operacionais utilizados nos modelos de reservatório 2D e seus respectivos intervalos de sensibilidade.

Tabela 4.4 – Parâmetros operacionais do modelo simplificado.

Parâmetro	Aquífero	Óleo
Vazão de Injeção, Q _i [kg/s/m]	0,1 / 0,05 / 0,02	0,1 / 0,05 / 0,02
Vazão de produção, Q _p [kg/s/m]	0,1 / 0,05 / 0,02	0,1 / 0,05 / 0,02
Vazão de gás colchão, Q _c [kg/s/m]	0,1	0,05 / 0,07 / 0,1
Profundidade [km]	3 / 4 / 5 / 6	6
Mergulho	5° / 10° / 15°	10
Saturação inicial da fase gasosa	0,0001	0,0001
Pressão inicial, P ₀ [MPa]	30 / 40 / 50 / 60	60
Limite máximo, P _{máx} [MPa]	42 / 52 / 62 / 72	72

Parâmetro	Aquífero	Óleo
Limite mínimo, P_{\min} [MPa]	27 / 37 / 47 / 57	57
Temperatura, T [°C]	50	50
Período de injeção do gás colchão, T_{colch} [dias]	365	365
Período de fechamento, T_{fech} [dias]	90	90
Ciclo de injeção do gás de trabalho, T_{inj} [dias]	180	180
Ciclo de produção do gás de trabalho, T_{prod} [dias]	180	180
Número de ciclos completos, N_{cic}	5	5
Tempo de Simulação, T [dias]	2280	2280
Passo de Tempo, S [dias]	10	10

Foram adotados os dados reportados por Higgs et al. (2024) para a permeabilidade, porosidade, pressão de entrada de ar e saturações residuais no modelo de aquífero arenítico. O índice de distribuição de poros foi considerado igual a 0,81, conforme (Li, 2010). Adicionalmente, utilizou-se diferentes pares de valores de permeabilidade e porosidade, com base em valores de referência (Rezaei et al., 2022; Higgs et al., 2024) a fim de avaliar a sensibilidade desses parâmetros no ASH. A Figura 4.6 e Figura 4.7 apresentam os gráficos da permeabilidade relativa e curva capilar empregados nas análises do aquífero, respectivamente.

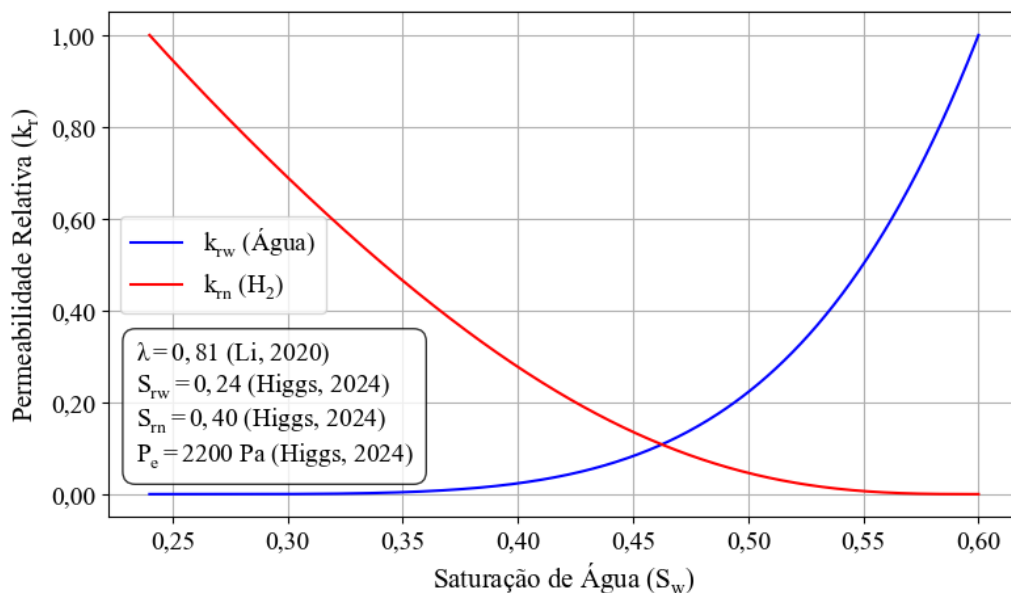


Figura 4.6 – Curvas de permeabilidade relativa H₂-H₂O do aquífero arenítico

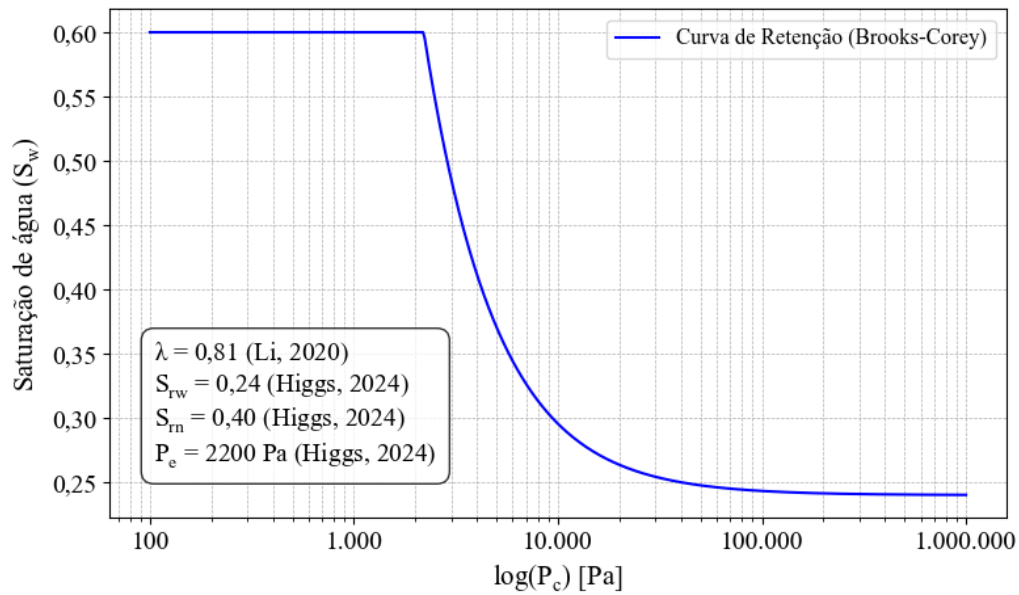


Figura 4.7 – Curva de retenção do aquífero arenítico

Para o modelo de reservatório de óleo, a pressão de entrada de ar, o índice de distribuição de poros e a saturação residual da fase molhante foram considerados com base em Christoffersen et al. (1995). Para a saturação residual da fase não molhante, o valor de 0,27 foi adotado com base em Liao et al. (2024). Os gráficos da Figura 4.8 e Figura 4.9 apresentam os modelos usados com os respectivos parâmetros e a referência adotada.

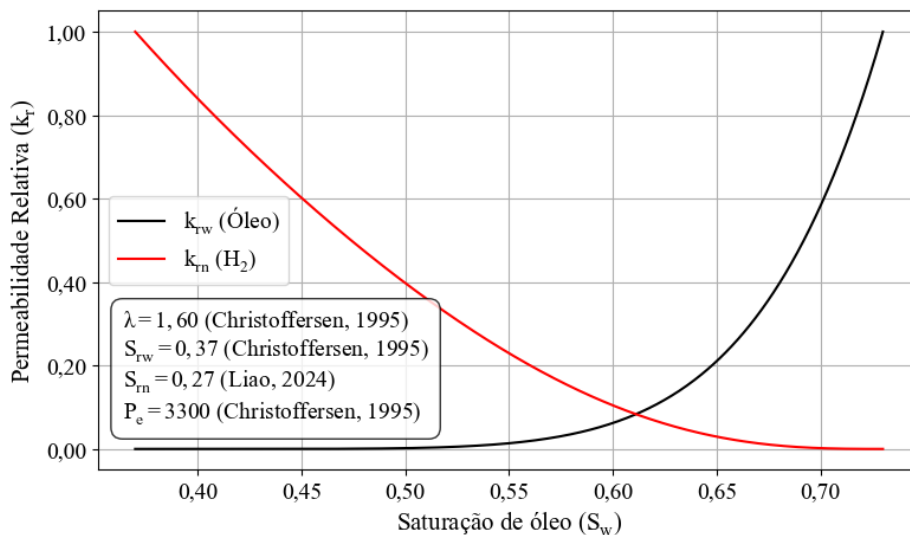


Figura 4.8 – Curvas de permeabilidade relativa H2-óleo do reservatório maduro de óleo

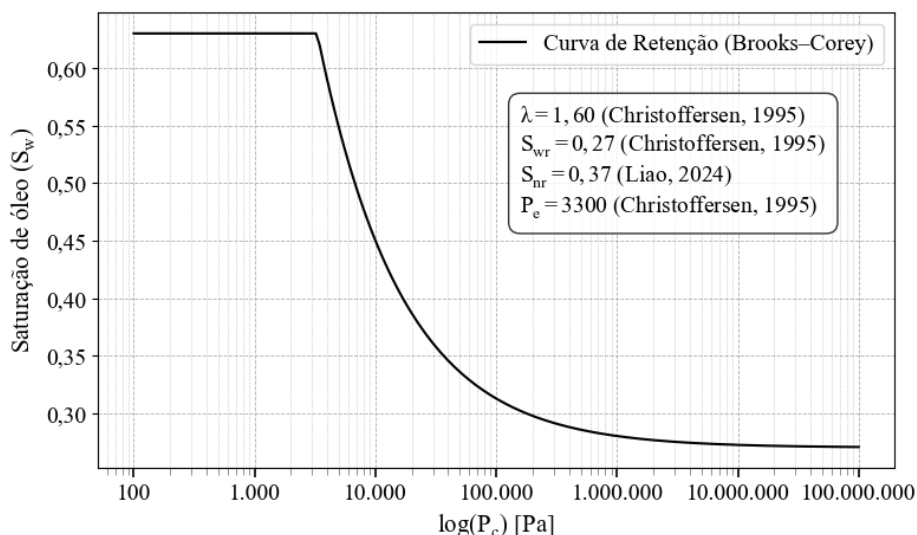


Figura 4.9 – Curva de retenção do reservatório maduro de óleo

A Tabela 4.5 apresenta os parâmetros de fluxo da rocha arenítica dos reservatórios 2D de cada análise, bem como os intervalos de sensibilidade, quando aplicáveis.

Tabela 4.5 – Resumo dos parâmetros de fluxo da rocha arenítica usados no modelo 2D

Parâmetro	Aquífero	Óleo
Permeabilidade, K [m ²]	$3 \times 10^{-14} / 6,5 \times 10^{-13}$	$3 \times 10^{-14} / 6,5 \times 10^{-13}$
Porosidade, ϕ	0,16 / 0,23	0,16 / 0,21
Índice de distribuição de poros, λ	0,81	1,6
Pressão de entrada de ar, P _e [MPa]	2200	3300
Saturação residual molhante, S _{rw}	0,24	0,37
Saturação residual não-molhante, S _{rn}	0,40	0,27

Em síntese, as análises foram organizadas em dois grupos: aquífero e reservatório de óleo. A Tabela 4.6 e Tabela 4.7 apresentam, respectivamente, os cenários simulados em cada grupo, juntamente com os intervalos de sensibilidade considerados.

No modelo de aquífero, as variáveis de sensibilidade consideradas foram: profundidade, vazões de operação, mergulho do reservatório, permeabilidade absoluta e porosidade. A Tabela 4.6 apresenta os valores de entrada adotados em cada cenário de simulação, sendo Q_c, Q_i e Q_p as vazões de gás colchão, injeção e produção, respectivamente.

Tabela 4.6 – Resumo dos cenários simulados no aquífero arenítico.

Cenário	Profundidade (m)	Q _c , Q _i , Q _p (kg/s/m)	Mergulho	K (m ²) e ϕ
1.1.1.1	3000	0,010	5°	3×10^{-14} e 0,16
1.1.1.2	3000	0,010	10°	3×10^{-14} e 0,16
1.1.1.3	3000	0,010	15°	3×10^{-14} e 0,16

Cenário	Profundidade (m)	Q_c, Q_i, Q_p (kg/s/m)	Mergulho	K (m ²) e ϕ
1.1.1.4	3000	0,010	10°	$6,5 \times 10^{-13}$ e 0,23
1.1.2.1	3000	0,005	5°	3×10^{-14} e 0,16
1.1.2.2	3000	0,005	10°	3×10^{-14} e 0,16
1.1.2.3	3000	0,005	15°	3×10^{-14} e 0,16
1.1.2.4	3000	0,005	10°	$6,5 \times 10^{-13}$ e 0,23
1.1.3.1	3000	0,002	5°	3×10^{-14} e 0,16
1.1.3.2	3000	0,002	10°	3×10^{-14} e 0,16
1.1.3.3	3000	0,002	15°	3×10^{-14} e 0,16
1.1.3.4	3000	0,002	10°	$6,5 \times 10^{-13}$ e 0,23
1.2.1.1	4000	0,010	10°	3×10^{-14} e 0,16
1.3.1.1	5000	0,010	10°	3×10^{-14} e 0,16
1.4.1.1	6000	0,010	10°	3×10^{-14} e 0,16

Nas análises de sensibilidade realizadas para o modelo de reservatório maduro de óleo, foram mantidas fixas as variáveis profundidade (6000 m), inclinação (10°), permeabilidade (3×10^{-14} m²) e porosidade (0,16). Optou-se por variar outros parâmetros relacionados ao modelo de aquífero, de modo a ampliar o escopo da análise e fornecer resultados sobre diferentes aspectos da operação e das propriedades dos fluidos. A Tabela 4.7 apresenta os parâmetros considerados em cada cenário de sensibilidade.

Tabela 4.7 – Resumo dos cenários simulados no reservatório maduro de óleo

Cenário	Viscosidade dinâmica (Pa·s)	Q_c (kg/s/m)	Q_i, Q_p (kg/s/m)
2.1.1	0,06 (leve)	0,05	0,020
2.1.2	0,06 (leve)	0,07	0,020
2.1.3	0,06 (leve)	0,1	0,020
2.1.4	0,06 (leve)	0,1	0,050
2.1.5	0,06 (leve)	0,1	0,100
2.2.1	0,003 (muito leve)	0,05	0,020
2.2.2	0,003 (muito leve)	0,07	0,020
2.2.3	0,003 (muito leve)	0,1	0,020
2.2.4	0,003 (muito leve)	0,1	0,050
2.2.5	0,003 (muito leve)	0,1	0,100
2.3.1	0,15 (pesado)	0,05	0,020
2.3.2	0,15 (pesado)	0,07	0,020
2.3.3	0,15 (pesado)	0,1	0,020
2.3.4	0,15 (pesado)	0,1	0,050
2.3.5	0,15 (pesado)	0,1	0,100

4.3.2 ETAPA 2: CAMPO DE NAMORADO

No modelo 3D de Namorado, as análises foram divididas em dois cenários, sendo o

primeiro deles com permeabilidade e porosidade constante e o segundo com características heterogêneas. A proposta desses modelos é avaliar de maneira simplificada a capacidade volumétrica do campo em termos de ASH, associando também ao potencial de geração de energia. Além disso, os modelos visam compreender o impacto dos contrastes de permeabilidade no comportamento dos fluidos.

No modelo homogêneo, usou-se permeabilidade constante de $4 \times 10^{-3} \text{ m}^2$ e porosidade de 0,26, conforme indicado por (Souza et al., 2005). Já no modelo heterogêneo, foram consideradas permeabilidades e porosidades aleatórias no domínio, dentro da faixa de valores apresentada no modelo disponibilizado pelo grupo UNISIM e seguindo uma distribuição log-normal de probabilidades. Essa atribuição se deu considerando uma relação entre o par permeabilidade-porosidade a partir do modelo Kozeny-Carman.

A Figura 4.11 apresenta a curva de distribuição de probabilidades adotada para as porosidades encontradas na rocha, admitindo-se uma média de 0,13 e desvio padrão de 0,08 – valores calculados considerando os dados disponíveis para todo o reservatório. Para obter a permeabilidade em cada elemento, inicialmente ajustou-se o parâmetro S da função de Kozeny-Carman para o valor $K = 1 \times 10^{-3} \text{ m}^2$ e $\phi = 0,13$, que são os valores médios da base de dados. O valor de $c = 5$ foi considerado com base em dados experimentais apresentados por Rabbani (2014) para o Arenito de Berea. A função Kozeny-Carman com o parâmetro S ajustado para esses valores está apresentada na Figura 4.10.

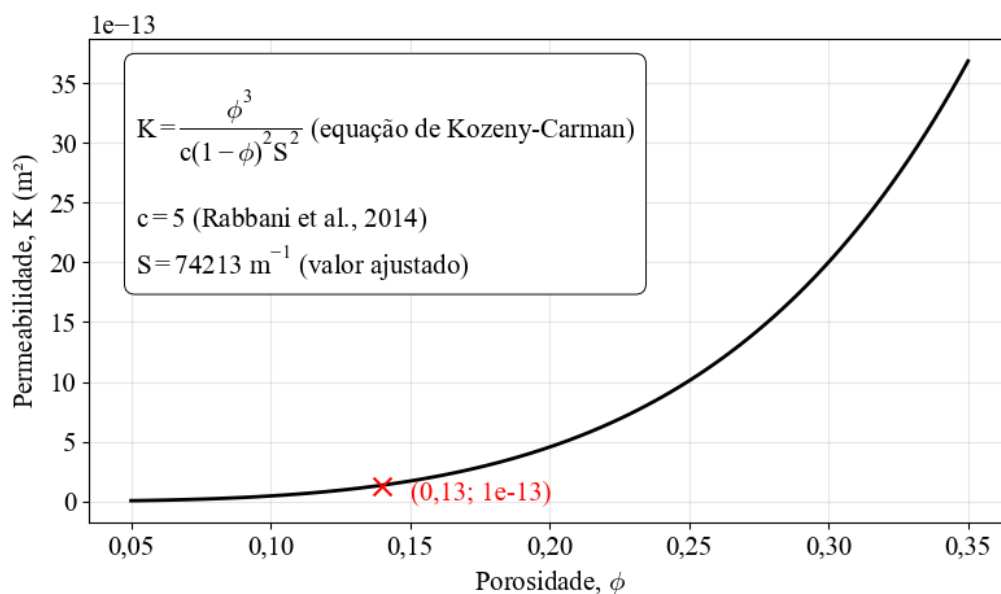


Figura 4.10 – Relação entre permeabilidade e porosidade a partir da função Kozeny-Carman.

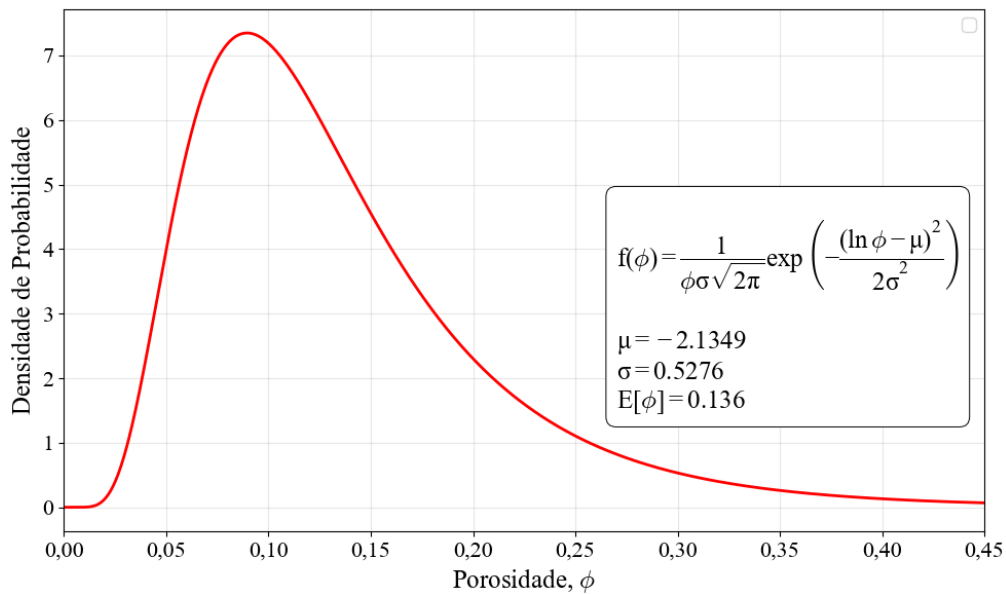


Figura 4.11 – Curva de densidade de probabilidade das porosidades do campo de Namorado

Com a CDF de porosidades, foi gerado um arquivo contendo valores aleatórios de porosidade para cada elemento do domínio e, a partir deles, foram calculados os valores de permeabilidade correspondentes. A Tabela 4.8 resume as estatísticas dos dados obtidos e utilizados para o modelo heterogêneo de reservatório 3D. A Figura 4.12 apresenta o mapa de porosidades do domínio completo e a Figura 4.13 mostra a os campos de porosidade nas seções de interesse, localizadas em $x = 3000$ m e $y = 5000$ m.

Tabela 4.8 – Resumo estatístico dos parâmetros adotados para o campo de Namorado na condição heterogênea.

Valor	Porosidade, ϕ	Permeabilidade, K (m^2)
Média	0,13	$2,8 \times 10^{-13}$
Desvio padrão	0,08	$1,6 \times 10^{-13}$
Máximo	0,30	$2,0 \times 10^{-12}$
Mínimo	0,01	$8,1 \times 10^{-17}$

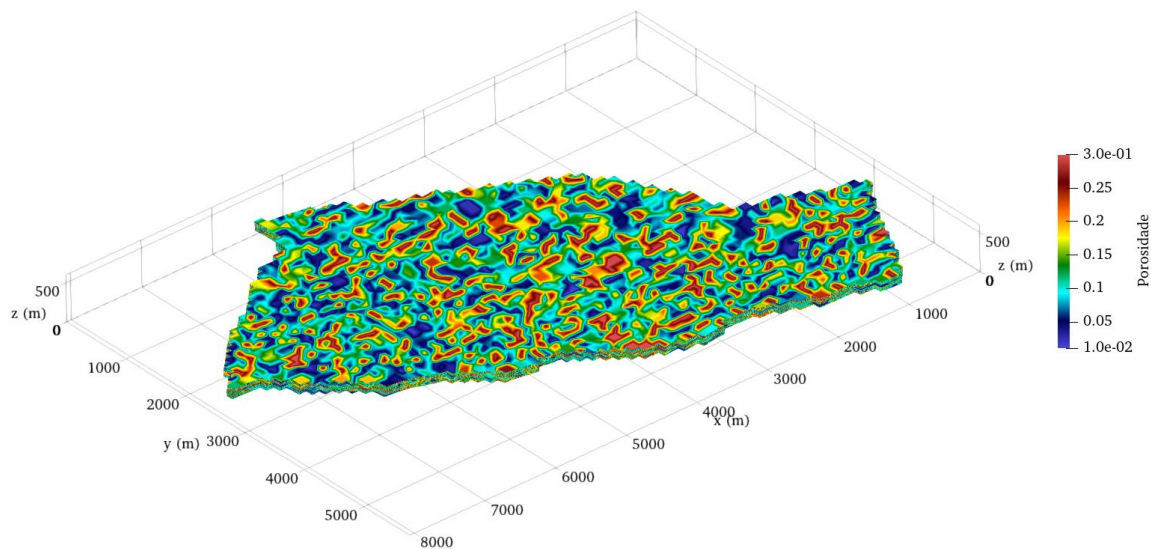


Figura 4.12 – Mapa de porosidades adotado para o modelo heterogêneo do Campo de Namorado

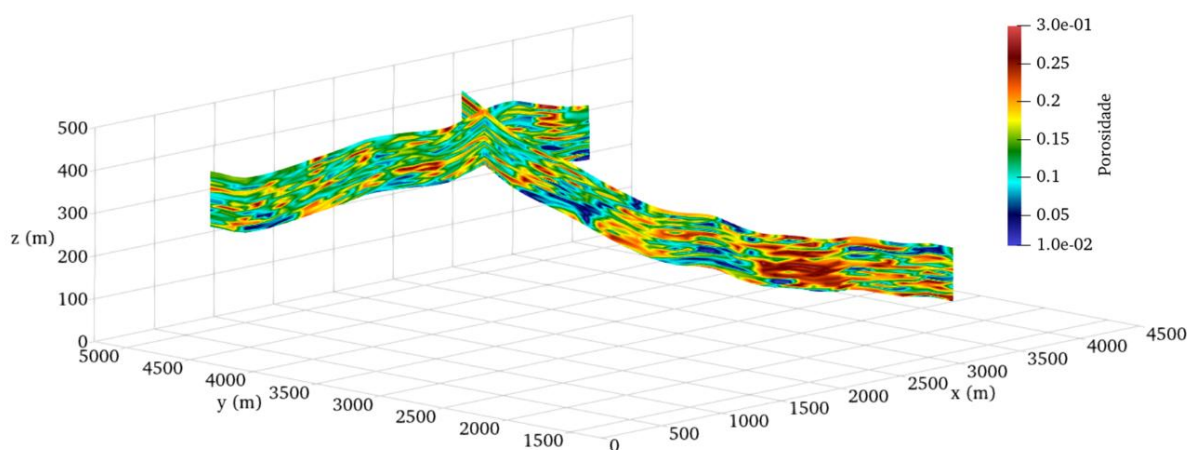


Figura 4.13 – Campo de porosidades nas seções de interesse

Embora os campos de permeabilidade e porosidade utilizados neste estudo não representem fielmente a geologia do campo de Namorado, eles permitem avaliar a sensibilidade do comportamento do hidrogênio em meio poroso diante de diferentes contrastes de permeabilidade. Dessa forma, mesmo sem reproduzir a conectividade e as heterogeneidades reais controladas por processos geológicos, os cenários gerados fornecem uma base para a compreensão dos impactos gerais da heterogeneidade nas dinâmicas de migração e armazenamento do gás.

Para os fluidos, adotou-se os mesmos parâmetros do óleo pesado utilizado nas análises de sensibilidade, conforme indicado na Tabela 4.2. Já as vazões de gás colchão e vazão operacional foram mantidas constantes com valor de $1,1 \times 10^8 \text{ Sm}^3/\text{d}$. Os demais parâmetros de

operação também foram mantidos os mesmos das análises de sensibilidade no modelo sintético. A Tabela 4.9 e Tabela 4.10 resumem os parâmetros usados.

Tabela 4.9 – Resumo dos parâmetros de fluxo da rocha arenítica usados no modelo 3D

Parâmetro	Valor
Permeabilidade, K [m^2]	4×10^{-13} / variável
Porosidade, ϕ	0,26 / variável
Índice de distribuição de poros, l	0,81
Pressão de entrada de ar, P_e [MPa]	2200
Saturação residual molhante, S_{rw}	0,24
Saturação residual não-molhante, S_{rn}	0,40

Tabela 4.10 – Parâmetros operacionais do modelo de Namorado

Parâmetro	Valor
Vazão de Injeção, Q_i [Sm^3/d]	$1,1 \times 10^8$
Vazão de produção, Q_p [Sm^3/d]	$1,1 \times 10^8$
Vazão de gás colchão, Q_c [Sm^3/d]	$1,1 \times 10^8$
Profundidade, H [km]	3
Pressão inicial, P_0 [MPa]	30
Limite máximo, $P_{m\acute{a}x}$ [MPa]	42
Limite mínimo, $P_{m\acute{i}n}$ [MPa]	25
Temperatura, T [$^{\circ}C$]	50
Período de injeção do gás colchão, T_{colch} [dias]	365
Período de fechamento, T_{fech} [dias]	90
Ciclo de injeção do gás de trabalho, T_{inj} [dias]	180
Ciclo de produção do gás de trabalho, T_{prod} [dias]	180
Número de ciclos completos, N_{cic}	5
Tempo de Simulação, T [dias]	2280
Passo de Tempo, S [dias]	10

4.4 MÉTRICAS DE AVALIAÇÃO DA PERFORMANCE

A performance do processo de armazenamento de hidrogênio em reservatórios subterrâneos diz respeito a duas principais métricas: a pureza e o fator de recuperação. Conforme mencionado no Item 2.4, essas medidas não dependem apenas do volume útil do reservatório, mas também a outras variáveis como a permeabilidade da matriz rochosa, a interação do H_2 com outros componentes e o comportamento da pluma de maneira geral.

O fator de recuperação (FR), pôde ser determinado a partir da razão entre a massa total injetada de H_2 no ciclo e a massa total extraída. Esse valor é determinado em porcentagem para cada ciclo completo executado e é dado pela equação:

$$FR = \frac{m_{1,i}^{inj}}{m_{1,i}^{prod}} \quad (60)$$

Onde $m_{1,i}^{inj}$ é a massa de H₂ injetada no ciclo i e $m_{1,i}^{prod}$ é a massa de H₂ produzida no ciclo i.

Ao final de todos os ciclos executados, foi obtido também o fator de recuperação médio (FR_{med}), que é calculado conforme a equação:

$$FR_{med} = \frac{\sum_1^5 m_{1,i}^{inj}}{\sum_1^5 m_{1,i}^{prod}} \quad (61)$$

E o fator de recuperação último (FR_{ult}), que é resultado do fator de recuperação após quinto ciclo. Esse parâmetro indica quais cenários apresentam maior ganho de desempenho ao longo da operação, refletindo a tendência de aumento da recuperação com os ciclos sucessivos.

Além disso, outra métrica importante para compreender a viabilidade de um sistema de armazenamento é a pureza do H₂ produzido (P), que está diretamente associada às características dos fluidos, do meio e às estratégias operacionais adotadas. Esse parâmetro quantifica a fração de hidrogênio presente no fluido produzido e, portanto, representa a parcela do gás que pode ser efetivamente aproveitada para geração de energia.

Valores reduzidos de pureza implicam na necessidade de etapas adicionais de separação e tratamento, o que pode elevar significativamente os custos do processo e comprometer a atratividade econômica da operação. Dessa forma, o cálculo da pureza foi realizado a partir da equação:

$$P = \frac{m_{1,i}^{inj}}{m_{1,i}^{prod} + m_{2,i}^{prod}} \quad (62)$$

Onde $m_{2,i}^{prod}$ é a massa de fluido secundário produzida no ciclo i.

A pureza última (P_{ult}) também foi extraída do último ciclo de produção de cada cenário e o cálculo da pureza média (P_{med}) dos cenários foi feito considerando-se a mesma formulação usada para o fator de recuperação médio:

$$P_{med} = \frac{\sum_1^5 m_{1,i}^{inj}}{\sum_1^5 m_{1,i}^{prod} + \sum_1^5 m_{2,i}^{prod}} \quad (63)$$

No entanto, a viabilidade de operação do ASH não depende apenas do fator de recuperação e da pureza do H₂ extraído, mas também da capacidade de produção e armazenamento do meio, que está relacionada à quantidade de energia que o sistema é capaz de gerar durante os períodos de produção do gás. Nesse sentido, a massa de H₂, associada ao

seu poder calorífico e à eficiência energética do sistema, pode fornecer outra métrica relevante para a análise de viabilidade do ASH.

A capacidade de armazenamento e produção de energia foi estudada para o modelo 3D de Namorado. No caso das análises 2D, a massa é expressa em kg/m, o que pode dificultar a interpretação da quantidade total armazenada. Assim, a taxa de massa serve apenas como parâmetro de comparação entre os diferentes cenários 2D, não sendo possível estimar a viabilidade em escala real. Para estimar a energia gerada nos 6 meses de produção para o Campo de Namorado, o potencial calorífico do H₂ foi convertido em energia química usando a equação:

$$E_{H_2} = m_{H_2,6m} \cdot \frac{PC_{H_2}}{3,6 \cdot 10^6} \cdot \eta_c \quad (64)$$

Onde E_{H_2} é a energia gerada pelo H₂ usando célula a combustível (GWh/semestre), $m_{H_2,6m}$ é a massa de H₂ produzida em 6 meses em kg, PC_{H_2} é o potencial calorífico do H₂ em MJ/kg e η_c é a eficiência da célula a combustível em porcentagem.

A estimativa da energia gerada foi obtida a partir da potência instalada para cada categoria ($P_{inst.}$). O cálculo considerou um período t de seis meses (4380 h) e um fator de capacidade (FC), que expressa a razão entre a energia efetivamente gerada (E_U) e a energia máxima possível, indicando o aproveitamento médio do potencial de geração, conforme a Equação 65. A Tabela 4.11 apresenta o potencial de energia elétrica gerada por cada tipo de estrutura, conforme a definição da ANEEL (2023), que se baseia na potência instalada.

$$E_U = \frac{P_{inst.} \cdot FC \cdot t}{1000} \quad (65)$$

Tabela 4.11 – Potencial de geração elétrica de usinas hidrelétricas por tipo (ANEEL, 2023)

Tipo de usina	Potência instalada (MW)	Fator de capacidade	Energia gerada por semestre
Central Geradora Hidrelétrica (CGH)	< 5	~35%	< 8 GWh
Pequena Central Hidrelétrica (PCH)	5 – 30	~40%	53 GWh
Usina Hidrelétrica (UHE)	> 30	~50%	> 65 GWh

Com o objetivo de estabelecer uma base de comparação para o potencial energético do campo de Namorado, foi elaborado um levantamento de usinas hidrelétricas de grande porte brasileiras, considerando seus valores de potência instalada e geração anual de energia (Tabela 4.12). A geração semestral foi estimada a partir da aplicação do fator de capacidade médio, calculado com base na geração efetiva registrada no ano de 2022 para cada usina. Para as usinas

cujos dados anuais de geração não estavam disponíveis, adotou-se um fator de capacidade típico de 45%. Essa abordagem permite contextualizar a ordem de grandeza do potencial energético do reservatório em relação a fontes consolidadas de geração elétrica no país.

Tabela 4.12 – Maiores geradoras hidrelétricas do Brasil em potência instalada (ANEEL, 2025; ITAIPU, 2023).

Usina	Potência Instalada (MW)	Geração em 2022 (MWh)	Fator de capacidade	Energia gerada em 6 meses (GWh)
Itaipu	14.000	69.873.095	100,0	34.937
Belo Monte	11.233	37.138.721	35,7	18.569
Tucuruí	8.370	32.745.318	44,7	16.373
Santo Antônio	3.568	17.843.770	45,4	8.922
Xingó	3.162	15.390.444	44,2	7.695
Jirau	3.750	14.011.795	36,0	7.006
Ilha Solteira	3.444	10.022.666	33,2	5.011
Billings	889	-	45,0 (estimado)	1.752
Campos Novos	880	-	45,0 (estimado)	1.734
Barra Grande	708	-	45,0 (estimado)	1.395
Capivara	619	-	45,0 (estimado)	1.220
Boa Esperança	237	-	45,0 (estimado)	467

Além disso, para dimensionar o impacto prático de uma solução energética, é possível estabelecer um paralelo com o consumo médio de energia no Brasil. Considerando o consumo médio per capita nacional, incluindo todos os setores, de aproximadamente 2.900 kWh por ano (EPE, 2025), o potencial energético do campo de Namorado pode ser convertido em um equivalente populacional atendido.

Por exemplo, a geração semestral estimada para o reservatório (ex.: X GWh) seria suficiente para suprir a demanda elétrica semestral de uma cidade com Y milhares de habitantes. Essa métrica vai além da comparação entre usinas e permite visualizar o potencial do projeto em termos de seu impacto social direto, conectando a escala de geração à escala do consumo final.

5 MODELOS SINTÉTICOS 2D: ANÁLISES DE SENSIBILIDADE

Esta seção apresenta os resultados das análises de sensibilidade realizadas para os modelos sintéticos de aquífero e reservatório maduro de óleo. São exibidas os principais resultados dos modelos, incluindo as distribuições de saturação de gás e óleo, campos de pressão e mobilidade da pluma. Além disso, são discutidos os efeitos de cada parâmetro de sensibilidade adotado, bem como um resumo dos cenários de melhor desempenho, a comparação entre os modelos e a identificação dos parâmetros mais influentes na performance do sistema.

5.1 AQUÍFERO

As simulações conduzidas no modelo de aquífero apresentadas nesta seção são divididas em 4 análises principais, sendo elas:

- Avaliação do comportamento da pluma de H_2 (Seção 5.1.1): examina a formação e a evolução espacial da saturação gasosa durante os ciclos, considerando efeitos de segregação gravitacional, diferenças de densidade e viscosidade entre os fluidos e a ocorrência de aprisionamento capilar e estratigráfico.
- Monitoramento das pressões médias na região do poço (Seção 5.1.2): acompanha o desenvolvimento das pressões no aquífero durante os ciclos, identificando possíveis cenários críticos associados a gradientes elevados e avaliando a influência da vazão, profundidade e geometria do reservatório nos limites operacionais de pressão.
- Avaliação da mobilidade e do deslocamento do H_2 (Seção 5.1.3): quantifica a extensão horizontal e vertical da pluma ao longo dos diferentes cenários, discutindo a influência do mergulho do reservatório, das propriedades hidráulicas e dos efeitos gravitacionais na redistribuição do gás e na recuperação após cada ciclo.
- Análise das métricas de eficiência do ASH (Seção 5.1.4): apresenta o desempenho global do ASH, com foco no fator de recuperação, pureza do gás produzido e massa recuperada, destacando tendências gerais e variações entre cenários.

5.1.1 COMPORTAMENTO DA PLUMA DE H_2

A Figura 5.1, Figura 5.2 e Figura 5.3 apresentam a evolução da pluma de H_2 para o

aquífero arenítico inclinado a 5° , 10° e 15° , respectivamente, ao longo dos 5 ciclos de operação. Ressalta-se que o limite foi estabelecido com base na região cuja saturação de gás H_2 corresponde a 0,40, a fim de limitar a pluma na região móvel do gás, dado que a saturação residual foi definida por esse valor.

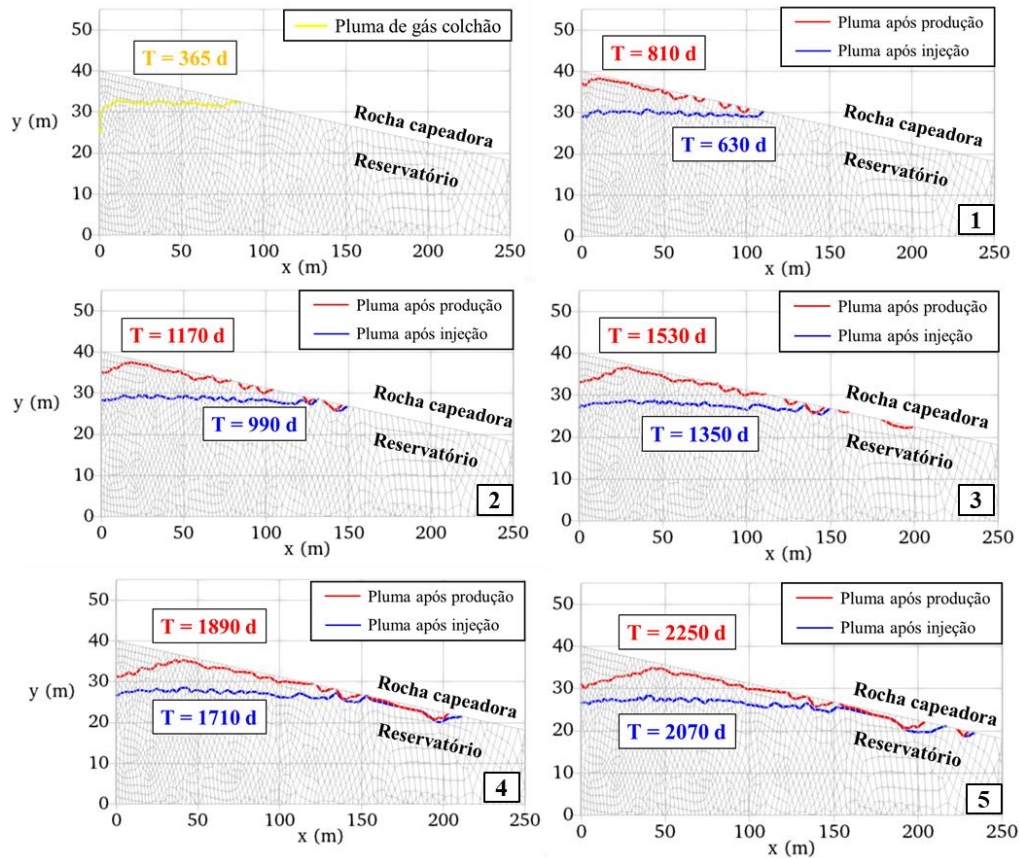


Figura 5.1 – Pluma de H_2 ao longo dos ciclos (mergulho = 5°).

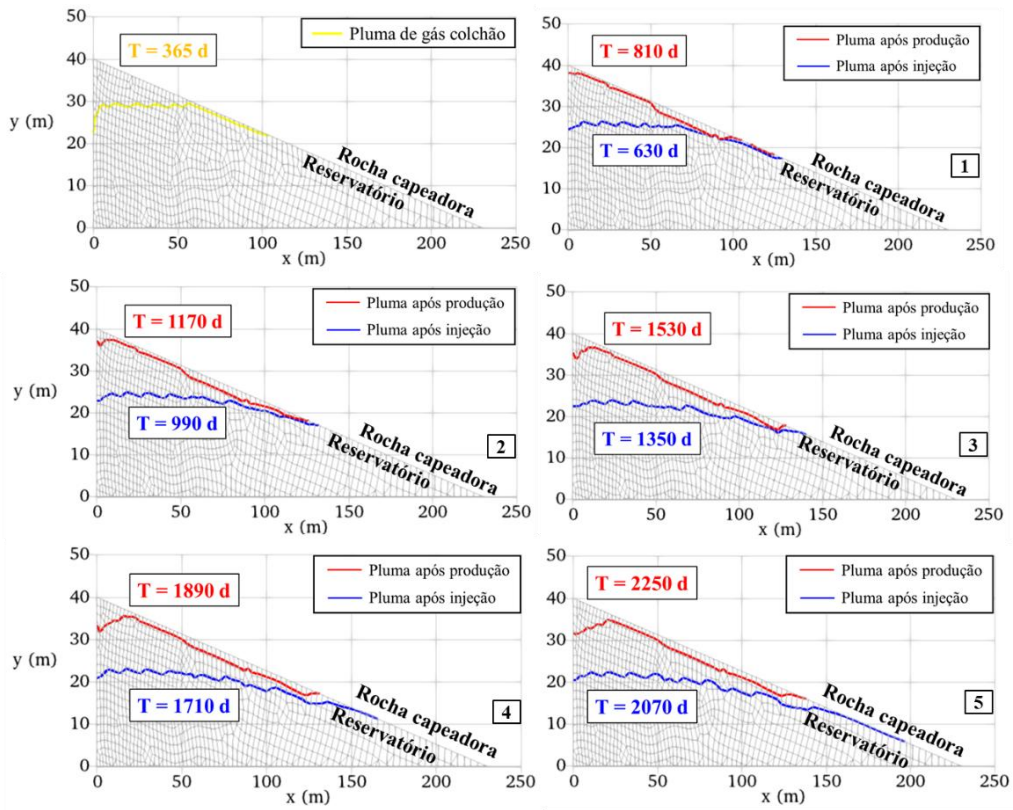


Figura 5.2 – Pluma de H₂ ao longo dos ciclos (mergulho = 10°).

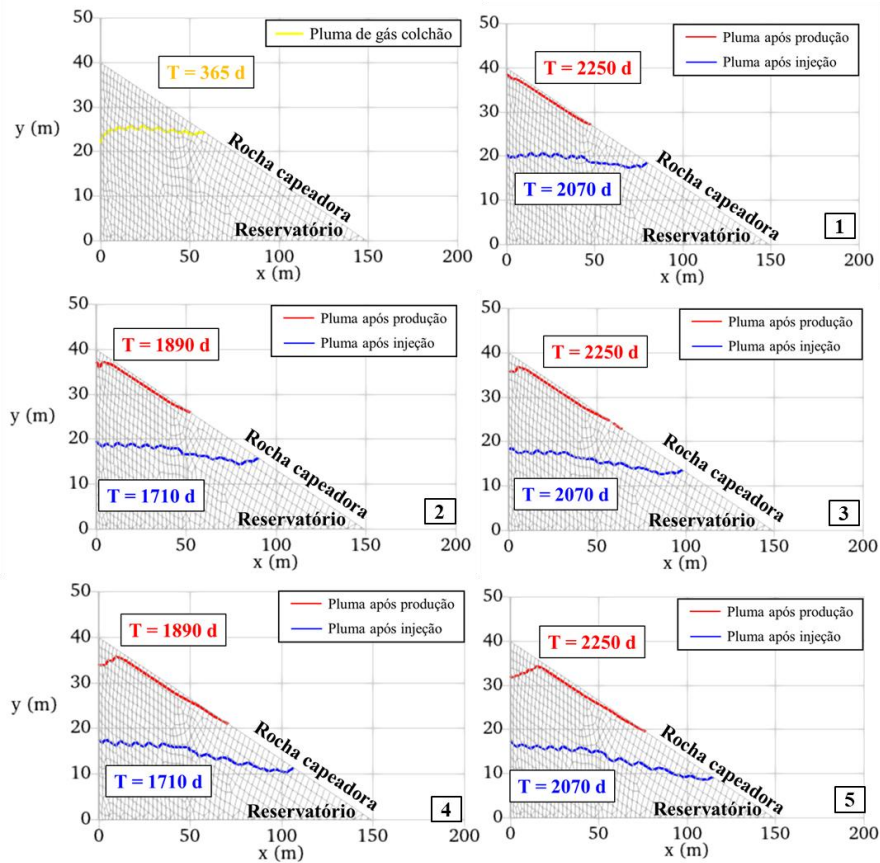


Figura 5.3 – Pluma de H₂ ao longo dos ciclos (mergulho = 15°).

Observa-se que o comportamento da pluma pós ciclo de produção apresenta redução das saturações de gás próximas ao poço, porém mantendo concentrações residuais em regiões mais afastadas. Esse mecanismo decorre do aprisionamento capilar, que impede o completo escoamento do gás, e do fenômeno de gravity override, que mantém parte do hidrogênio aprisionado sob a rocha capeadora.

No caso de reservatórios com menor ângulo de mergulho, a saturação residual de gás nas regiões mais afastadas do poço foi maior do que nos outros modelos, conforme mostra a Figura 5.1. Nesse caso, a segregação gravitacional amplificou o aprisionamento capilar e estratigráfico. Já o caso com maior ângulo de mergulho, o efeito foi o contrário: além da extensão da pluma na direção horizontal ser reduzida, a pluma residual pós produção se manteve mais controlada nas proximidades do poço em comparação aos outros dois modelos.

Em termos de saturação residual do gás após os 5 ciclos de operação, a Figura 5.4, Figura 5.5 e Figura 5.6 apresentam os resultados para cada condição de mergulho simulada nos cenários 1.1.1.1, 1.1.1.2 e 1.1.1.3, respectivamente.

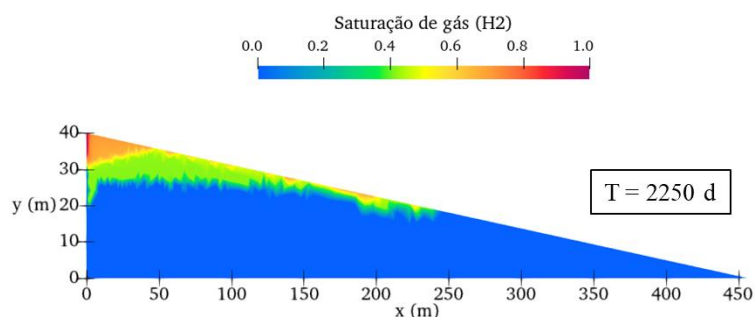


Figura 5.4 – Saturação residual de H₂ após o último ciclo de produção (Cenário 1.1.1.1 - mergulho = 5°).

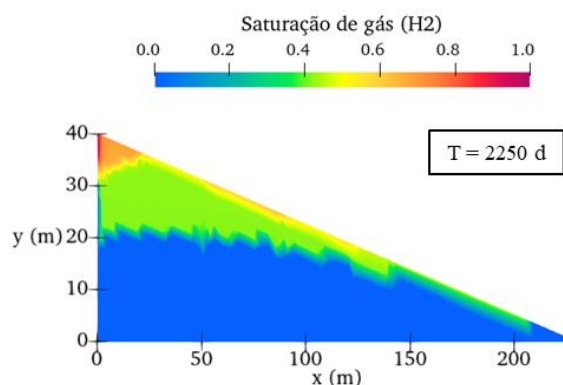


Figura 5.5 – Saturação residual de H₂ após o último ciclo de produção (Cenário 1.1.1.2 - mergulho = 10°).

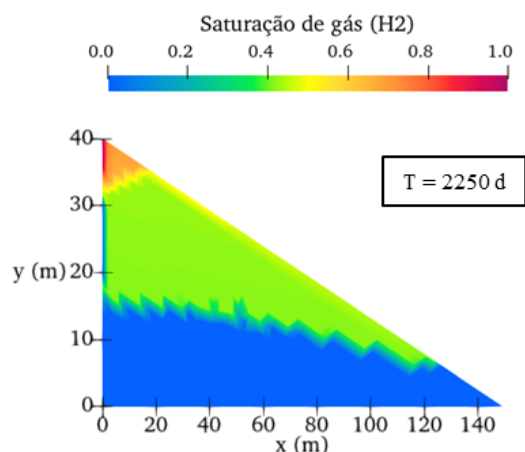


Figura 5.6 – Saturação residual de H₂ após o último ciclo de produção (Cenário 1.1.1.3 - mergulho = 15°).

De modo geral, os resultados apresentados nas figuras anteriores refletem o mesmo comportamento identificado nos demais cenários analisados no aquífero arenítico: predominam os efeitos de segregação gravitacional e, nos reservatórios com menor ângulo de mergulho, esse efeito provoca maior afastamento da pluma em relação à zona do poço.

Na sequência, são apresentados os resultados de cada modelo de aquífero em termos de pressões desenvolvidas no poço, mobilidade do gás e das principais métricas de eficiência, representadas pelo fator de recuperação, pureza e massa de H₂ produzida por ciclo.

5.1.2 PRESSÃO NO POÇO

As pressões desenvolvidas na região do poço dependem diretamente das vazões de injeção ou extração de gás adotadas, que também estão associadas diretamente a quantidade de gás injetado. Nos modelos de aquífero, observa-se que o reservatório responde a essas variações de forma global, conforme ilustrado na Figura 5.7. Em outras palavras, acréscimos de pressão próximos ao poço resultam em aumentos significativos de pressão na região oposta do reservatório.

Esse comportamento faz com que o gradiente de pressão diminua no reservatório como um todo, dado que variações de pressão são observadas em grandes distâncias. A exemplo disso, o cenário 1.1.1.2 apresentou máxima pressão no reservatório após o primeiro período de injeção, com valor próximo a 46 MPa, apenas 4 MPa acima da pressão registrada no poço. Nesse caso, a pressão máxima estabelecida como critério de parada foi atingida na região de injeção no primeiro ciclo, tendo variado de 27 MPa (pressão inicial) até 42 MPa.

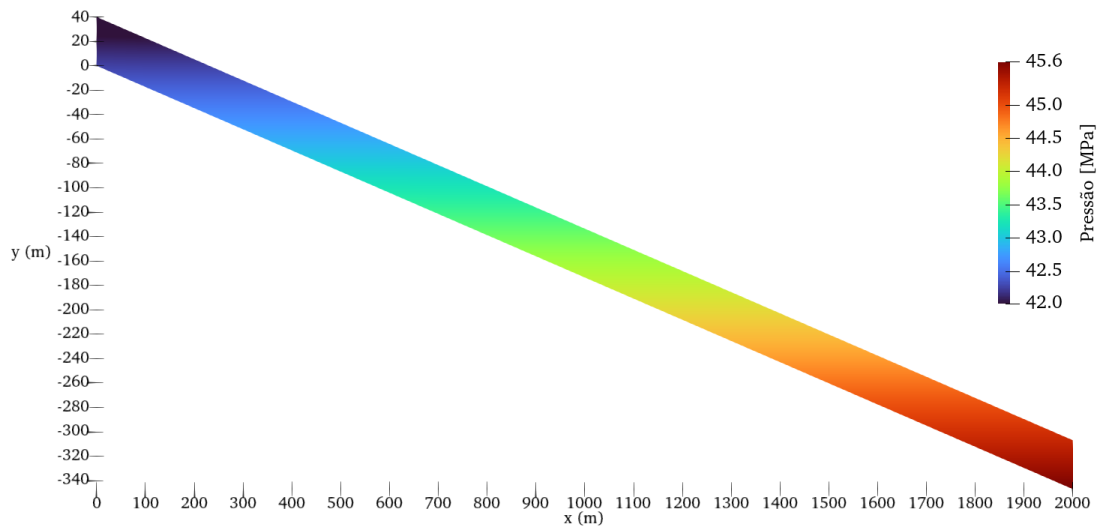


Figura 5.7 – Pressão máxima atingida no aquífero – exemplo do cenário 1.1.1.2.

De modo geral, em todos os modelos observa-se a dependência da pressão no poço em relação à vazão de operação: quanto maior a vazão, maior a pressão desenvolvida, conforme ilustrado na Figura 5.8. O gráfico compara três modelos com os mesmos parâmetros de entrada, variando apenas as vazões de injeção e produção do gás de trabalho.

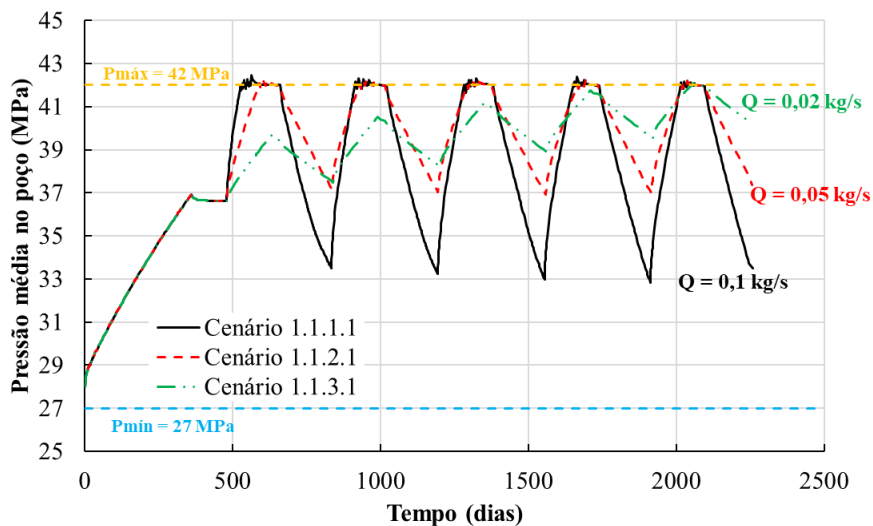


Figura 5.8 – Influência da vazão de operação na pressão desenvolvida no poço (aquífero).

Do ponto de vista operacional, o uso de maiores vazões de injeção tende a elevar a pressão no poço, fazendo com que o limite máximo estabelecido (42 MPa) seja alcançado mais rapidamente.

O mesmo ocorre para a vazão de produção, porém, nesse caso, o efeito é a aceleração

da queda de pressão até o limite mínimo admissível. Ressalta-se que esse problema não foi observado nos cenários simulados no aquífero, uma vez que a pressurização promovida pelo gás colchão foi suficiente para manter a pressão em níveis superiores.

O mergulho da rocha armazenadora também influencia o acréscimo de pressão observado no poço, conforme ilustrado no gráfico da Figura 5.9. Os cenários apresentados na figura correspondem a simulações realizadas para uma profundidade de 3000 m e vazão de operação de 0,05 kg/s/m, no entanto, o comportamento se estende para os demais cenários.

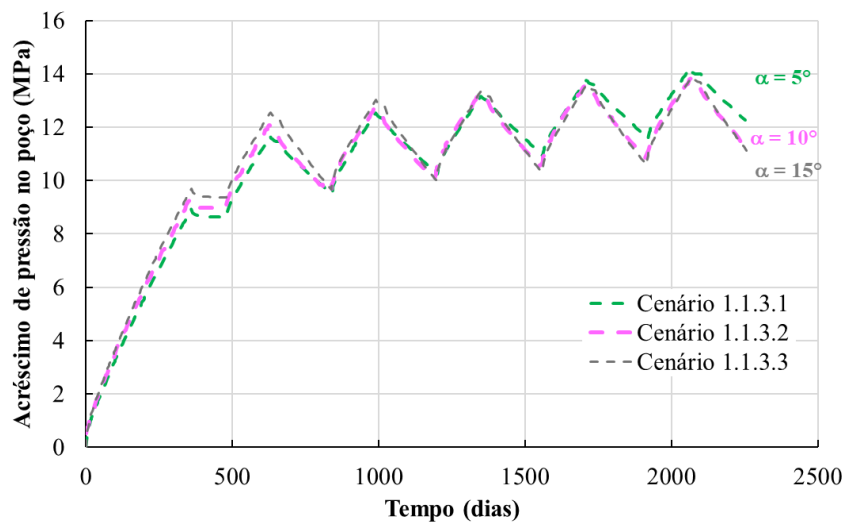


Figura 5.9 – Influência do mergulho na variação de pressão desenvolvida no poço (aquífero).

Embora o reservatório com maior inclinação apresente variações de pressão mais expressivas nos primeiros ciclos, nota-se que aqueles com menor inclinação exibem um aumento mais acentuado de pressão à medida que os ciclos avançam, sendo o reservatório com inclinação de 5° o que apresentou a maior variação ao final da operação.

Pensando em acúmulo de gás no reservatório, em cenários com baixo ângulo de mergulho o hidrogênio encontra maior resistência para se redistribuir devido à menor contribuição de componente gravitacional em comparação a reservatórios mais inclinados. Assim, forma-se um gradiente de pressão mais elevado entre o poço e o interior do reservatório, intensificando a acumulação do gás e favorecendo aumentos progressivos de pressão nos ciclos subsequentes.

5.1.3 MOBILIDADE DO H₂

A Tabela 5.1 apresenta as distâncias horizontais máximas percorridas pelo gás em cada modelo e sua relação com o mergulho adotado para a rocha armazenadora e a vazão de injeção usada.

Tabela 5.1 – Mobilidade do H₂ para os cenários simulados (aquífero).

Cenário	Mergulho	Q _c , Q _i , Q _p (kg/s/m)	Distância máxima (m)
1.1.1.1	5°	0,1	250
1.1.2.1	5°	0,05	150
1.1.3.1	5°	0,02	120
1.1.1.2	10°	0,1	200
1.1.2.2	10°	0,05	150
1.1.3.2	10°	0,02	130
1.1.1.3	15°	0,1	130
1.1.2.3	15°	0,05	100
1.1.3.3	15°	0,02	80

Depreende-se dos resultados que mergulhos mais acentuados restringem a mobilidade do H₂, que em geral se concentra nas proximidades do poço de extração mesmo após cinco ciclos. Observa-se que a pluma tende a alcançar distâncias maiores quando a inclinação do reservatório é menor. Além disso, maiores vazões de injeção também aumentam o deslocamento da pluma.

Nessas condições, o efeito de diferença de densidades mostrou-se determinante para a movimentação do gás em direção à porção superior do reservatório, sendo menos favorável no caso do aquífero a 5°, já que permitiu maior deslocamento horizontal da pluma, e mais benéfico no aquífero a 15°, onde limitou o avanço horizontal do H₂. Já os efeitos de diferença de viscosidade atuam como intensificadores da segregação gravitacional, apesar de não serem observados os dedos viscosos.

5.1.4 PERFORMANCE DO ASH

A Tabela 5.2 e Tabela 5.3 resumem os resultados com relação a eficiência do ASH obtido para cada cenário simulado no aquífero ao longo dos ciclos de operação.

Tabela 5.2 – Fator de Recuperação do H₂ por ciclo (aquífero).

Cenário	Ciclo 1	Ciclo 2	Ciclo 3	Ciclo 4	Ciclo 5 (FR _{últ})
1.1.1.1	93%	76%	80%	85%	88%
1.1.1.2	82%	82%	90%	93%	98%
1.1.1.3	85%	84%	93%	93%	97%
1.1.1.4	54%	85%	88%	92%	97%
1.1.2.1	56%	76%	79%	76%	82%
1.1.2.2	61%	88%	91%	93%	92%
1.1.2.3	73%	82%	96%	96%	99%
1.1.2.4	47%	61%	66%	72%	80%
1.1.3.1	41%	52%	53%	55%	62%
1.1.3.2	53%	64%	67%	73%	76%
1.1.3.3	64%	78%	80%	86%	87%
1.1.3.4	43%	51%	54%	60%	65%
1.2.1.1	68%	81%	86%	94%	94%
1.3.1.1	60%	78%	82%	91%	91%
1.4.1.1	54%	71%	82%	85%	92%

Tabela 5.3 – Pureza do H₂ por ciclo de produção (aquífero).

Cenário	Ciclo 1	Ciclo 2	Ciclo 3	Ciclo 4	Ciclo 5 (P _{últ})
1.1.1.1	39%	45%	51%	55%	59%
1.1.1.2	44%	50%	57%	64%	69%
1.1.1.3	52%	58%	63%	69%	74%
1.1.1.4	52%	56%	63%	67%	70%
1.1.2.1	46%	50%	53%	55%	57%
1.1.2.2	59%	63%	66%	69%	71%
1.1.2.3	70%	76%	79%	81%	82%
1.1.2.4	46%	56%	62%	67%	71%
1.1.3.1	41%	47%	50%	52%	54%
1.1.3.2	51%	59%	64%	67%	68%
1.1.3.3	64%	72%	76%	78%	80%
1.1.3.4	42%	48%	52%	55%	58%
1.2.1.1	48%	55%	62%	68%	73%
1.3.1.1	52%	60%	65%	70%	75%
1.4.1.1	52%	62%	67%	73%	77%

Via de regra, observa-se que a pureza e o fator de recuperação tendem a aumentar com o número de ciclos, independentemente dos demais fatores associados a cada cenário. Esse comportamento decorre da extração contínua da água inicialmente presente no reservatório, que eleva gradualmente a concentração de H₂ ao longo do tempo. Conseqüentemente, a cada ciclo de produção, uma quantidade menor de água é extraída em conjunto com o gás, o que aumenta a eficiência do sistema.

Os quadros resumo contendo os resultados detalhados de cada cenário, incluindo a

evolução da pureza ao longo dos ciclos, as pressões desenvolvidas no poço, as massas de H₂ e água movimentadas, as vazões no poço e as métricas de eficiência, encontram-se detalhados no Apêndice 1 deste trabalho.

5.1.4.1 EFEITO DO MERGULHO

Ao analisarmos os resultados apresentados na Tabela 5.2 e Tabela 5.3, é possível comparar análises realizadas com diferentes ângulos de mergulho, de forma a avaliar a sensibilidade do modelo à essa variável. A Figura 5.10 apresenta os gráficos de pureza e fator de recuperação obtidos para os cenários 1.1.2.1, 1.1.2.2 e 1.1.2.3, onde apenas o ângulo do mergulho foi variado.

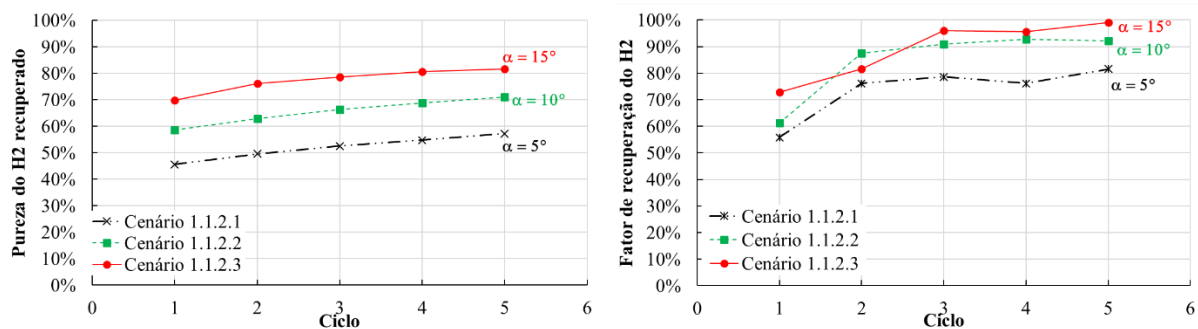


Figura 5.10 – Análise de sensibilidade do mergulho do reservatório (aquífero).

Nota-se que ângulos maiores de mergulho facilitam a recuperação do gás com o decorrer dos ciclos, bem como a pureza total do gás extraído, sendo um fator benéfico ao ASH. Esse mesmo padrão de comportamento é observado nos demais cenários em que essa variável foi isoladamente alterada. Conforme apresentado na Seção 5.1.1, esse comportamento tem relação direta com a movimentação da pluma e a ocorrência de segregação gravitacional mais acentuada em reservatórios com menor ângulo de mergulho.

A Figura 5.11 apresenta a evolução da pureza em cada ciclo de produção para os cenários 1.1.1.1, 1.1.1.2 e 1.1.1.3, onde foram adotados ângulos de 5, 10 e 15 graus respectivamente.

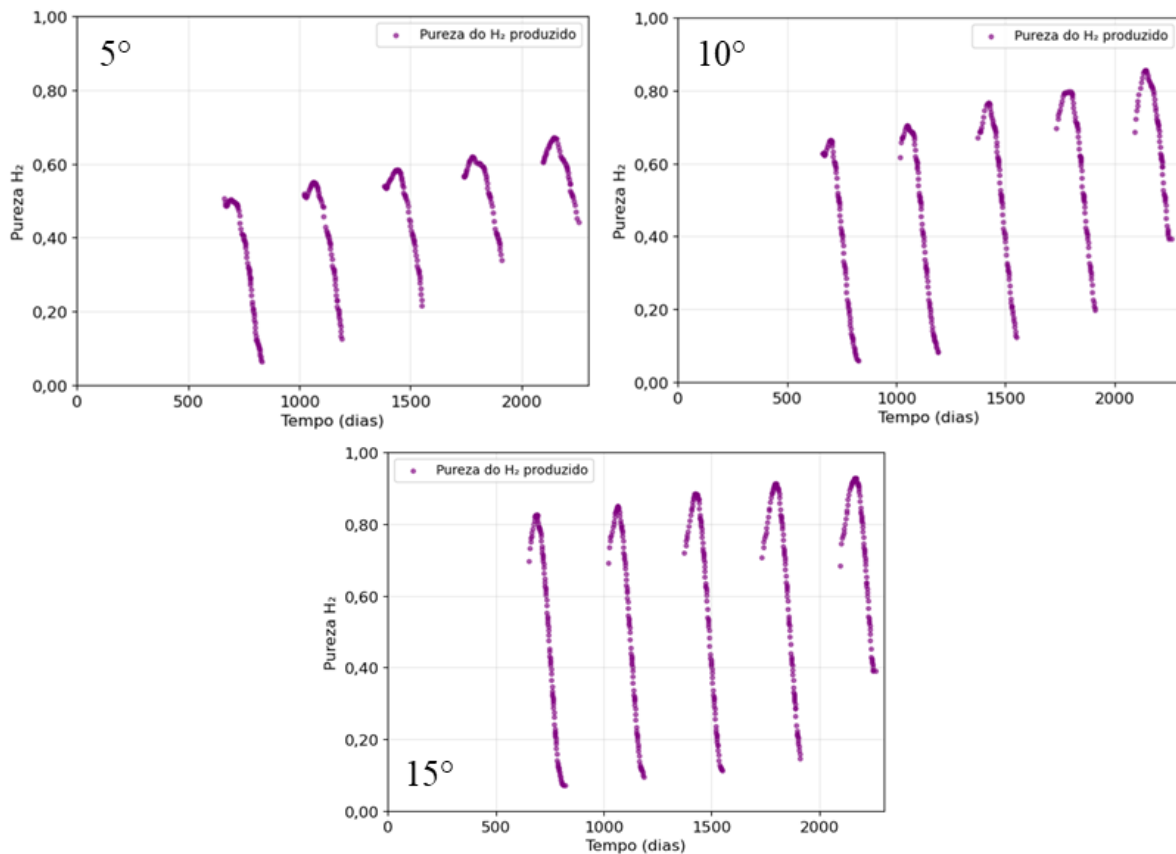


Figura 5.11 – Pureza do H₂ recuperado ao longo dos ciclos de produção: relação com o ângulo de mergulho do aquífero.

Observa-se que o reservatório com maior inclinação apresentou valores iniciais, médios e máximos de pureza superiores aos demais cenários. Esse comportamento é condizente com o comportamento da pluma, que tende a se manter próxima ao poço no início da operação, aumentando a concentração de H₂ próxima ao poço.

Todavia, à medida que a produção avança, observa-se que os cenários com maior inclinação tendem a reduzir a pureza do H₂ extraído de forma mais acentuada do que nos casos com menor inclinação. Isso ocorre porque, devido aos altos valores iniciais de pureza do gás produzido, a concentração de H₂ na região do poço diminui mais rapidamente após certo período. Embora essa dinâmica não afete significativamente a pureza média extraída, ela resulta em maior produção de água ao final do ciclo, o que constitui um ponto crítico, uma vez que a extração de água é indesejada nesses sistemas.

5.1.4.2 EFEITO DA VAZÃO DE OPERAÇÃO

De modo geral, os cenários simulados para as três vazões distintas não apresentaram

correlação clara da vazão de operação (colchão, injeção e produção) com a pureza do gás recuperado, apesar dessa métrica ter crescido com o tempo em todos os cenários. No entanto, quanto ao fator de recuperação, observou-se que vazões de operação maiores tendem a aumentar o fator de recuperação, conforme mostram os gráficos apresentados na Figura 5.12.

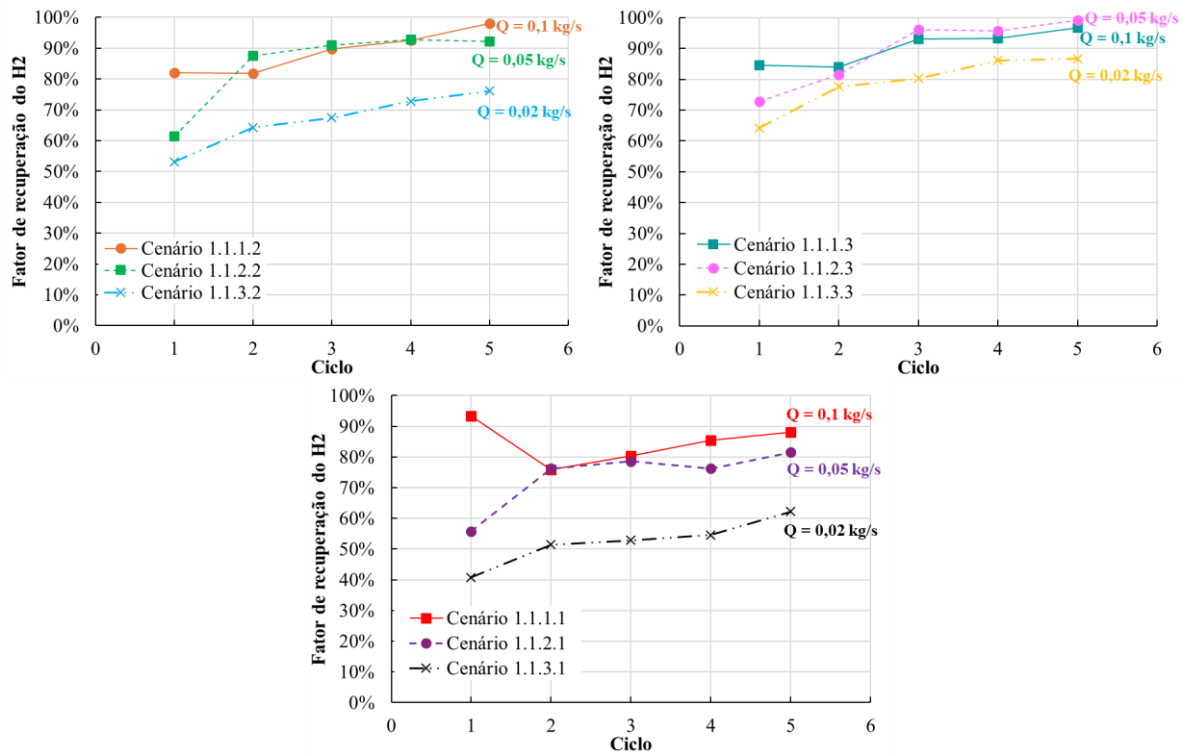


Figura 5.12 – Influência da vazão de operação no FR (aquífero).

Os menores valores de FR foram observados nos cenários com vazão operacional de 0,02 kg/s. Esse desempenho inferior pode ser atribuído à menor pressurização do reservatório durante a injeção, que reduz a capacidade de mobilização do gás de trabalho na etapa de produção. Com menor energia disponível para impulsionar o hidrogênio de volta ao poço, a produção torna-se menos eficaz.

Além disso, a baixa vazão operacional implica menor acúmulo de gás colchão ao longo dos ciclos. Com isso, os efeitos gravitacionais tendem a dominar o escoamento, intensificando o gravity override do H₂ e limitando sua interação com zonas mais profundas do reservatório. Quando há maior quantidade de gás colchão, a maior contribuição das forças viscosas em relação às gravitacionais reduz essa segregação vertical, proporcionando um deslocamento mais eficiente do gás de trabalho e, conseqüentemente, maiores valores de FR.

Nos cenários com maior vazão de injeção, o maior volume de gás introduzido no reservatório provoca uma elevação mais rápida da pressão, fazendo com que o limite

operacional seja atingido ainda no primeiro ciclo. Isso reduz significativamente o tempo disponível para a etapa de injeção, enquanto o tempo de produção permanece inalterado. Como consequência, nesse ciclo inicial a razão entre o gás produzido e o gás injetado torna-se artificialmente elevada, resultando em um valor de fator de recuperação superior ao observado nos ciclos subsequentes. Esse comportamento se repete nos modelos com vazão de 0,1 kg/s, justificando o desvio do primeiro ponto das curvas em relação ao restante da série.

A Figura 5.13 apresenta para os cenários 1.1.1.2, 1.1.2.2 e 1.1.3.2, a influência da vazão de operação na evolução da pureza do H₂ ao longo dos ciclos de produção.

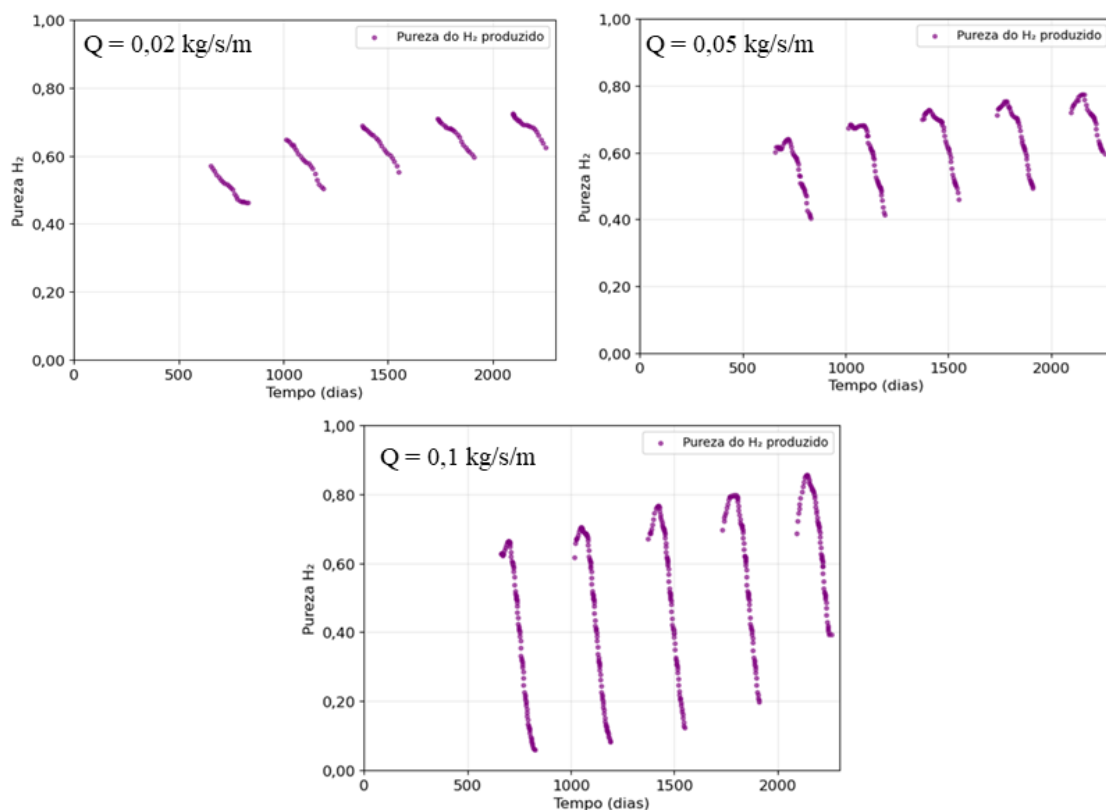


Figura 5.13 – Pureza do H₂ recuperado ao longo dos ciclos de produção: relação com a vazão de operação.

O que se observa nesses casos é que os cenários com menor vazão operacional não apresentam ganho de pureza ao longo da produção de maneira consistente, enquanto cenários com maior vazão apresentam ganho nos primeiros dias de produção. Em contrapartida, a redução da concentração de H₂ que é extraído na mistura é maior no caso onde se usa vazão maior, o que equilibra as coisas e faz com que, na média os valores para os três casos sejam similares.

A estratégia de produção em períodos de curta duração pode favorecer cenários com

maior vazão, uma vez que isso permite manter elevados níveis de pureza do H₂. Por outro lado, quando o objetivo é estender o tempo de produção, vazões moderadas podem ser mais vantajosas, contribuindo para uma maior pureza média do gás extraído.

5.1.4.3 EFEITO DA PERMEABILIDADE

Os pares de permeabilidade e porosidade usados nos modelos mostraram que esses parâmetros influenciam na eficiência do armazenamento, principalmente no que diz respeito ao fator de recuperação. Para os cenários 1.1.2.2 e 1.1.3.2, tanto a pureza como FR aumentaram para reservatórios com menor permeabilidade e porosidade, como mostra a Figura 5.14.

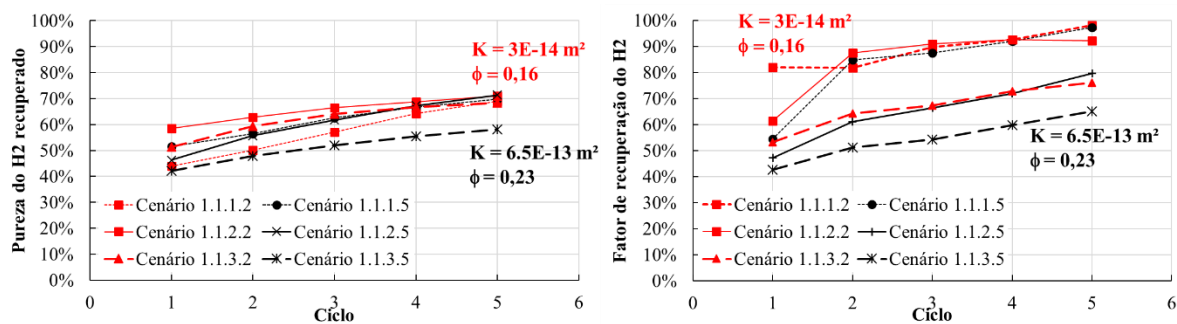


Figura 5.14 – Análise de sensibilidade da permeabilidade e porosidade do reservatório Cenários 1.1.2 e 1.1.3 (aquífero).

Uma possível justificativa para esse efeito está associada à maior mobilidade do gás em reservatórios mais permeáveis e porosos, que acaba se distanciando mais da região do poço durante o fenômeno de segregação gravitacional, dificultando sua recuperação no caso de reservatórios mais permeáveis.

A evolução da pureza ao longo dos ciclos pode ser observada na Figura 5.15, onde estão apresentados os resultados para os cenários 1.1.2.2 e 1.1.2.5. Ambos os modelos apresentam uma redução gradual na pureza do H₂ extraído a partir de certo momento, convergindo para valores muito semelhantes ao final do ciclo de produção. A principal diferença ocorre na fase inicial, quando o reservatório menos permeável favorece um ganho de pureza nos primeiros dias, possivelmente devido à menor mobilidade do gás, que tende a se concentrar em maior quantidade na região próxima ao poço.

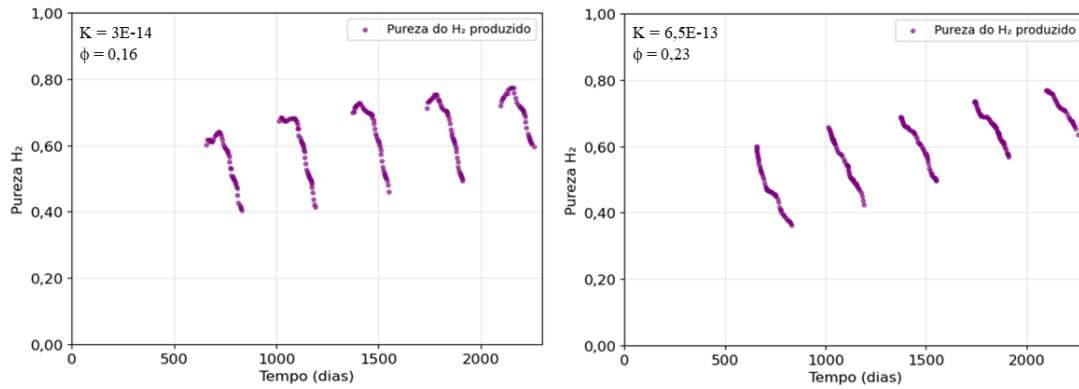


Figura 5.15 – Pureza do H₂ recuperado ao longo dos ciclos de produção: relação com a permeabilidade e porosidade.

5.1.4.4 EFEITO DA PROFUNDIDADE

Em todas as profundidades adotadas, observou-se que a tendência é de aumento das métricas de eficiência ao longo dos ciclos de operação. A Figura 5.16 apresenta esse comportamento para os cenários 1.1.1.2, 1.2.1.1, 1.3.1.1 e 1.4.1.1, em que apenas a profundidade do armazenamento foi variada.

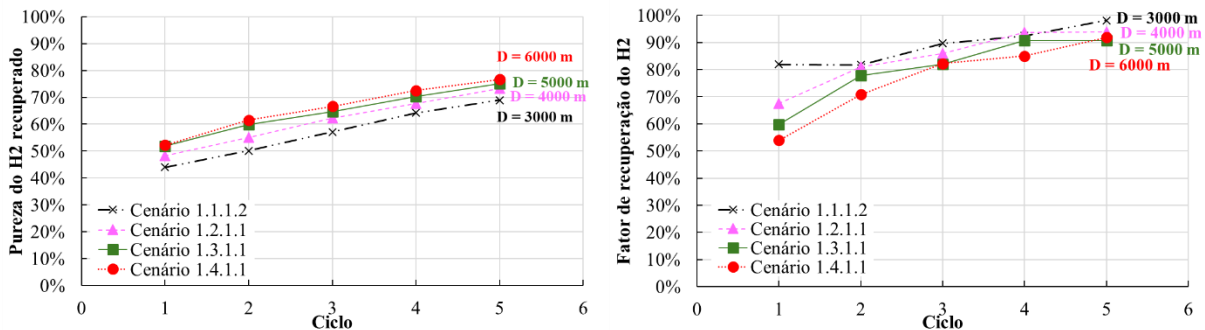


Figura 5.16 – Análise de sensibilidade da profundidade do reservatório (aquífero).

Com base nos resultados, observa-se que a profundidade – e, portanto, a pressão inicial do reservatório – influencia diretamente o desempenho do ASH. Reservatórios mais profundos, sob maior pressão de confinamento, tendem a favorecer a pureza do H₂ produzido, enquanto reservatórios mais superficiais apresentam maior fator de recuperação. Esse efeito pode ser explicado ao comparar as plumas dos cenários de maior e menor profundidade (Figura 5.17).

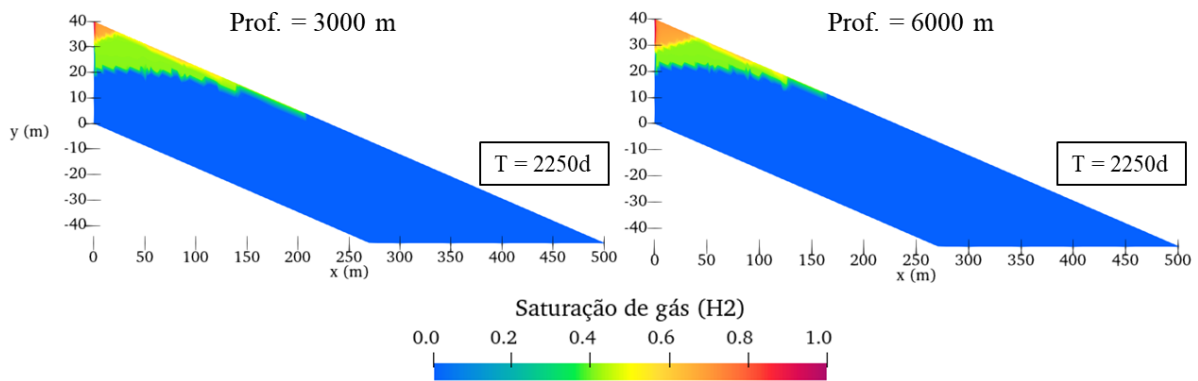


Figura 5.17 – Comparação das plumas residuais nos cenários de menor e maior profundidade do aquífero (Cenário 1.1.1.2 e Cenário 1.4.1.1).

A principal diferença observada é no comportamento da pluma de gás: no reservatório profundo (alta pressão), ela se estende por apenas 150 m, enquanto no raso atinge 200 m. Isso pode ocorrer porque, sob alta pressão, o H_2 tem maior viscosidade e densidade e menor mobilidade, ficando concentrado ao redor da zona de injeção/produção. Por esse motivo, as saturações locais de H_2 na região de extração do cenário profundo são muito altas, frequentemente próximas de 100% e, conseqüentemente, a pureza extraída é maior nesse caso.

Entretanto, ao final da operação, nota-se que a saturação residual de H_2 no reservatório profundo é significativamente maior (cerca de 60%) em comparação com o cenário raso (aproximadamente 40%). Essa diferença explica o maior fator de recuperação no caso raso. O fenômeno pode ser atribuído à maior mobilidade do H_2 em condições de pressão mais baixa, onde sua densidade e viscosidade são reduzidas. Dessa forma, para uma mesma vazão de produção, o gás flui com maior facilidade, deixando menos volume aprisionado no meio poroso.

5.2 RESERVATÓRIO MADURO DE ÓLEO

As simulações conduzidas no modelo de reservatório maduro de óleo apresentadas nesta seção são divididas em 4 análises principais, sendo elas:

- Avaliação do comportamento da pluma de H_2 (Seção 5.2.1): Investiga o desenvolvimento espacial da pluma de H_2 ao longo dos ciclos operacionais, considerando os efeitos de segregação gravitacional, contrastes de densidade e viscosidade entre as fases e os mecanismos de aprisionamento capilar e estratigráfico.
- Monitoramento das pressões médias na região do poço (Seção 5.2.2): acompanha o desenvolvimento das pressões no reservatório durante os ciclos, identificando possíveis

cenários críticos associados a gradientes elevados e avaliando a influência da vazão de gás colchão e das características do óleo presente no reservatório.

- Avaliação da mobilidade e do deslocamento do H₂ (Seção 5.2.3): Quantifica a extensão da pluma nos cenários e relaciona sua evolução às variações de vazão operacional e viscosidade dinâmica do fluido secundário.
- Análise das métricas de eficiência do ASH (Seção 5.2.4): apresenta o desempenho do ASH – fator de recuperação, pureza do gás produzido e massa recuperada – relacionando essas métricas às variações dos parâmetros de sensibilidade considerados, a saber: viscosidade dinâmica do H₂, vazão de gás colchão e vazão operacional durante os ciclos.

5.2.1 COMPORTAMENTO DA PLUMA DE H₂

A Figura 5.18 mostra a evolução da pluma de H₂ no reservatório maduro de óleo à medida em que são executados os ciclos de injeção e produção. Ressalta-se que o limite foi estabelecido com base na região cuja saturação de gás H₂ corresponde a 0,27, a fim de limitar a pluma na região móvel do gás, dado que a saturação residual foi definida por esse valor.

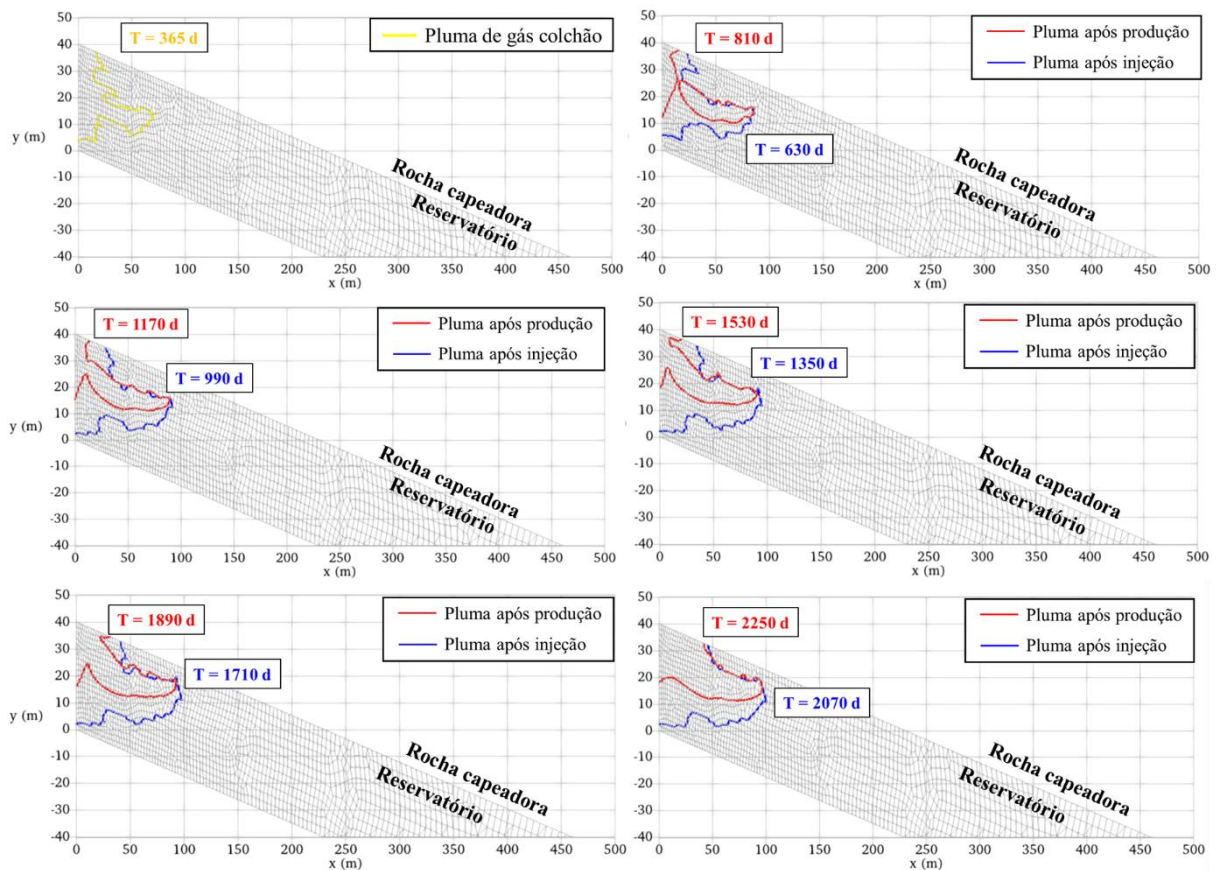


Figura 5.18 – Pluma de H_2 ao longo dos ciclos no reservatório maduro de óleo pesado ($\mu = 0,15 \text{ Pa}\cdot\text{s}$).

Observa-se que, no caso do óleo pesado, a pluma apresenta menor deslocamento em direção à porção superior e maior propagação lateral, comportamento atribuído aos efeitos viscosos decorrentes da diferença de viscosidades entre os fluidos. Embora os efeitos gravitacionais também estejam presentes, sua influência é menos significativa. Nesse cenário, o aprisionamento capilar torna-se mais pronunciado, favorecendo a formação de bolsões com regiões saturação residual de H_2 .

A saturação residual após os cinco ciclos de operação nos cenários com diferentes viscosidades (2.1.4, 2.2.4 e 2.3.4) pode ser observada na Figura 5.19, Figura 5.20 e Figura 5.21. O que se observa é uma combinação de efeitos viscosos e gravitacionais, sendo o efeito viscoso mais pronunciado nos cenários com óleo pesado. O óleo com menor viscosidade indicou efeito gravitacional mais proeminente, porém ainda com deslocamento lateral acentuado possivelmente em virtude da formação de instabilidades na fronteira H_2 -óleo.

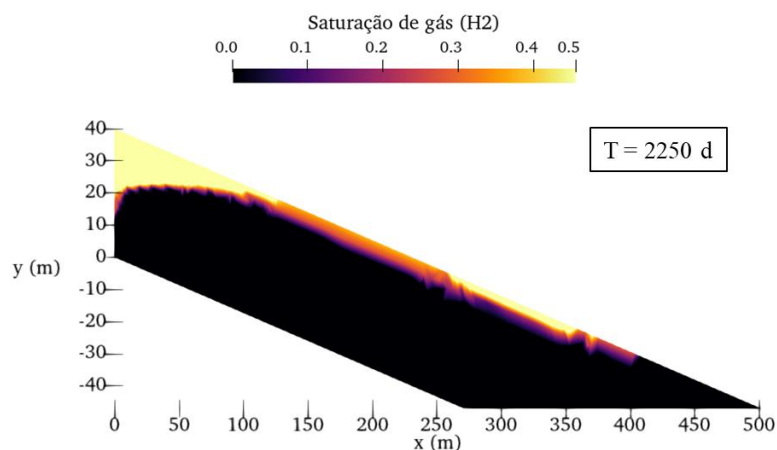


Figura 5.19 – Saturação residual de H₂ após o último ciclo de produção do reservatório maduro de óleo ($\mu = 0,003 \text{ Pa}\cdot\text{s}$).

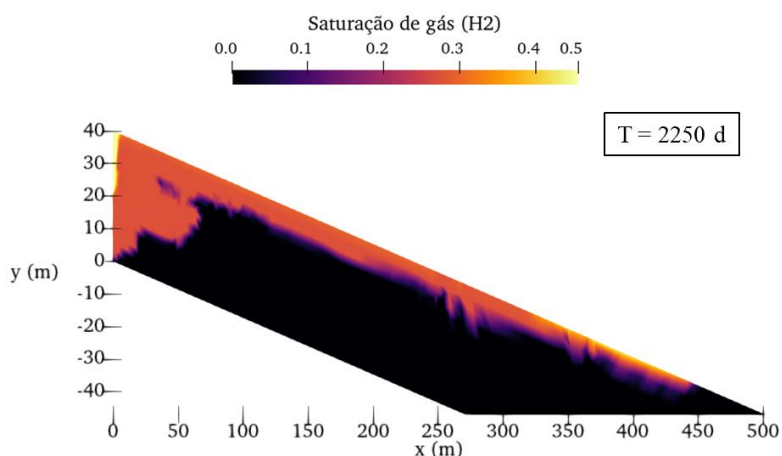


Figura 5.20 – Saturação residual de H₂ após o último ciclo de produção do reservatório maduro de óleo ($\mu = 0,06 \text{ Pa}\cdot\text{s}$).

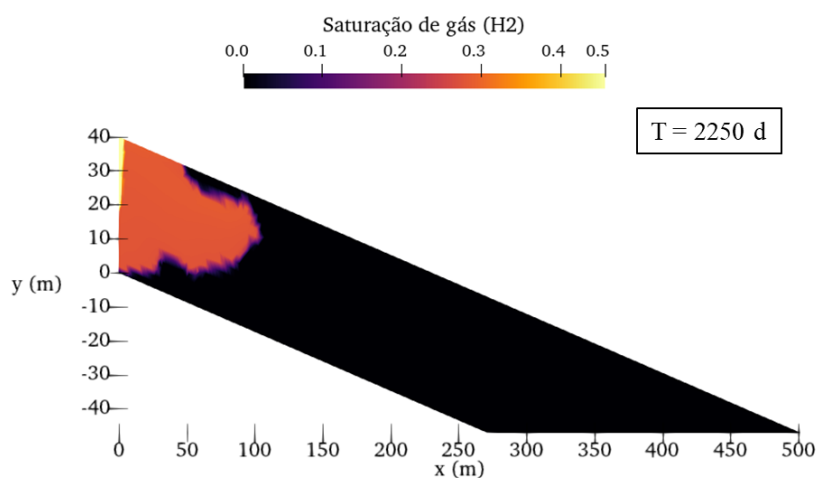


Figura 5.21 – Saturação residual de H₂ após o último ciclo de produção do reservatório maduro de óleo ($\mu = 0,15 \text{ Pa}\cdot\text{s}$).

A diferença na conformação das plumas pode ser explicada pela maior e menor facilidade do H₂ em deslocar o óleo nativo. Enquanto cenários de óleo pesado tendem a gerar mais instabilidades na fronteira com o gás por conta da diferença elevada de viscosidades, em cenários com óleo mais leve sobressaem os efeitos de segregação gravitacional ocasionada pela diferença de densidades entre os fluidos.

Na sequência, são apresentados os resultados dos cenários em termos de pressões desenvolvidas no poço, mobilidade do gás e das principais métricas de eficiência, representadas pelo fator de recuperação, pureza e massa de H₂ produzida por ciclo.

5.2.2 PRESSÃO NO POÇO

Em geral, observou-se que a máxima pressão atingida nos modelos de reservatório de óleo ocorreu após a injeção do gás colchão. A Figura 5.22 apresenta o gradiente de pressão observado nesse instante, tomando como exemplo o cenário 2.1.3

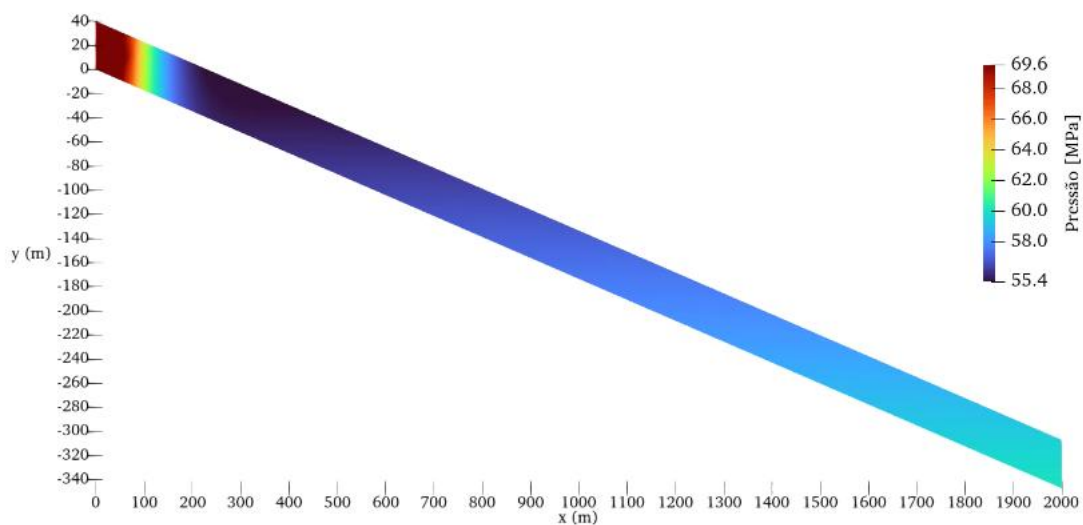


Figura 5.22 – Pressão máxima atingida no reservatório maduro – exemplo do cenário 2.1.3.

Observa-se que o reservatório, de modo geral, não é significativamente afetado pelas variações de pressão na região do poço. Isso se deve à elevada viscosidade do óleo, que reduz sua mobilidade e intensifica o gradiente de pressão próximo ao local de injeção. Além disso, por ser mais compressível que a água, o óleo tende a acumular pressão de forma gradual, resultando em uma resposta mais localizada e menos expressiva em todo o reservatório.

No entanto, esse comportamento pode refletir na operação, especialmente em períodos de extração do gás, uma vez que o sistema não mantém a pressurização a depender das vazões

de extração de gás e das vazões de gás colchão adotadas. Nesse sentido, pressões mínimas são atingidas mais facilmente, prejudicando a etapa de produção e aumentando a porção do gás que permanece aprisionada.

Esse efeito é observado em todos os cenários simulados neste ambiente e a Figura 5.23 ilustra o comportamento típico das pressões com base nas vazões de injeção de gás colchão adotadas. Ressalta-se que nos cenários apresentados, apenas a vazão de gás colchão foi alterada, a fim de obter a sensibilidade dessa variável no desenvolvimento das pressões.

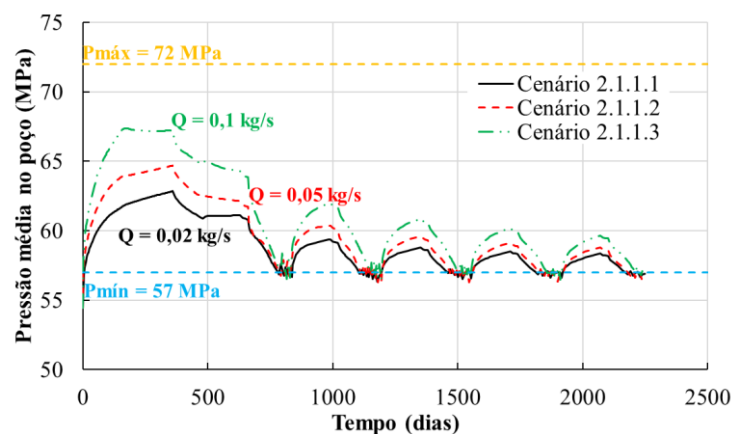


Figura 5.23 – Influência da vazão de gás colchão na pressão desenvolvida no poço (reservatório maduro de óleo).

É importante destacar que os cenários com vazão de produção de 0,05 kg/s/m e 0,1 kg/s/m ultrapassaram o limite inferior de pressão de forma mais acentuada, atingindo valores até 10 MPa abaixo do estabelecido em determinados passos de tempo durante a produção. A Figura 5.24 ilustra o caso do cenário 2.3.1.5, onde esse efeito foi mais proeminente.

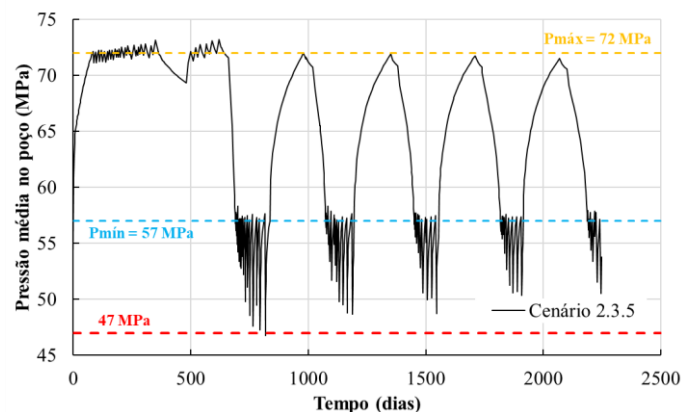


Figura 5.24 – Discrepância entre pressão mínima no poço calculada e pressão mínima estabelecida como critério de parada da produção (reservatório maduro de óleo).

Esse comportamento ocorreu porque o intervalo de tempo adotado nas simulações não foi suficientemente pequeno para permitir o recálculo das pressões dentro do limite estabelecido antes da retomada da produção. Dessa forma, esses cenários indicam pontos críticos, nos quais a pressão varia de maneira abrupta – para cima ou para baixo – podendo representar um potencial risco à segurança do sistema.

5.2.3 MOBILIDADE DO H₂

A Tabela 5.1 apresenta as distâncias horizontais máximas percorridas pelo gás em cada modelo e sua relação com a viscosidade dinâmica do óleo e a vazão de injeção usada.

Tabela 5.4 – Mobilidade do H₂ para os cenários simulados (reservatório maduro de óleo)

Cenário	Viscosidade do óleo (Pa·s)	Q _i , Q _p (kg/s/m)	Distância máxima (m)
2.1.3	0,06	0,02	370
2.1.4	0,06	0,05	450
2.1.5	0,06	0,1	600
2.2.3	0,003	0,02	370
2.2.4	0,003	0,05	400
2.2.5	0,003	0,1	470
2.3.3	0,15	0,02	80
2.3.4	0,15	0,05	100
2.3.5	0,15	0,1	150

No modelo com viscosidade mais alta, a pluma do gás se manteve próxima ao poço e sem efeitos de segregação gravitacional tão evidentes quanto os outros dois modelos. Esse comportamento é condizente com a característica do fluido molhante, que por ser muito viscoso gera instabilidades na fronteira com o H₂, que ao invés de deslocar o óleo de maneira uniforme, forma dedos viscosos ao longo da espessura do reservatório. Assim, não apenas o deslocamento vertical é contido, mas também o afastamento da pluma na porção superior do reservatório é menor.

Já o cenário com menor viscosidade, o efeito gravitacional foi mais intenso, com um deslocamento mais acentuado na direção horizontal na porção superior do reservatório. No entanto, o cenário com viscosidade 0,06 Pa.s foi o que indicou os maiores deslocamentos da pluma na direção horizontal. Possivelmente esse efeito se deve à combinação de efeitos de viscosidade e gravidade nessa região.

Observa-se também que, em todos os modelos, o aumento da vazão operacional elevou o deslocamento horizontal da pluma, tendência igualmente verificada com o incremento da

vazão do gás colchão. Como ambos os parâmetros controlam o volume total de H₂ injetado, maiores vazões resultam em maior ocupação do meio poroso pelo gás, favorecendo seu avanço lateral e ampliando o alcance da frente de deslocamento.

A pluma de hidrogênio avança distâncias maiores nos cenários em que o fluido do reservatório é água ou óleo de baixa viscosidade, pois a menor resistência ao escoamento facilita o deslocamento do gás ao longo do meio poroso. Dessa forma, o gradiente de pressão aplicado durante a injeção é convertido mais eficientemente em movimento do H₂.

Quando o reservatório está saturado por óleo mais viscoso, o avanço do gás é significativamente reduzido. A maior resistência viscosa limita a mobilidade do hidrogênio e favorece sua segregação gravitacional, fazendo com que o gás se acumule mais rapidamente próximo ao topo e percorra menores distâncias horizontais.

5.2.4 EFICIÊNCIA DO ASH

A Tabela 5.5 e Tabela 5.6 resumem os resultados com relação a eficiência do ASH obtido para cada cenário simulado no aquífero ao longo dos ciclos de operação.

Tabela 5.5 – Fator de Recuperação do H₂ por ciclo (reservatório maduro de óleo)

Cenário	Ciclo 1	Ciclo 2	Ciclo 3	Ciclo 4	Ciclo 5 (FR _{últ})
2.1.1	88%	80%	70%	69%	70%
2.1.2	85%	81%	83%	78%	76%
2.1.3	85%	95%	94%	95%	94%
2.1.4	40%	65%	73%	77%	79%
2.1.5	32%	53%	60%	68%	72%
2.2.1	13%	7%	7%	7%	13%
2.2.2	Não converge	Não converge	Não converge	Não converge	Não converge
2.2.3	91%	67%	37%	33%	39%
2.2.4	94%	69%	65%	66%	66%
2.2.5	78%	74%	77%	81%	85%
2.3.1	83%	82%	73%	75%	76%
2.3.2	96%	89%	89%	85%	86%
2.3.3	96%	93%	89%	84%	86%
2.3.4	78%	68%	70%	74%	79%
2.3.5	80%	58%	67%	71%	78%

Tabela 5.6 – Pureza do H₂ por ciclo de produção (reservatório maduro de óleo)

Cenário	Ciclo 1	Ciclo 2	Ciclo 3	Ciclo 4	Ciclo 5 (P _{últ})
2.1.1	93%	96%	97%	98%	98%
2.1.2	91%	95%	96%	97%	98%

Cenário	Ciclo 1	Ciclo 2	Ciclo 3	Ciclo 4	Ciclo 5 (P _{ult})
2.1.3	89%	94%	96%	97%	97%
2.1.4	75%	91%	95%	96%	98%
2.1.5	80%	91%	95%	97%	98%
2.2.1	80%	83%	87%	89%	92%
2.2.2	Não converge	Não converge	Não converge	Não converge	Não converge
2.2.3	94%	96%	96%	97%	97%
2.2.4	97%	98%	99%	99%	99%
2.2.5	98%	99%	99%	100%	100%
2.3.1	92%	94%	96%	97%	98%
2.3.2	94%	95%	97%	97%	98%
2.3.3	94%	95%	97%	97%	98%
2.3.4	94%	97%	98%	98%	99%
2.3.5	93%	97%	98%	98%	99%

De modo geral, observa-se que o fator de recuperação do hidrogênio não possui padrão relacionado ao número de ciclos, uma vez que depende das condições específicas de cada cenário. Cenários cuja vazão de injeção de gás colchão é suficiente para pressurizar o reservatório e em que as vazões operacionais também não afetam os limites máximo e mínimo de pressão no poço, tendem a mostrar aumento das métricas ao longo dos 5 ciclos. No entanto esse comportamento pode não ser sustentável a longo prazo, já que a pressurização diminui com o tempo, necessitando de novas rodadas de injeção de gás colchão.

Já a pureza do gás produzido apresentou aumento consistente em todos os cenários simulados. Isso ocorre porque, ao longo dos ciclos, parte do óleo que inicialmente ocupa a região próxima ao poço é removida durante a produção. Com menos óleo remanescente para ser arrastado nos ciclos seguintes, reduz-se a coprodução desse fluido, e a fração de hidrogênio no gás produzido aumenta progressivamente. Assim, cada ciclo tende a resultar em um gás mais puro e com menor contaminação por óleo, indicando uma operação mais eficiente com o avanço do tempo e demandando menores custos e esforços com a separação posterior do H₂.

Além disso, não foi observada diferença significativa entre as purezas observadas em nenhum dos modelos de reservatório maduro, possivelmente em razão da baixa mobilidade do óleo no reservatório, que acaba dificultando a sua extração em períodos de produção. Em razão disso, os valores em geral foram próximos a 80% e 100% em todos os ciclos simulados.

Por fim, ressalta-se que os cenários 2.2.1 e 2.2.2, nos quais foi utilizado óleo muito leve e vazões de gás colchão de 0,05 e 0,07 kg/s, respectivamente, apresentaram resultados insatisfatórios para o armazenamento, com fator de recuperação médio abaixo de 10%. Além disso, o cenário 2.2.2 mostrou-se numericamente inviável, considerando os parâmetros de simulação adotados neste estudo.

Os quadros resumo com os resultados detalhados de cada cenário – incluindo a evolução da pureza ao longo dos ciclos, as pressões desenvolvidas no poço, as massas de H₂ e óleo movimentadas, as vazões no poço e as métricas de eficiência – estão apresentados no Apêndice 2 deste trabalho.

5.2.4.1 EFEITO DA VISCOSIDADE

A Figura 5.25 apresenta a análise de sensibilidade da viscosidade dinâmica do óleo no ASH para os cenários com vazão de operação e gás colchão de 0,1 kg/s.

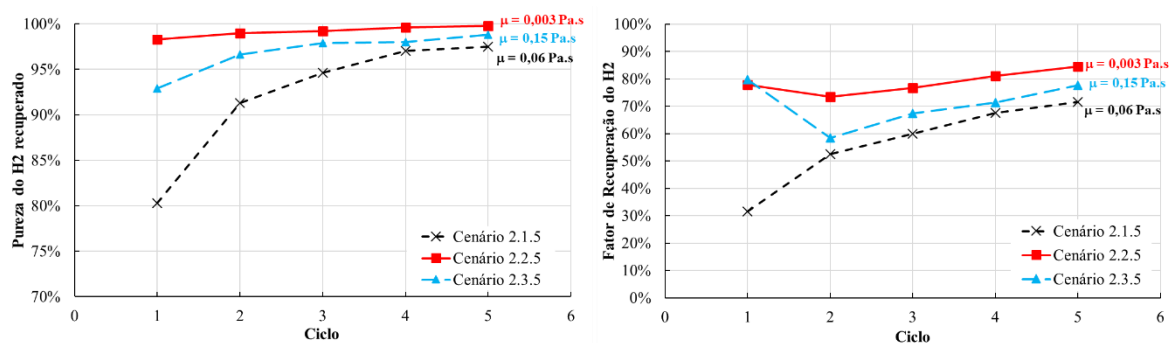


Figura 5.25 – Análise de sensibilidade da viscosidade dinâmica do óleo (reservatório maduro de óleo).

A pureza do gás recuperado aumenta com a evolução dos ciclos em todos os cenários, no entanto esse aumento possui maior intensidade no caso do óleo com viscosidade intermediária. O cenário com óleo mais leve mostrou ser o caso com maior pureza ao longo da operação, mantendo valores próximos a 98% em todos os ciclos. O cenário com óleo pesado mostrou valores intermediários de pureza quando comparado aos outros dois fluidos adotados.

Já o fator de recuperação apresentou tendência similar, com o óleo mais leve também se mostrando como uma opção mais vantajosa. Nesse caso, fica evidente uma diferença de comportamento dentre os fluidos de alta e baixa viscosidade em comparação ao fluido de viscosidade muito baixa. Essa diferença está expressa principalmente na forma como a pluma se desloca nesses três casos:

- Óleos pesados e leves possuem efeitos viscosos pronunciados mesmo com a ocorrência de segregação gravitacional. No caso do óleo leve, a combinação desses mecanismos é fundamental para o maior distanciamento da pluma em comparação aos outros cenários.
- Óleos muito leves possuem baixa interferência de efeitos viscosos, garantindo que o H₂

não flua por caminhos preferenciais ou forme bolsões no interior do reservatório com a mesma facilidade dos demais cenários. Desse modo, a pluma do gás se concentra mais próxima ao poço, facilitando a recuperação.

Esses resultados indicam que, ao definir critérios para seleção de reservatórios para ASH, a viscosidade do óleo deve ser considerada como parâmetro-chave, sendo os reservatórios com óleo mais leve potencialmente os mais vantajosos para maximizar a recuperação e a pureza do hidrogênio ao longo dos ciclos operacionais.

Por outro lado, os óleos de viscosidade intermediária podem apresentar o pior desempenho, pois combinam efeitos de diferenças de viscosidade relevantes com efeito de segregação gravitacional acentuado. Essa combinação cria trajetórias preferenciais e amplifica o deslocamento lateral do gás, prejudicando tanto a pureza quanto o fator de recuperação ao longo dos ciclos.

Destaca-se também que em simulações com óleo pesado e altas vazões operacionais (como o cenário 2.3.1.5), a recuperação no primeiro ciclo é maior que os demais em razão do atingimento da pressão máxima durante a injeção. Em razão disso, o volume injetado é menor e conseqüentemente o fator de recuperação é beneficiado. Esse comportamento decorre da mobilidade reduzida do fluido mais viscoso, que tende a acumular pressões localmente com maior facilidade em razão do difícil escoamento.

5.2.4.2 EFEITO DA VAZÃO DE GÁS COLCHÃO

O efeito da variação da vazão de gás colchão pode ser observado nos gráficos da Figura 5.26.

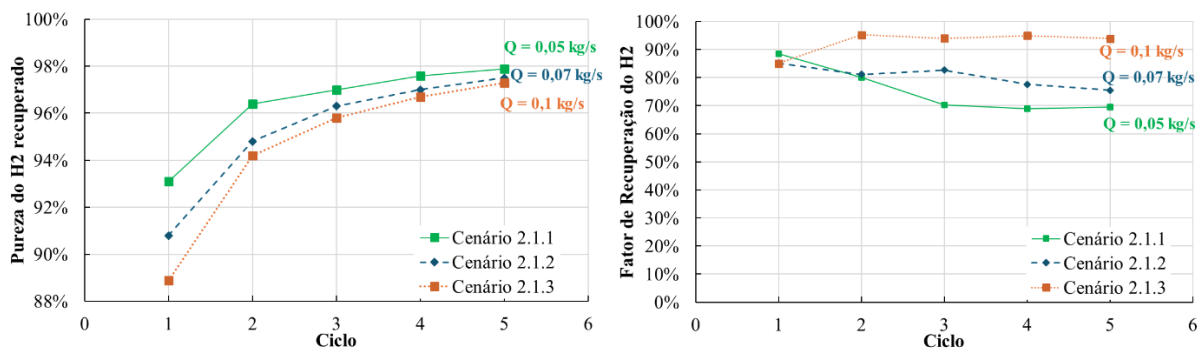


Figura 5.26 – Análise de sensibilidade da vazão de gás colchão (reservatório maduro de óleo).

Maiores vazões de gás colchão significam uma maior pressurização do reservatório

antes de se iniciarem os ciclos com gás de trabalho. Nos modelos simulados, observou-se que maiores vazões favorecem o fator de recuperação do gás, uma vez que ao longo dos ciclos, as pressões se mantêm entre os limites máximo e mínimo estabelecidos.

É importante ressaltar que, maiores vazões de gás colchão implicam em maior quantidade de H_2 armazenado antes da operação. Dessa forma, o efeito da quantidade de gás injetada também impacta os resultados. Para quantificar de maneira mais específica a sensibilidade da vazão operacional, é necessário adotar tempos de injeção diferentes para cada vazão usada, a fim de injetar a mesma quantidade de gás em cada cenário e avaliar de maneira separada o impacto exclusivo da velocidade de injeção.

Quanto à pureza, ocorre o oposto: cenários com menor vazão de gás colchão tendem a apresentar maior pureza do gás recuperado, apesar de todos os cenários convergirem para valores próximos de pureza ao final dos 5 ciclos.

Em contrapartida, cenários com menor vazão de gás colchão não conseguem sustentar a pressão mínima no reservatório à medida que o gás é extraído. Esse efeito é ainda maior quando a viscosidade do fluido é mais baixa. A Figura 5.27 mostra esse efeito no cenário 2.2.1.3, onde foi adotada vazão de gás colchão de 0,09 kg/s.

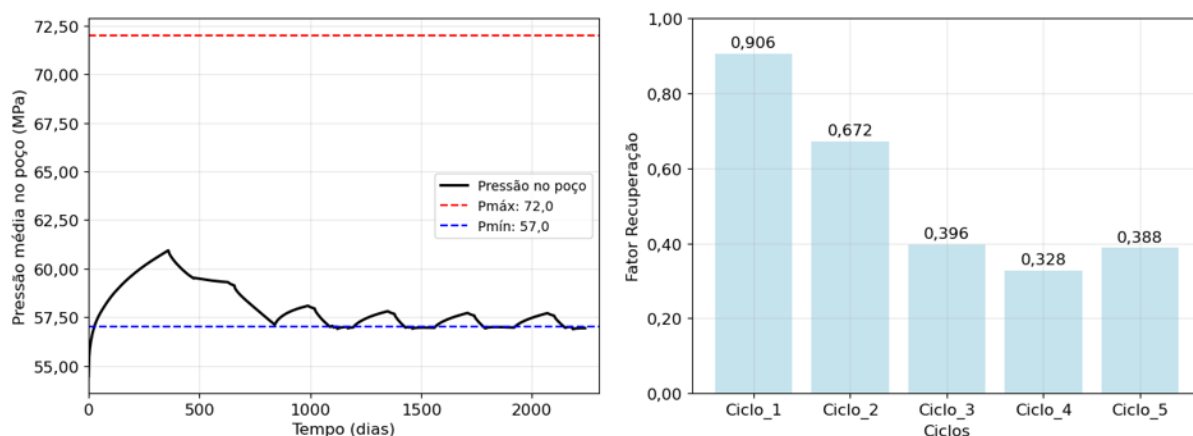


Figura 5.27 – Impacto das pressões médias desenvolvidas no poço no fator de recuperação do cenário 2.2.1.3.

Nesse caso, a produção de H_2 foi comprometida, já que os períodos de produção são encurtados em razão da baixa pressão no reservatório como um todo. Além disso, não há o efeito de expulsão do gás pois as pressões não são suficientes. A tendência observada é uma redução gradual da pressurização do reservatório, o que demandaria novos ciclos de injeção de gás colchão.

5.2.4.3 EFEITO DA VAZÃO DE OPERAÇÃO

Os gráficos apresentados na Figura 5.28 mostram o efeito da variação das vazões de injeção e produção do gás nas métricas de eficiência.

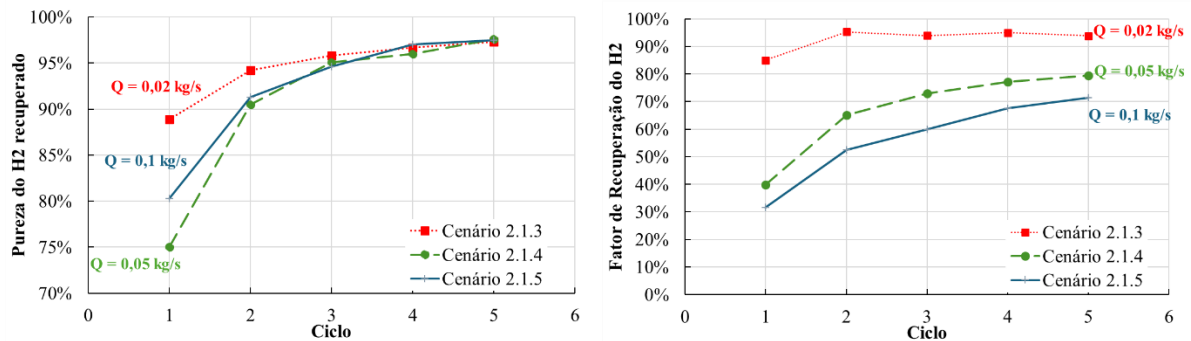


Figura 5.28 – Efeito da vazão de operação nas métricas de eficiência (cenários com óleo pesado e leve).

Observa-se que maiores vazões de operação tendem a reduzir o fator de recuperação do gás. Esse comportamento possivelmente está relacionado aos limites mínimos de pressão do sistema, uma vez que quedas abruptas de pressão, provocadas por elevadas vazões de extração, podem antecipar o atingimento desse limite e, conseqüentemente, restringir o período de produção.

A pureza do gás, avaliada pelas métricas $P_{méd}$ e $P_{últ}$, demonstrou ser pouco influenciada pelas diferentes condições operacionais, mantendo valores próximos em todos os cenários. O que se observa é um crescimento ao longo dos ciclos, porém, sem correlação explícita com variações de vazão operacional, indicando pouca sensibilidade desse parâmetro na pureza recuperada.

Nos cenários com óleo muito leve, o efeito foi o contrário. Em razão da baixa pressurização do reservatório mesmo após a injeção do gás colchão, vazões mais altas ajudaram a manter a pressão em níveis maiores, permitindo uma recuperação de gás mais eficiente. A Figura 5.29 apresenta o fator de recuperação para os Cenários 2.2.3, 2.2.4 e 2.2.5, onde foram usadas vazão de gás colchão de 0,1 kg/s/m e óleo com viscosidade 0,003 Pa·s.

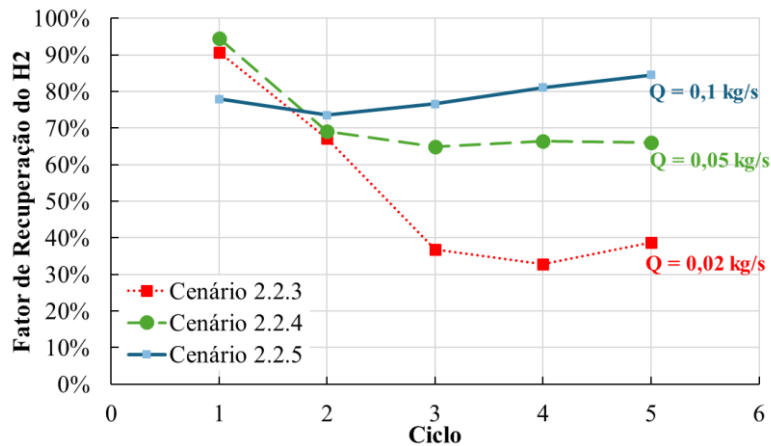


Figura 5.29 – Efeito da vazão de operação no FR (cenários com óleo muito leve).

5.3 RESUMO DA SENSIBILIDADE

A Figura 5.30 apresenta o gráfico de sensibilidade dos parâmetros considerados para o aquífero, tendo como referência o cenário com maior fator de recuperação médio entre os ciclos (FR = 90%). Observa-se que, sob uma condição otimizada de operação, a profundidade do reservatório é o parâmetro de maior influência sobre o fator de recuperação do gás – sendo que maiores profundidades tendem a reduzir a eficiência de recuperação.

Valores altos de permeabilidade e profundidade do reservatório acarretaram pior desempenho quanto ao fator de recuperação médio, enquanto valores altos de mergulho e vazões operacionais aumentaram essa métrica.

Em seguida, destacam-se, em ordem decrescente de sensibilidade, a vazão operacional, o par permeabilidade-porosidade e o mergulho da rocha. Ressalta-se que essa análise está condicionada aos intervalos de variação adotados neste estudo para a definição de cada parâmetro.

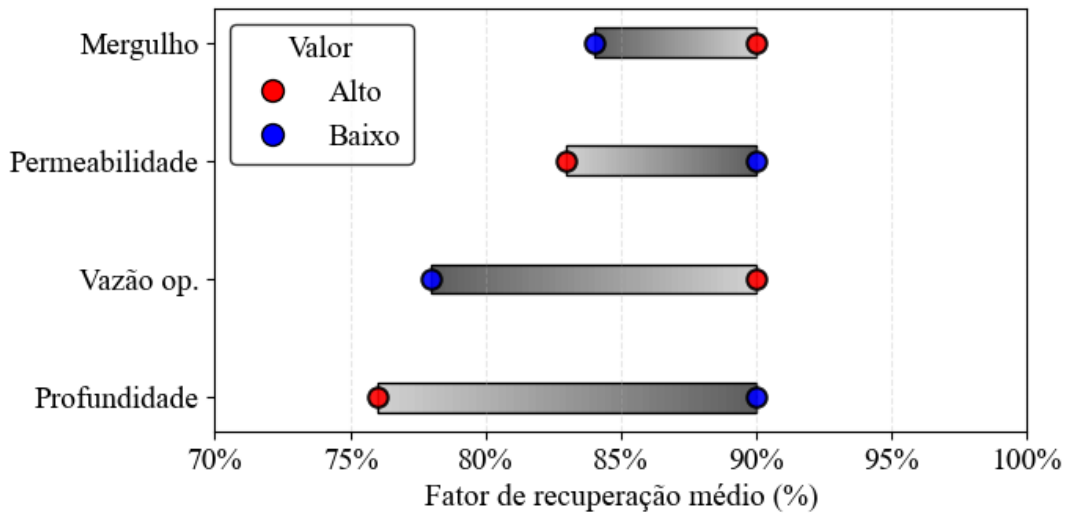


Figura 5.30 – Resumo da sensibilidade do $FR_{méd}$ aos parâmetros do aquífero arenítico.

Com relação ao $FR_{últ}$, os resultados seguem tendência similar ao que é observado na média dos ciclos: o fator de recuperação último foi positivamente influenciado por valores elevados de mergulho e vazão operacional, enquanto valores altos de permeabilidade e profundidade do reservatório mostraram efeito negativo sobre essa métrica, conforme mostra a Figura 5.30.

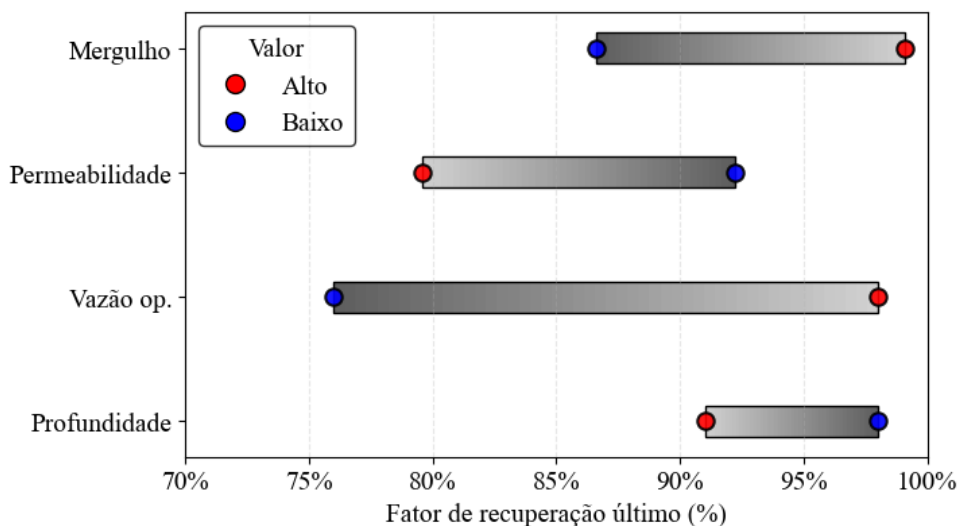


Figura 5.31 – Resumo da sensibilidade do $FR_{últ}$ aos parâmetros do aquífero arenítico.

A pureza média dos cenários mostrou sensibilidade aos parâmetros de mergulho e profundidade do reservatório, não tendo indicado padrão de comportamento com a variação das vazões de operação ou permeabilidade do meio. O mergulho apresentou maior impacto nesse caso, com 77% de pureza média no melhor cenário (mergulho mais acentuado) e 53% no pior

(mergulho menor). Essa avaliação se estende à Pult, conforme mostram os gráficos da Figura 5.32 e Figura 5.33.

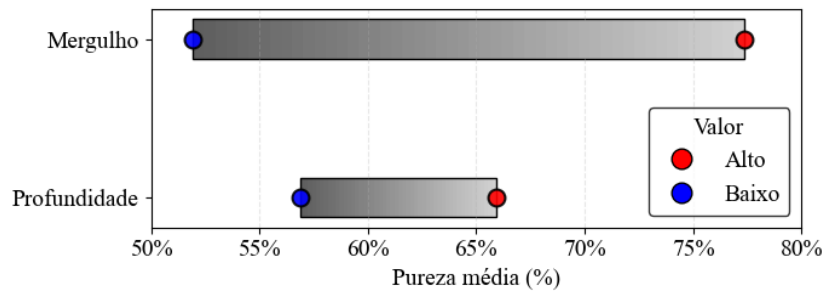


Figura 5.32 – Resumo da sensibilidade da $P_{méd}$ aos parâmetros do aquífero arenítico.

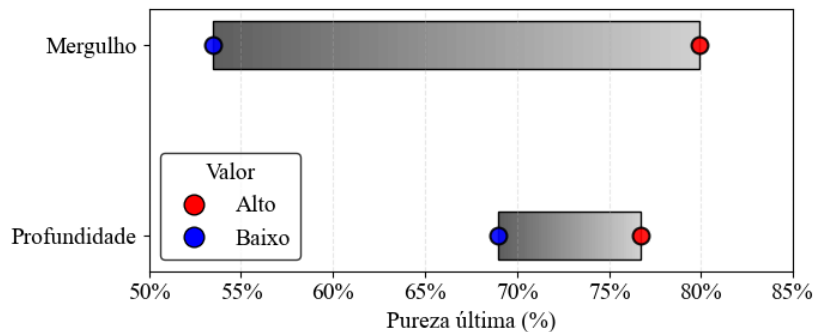


Figura 5.33 – Resumo da sensibilidade da $P_{últ}$ aos parâmetros do aquífero arenítico.

Quanto ao reservatório maduro de óleo, observa-se que a vazão operacional é o parâmetro de maior influência, sendo que valores elevados reduzem a eficiência de recuperação por causarem queda rápida da pressão na produção, o que antecipa o limite mínimo operacional e encurta o tempo de produção. A vazão de colchão apresenta sensibilidade intermediária, indicando que maiores volumes de gás colchão contribuem para estabilizar a pressão e aumentar o fator de recuperação.

A viscosidade apresentou efeito relativamente pequeno dentro dos intervalos analisados; entretanto, valores muito baixos podem alterar significativamente o comportamento do fluido, como observado no cenário com menor viscosidade ($\mu=0,003$ Pa.s). No caso do óleo muito leve, o comportamento diferiu da pluma de referência devido à maior influência da segregação gravitacional, resultando em efeitos opostos na análise de sensibilidade da viscosidade.

Essa discrepância decorre de suas características particulares, expressas pela ausência de efeitos viscosos, sobreposição de efeitos gravitacionais e comportamento distinto das pressões no reservatório. Por esse motivo, a avaliação focou apenas nos casos de óleo pesado e

leve, já que o óleo muito leve apresentou comportamento distinto em todas as métricas analisadas.

A sensibilidade mostra que o $FR_{méd}$ é mais sensível à vazão operacional, enquanto o $FR_{últ}$ é mais sensível à vazão de gás colchão. Além disso, valores mais baixos de viscosidade e vazão operacional proporcionaram cenários de maior desempenho em ambas as métricas, enquanto vazões maiores de gás colchão foram prejudiciais.

A Figura 5.34 e Figura 5.35 apresentam a análise de sensibilidade dos parâmetros do reservatório maduro de óleo, tendo como referência o cenário de maior $FR_{méd}$ (92%) e maior $FR_{últ}$ (94%).

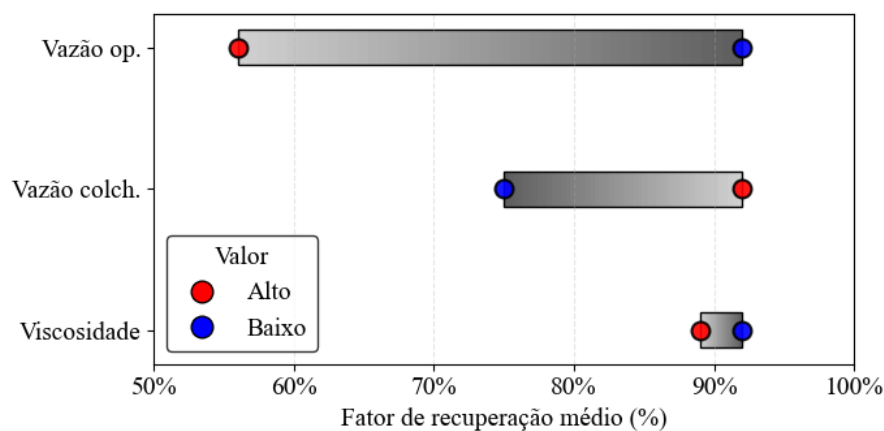


Figura 5.34 – Resumo da sensibilidade do $FR_{méd}$ aos parâmetros dos reservatórios maduros de óleo pesado e leve.

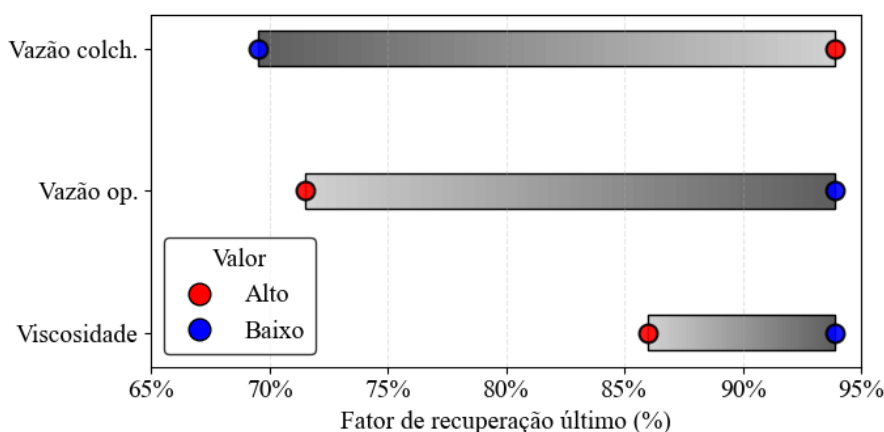


Figura 5.35 – Resumo da sensibilidade do $FR_{últ}$ aos parâmetros dos reservatórios maduros de óleo pesado e leve.

No reservatório maduro, a pureza média dos ciclos e a pureza total não apresentaram

variação significativa entre os cenários, tendo se mantido em valores entre 97% e 99%. Nesse sentido, entende-se que o tipo de reservatório por si só já favorece essa métrica em comparação ao aquífero, não havendo tendência de ganho ou perda de pureza significativos com a variação dos parâmetros operacionais e dos fluidos.

Ao compararmos os dois ambientes de armazenamento (aquífero e reservatório maduro), ficam evidentes as diferenças de comportamento dos fluidos com respeito à mobilidade, pressões desenvolvidas, fatores de recuperação e purezas do H₂ extraído.

De modo geral, os cenários do reservatório aquífero apresentaram maiores volumes acumulados de gás e fatores de recuperação mais elevados, indicando maior eficiência global de armazenamento e recuperação quando comparados ao reservatório de óleo residual.

Nos melhores cenários, o aquífero atingiu fatores de recuperação médios de até 90%, enquanto o reservatório de óleo alcançou valores próximos de 94% apenas em casos mais otimizados (ex.: Cenário 2.1.3). No entanto, o aquífero manteve desempenho mais consistente, com menor dispersão entre os resultados – enquanto o reservatório de óleo mostrou maior variabilidade, incluindo casos com baixo fator de recuperação (FR < 10%) e até cenários numericamente inviáveis para simulação (cenário 2.2.2 não converge).

Observa-se uma tendência oposta quanto à pureza: os reservatórios de óleo apresentaram valores de pureza média sistematicamente superiores (90% a 99%), enquanto os aquíferos variaram entre 49% e 77%. Isso sugere que, embora o aquífero seja mais eficiente para armazenar e recuperar maiores volumes de gás, a água presente no reservatório é extraída mais facilmente pelo poço, reduzindo a proporção gás/água na produção.

6 ETAPA 2: ESTUDO DE CASO BASEADO NO CAMPO DE NAMORADO

Esta seção apresenta os resultados das análises realizadas no campo maduro de óleo de Namorado. São exibidas as principais saídas dos modelos, incluindo as distribuições de saturação de gás e óleo, campos de pressão e mobilidade da pluma. Além disso, são discutidos os efeitos da heterogeneidade do meio, considerando valores arbitrários de distribuição de permeabilidade e porosidade, bem como uma análise preliminar de viabilidade e potencial energético da estrutura (Seção 6.1.1).

6.1 MODELO HOMOGÊNEO

A mobilidade da pluma de H_2 no modelo homogêneo do Campo de Namorado pode ser observada da Figura 6.1 a Figura 6.6. O limite da pluma foi estabelecido com base na região cuja saturação de gás H_2 corresponde a 0,27, a fim de limitar a pluma na região móvel do gás, dado que a saturação residual foi definida por esse valor. São apresentadas uma vista 3D contendo uma seção em $x = 3000$ m e outra em $y = 5000$ m e uma vista lateral em corte da seção em $x = 3000$ m.

A mobilidade do H_2 ocorre preferencialmente na porção superior do reservatório ao longo dos ciclos, com um deslocamento lateral também acentuado nessa porção. O que se observa é que à medida em que são executados os ciclos, parte do gás permanece aprisionado nas regiões mais afastadas do poço, fruto do aprisionamento capilar e da influência do confinamento estratigráfico provocado pela presença da rocha capeadora. Esse comportamento se assemelha com o modelo 2D simulado na Etapa 1.

Embora os efeitos viscosos sejam perceptíveis, a diferença de densidades exerce maior influência na movimentação dos fluidos no reservatório. Nesse sentido, o modelo homogêneo tende a minimizar a formação de bolsões caminhos preferenciais de fluxo, geralmente associados às instabilidades decorrentes das diferenças de viscosidade dinâmica entre os fluidos. A saturação residual após os 5 ciclos de operação é apresentada na Figura 6.7.

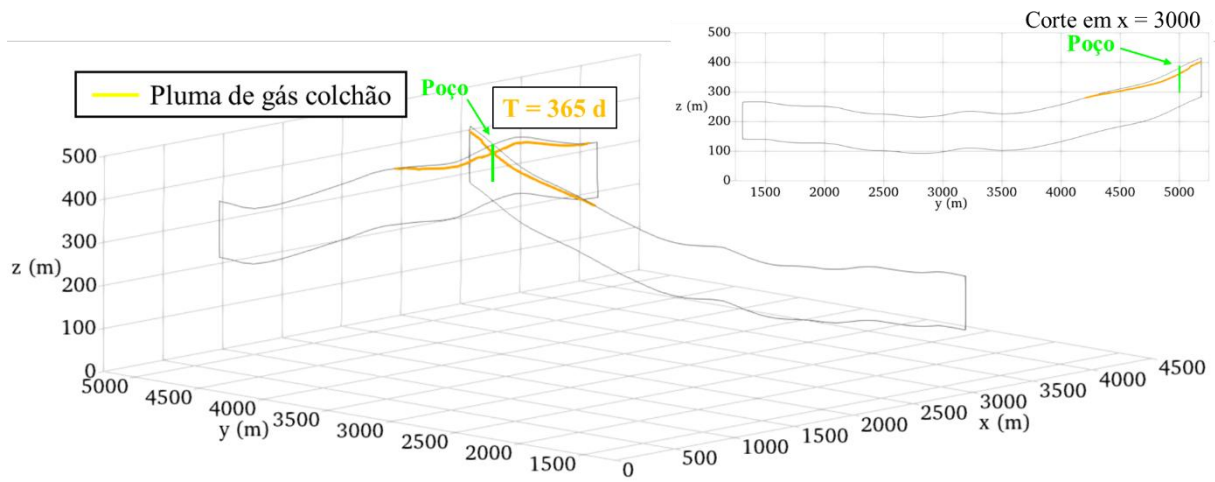


Figura 6.1 – Pluma de H₂ após ciclo de gás colchão – Namorado homogêneo.

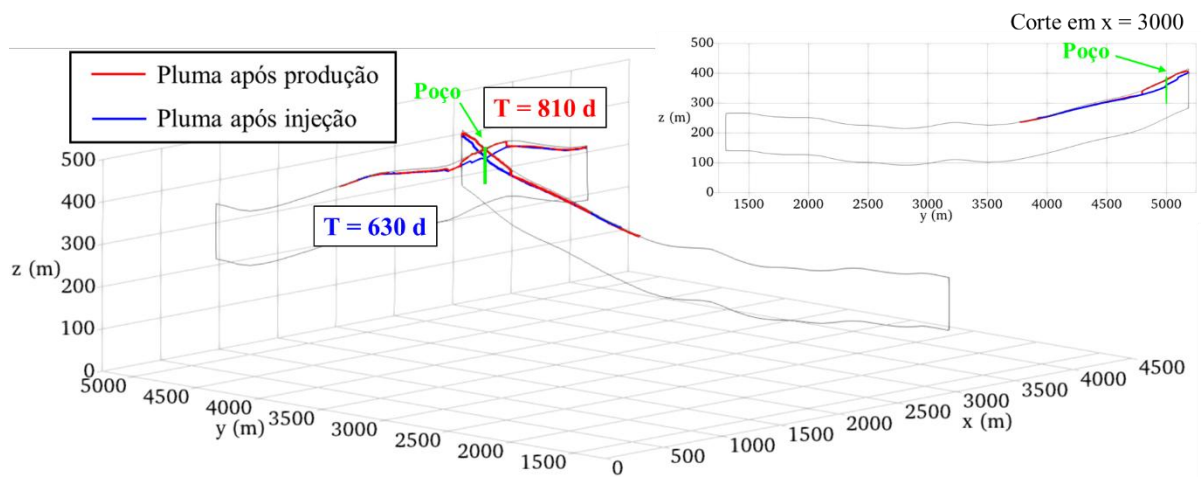


Figura 6.2 – Pluma de H₂ após ciclo 1 – Namorado homogêneo.

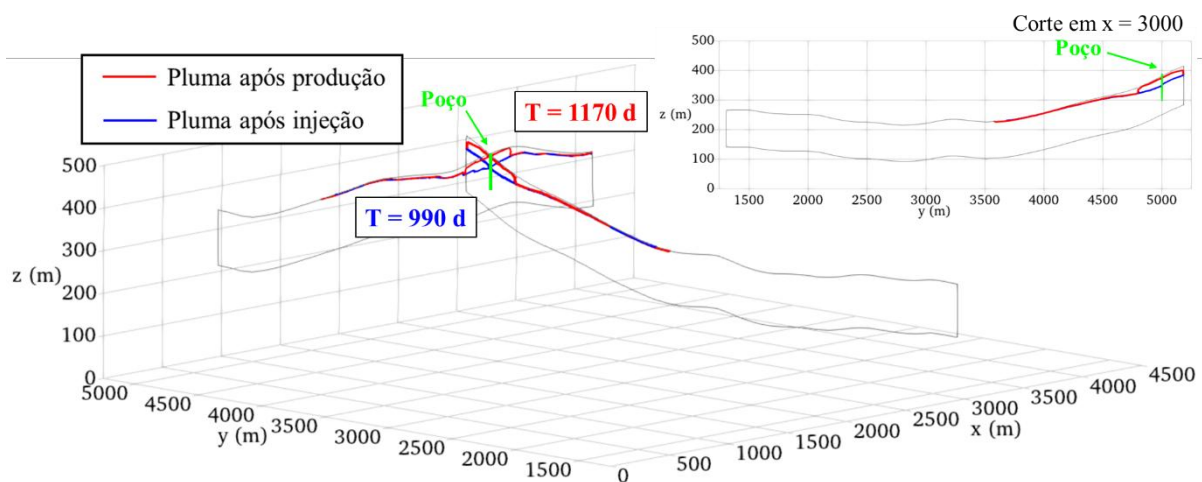


Figura 6.3 – Pluma de H₂ após ciclo 2 – Namorado homogêneo.

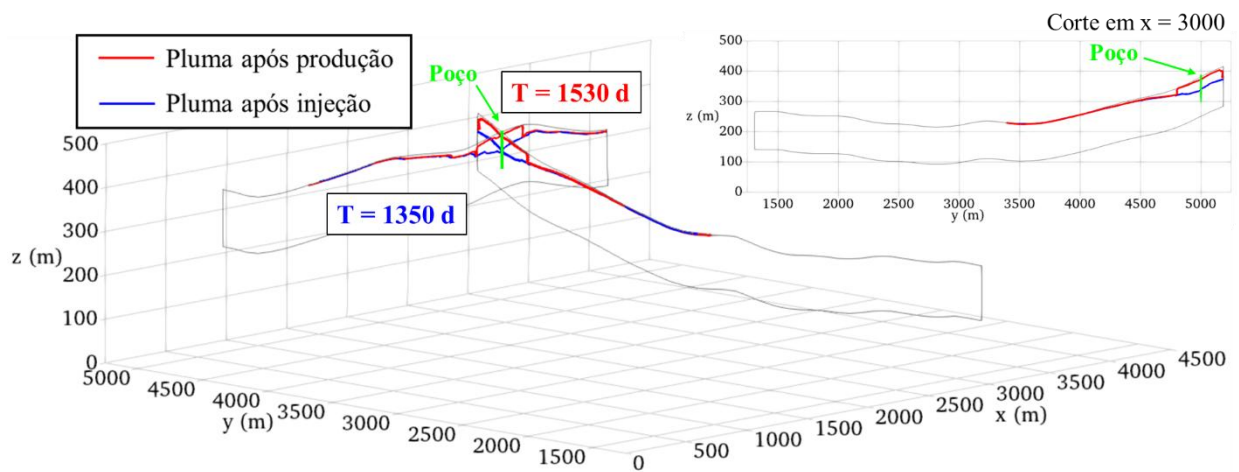


Figura 6.4 – Pluma de H₂ após ciclo 3 – Namorado homogêneo

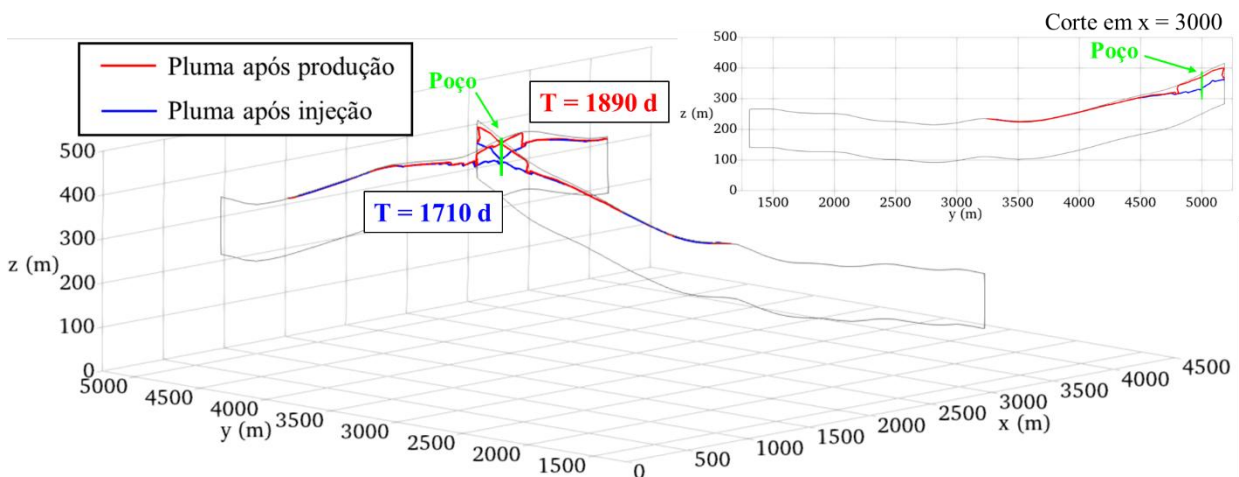


Figura 6.5 – Pluma de H₂ após ciclo 4 – Namorado homogêneo

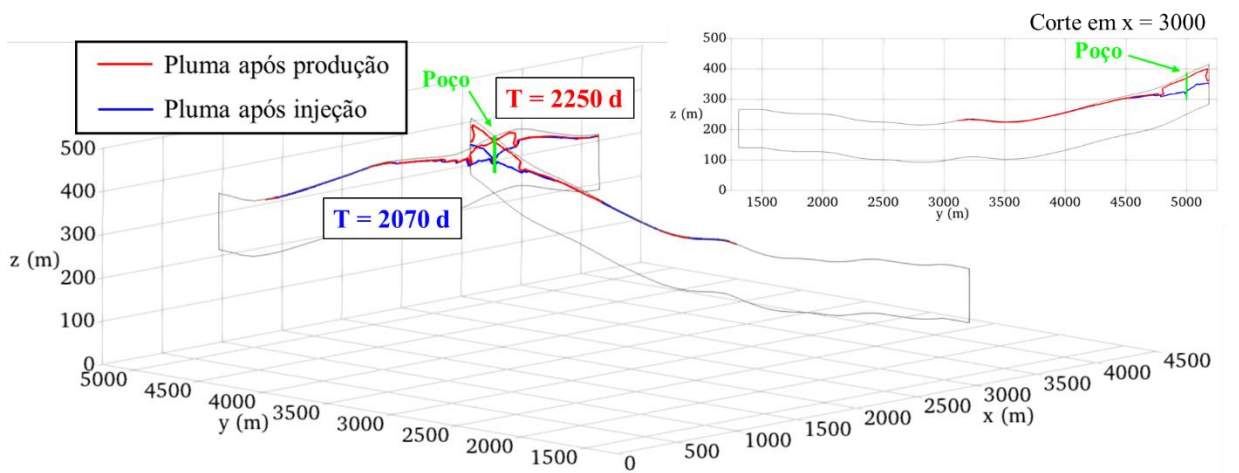


Figura 6.6 – Pluma de H₂ após ciclo 5 – Namorado homogêneo

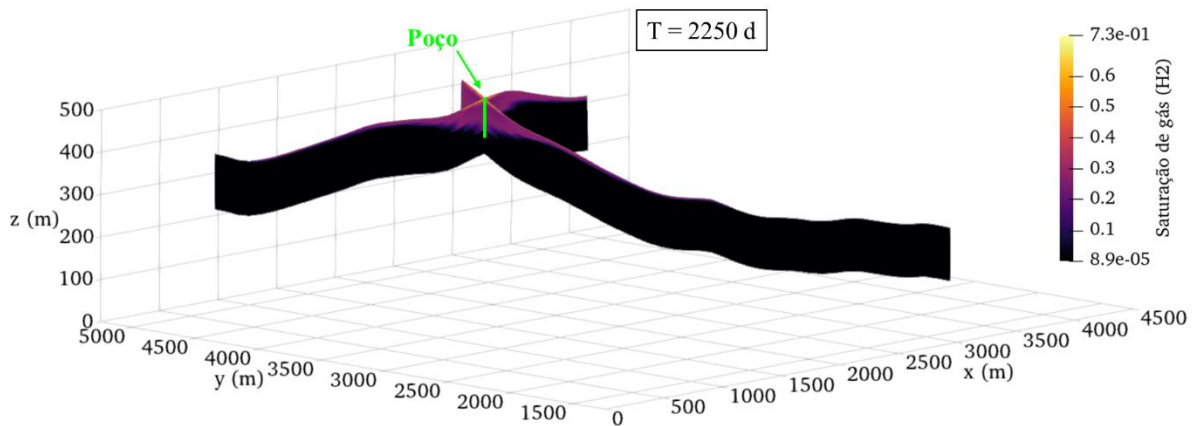


Figura 6.7 – Saturação residual de H₂ após o último ciclo de produção – Namorado homogêneo

As pressões médias no poço foram maiores no período de injeção de gás colchão, corroborando com o comportamento observado no modelo sintético 2D. Nesse caso, o gradiente de pressão também se concentrou na região próxima ao poço, em razão da baixa mobilidade do fluido no meio e da compressibilidade do óleo. A Figura 6.8 apresenta a vista das seções x e y no período de maior pressão média no poço (T = 350 d).

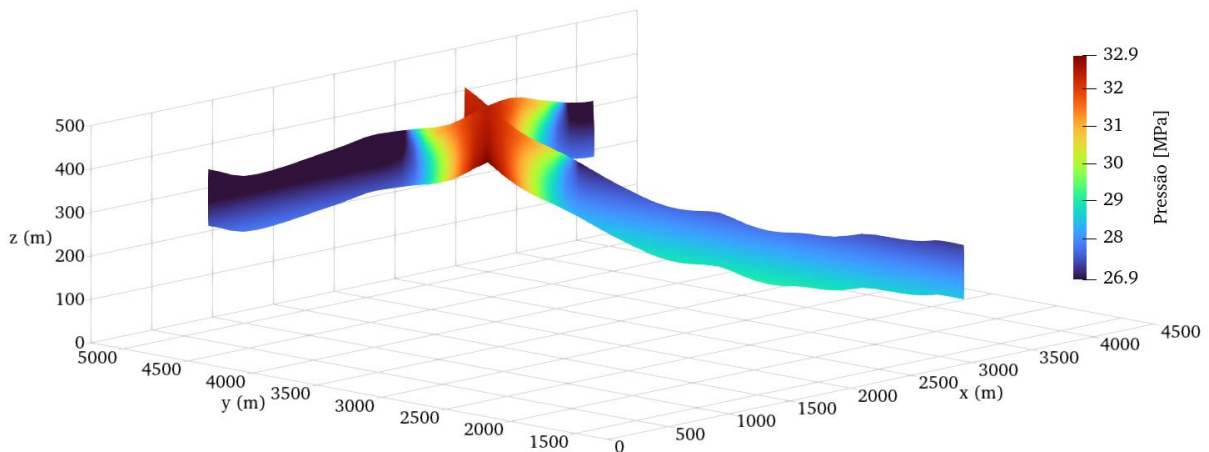


Figura 6.8 – Campo de pressões nas seções x e y – Namorado homogêneo

Em relação à eficiência do armazenamento, os resultados de pureza, fator de recuperação e a massa de H₂ recuperada estão apresentados na Tabela 6.1. A Figura 6.9, por sua vez, apresenta o quadro resumo do monitoramento das pressões, vazões e demais métricas de eficiência ao longo de toda a operação.

Observa-se que o comportamento do sistema é consistente com aquele verificado nos modelos sintéticos simulados na Etapa 1, uma vez que o fluido e as propriedades da rocha

apresentam características semelhantes. Tanto a pureza quanto o fator de recuperação tendem a aumentar com o número de ciclos, desde que o reservatório seja submetido a uma pressurização adequada.

Tabela 6.1 – Eficiência do armazenamento no cenário homogêneo – Namorado

Métrica	Ciclo 1	Ciclo 2	Ciclo 3	Ciclo 4	Ciclo 5	Total
Pureza	69%	80%	89%	91%	93%	84%
Fator de Recuperação	24%	38%	47%	54%	56%	44%
Massa (t)	332.217	533.347	655.383	763.992	788.734	3.073.674

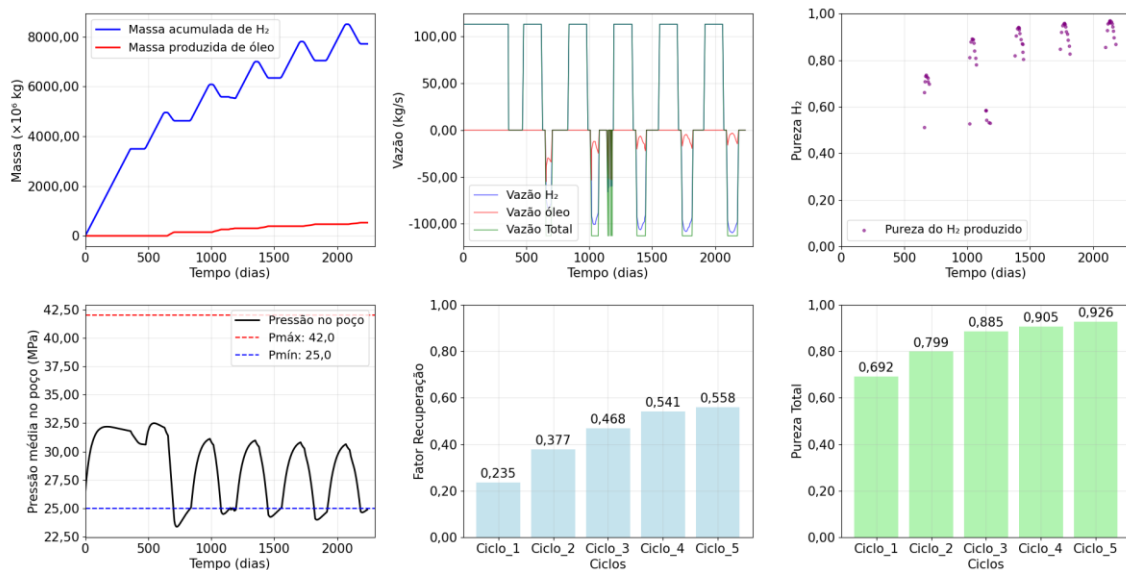


Figura 6.9 – Quadro resumo do ASH no modelo homogêneo de Namorado.

6.1.1 ANÁLISE DE VIABILIDADE E POTENCIAL ENERGÉTICO

Após a simulação no modelo homogêneo do campo de Namorado, foi possível avaliar de maneira expedita o desempenho energético do sistema.

Inicialmente, foi aplicado um fator de redução às massas produzidas por ciclo, como forma de compensar potenciais superestimativas nas vazões adotadas ao longo da operação. As simulações foram realizadas considerando uma vazão de 10^8 Sm³/d, valor que pode não representar condições realistas em reservatórios destinados ao armazenamento de gases.

Para aproximar os resultados de cenários mais plausíveis, as massas produzidas foram divididas por 10 em uma simplificação que busca representar uma vazão efetiva 10 vezes menor – embora essa relação não seja estritamente linear, uma vez que reduzir a vazão por um fator não garante proporcionalidade exata nas massas recuperadas ao longo de ciclos sucessivos.

Após essa simplificação foi feita a conversão para energia gerada considerando o uso em células a combustível, conforme descrito no Item 4.4. Os resultados da conversão estão na Tabela 6.2.

Tabela 6.2 – Conversão da massa produzida de H₂ em energia gerada por ciclo para o campo de Namorado considerando o uso em células a combustível

Ciclo	Massa de H ₂ (t)	Massa de H ₂ com vazão reduzida (t)	Energia por ciclo de 6 meses (GWh)
1	332.217	33.221	664
2	533.347	53.335	1.067
3	655.383	65.538	1.311
4	763.992	76.399	1.528
5	788.734	78.873	1.578

Esses resultados mostram que, em comparação com hidrelétricas de grande porte nacionais, o ASH no campo de Namorado apresenta um alto potencial de geração de energia, quando comparado a UHEs convencionais (conforme indicado na Tabela 4.11) porém inferior a barragens como Jirau, Tucuruí e São Luís do Tapajós, considerando as simplificações e condições adotadas no modelo numérico simulado. A Tabela 6.3 apresenta a posição do reservatório junto às hidrelétricas com maior capacidade instalada do Brasil.

Tabela 6.3 – Comparativo entre usinas hidrelétricas nacionais de grande porte (UHE) e o campo de Namorado

Estrutura/Usina	GWh gerados por semestre
Itaipu	34.937
Belo Monte	18.569
Tucuruí	16.373
Santo Antônio	8.922
Xingó	7.695
Jirau	7.006
Ilha Solteira	5.011
Billings	1.752
Campos Novos	1.734
Namorado	1.578
Barra Grande	1.395
Capivara	1.220
Boa Esperança	467

6.2 MODELO HETEROGÊNIO

Da Figura 6.10 a Figura 6.15 estão apresentadas as saídas do modelo heterogêneo referentes à mobilidade da pluma de H_2 . Ressalta-se que o limite foi estabelecido com base na região cuja saturação de gás H_2 corresponde a 0,27, a fim de limitar a pluma na região móvel do gás, dado que a saturação residual foi definida por esse valor. São apresentadas uma vista 3D contendo uma seção em $x = 3000$ m e outra em $y = 5000$ m e uma vista lateral em corte da seção em $x = 3000$ m.

Observa-se que, de modo geral, após os ciclos de produção, a pluma de H_2 tende a se afastar do poço, acompanhada da formação de “bolsões” de óleo em suas proximidades. Essas regiões podem estar associadas a instabilidades na interface H_2 -óleo, que favorecem o surgimento de caminhos preferenciais de fluxo — um comportamento típico de sistemas com forte influência de efeitos viscosos.

Além disso, diferentemente do observado no modelo homogêneo, a pluma de H_2 apresenta um deslocamento menos uniforme no modelo heterogêneo, resultado das variações de mobilidade em zonas com diferentes permeabilidades e porosidades. Nesse contexto, os efeitos viscosos tornam-se mais pronunciados devido à presença da heterogeneidade do meio.

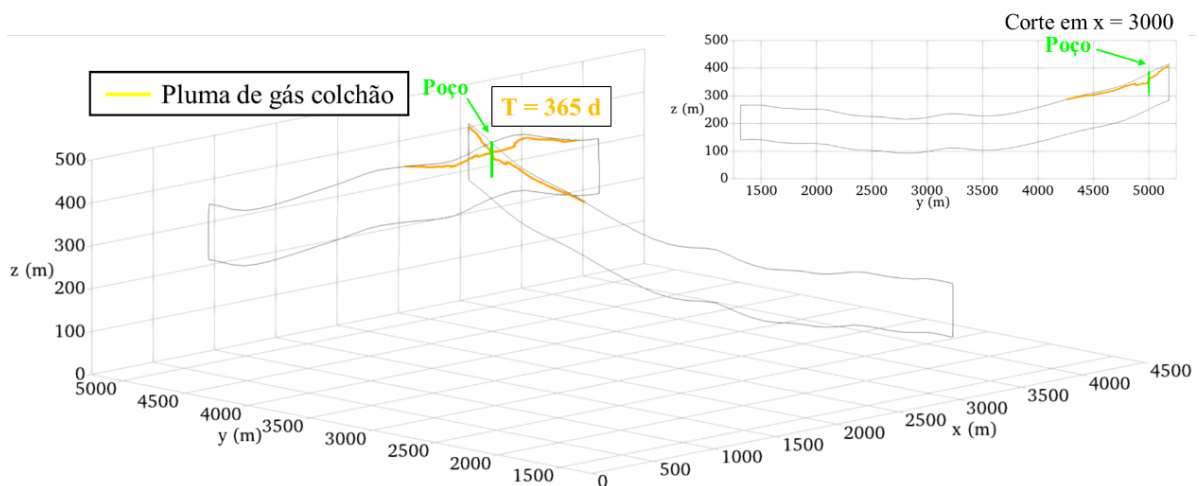


Figura 6.10 – Pluma de H_2 após ciclo de gás colchão – Namorado heterogêneo

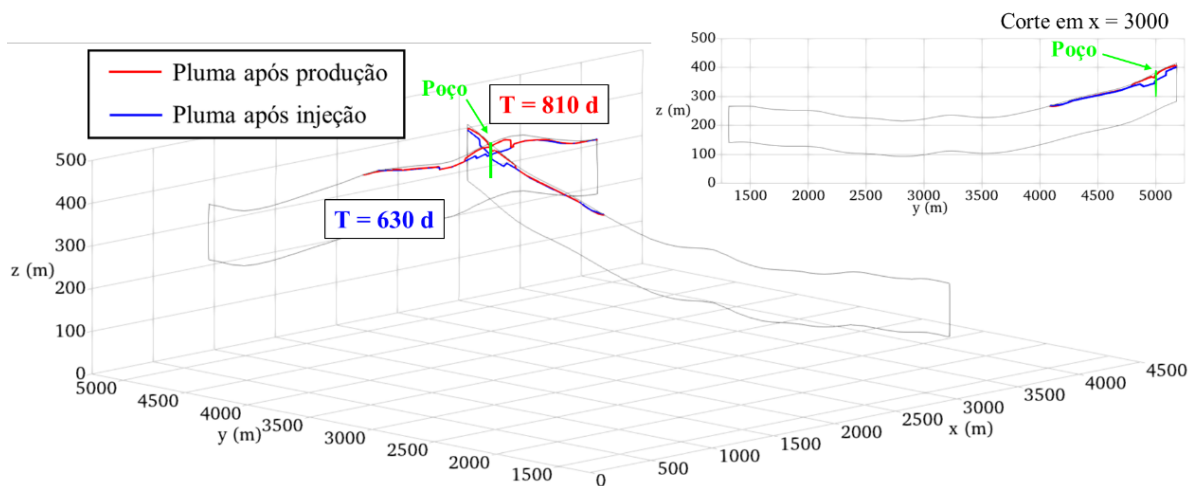


Figura 6.11 – Pluma de H₂ após ciclo 1 – Namorado heterogêneo

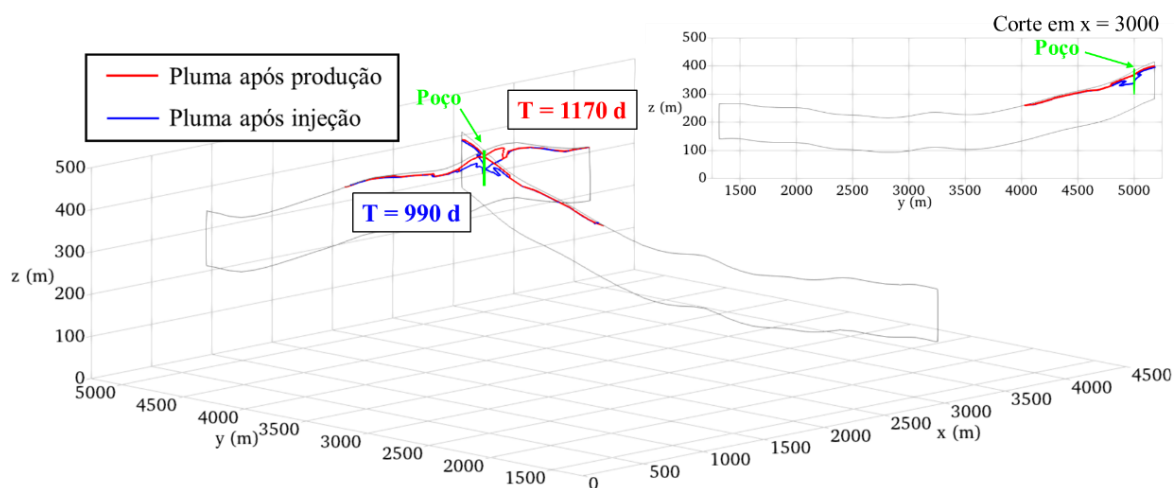


Figura 6.12 – Pluma de H₂ após ciclo 2 – Namorado

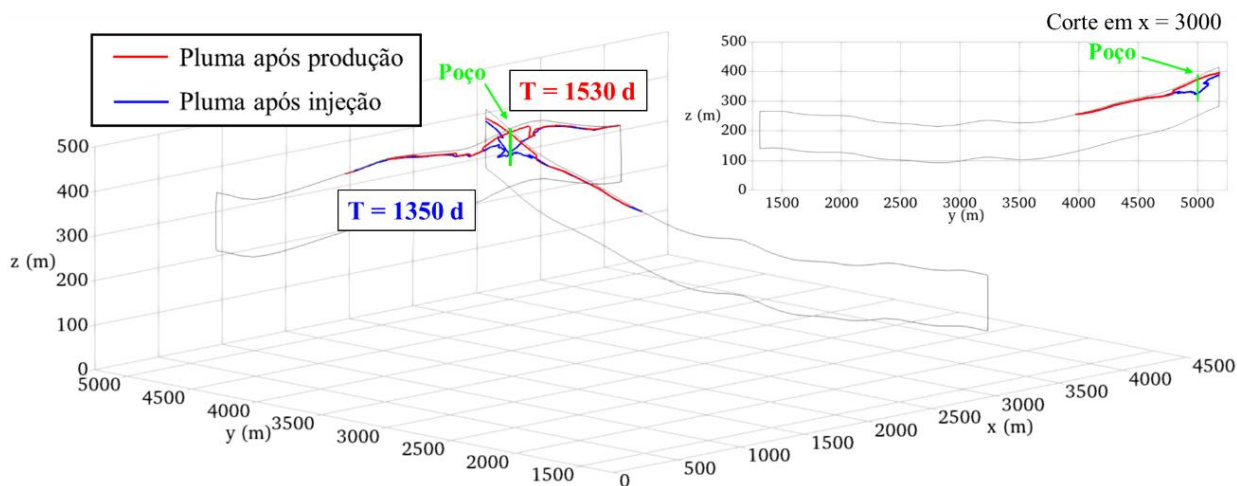


Figura 6.13 – Pluma de H₂ após ciclo 3 – Namorado heterogêneo

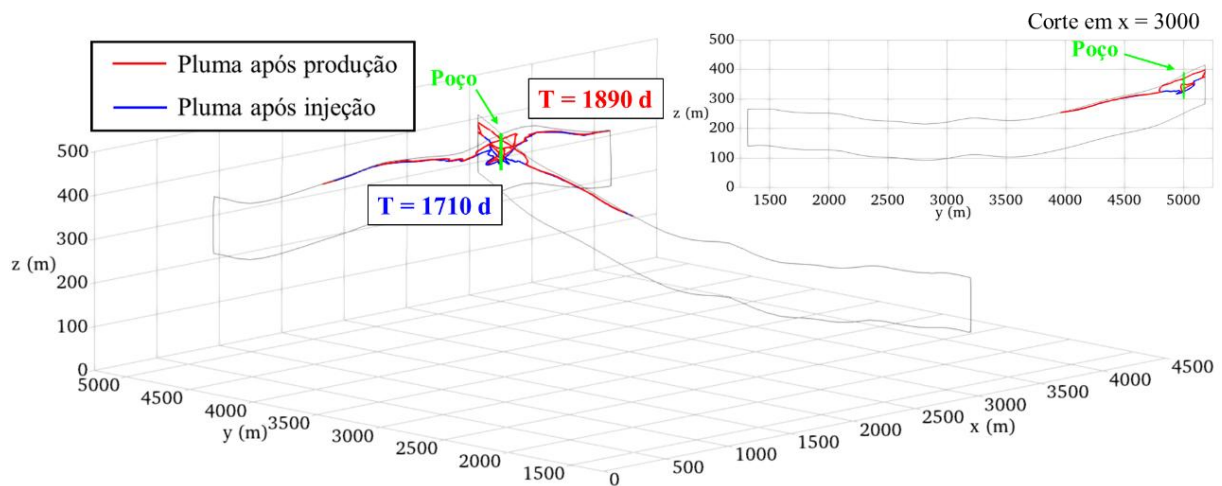


Figura 6.14 – Pluma de H₂ após ciclo 4 – Namorado heterogêneo

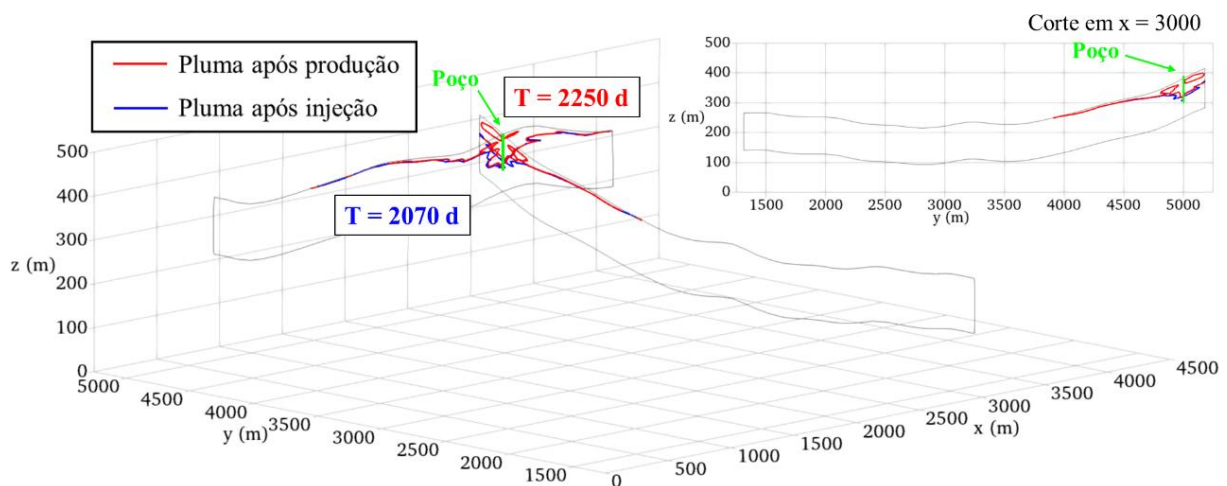


Figura 6.15 – Pluma de H₂ após ciclo 5 – Namorado heterogêneo

O campo de saturação de gás H₂ ao final da operação, nas seções x e y é apresentado na Figura 6.16. No caso do reservatório heterogêneo, observam-se efeitos viscosos mais pronunciados, resultando em um maior deslocamento lateral da pluma ao longo de caminhos preferenciais de escoamento (dedos viscosos) – especialmente na direção x, onde a inclinação do reservatório é menos acentuada.

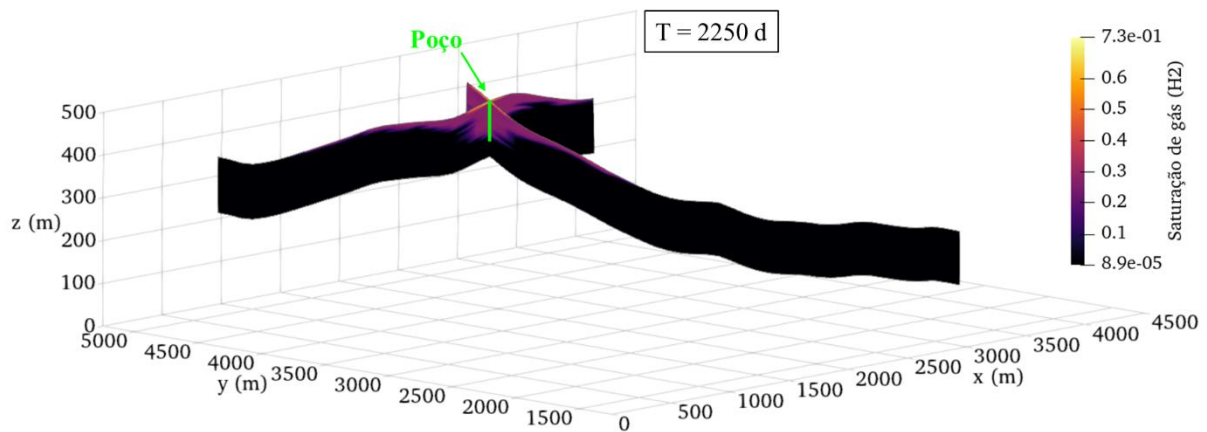


Figura 6.16 – Saturação residual de H₂ após o último ciclo de produção – Namorado heterogêneo

As pressões médias no poço foram maiores no período de injeção de gás colchão, corroborando com o comportamento observado no modelo sintético 2D. Nesse caso, o gradiente de pressão também se concentrou na região próxima ao poço, em razão da baixa mobilidade do fluido no meio e da compressibilidade do óleo. A Figura 6.17 apresenta a vista das seções x e y no período de maior pressão média no poço (T = 350 d).

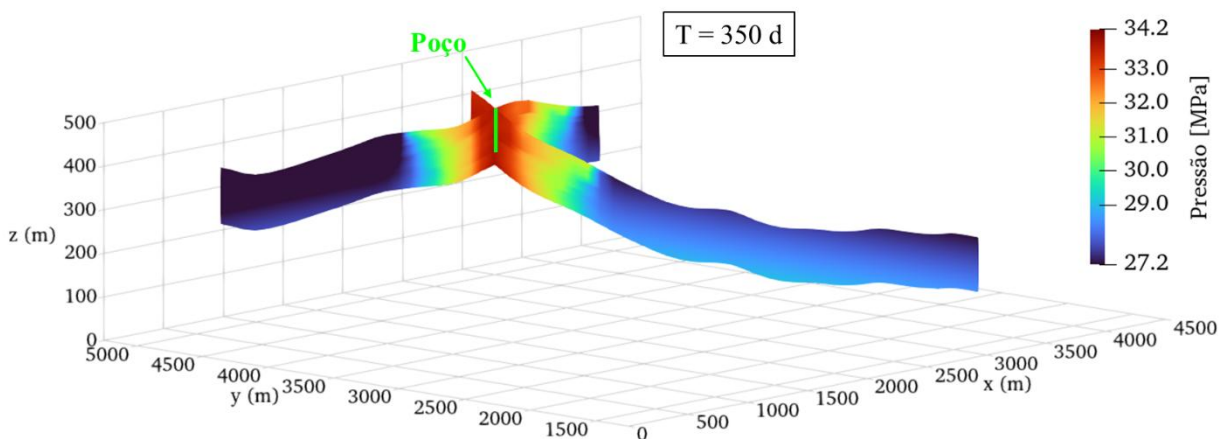


Figura 6.17 – Campo de pressões nas seções x e y – Namorado heterogêneo

Quanto à eficiência do armazenamento, o cenário apresentou os resultados descritos na Tabela 6.4 para a pureza, fator de recuperação e massa de H₂ recuperada. Ademais, a Figura 6.18 mostra o quadro resumo de monitoramento de pressões, vazões e métricas de eficiência desse modelo ao longo de toda a operação.

Ressalta-se que o comportamento observado corrobora com o observado para os modelos sintéticos simulados na Etapa 1, haja vista que o fluido e parâmetros da rocha são

similares. Pureza e fator de recuperação tendem a aumentar com o número de ciclos quando há pressurização suficiente no reservatório.

Tabela 6.4 – Eficiência do armazenamento no cenário heterogêneo – Namorado

Métrica	Ciclo 1	Ciclo 2	Ciclo 3	Ciclo 4	Ciclo 5	Total
Pureza	82%	85%	92%	93%	93%	89%
Fator de Recuperação	37%	45%	53%	60%	70%	53%
Massa (t)	528.770	643.006	748.863	841.648	973.189	3.735.475

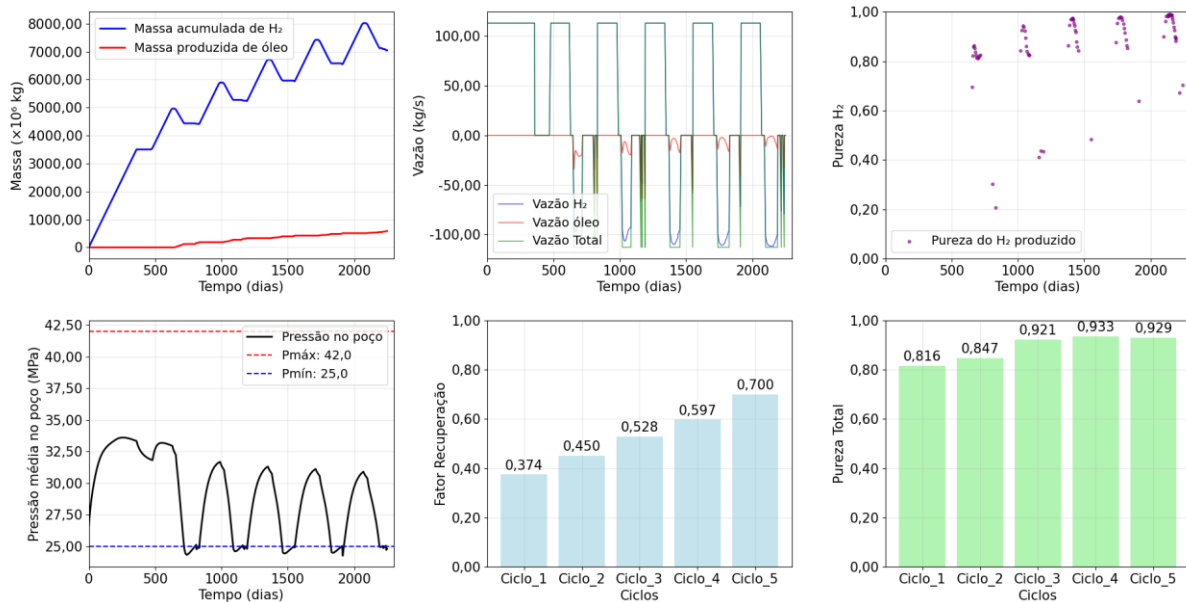


Figura 6.18 – Quadro resumo do ASH no modelo heterogêneo de Namorado.

6.3 COMPARAÇÃO DOS MODELOS

Conforme mostra a Figura 6.19, o modelo com permeabilidade constante apresentou métricas de eficiência ligeiramente menores que o modelo heterogêneo. Nesse caso, o par permeabilidade–porosidade foi definido com base na média dos valores observados no reservatório Namorado. Já no modelo heterogêneo, esses parâmetros foram atribuídos de forma aleatória em torno de uma distribuição log-normal de probabilidades, construída a partir dos dados reais do reservatório.

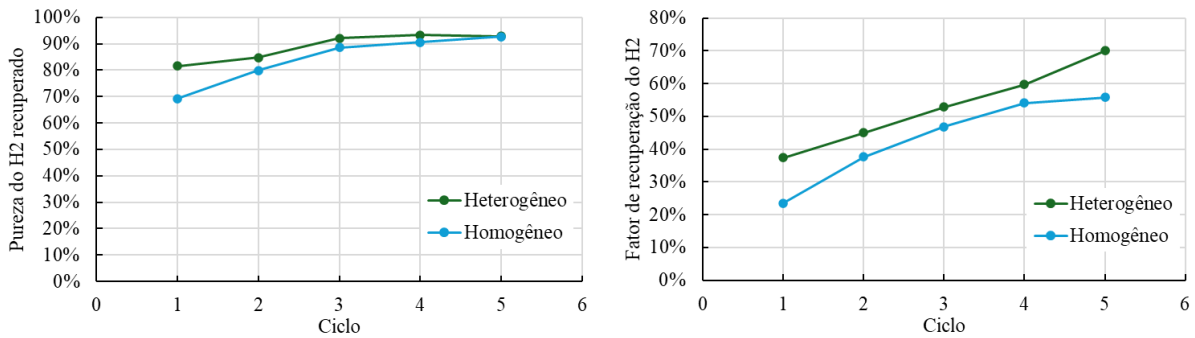


Figura 6.19 – Comparação dos modelos homogêneo e heterogêneo de Namorado.

Uma possível explicação para esse resultado está relacionada à posição do poço de extração. Conforme indicado nas análises de sensibilidade, o aumento da permeabilidade pode reduzir a eficiência do ASH, pois aumenta a mobilidade do gás e favorece seu afastamento do poço. Assim, a localização do poço em uma região com valores mais altos de permeabilidade pode comprometer o desempenho do sistema. Nesse sentido, posicionar o poço em áreas mais homogêneas, com valores conhecidos e moderadamente baixos de permeabilidade e porosidade – sem que sejam muito baixos a ponto de elevar excessivamente a pressão – pode ser mais vantajoso para o ASH.

Outra fator que deve ser levado em conta é uma possível a redução da segregação gravitacional no modelo heterogêneo, impulsionada por lentes de menor permeabilidade na porção superior. Essas zonas diminuem o deslocamento do gás para essa região e dificultam que o H₂ se distancie do poço. Dessa forma, maiores contrastes de porosidade e permeabilidade podem beneficiar o ASH a depender da região do poço.

Além disso, é importante destacar que um dos principais fatores que influenciam a retenção de H₂ no reservatório é a curva de permeabilidade relativa, diretamente associada à molhabilidade, litologia, mineralogia e outras propriedades intrínsecas do meio e fluidos. Nos casos analisados, essa característica foi mantida constante em ambos os modelos, como forma de simplificação. No entanto, entende-se que a variação espacial dessa propriedade pode ter um impacto ainda mais significativo no desempenho do ASH, uma vez que está diretamente relacionada à saturação residual da fase não molhante no meio poroso.

7 CONCLUSÃO

Este trabalho buscou fornecer contribuições relevantes a respeito do armazenamento subterrâneo de Hidrogênio e da aplicabilidade do software DuMu^x para modelagem desse tipo de problema. Além disso, também foram avaliados aspectos referentes à especificidades dos fluidos e rochas envolvidas, bem como a viabilidade de se operar o ASH em um reservatório em escala real.

Com base nos resultados, este capítulo discute as principais conclusões do estudo, passando por cada etapa de modelagem. Além disso, são também apresentadas as principais incertezas e limitações que foram identificadas no decorrer dos testes realizados e apresentadas ao longo do estudo.

Ressalta-se ainda que o estudo realizado constitui um breve ensaio do potencial que ainda precisa ser explorado sobre o ASH no Brasil e no mundo, uma vez que ainda são incipientes as linhas de pesquisa que abordam esse tema. Nesse sentido, o estudo também se propõe a indicar oportunidades de melhoria, trabalhos complementares e novas linhas a serem estudadas, envolvendo aspectos de modelagem, ensaios, estudos de viabilidade e outros.

7.1 PRINCIPAIS CONCLUSÕES

A base teórica referenciada no Capítulo 2 deste estudo incorporou os principais aspectos relacionados ao ASH atualmente, fornecendo informações relevantes para o entendimento desses sistemas, e suas principais limitações técnicas, operacionais e regulatórias. Nesse contexto, as conclusões obtidas puderam ser confrontadas com o cenário atual dos estudos sobre ASH, não apenas corroborando trabalhos previamente referenciados, mas também oferecendo novas perspectivas quanto às suas características, boas práticas e aspectos de modelagem.

Na etapa 1 das simulações, foi possível realizar as análises de sensibilidade dos parâmetros físicos e variáveis relacionadas à operação do ASH em reservatórios maduros e aquíferos. As principais conclusões do estudo nessa etapa foram:

- O programa DuMu^x possui aplicabilidade a problemas de fluxo multifásico 2D em aquíferos e reservatórios maduros, sendo uma ferramenta capaz de simular a operação de ASH com precisão de resultados. A versatilidade do programa garante ainda que sejam implementados diferentes modelos, com fluidos e materiais variados e parametrizáveis, além de permitir a criação de modelos constitutivos, componentes e materiais.

- A análise de sensibilidade revela que a profundidade aquífero é o parâmetro mais influente no fator de recuperação médio do H₂. Valores altos de mergulho e vazão operacional aumentam o desempenho nesse sentido, enquanto alta permeabilidade e profundidade o reduzem. A pureza demonstrou ser mais sensível às variações de mergulho e profundidade do reservatório, com o mergulho apresentando o impacto mais expressivo: nos cenários analisados, a pureza média variou de 53% no pior caso (menor mergulho) a 77% no melhor cenário (mergulho mais acentuado).
- Vazões operacionais maiores tendem a favorecer ganho inicial de pureza no ASH, enquanto vazões moderadas beneficiam a produção prolongada. Reservatórios mais inclinados podem aumentar a pureza nos primeiros dias de produção, mas redução mais rápida ao longo do ciclo, elevando a extração de água no final, o que é crítico para a operação. Já reservatórios menos permeáveis proporcionam maior pureza de H₂ extraído nos primeiros dias de produção, em razão da baixa mobilidade do H₂ que se concentra próximo ao poço.
- Os resultados também mostraram que, dentro dos limites estabelecidos para as variáveis de sensibilidade adotadas, o cenário mais eficiente de ASH em aquíferos apresentou maior ângulo de mergulho, maior vazão operacional, menor permeabilidade e porosidade e menor profundidade. Ressalta-se que o par porosidade-permeabilidade deve possuir valor suficientemente grande para evitar gradientes de pressão elevados.
- Quanto ao reservatório maduro de óleo, foram simulados cenários variando-se a viscosidade, vazão de gás colchão e vazão de operação do sistema. Em geral, os resultados demonstraram que o óleo de viscosidade muito baixa (0,003 Pa·s) apresentou um comportamento distinto dos demais, devido à predominância dos efeitos gravitacionais sobre os viscosos. Esse fenômeno resultou em métricas de desempenho superiores nos cenários onde é possível manter a pressão do reservatório, sugerindo que ambientes com fluidos de baixa viscosidade podem ser mais adequados para a implementação do ASH.
- Reservatórios maduros de óleo pesado e leve (viscosidades de 0,15 e 0,06 Pa·s, respectivamente) mostraram que, em geral, maiores viscosidades, menores vazões de operação e maiores vazões de gás colchão tendem a aumentar a eficiência do sistema, com maior influência no fator de recuperação. A pureza mantém-se consistentemente alta (97-99%) independentemente dos parâmetros, indicando que o próprio tipo de reservatório favorece essa métrica. Ressalta-se que esses resultados não se aplicaram ao

óleo muito leve e estão diretamente atrelados aos limites de sensibilidade considerados por este estudo.

- A pressurização do reservatório com gás colchão mostrou-se especialmente importante em reservatórios maduros de óleo, pois a maior viscosidade e compressibilidade do óleo, em comparação à água, exigem uma pressão inicial mais elevada para assegurar a mobilidade do gás e a estabilidade do sistema. O $FR_{méd}$ responde mais à vazão operacional, enquanto o $FR_{últ}$ é mais sensível à vazão de colchão. Uma pressurização insuficiente no início da operação pode antecipar o atingimento do limite mínimo de pressão, tornando necessários novos ciclos de injeção de gás colchão ou reduções nas vazões de extração.
- De modo geral, os aquíferos apresentaram maiores volumes acumulados de gás e fatores de recuperação mais elevados, com desempenho mais consistente entre os cenários. Já os reservatórios de óleo mostraram maior variabilidade nos resultados, com casos de baixo fator de recuperação, mas purezas médias mais altas (90%-99%) em relação aos aquíferos (49%-77%), indicando que, embora o aquífero seja mais eficiente em termos de recuperação, a produção de água reduz a pureza do H_2 extraído.

Na segunda parte do trabalho, foi avaliado o ASH no reservatório maduro de Namorado, que mostrou ser uma estrutura com características adequadas para armazenamento do H_2 , dadas as condições exploradas por este estudo. É importante ressaltar que essa avaliação leva em conta apenas aspectos de fluxo e transporte no meio poroso, além de estar atrelada a incertezas e limitações do estudo, conforme apresentado no Item 7.2.

Nesse cenário, a viabilidade foi avaliada considerando aspectos relacionados à condições de operação e à capacidade de armazenamento para geração de energia. Como principais conclusões, destacam-se:

- Os modelos tridimensionais baseados no campo de Namorado puderam ser reproduzidos no DuMu^x, fornecendo resultados representativos para os fenômenos multifásicos de fluxo e transporte de interesse deste estudo. Além disso, as simulações realizadas no modelo 3D corroboram com as análises de sensibilidade 2D para o reservatório maduro de óleo, com comportamento dos fluidos similar ao observado na Etapa 1 do estudo.
- O modelo homogêneo de Namorado apresentou comportamento mais contido da pluma de H_2 , com efeitos viscosos menos evidentes e formato mais contínuo. Observa-se que reservatórios mais heterogêneos tendem a intensificar os efeitos oriundos da diferença

de viscosidade entre os fluidos, porém a segregação gravitacional é reduzida.

- A heterogeneidade do par permeabilidade–porosidade resultou em aumento das métricas de eficiência do sistema, mas essa resposta mostrou-se dependente da posição do poço no modelo heterogêneo, que utilizou distribuição lognormal aleatória desses parâmetros. Uma possível explicação está no fato de que a localização do poço em regiões de menor permeabilidade pode limitar a mobilidade do H₂ e favorecer sua retenção próximo à extração. Além disso, o aumento do contraste de propriedades pode reduzir a segregação gravitacional, beneficiando a recuperação. Entretanto, as variações observadas permanecem dentro do intervalo esperado para pequenas flutuações nas propriedades do meio, não indicando um efeito sistemático da heterogeneidade. Ressalta-se a necessidade de estudos complementares que avaliem seu impacto real, incorporando fatores como variação espacial das curvas de permeabilidade relativa, presença de fraturas e outras características estruturais do reservatório.
- Considerando as condições operacionais adotadas neste estudo e um consumo médio de 2.900 kWh por pessoa ao ano (1.450 kWh por semestre), a geração de 1.578 GWh por semestre a partir do hidrogênio armazenado no campo de Namorado seria suficiente para abastecer cerca de 1,1 milhão de pessoas nesse período, equivalente, por exemplo, à população de Belém (PA), Goiânia (GO) ou Porto Alegre (RS). Esse resultado demonstra o potencial energético do reservatório e aponta a viabilidade do sistema de armazenamento para suprir demandas regionais significativas.

7.2 LIMITAÇÕES DO ESTUDO

Este estudo apresenta limitações associadas às simplificações adotadas na modelagem numérica, necessárias para viabilizar as simulações dos cenários propostos. No entanto, ressalta-se que os resultados obtidos permanecem relevantes para a compreensão da dinâmica do ASH em reservatórios geológicos, e as ferramentas utilizadas são adequadas para o tipo de análise realizado. A identificação destas limitações tem como objetivo principal apontar caminhos para melhorias em pesquisas futuras e fomentar o desenvolvimento de novas linhas de investigação no tema.

O modelo adotou condições isotérmicas, não considerando potenciais variações de temperatura durante a injeção e produção. Uma possível consideração desses efeitos térmicos poderia incorporar a influência de diferenciais de temperatura nas pressões, na densidade, na viscosidade e na solubilidade do H₂, além de alterações nas propriedades dos fluidos e da rocha

ao longo da operação cíclica, o que poderia impactar a dinâmica do armazenamento e os resultados de recuperação

Embora o processo difusivo esteja presente na formulação do modelo, ele não foi considerado nas análises de sensibilidade, de modo que seus efeitos sobre o fator de recuperação não foram quantificados separadamente. Já a dispersão hidrodinâmica não foi incluída na modelagem, o que representa uma limitação secundária, dado o menor impacto esperado desse mecanismo nas escalas e condições analisadas.

Além disso, foram adotadas constantes e parâmetros de entrada obtidos na literatura para representar as propriedades dos materiais, como coeficientes de difusão, solubilidade, permeabilidade, porosidade, curvas de permeabilidade relativa e capilaridade. Embora esses valores sejam amplamente utilizados e reconhecidos em estudos similares, não foram determinados por meio de ensaios laboratoriais específicos para o material analisado neste trabalho.

O modelo tridimensional também foi simplificado devido às limitações na leitura e interpretação dos arquivos de dados de permeabilidade e porosidade pelo DuMu^x. Assim, o modelo homogêneo foi representado com parâmetros médios obtidos da literatura, enquanto o modelo heterogêneo considerou valores aleatórios dentro dos limites da base de dados disponível. Embora essa abordagem permita uma análise expedita do potencial energético e uma sensibilidade da influência do grau de heterogeneidade, ela pode não reproduzir fielmente o comportamento real do reservatório.

A discretização temporal adotada – com passos de tempo de 10 dias – foi arbitrada para reduzir o tempo computacional, o que pode ter limitado a captura de fenômenos transientes de curta duração, como variações abruptas de pressão e saturação próximas aos poços. Uma possível melhoria do estudo seria aumentar tanto a discretização temporal quanto espacial como forma de aumentar a precisão dos resultados.

Quanto à representação dos poços, o código DuMu^x considera esses elementos como termos fonte ou sumidouro, correspondendo matematicamente a pontos ou linhas de injeção e produção com condições de fluxo arbitradas por condições de Neumann. Essa abordagem, que segue a formulação implementada por outros autores para problemas de armazenamento subterrâneo de hidrogênio, simplifica a interação poço-reservatório, uma vez que a vazão é aplicada isotropicamente, inclusive em direção ao poço. Contudo, um modelo de poço mais detalhado, com representação radial e controle direcional de vazão, seria desejável para capturar efeitos locais mais realistas.

Por fim, destaca-se que o DuMu^x não dispõe de uma interface gráfica nativa, o que dificulta o processo de modelagem, análise e interpretação de resultados. A integração de módulos complementares ou o desenvolvimento de uma ferramenta de interface dedicada representam caminhos promissores para aprimorar a usabilidade e a eficiência do processo de simulação no DuMu^x.

7.3 PERSPECTIVAS PARA TRABALHOS FUTUROS

Com base nas limitações e nos resultados obtidos neste estudo, algumas perspectivas de continuidade e aprofundamento são sugeridas para aprimorar a compreensão dos processos envolvidos no ASH.

- Modelagem hidromecânica acoplada – Incorporar o acoplamento entre os campos de fluxo e deformação do meio poroso, permitindo avaliar efeitos de compactação, fraturamento induzido e alterações de permeabilidade decorrentes das variações de pressão durante os ciclos de injeção e produção.
- Avaliação das perdas por difusão e dispersão – Investigar mecanismos de transporte de massa não advectivos, de modo a quantificar perdas difusivas e dispersivas e compreender sua influência na eficiência de armazenamento ao longo do tempo.
- Modelagem em meios fraturados – Incluir fraturas naturais ou induzidas na representação do reservatório, avaliando efeitos de aprisionamento estrutural, anisotropia e caminhos preferenciais de fluxo sobre o comportamento do hidrogênio.
- Consideração da histerese nas curvas de permeabilidade relativa – Implementar modelos que representem a dependência histórica das saturações para melhor descrever os processos de injeção e produção cíclica de gás.
- Estudo de reações microbianas e consumo de hidrogênio – Investigar processos biogeoquímicos que possam consumir ou alterar a composição do hidrogênio, especialmente em aquíferos com presença de microrganismos anaeróbicos.
- Avaliação do uso de CO₂ como gás colchão (análise em 2 fases e 3 componentes) – Simular cenários com injeção combinada de CO₂ e H₂, explorando seu potencial de recuperação avançada de óleo (EOR) e os efeitos de competição entre componentes.
- Estudos de ASH com diferentes fluidos de formação – Analisar o armazenamento de hidrogênio em reservatórios com fluidos distintos, como gás natural, óleo pesado ou

salmouras, a fim de avaliar a influência da composição do fluido original nas trocas de massa e energia.

REFERÊNCIAS

ABDELLATIF, M. et al. Sensitivity analysis of the methanation process in underground hydrogen storage: A case study in Upper Austria. **International Journal of Hydrogen Energy**, v. 105, p. 1164–1177, 2025. doi: 10.1016/j.ijhydene.2025.01.381.

ALBUQUERQUE, R. A. C.; BRAGA, A. M. B.; FONTOURA, S. A. B. **Simulação de fluxo e tensões em reservatórios aplicada a casos reais**. 2014. Dissertação (Mestrado) – Pontifícia Universidade Católica do Rio de Janeiro, Rio de Janeiro, 2014. doi: 10.17771/PUCRio.acad.24660.

ALMS, K. et al. Linking geological and infrastructural requirements for large-scale underground hydrogen storage in Germany. **Frontiers in Energy Research**, v. 11, 2023. doi: 10.3389/fenrg.2023.1172003.

AL-YASERI, A. et al. Initial and residual trapping of hydrogen and nitrogen in Fontainebleau sandstone using nuclear magnetic resonance core flooding. **International Journal of Hydrogen Energy**, v. 47, n. 53, p. 22482–22494, 2022. doi: 10.1016/j.ijhydene.2022.05.059.

AMID, A.; MIGNARD, D.; WILKINSON, M. Seasonal storage of hydrogen in a depleted natural gas reservoir. **International Journal of Hydrogen Energy**, v. 41, n. 12, p. 5549–5558, 2016. doi: 10.1016/j.ijhydene.2016.02.036.

AMIRTHAN, T.; PERERA, M. S. A. Underground hydrogen storage in Australia: A review on the feasibility of geological sites. **International Journal of Hydrogen Energy**, v. 48, n. 11, p. 4300–4328, 2023. doi: 10.1016/j.ijhydene.2022.10.218.

ANEEL (Agência Nacional de Energia Elétrica). **Resolução Normativa ANEEL Nº 1.070**. Brasília, 2023. Disponível em: <https://www2.aneel.gov.br/cedoc/ren20231070.pdf>. Acesso em: 20/11/2025.

ANEEL (Agência Nacional de Energia Elétrica). **SIGA – Sistema de Informações de Geração da ANEEL**. 2025. Disponível em: <https://dadosabertos.aneel.gov.br/dataset/siga-sistema-de-informacoes-de-geracao-da-aneel>. Acesso em: 20/11/2025.

ANP (Agência Nacional do Petróleo, Gás Natural e Biocombustíveis). **Implementação do Marco Regulatório do Hidrogênio de Baixa Emissão de Carbono no Brasil**. 2024. Disponível em: <https://www.gov.br/anp/pt-br/centrais-de-conteudo/publicacoes/relatorios/arquivos/implementacaomarcoregulatoriohidrogenio.pdf>. Acesso em: 20/11/2025.

ASSALEL, M. J. et al. Correlation of the Thermal Conductivity of Normal and Parahydrogen from the Triple Point to 1000 K and up to 100 MPa. **Journal of Physical and Chemical Reference Data**, v. 40, n. 3, 2011. doi: 10.1063/1.3606499.

BADE, S. O. et al. A review of underground hydrogen storage systems: Current status, modeling approaches, challenges, and future prospective. **International Journal of Hydrogen Energy**, v. 80, p. 449–474, 2024. doi: 10.1016/j.ijhydene.2024.07.187.

BARBOZA, E. G.; TOMAZELLI, L. J.; AYUP-ZOUAIN, R. N. **Análise Estratigráfica do Campo de Namorado (Bacia de Campos) com base na Interpretação Sísmica Tridimensional**. 2005. Universidade Federal do Rio Grande do Sul. doi: 10.13140/RG.2.2.17058.32965.

BASTIAN, P. et al. The DUNE framework: Basic concepts and recent developments. **Computers and Mathematics with Applications**, v. 81, p. 75–112, 2021. doi: 10.1016/j.camwa.2020.06.007.

BEAR, J. **Dynamics of fluids in porous media**. New York: American Elsevier, 1972.

BEHVAR, A.; HAGSHENAS, M.; DJUKIC, M. B. Hydrogen embrittlement and hydrogen-induced crack initiation in additively manufactured metals: a critical review on mechanical and cyclic loading. **International Journal of Hydrogen Energy**, v. 58, p. 1214–1239, 2024. doi:10.1016/j.ijhydene.2024.01.232.

BENTO, D. F. Influência da Perda de Carga na Definição da Estratégia de Produção em Campos de Petróleo. **UNISIM On-Line**, n. 4, 2010. Disponível em: https://www.unisim.cepetro.unicamp.br/online/UNISIM_ON_LINE_N49.PDF. Acesso em: 20/11/2025.

BHOENDIE, K. S. et al. Case Study of Heavy-Oil Fluid Characterization for Gas EOR Experiments: Main Challenges. In: SPE INTERNATIONAL. **Anais...** 2014. doi: 10.2118/171039-MS.

BO, Z. et al. Impact of experimentally measured relative permeability hysteresis on reservoir-scale performance of underground hydrogen storage (UHS). **International Journal of Hydrogen Energy**, v. 48, n. 36, p. 13527–13542, 2023. doi: 10.1016/j.ijhydene.2022.12.270.

BO, Z. et al. Effects of geological heterogeneity on gas mixing during underground hydrogen storage (UHS) in braided-fluvial reservoirs. **Fuel**, v. 357, 2024. doi: 10.1016/j.fuel.2023.129949.

BOON, M.; HAJIBEYGI, H. Experimental characterization of H₂/water multiphase flow in heterogeneous sandstone rock at the core scale relevant for underground hydrogen storage (UHS). **Scientific Reports**, v. 12, n. 1, 2022. doi: 10.1038/s41598-022-18759-8.

BORGES, F. Q. Crise de Energia Elétrica no Brasil - Uma Breve Reflexão sobre a Dinâmica de suas Origens e Resultados. **RECIMA21 - Revista Científica Multidisciplinar**, v. 2, n. 10, e210809, 2021. doi: 10.47820/recima21.v2i10.809.

BOYCE, J. R.; NØSTBAKKEN, L. Exploration and development of U.S. oil and gas fields, 1955-2002. **Journal of Economic Dynamics and Control**, v. 35, n. 6, p. 891–908, 2011. doi: 10.1016/j.jedc.2010.12.010.

CHRISTOFFERSEN, K. R.; WHITSON, C. H. Gas/oil capillary pressure of chalk at elevated pressures. **SPE Formation Evaluation**, v. 10, n. 3, p. 153–159, 1995. doi: 10.2118/26673-PA.

CIOTTA, M. et al. Hydrogen storage in depleted offshore gas fields in Brazil: Potential and implications for energy security. **International Journal of Hydrogen Energy**, v. 48, n. 100, p. 39967–39980, 2023. doi: 10.1016/j.ijhydene.2023.08.209.

CRAIG, J. et al. The history of the European oil and gas industry (1600s-2000s). **Geological Society Special Publication**, v. 465, n. 1, p. 1–24, 2018. doi: 10.1144/SP465.23.

DE BLASIO, N. **The Colors of Hydrogen**. 2024. Disponível em: <https://www.belfercenter.org/research-analysis/colors-hydrogen>. Acesso em: 20/11/2025.

DE, C.; MOREIRA, A. **Tecnologias Envolvidas na Captura e Armazenamento de Carbono**. 2015. Centro Federal de Educação Tecnológica de Minas Gerais.

DOAN, Q. T. et al. Hydrogen diffusion into water and cushion gases – Relevance for hydrogen geo-storage. **International Journal of Hydrogen Energy**, v. 98, p. 1099–1106, 2025. doi: 10.1016/j.ijhydene.2024.12.147.

DURKIN, K. et al. Hydrogen-Powered Vehicles: Comparing the Powertrain Efficiency and Sustainability of Fuel Cell versus Internal Combustion Engine Cars. **Energies**, v. 17, n. 5, 2024. doi: 10.3390/en17051085.

ENERGY INSTITUTE. **Statistical Review of World Energy**. 2024. Disponível em: <https://www.energyinst.org/statistical-review>. Acesso em: 20/11/2025.

EPE (Empresa de Pesquisa Energética). **Usinas Hidrelétricas Reversíveis (UHR): Desafios para inserção em mercados de energia elétrica**. 2021. Disponível em: https://www.epe.gov.br/sites-pt/publicacoes-dados-abertos/publicacoes/PublicacoesArquivos/publicacao-561/EPE-DEE-NT-013_2021-r0.pdf. Acesso em: 20/11/2025.

EPE (Empresa de Pesquisa Energética). **Balanco Energético Nacional**. 2025. Disponível em: https://www.epe.gov.br/sites-pt/publicacoes-dados-abertos/publicacoes/PublicacoesArquivos/publicacao-885/topico-771/Relat%C3%B3rio%20Final_BEN%202025.pdf. Acesso em: 20/11/2025.

EUA. Department of Energy. **Hydrogen storage**. Office of Energy Efficiency & Renewable Energy, 2025. Disponível em: <https://www.energy.gov/eere/fuelcells/hydrogen-storage>. Acesso em: 20/11/2025.

EVANS, R. et al. Improving the Interpretation of Small Molecule Diffusion Coefficients. **Analytical Chemistry**, v. 90, n. 6, p. 3987–3994, 2018. doi:

10.1021/acs.analchem.7b05032.

FELDMANN, F. et al. Numerical simulation of hydrodynamic and gas mixing processes in underground hydrogen storages. **Environmental Earth Sciences**, v. 75, n. 16, 2016. doi: 10.1007/s12665-016-5948-z.

FLEMISCH, B. et al. DuMu x : DUNE for Multi-{Phase, Component, Scale, Physics, ...} Flow and Transport in Porous Media. **Advances in Water Resources**, v. 34, n. 9, p. 1102–1112, 2011. doi: 10.1016/j.advwatres.2011.03.007.

GALVÃO, J.; BERMAN, C. Crise hídrica e energia: Conflitos no uso múltiplo das águas. **Estudos Avançados**, v. 29, n. 84, p. 43–68, 2015. doi: 10.1590/S0103-40142015000200004.

GUO, K.; LI, H.; YU, Z. In-situ heavy and extra-heavy oil recovery: A review. **Fuel**, v. 185, p. 886–902, 2016. doi: 10.1016/j.fuel.2016.08.047.

HAGEMANN, B. et al. Mathematical modeling of unstable transport in underground hydrogen storage. **Environmental Earth Sciences**, v. 73, n. 11, p. 6891–6898, 2015. doi: 10.1007/s12665-015-4414-7.

HAGEMANN, B. et al. Hydrogenization of underground storage of natural gas: Impact of hydrogen on the hydrodynamic and bio-chemical behavior. **Computational Geosciences**, v. 20, n. 3, p. 595–606, 2016. doi: 10.1007/s10596-015-9515-6.

HASSANPOURYOUBAND, A. et al. Geological Hydrogen Storage: Geochemical Reactivity of Hydrogen with Sandstone Reservoirs. **ACS Energy Letters**, v. 7, n. 7, p. 2203–2210, 2022. doi: 10.1021/acsenergylett.2c01024.

HASSANPOURYOUBAND, A. et al. Offshore Geological Storage of Hydrogen: Is This Our Best Option to Achieve Net-Zero? **ACS Energy Letters**, v. 6, p. 2181–2186, 2021. doi: 10.1021/acsenergylett.1c00845.

HEINEMANN, N. et al. Hydrogen storage in saline aquifers: The role of cushion gas for

injection and production. **International Journal of Hydrogen Energy**, v. 46, n. 79, p. 39284–39296, 2021. doi: 10.1016/j.ijhydene.2021.09.174.

HELMIG, R. **Multiphase flow and transport processes in the subsurface**. Springer, 2017.

HIGGS, S. et al. Direct measurement of hydrogen relative permeability hysteresis for underground hydrogen storage. **International Journal of Hydrogen Energy**, v. 50, p. 524–541, 2024. doi: 10.1016/j.ijhydene.2023.07.270.

HU, B. et al. **Effects of cushion gas pressure and operating parameters on the capacity of hydrogen storage in lined rock caverns (LRC)**. *Renewable Energy*, v. 235, e121317, 2024. doi: 10.1016/j.renene.2024.121317.

HYDROGEN COUNCIL. **Hydrogen Insights 2024**. 2024. Disponível em: www.hydrogencouncil.com. Acesso em: 20/11/2025.

HYDROGEN TCP-TASK 42. **Building Confidence in Underground Hydrogen Storage**. 2025. Disponível em: https://www.ieahydrogen.org/wpfd_file/H2tcp-task-42-final-report/. Acesso em: 20/11/2025.

IAPWS (International Association for the Properties of Water and Steam). **Guideline on the Henry's Constant and Vapor-Liquid Distribution Constant for Gases in H₂O and D₂O at High Temperatures**. Quioto, Japão, 2004. Disponível em: <https://iapws.org/documents/release/HenGuide>. Acesso em: 20/11/2025.

IAPWS (International Association for the Properties of Water and Steam). **Release on the IAPWS Formulation 2008 for the Viscosity of Ordinary Water Substance**. Berlim, Alemanha, 2008. Disponível em: <https://www.iapws.org/documents/release/visc.pdf>. Acesso em: 20/11/2025.

IAPWS (International Association for the Properties of Water and Steam). **Revised Release on the IAPWS Industrial Formulation 1997 for the Thermodynamic Properties of Water and Steam**. Lucerne, Suíça, 2012. Disponível em: <https://iapws.org/documents/release/IF97-Rev.pdf>. Acesso em: 20/11/2025.

IEA (International Energy Agency). **Hydrogen in Latin America From near-term opportunities to large-scale deployment.** 2021. Disponível em: <https://www.iea.org/reports/hydrogen-in-latin-america>. Acesso em: 20/11/2025.

IEA (International Energy Agency). **World Energy Outlook 2022.** 2022. Disponível em: <https://www.iea.org/reports/world-energy-outlook-2022>. Acesso em: 20/11/2025.

ITAIPU BINACIONAL. **Itaipu alcança resultado histórico de 100% de eficiência operativa em 2022.** Itaipu Binacional, 2023. Disponível em: <https://www.itaipu.gov.br/noticias/energia/itaipu-alcanca-resultado-historico-de-100-de-eficiencia-operativa-em-2022>. Acesso em: 20/11/2025.

JAFARI RAAD, S. M.; LEONENKO, Y.; HASSANZADEH, H. Hydrogen storage in saline aquifers: Opportunities and challenges. **Renewable and Sustainable Energy Reviews**, v. 168, 2022. doi: 10.1016/j.rser.2022.112846.

JAHANBAKHS, A. et al. Underground hydrogen storage: A UK perspective. **Renewable and Sustainable Energy Reviews**, v. 189, 2024. doi: 10.1016/j.rser.2023.114001.

JANGDA, Z. et al. Pore-scale visualization of hydrogen storage in a sandstone at subsurface pressure and temperature conditions: Trapping, dissolution and wettability. **Journal of Colloid and Interface Science**, v. 629, p. 316–325, 2023. doi: 10.1016/j.jcis.2022.09.082.

JHA, N. K. et al. Pore scale investigation of hydrogen injection in sandstone via X-ray microtomography. **International Journal of Hydrogen Energy**, v. 46, n. 70, p. 34822–34829, 2021. doi: 10.1016/j.ijhydene.2021.08.042.

K & L GATES. **The H₂ Handbook - Legal, Regulatory, Policy, and Commercial Issues Impacting the Future of Hydrogen.** 2020.

KAKRAN, S. et al. Hydrogen energy in BRICS-US: A whirl succeeding fuel treasure. **Applied Energy**, v. 334, 2023. doi: 10.1016/j.apenergy.2023.120670.

KANNAMI, M.; SEDAEE, B.; ASADIAN-PAKFAR, M. Role of Cushion Gas on

Underground Hydrogen Storage in Depleted Oil Reservoirs. **Journal of Energy Storage**, v. 45, 2022. doi: 10.1016/j.est.2021.103783.

KARMAKAR, S. et al. Numerical Benchmark Studies on Flow and Solute Transport in Geological Reservoirs. **Water**, v. 14, n. 8, 2022. doi: 10.3390/w14081310.

KIM, H. et al. Multiphase hydraulic properties of reservoir rock in geologic H₂ storage. In: **58th US Rock Mechanics/Geomechanics Symposium. Anais...** 2024.

KOCH, T. et al. DuMux 3 – an open-source simulator for solving flow and transport problems in porous media with a focus on model coupling. **Computers and Mathematics with Applications**, v. 81, p. 423–443, 2021. doi: 10.1016/j.camwa.2020.02.012.

KOMAROV, I. I. et al. Comparative analysis of the efficiency of using hydrogen and steam methane reforming storage at combined cycle gas turbine for cogeneration. **Journal of Physics: Conference Series**, v. 2053, n. 1, 2021. doi: 10.1088/1742-6596/2053/1/012007.

LEACHMAN, J. W. et al. Fundamental Equations of State for Parahydrogen, Normal Hydrogen, and Orthohydrogen. **Journal of Physical and Chemical Reference Data**, v. 38, n. 3, p. 721–748, 2009. doi: 10.1063/1.3160306.

LEMMON, E. W. et al. **NIST Standard Reference Database 23: Reference Fluid Thermodynamic and Transport Properties-REFPROP**. Gaithersburg: National Institute of Standards and Technology, 2018. (No. 10). doi: 10.18434/T4/1502528.

LI, H.; ZHANG, J. Hydrogen's role in expanding renewable energy and reducing carbon emissions in Texas. **International Journal of Hydrogen Energy**, v. 113, p. 77–89, 2025. doi: 10.5281/zenodo.14894611.

LI, K. Analytical derivation of Brooks-Corey type capillary pressure models using fractal geometry and evaluation of rock heterogeneity. **Journal of Petroleum Science and Engineering**, v. 73, n. 1–2, p. 20–26, 2010. doi: 10.1016/j.petrol.2010.05.002.

LI, Z.; WANG, B.; LIU, X. Hydrogen Energy Demand Management in China: A Department

Scenario Analysis Method. **Energy Engineering: Journal of the Association of Energy Engineering**, v. 122, n. 3, p. 971–983, 2025. doi: 10.32604/ee.2025.061834.

LIAO, H. et al. The Time-Varying Characteristics of Relative Permeability in Oil Reservoirs with Gas Injection. **Energies**, v. 17, n. 17, 2024. doi: 10.3390/en17174512.

LIVSHITS, V.; ULUS, A.; PELED, E. High-power H₂/Br₂ fuel cell. **Electrochemistry Communications**, v. 8, n. 8, p. 1358–1362, 2006. doi: 10.1016/j.elecom.2006.06.021.

LORD, A. S.; KOBOS, P. H.; BORNS, D. J. Geologic storage of hydrogen: Scaling up to meet city transportation demands. **International Journal of Hydrogen Energy**, v. 39, p. 15570–15582, 2014. doi: 10.1016/j.ijhydene.2014.07.121.

LOYOLA, A. C. **Multiscale modeling of the hydromechanical behavior of fractured reservoirs**. 2022. Tese (Doutorado) – Ecole des Ponts ParisTech e Universidade de Brasília, 2022.

LOYOLA, A. C.; CORDÃO NETO, M. P.; PEREIRA, J. M. An open-source numerical laboratory to assess the poromechanical behavior of fractured rocks. **Computers and Geotechnics**, v. 168, 2024. doi: 10.1016/j.compgeo.2024.106127.

LUBOŃ, K.; TARKOWSKI, R. Influence of capillary threshold pressure and injection well location on the dynamic CO₂ and H₂ storage capacity for the deep geological structure. **International Journal of Hydrogen Energy**, v. 46, n. 58, p. 30048–30060, 2021. doi: 10.1016/j.ijhydene.2021.06.119.

LYSSYY, M.; FERNØ, M.; ERSLAND, G. Seasonal hydrogen storage in a depleted oil and gas field. **International Journal of Hydrogen Energy**, v. 46, n. 49, p. 25160–25174, 2021. doi: 10.1016/j.ijhydene.2021.05.030.

LYSSYY, M. et al. Hydrogen Relative Permeability Hysteresis in Underground Storage. **Geophysical Research Letters**, v. 49, n. 17, 2022. doi: 10.1029/2022GL100364.

MARUFUZZAMAN, M.; HENNI, A. Solubility and diffusivity of propane in heavy oil and its

SARA fractions. **The Canadian Journal of Chemical Engineering**, v. 92, n. 8, p. 1421–1431, 2014. doi: 10.1002/cjce.21977.

MASOUDI, M. et al. Lined rock caverns: A hydrogen storage solution. **Journal of Energy Storage**, v. 84, 2024. doi: 10.1016/j.est.2024.110927.

MEHMOOD, K. et al. Comparative analysis of CO₂ emissions and economic performance in the United States and China: Navigating sustainable development in the climate change era. **Geoscience Frontiers**, v. 15, n. 5, 2024. doi: 10.1016/j.gsf.2024.101843.

MIYABE, K.; ISOGAI, R. Estimation of molecular diffusivity in liquid phase systems by the Wilke-Chang equation. **Journal of Chromatography A**, v. 1218, n. 38, p. 6639–6645, 2011. doi: 10.1016/j.chroma.2011.07.018.

MME (Ministério de Minas e Energia). **Plano Nacional de Energia 2050**. Brasília, 2023. Disponível em: <https://www.gov.br/mme/pt-br/assuntos/secretarias/sntep/publicacoes/plano-nacional-de-energia/plano-nacional-de-energia-2050/relatorio-final>. Acesso em: 20/11/2025

MUHAMMED, N. S. et al. Hydrogen storage in depleted gas reservoirs: A comprehensive review. **Fuel**, v. 337, 2023. doi: 10.1016/j.fuel.2022.127032.

NAVAID, H. B.; EMADI, H.; WATSON, M. A comprehensive literature review on the challenges associated with underground hydrogen storage. **International Journal of Hydrogen Energy**, v. 48, n. 28, p. 10603–10635, 2023. doi: 10.1016/j.ijhydene.2022.11.225.

NETTO, A. L. A. et al. Panorama das políticas públicas e estratégias para desenvolvimento da captura e armazenamento de carbono: reflexões para o Brasil. **Revista de Gestão Ambiental e Sustentabilidade - GeAS**, v. 10, n. 1, p. 1, 2021. doi: 10.5585/geas.v10i1.19305.

OKERE, C. J.; SHENG, J. J.; EJIKE, C. Evaluating reservoir suitability for large-scale hydrogen storage: A preliminary assessment considering reservoir properties. **Energy Geoscience**, v. 5, n. 4, 2024. doi: 10.1016/j.engeos.2024.100318.

OKOROAFOR, E. R.; SALTZER, S. D.; KOVSCEK, A. R. Toward underground hydrogen

storage in porous media: Reservoir engineering insights. **International Journal of Hydrogen Energy**, v. 47, n. 79, p. 33781–33802, 2022. doi: 10.1016/j.ijhydene.2022.07.239.

OLDENBURG, C. M.; UNGER, A. J. A. Coupled Vadose Zone and Atmospheric Surface-Layer Transport of Carbon Dioxide from Geologic Carbon Sequestration Sites. **Vadose Zone Journal**, v. 3, n. 3, p. 848–857, 2004. doi: 10.2136/vzj2004.0848.

ORITA, G. K. L.; CRUZ, V. G. P. da. Captura e armazenamento de CO₂: uma revisão das tecnologias existentes, carbonatação in-situ de basaltos e avaliação do potencial do grupo serra geral como reservatório do CO₂. **Geociências**, v. 41, n. 3, p. 779–795, 2022.

PAN, B. et al. Impacts of relative permeability hysteresis, wettability, and injection/withdrawal schemes on underground hydrogen storage in saline aquifers. **Fuel**, v. 333, 2023. doi: 10.1016/j.fuel.2022.126516.

PAN, B. et al. Mini Review on Wettability in the Methane-Liquid-Rock System at Reservoir Conditions: Implications for Gas Recovery and Geo-Storage. **Energy and Fuels**, v. 36, n. 8, p. 4268–4275, 2022. doi: 10.1021/acs.energyfuels.2c00308.

PERERA, M. S. A. A review of underground hydrogen storage in depleted gas reservoirs. **Fuel**, v. 334, 2023. doi: 10.1016/j.fuel.2022.126677.

PÉREZ, A. et al. Patagonia Wind-Hydrogen Project: Underground Storage and Methanation. In: **21st World Hydrogen Energy Conference**. 2016.

PERK, M. van der. **Soil and Water Contamination - from molecular to catchment scale**. 1. ed. Leiden: Taylor & Francis - Balkema, 2007.

PFEIFFER, W. T.; BEYER, C.; BAUER, S. Hydrogen storage in a heterogeneous sandstone formation: Dimensioning and induced hydraulic effects. **Petroleum Geoscience**, v. 23, n. 3, p. 315–326, 2017. doi: 10.1144/petgeo2016-050.

RAG. **Underground Sun Storage: Final Report Public 13**. 2020. Disponível em: www.underground-sun-storage.at. Acesso em: 20/11/2025.

RAZA, A. et al. A holistic overview of underground hydrogen storage: Influencing factors, current understanding, and outlook. **Fuel**, v. 330, 2022. doi: 10.1016/j.fuel.2022.125636.

REID, R. C.; PRAUSNITZ, J. M.; POLING, B. E. **The properties of gases and liquids**. 3. ed. Nova Iorque: McGraw-Hill, 1977.

RÉVEILLÈRE, A. et al. Hystories project - Hydrogen Storage in European Subsurface: main project outcomes and applications for the underground gas storage industry. In: **SMRI Fall 2024 Technical Conference. Anais...** p. 22–25, 2024. doi: 10.3030/101007176.

REZAEI, A. et al. Relative Permeability of Hydrogen and Aqueous Brines in Sandstones and Carbonates at Reservoir Conditions. **Geophysical Research Letters**, v. 49, n. 12, 2022. doi: 10.1029/2022GL099433.

RHOUMA, S. B.; CHABAB, S.; BROSETA, D. Synergies of storing hydrogen at the crest of CO₂ or other gas storage. **Greenhouse Gases: Science and Technology**, v. 14, n. 4, p. 587–606, 2024. doi: 10.1002/ghg.2278.

SADKHAN, R. A.; AL-MUDHAFAR, W. J. Key aspects of underground hydrogen storage in depleted hydrocarbon reservoirs and saline aquifers: A review and understanding. **Energy Geoscience**, v. 5, n. 4, 2024. doi: 10.1016/j.engeos.2024.100339.

SAEED, M.; JADHAWAR, P. Modelling underground hydrogen storage: A state-of-the-art review of fundamental approaches and findings. **Gas Science and Engineering**, v. 121, 2024a. doi: 10.1016/j.jgsce.2023.205196.

SAEED, M.; JADHAWAR, P. Optimizing underground hydrogen storage in aquifers: The impact of cushion gas type. **International Journal of Hydrogen Energy**, v. 52, p. 1537–1549, 2024b. doi: 10.1016/j.ijhydene.2023.08.352.

SANTOS, I. P. de O. et al. São Paulo's 2013 water crisis: a socially constructed disaster risk. **Sustainability in Debate**, v. 12, n. 3, p. 167–181, 2021. doi: 10.18472/SustDeb.v12n1.2021.38652.

SOUZA, P. H. G.; MARIA, M.; VICENTELLI, G. C. **Análise Petrofísica do “Arenito Namorado” na Porção Sudeste do Campo de Namorado-Bacia de Campos, Brasil.** 2005.

TAIWO, G. O.; TOMOMEWO, O. S.; ONI, B. A. A comprehensive review of underground hydrogen storage: Insight into geological sites (mechanisms), economics, barriers, and future outlook. **Journal of Energy Storage**, v. 90, 2024. doi: 10.1016/j.est.2024.111844.

TARKOWSKI, R. Underground hydrogen storage: Characteristics and prospects. **Renewable and Sustainable Energy Reviews**, v. 105, p. 86–94, 2019. doi: 10.1016/j.rser.2019.01.051.

TARKOWSKI, R.; ULIASZ-MISIAK, B.; TARKOWSKI, P. Storage of hydrogen, natural gas, and carbon dioxide – Geological and legal conditions. **International Journal of Hydrogen Energy**, v. 46, n. 38, p. 20010–20022, 2021. doi: 10.1016/j.ijhydene.2021.03.131.

THAYSEN, E. M. et al. Estimating microbial growth and hydrogen consumption in hydrogen storage in porous media. **Renewable and Sustainable Energy Reviews**, v. 151, 2021. doi: 10.1016/j.rser.2021.111481.

VASILE, N. S. A Comprehensive Review of Biogeochemical Modeling of Underground Hydrogen Storage: A Step Forward in Achieving a Multi-Scale Approach. **Energies**, v. 17, n. 23, 2024. doi: 10.3390/en17236094.

WALLACE, R. L. et al. Utility-scale subsurface hydrogen storage: UK perspectives and technology. **International Journal of Hydrogen Energy**, v. 46, n. 49, p. 25137–25159, 2021. doi: 10.1016/j.ijhydene.2021.05.034.

WANG, H. et al. Underground hydrogen storage in depleted gas reservoirs with hydraulic fractures: Numerical modeling and simulation. **Journal of Energy Storage**, v. 97, 2024. doi: 10.1016/j.est.2024.112777.

WANG, L. et al. High-pressure hydrogen adsorption in clay minerals: Insights on natural hydrogen exploration. **Fuel**, v. 344, 2023. doi: 10.1016/j.fuel.2023.127919.

WANG, Z.; LAO, G. Hydrogen production from renewable sources: Bridging the gap to

sustainable energy and economic viability. **International Journal of Hydrogen Energy**, v. 117, p. 121–134, 2025. doi: 10.1016/j.ijhydene.2025.03.176.

WORLD NUCLEAR ASSOCIATION. **Heat Values of Various Fuels**. 2025. Disponível em: <https://world-nuclear.org/information-library/facts-and-figures/heat-values-of-various-fuels#notes-amp-references>. Acesso em: 20/11/2025.

XIE, Z. et al. CO₂ storage performance influenced by CO₂-brine-carbonate reactions: A case from China's first CCUS project in carbonate gas reservoir. **Energy**, v. 337, 2025. doi: 10.1016/j.energy.2025.138418.

XIONG, Z. et al. A comprehensive review of H₂ physical behavior and H₂-rock-microbial interactions in underground hydrogen storage. **Energy**, v. 326, 2025. doi: 10.1016/j.energy.2025.136226.

YAO, Y. et al. Hydrogen energy industry in China: The current status, safety problems, and pathways for future safe and healthy development. **Safety Science**, v. 186, 2025. doi: 10.1016/j.ssci.2025.106808.

YEKTA, A. E. et al. Determination of Hydrogen–Water Relative Permeability and Capillary Pressure in Sandstone: Application to Underground Hydrogen Injection in Sedimentary Formations. **Transport in Porous Media**, v. 122, n. 2, p. 333–356, 2018. doi: 10.1007/s11242-018-1004-7.

ZENG, L. et al. Hydrogen storage in Majiagou carbonate reservoir in China: Geochemical modelling on carbonate dissolution and hydrogen loss. **International Journal of Hydrogen Energy**, v. 47, n. 59, p. 24861–24870, 2022. doi: 10.1016/j.ijhydene.2022.05.247.

ZHU, Y.; KEOLEIAN, G. A.; COOPER, D. R. The role of hydrogen in decarbonizing U.S. industry: A review. **Renewable and Sustainable Energy Reviews**, v. 214, 2025. doi: 10.1016/j.rser.2025.115392.

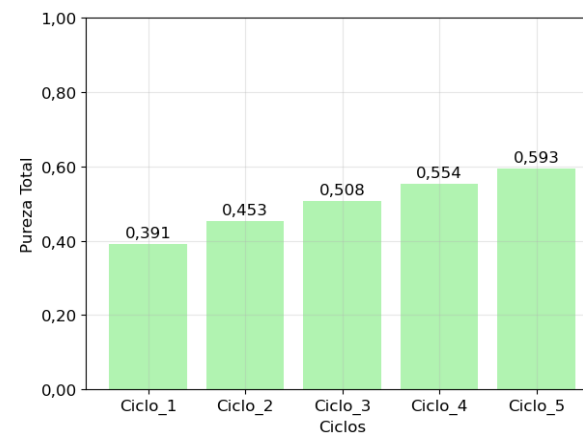
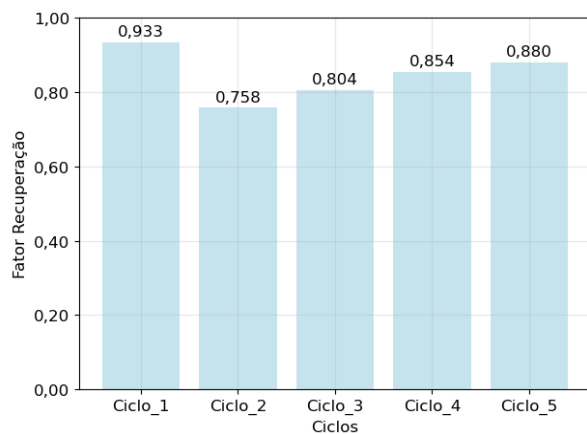
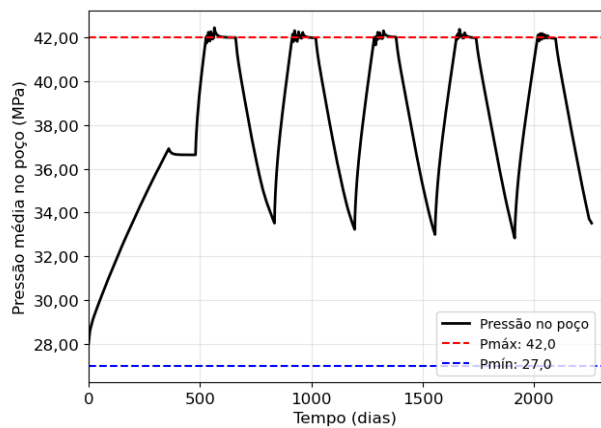
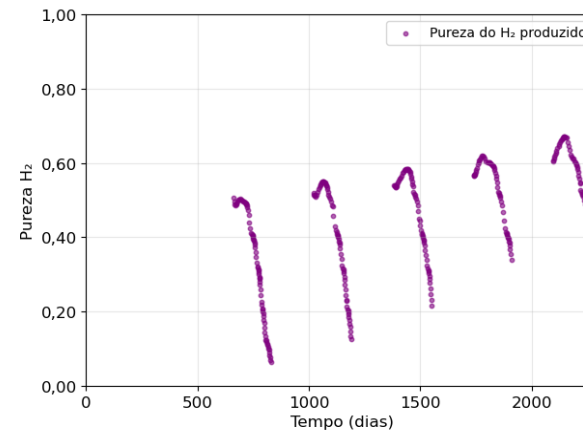
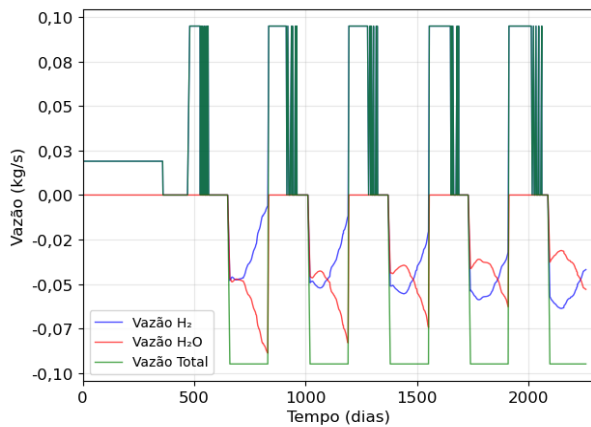
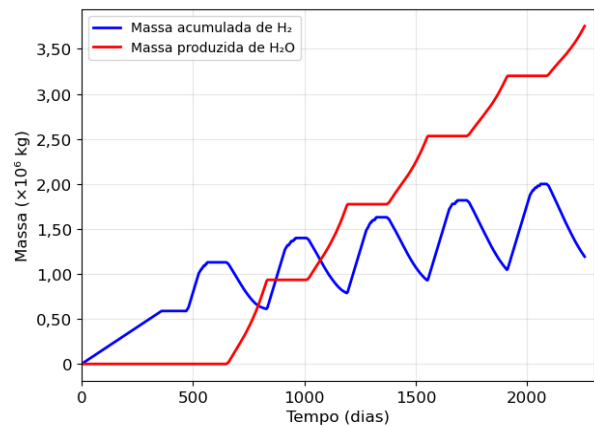
ZIVAR, D.; KUMAR, S.; FOROOZESH, J. Underground hydrogen storage: A comprehensive review. **International Journal of Hydrogen Energy**, v. 46, n. 45, p. 23436–23462, 2021. doi: 10.1016/j.ijhydene.2020.08.138.

ZOU, C. et al. Tight gas sandstone reservoirs in China: Characteristics and recognition criteria. **Journal of Petroleum Science and Engineering**, v. 88–89, p. 82–91, 2012. doi: 10.1016/j.petrol.2012.02.001.

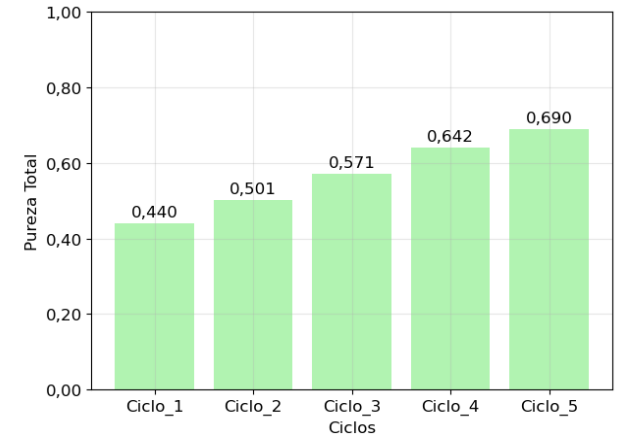
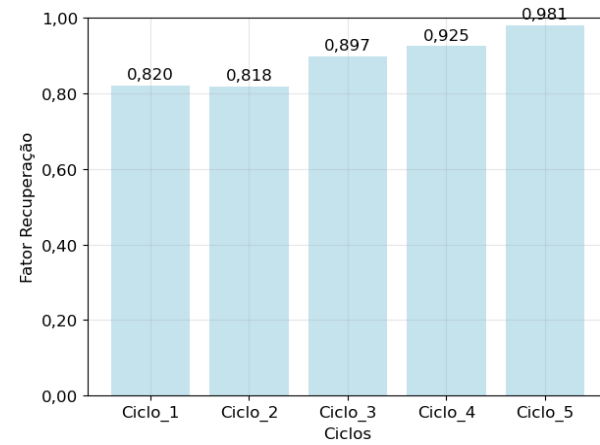
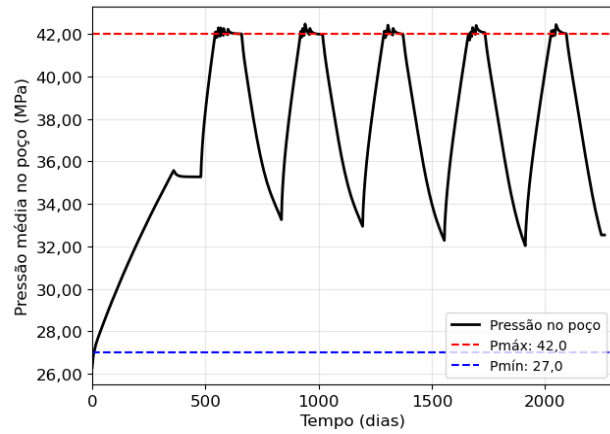
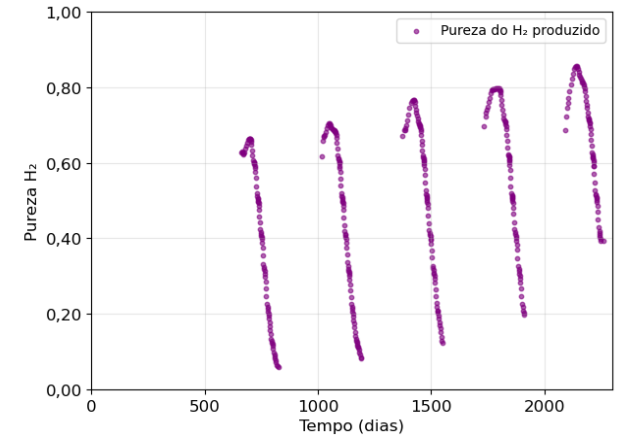
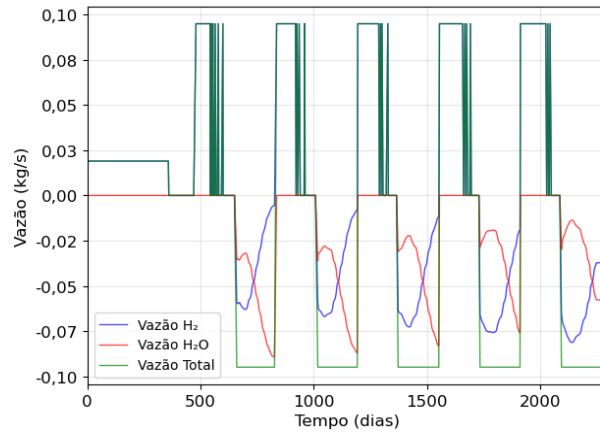
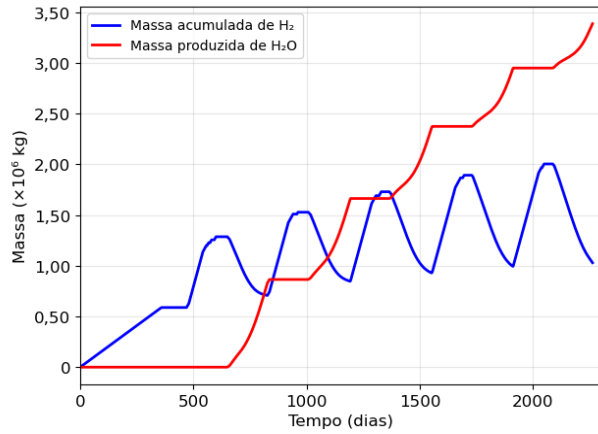
APÊNDICE I

QUADROS RESUMO DO AQUÍFERO

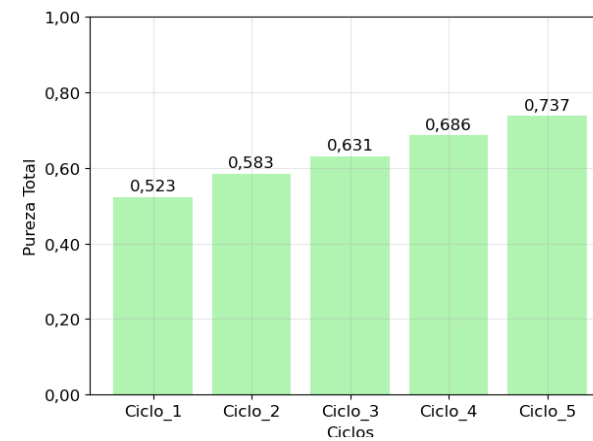
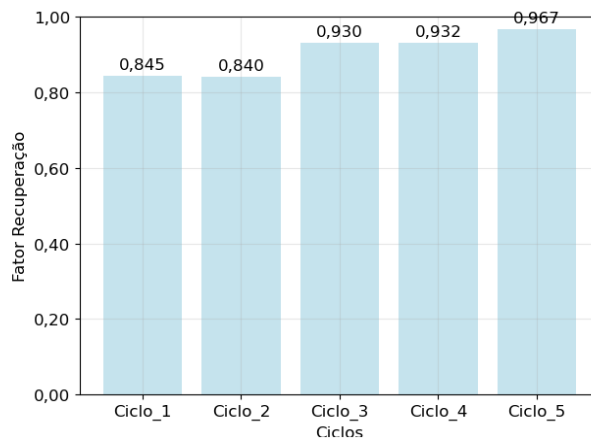
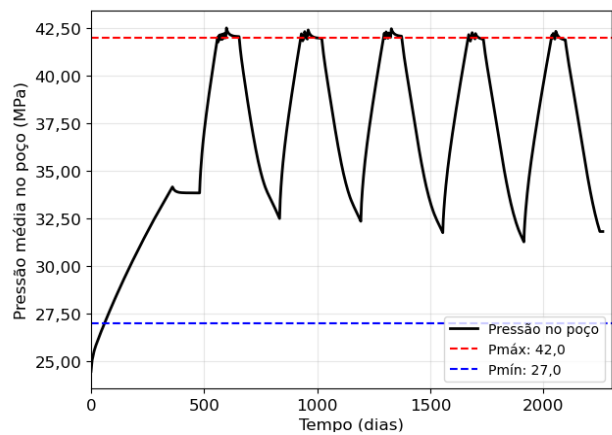
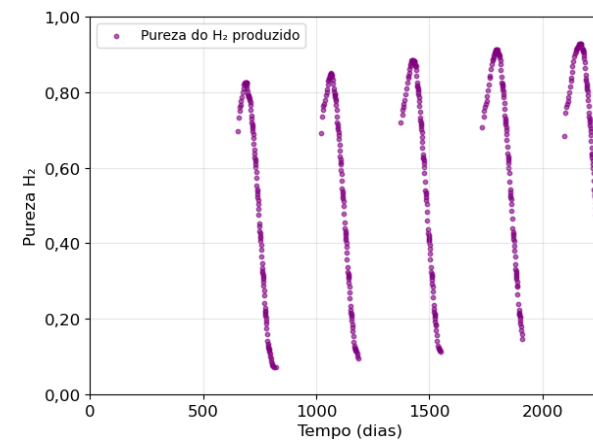
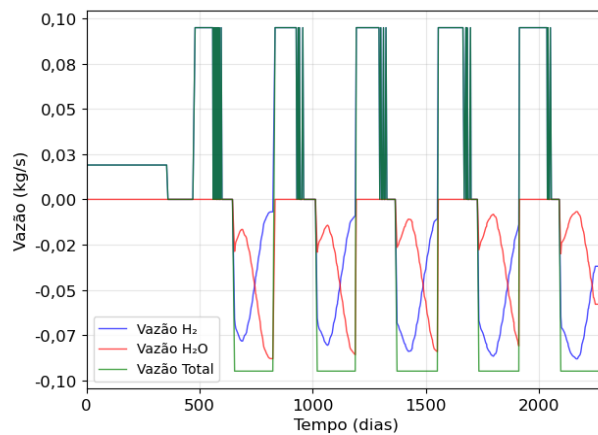
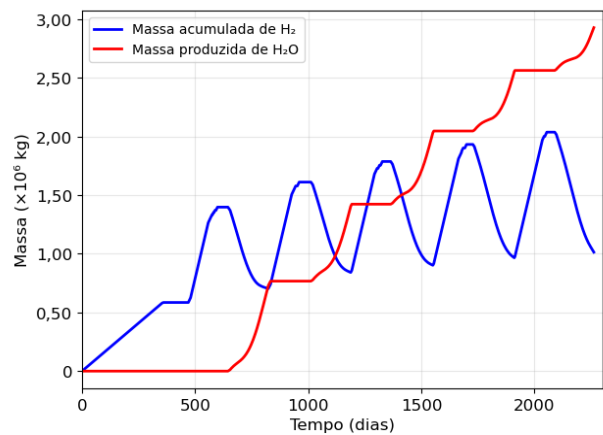
Cenário 1.1.1.1



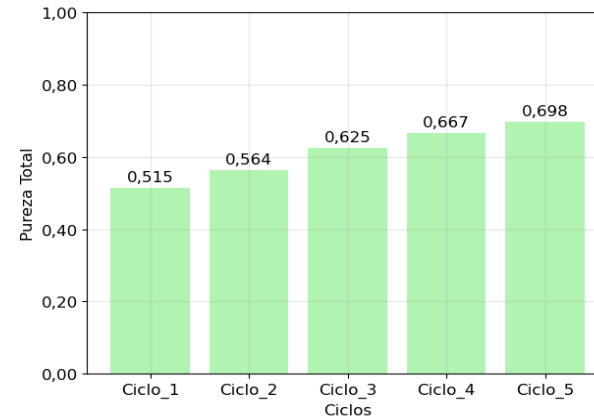
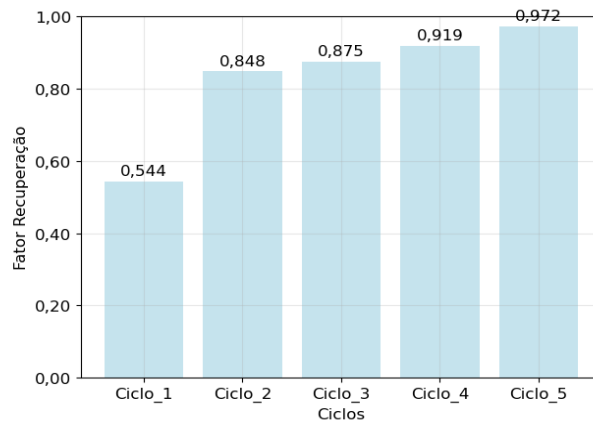
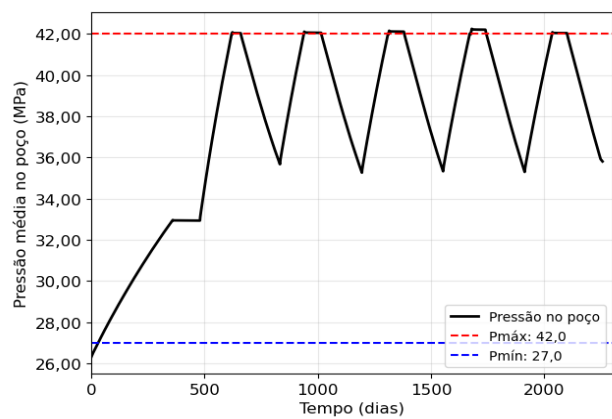
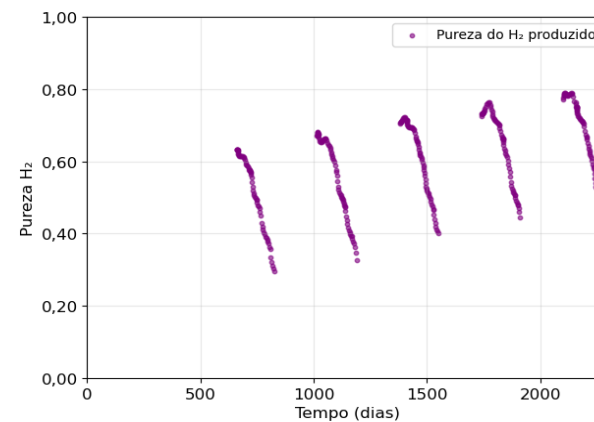
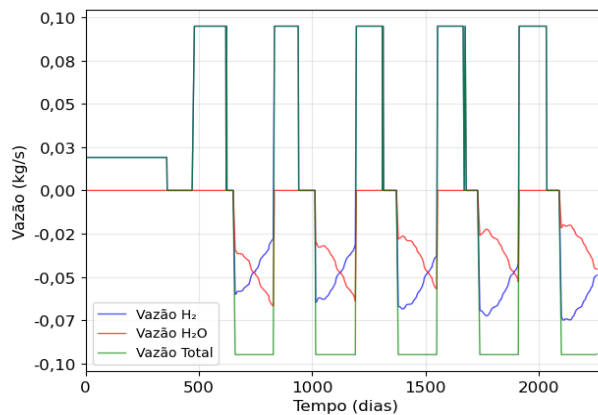
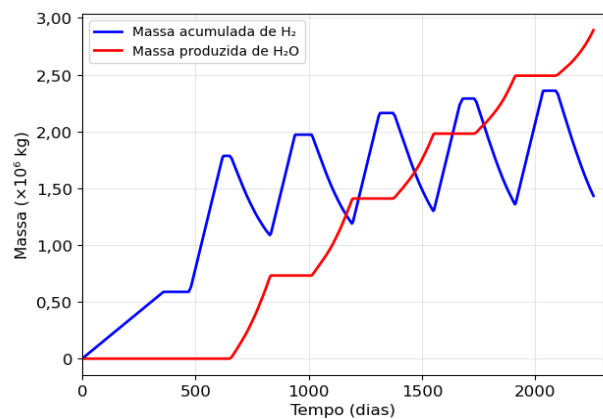
Cenário 1.1.1.2



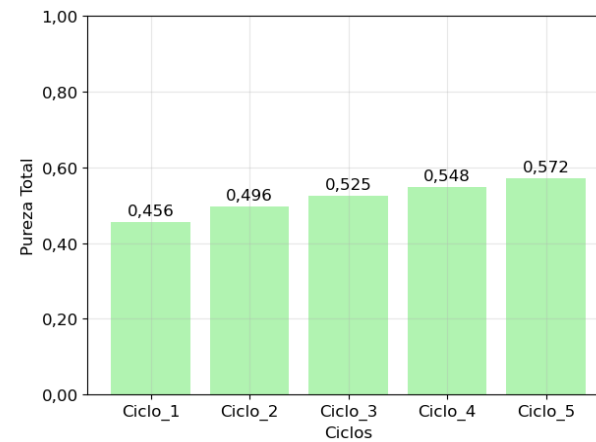
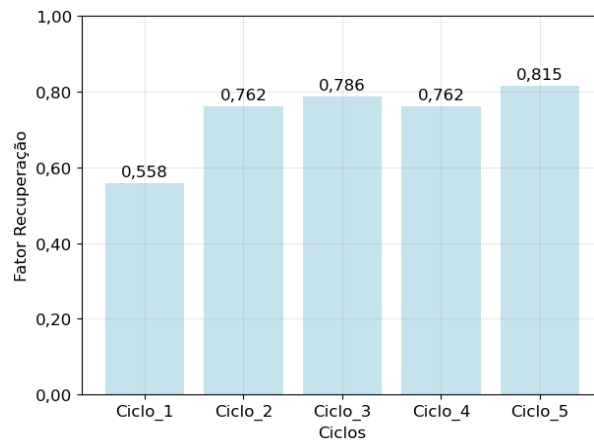
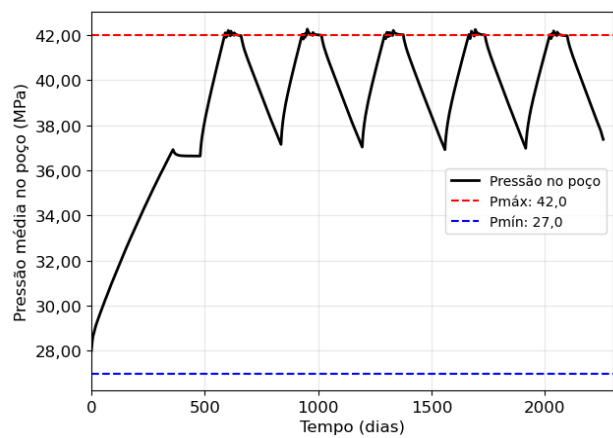
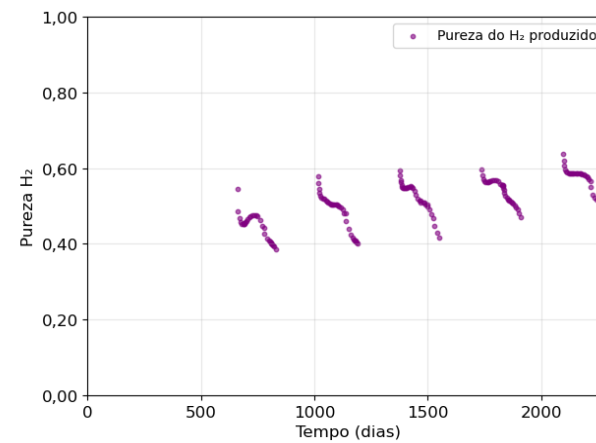
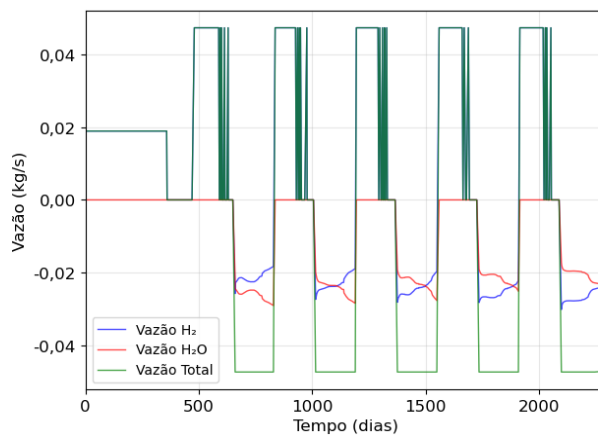
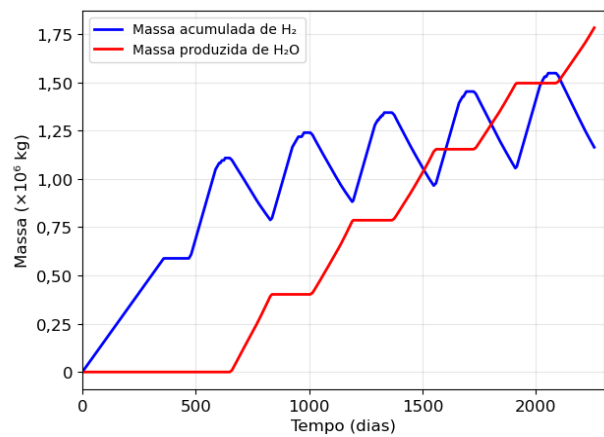
Cenário 1.1.1.3



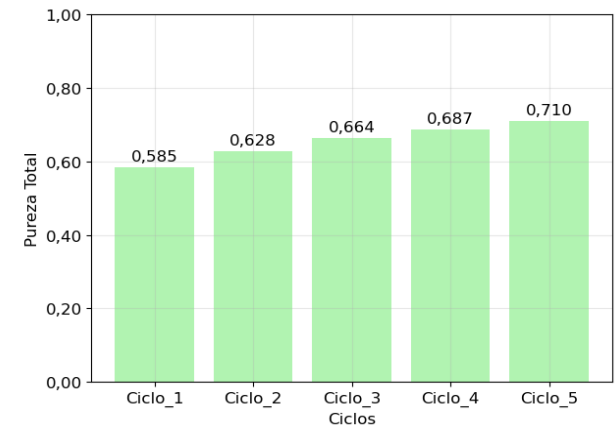
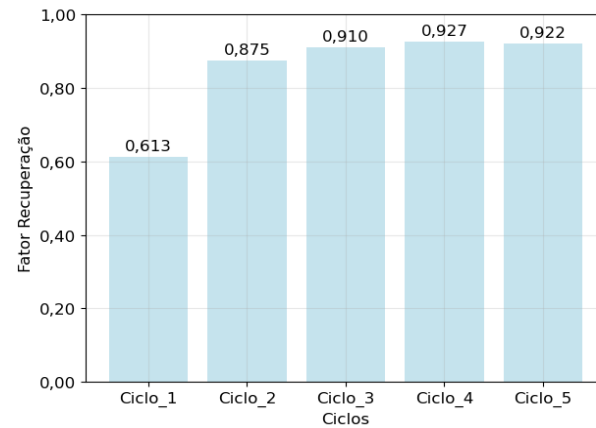
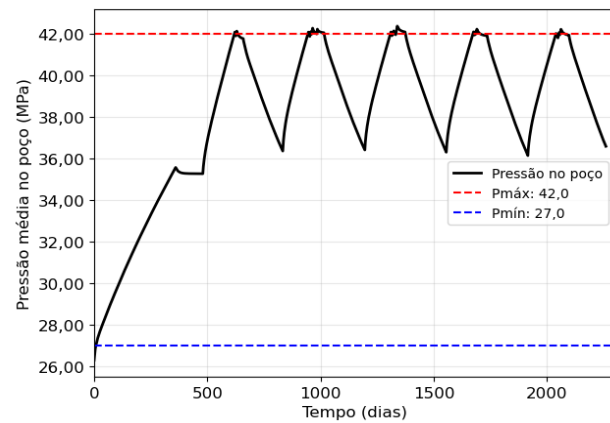
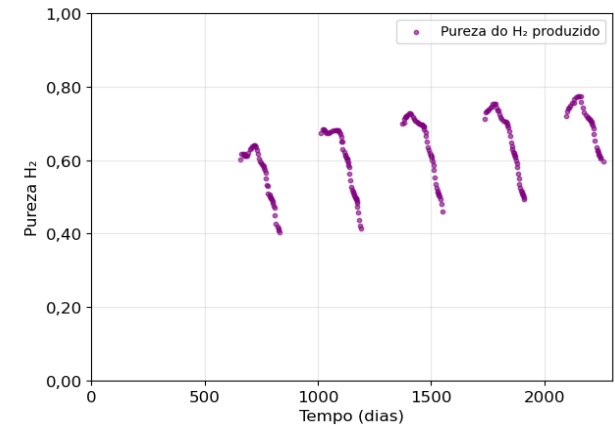
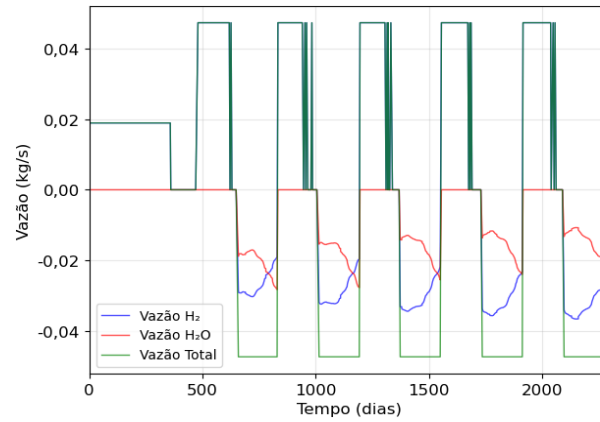
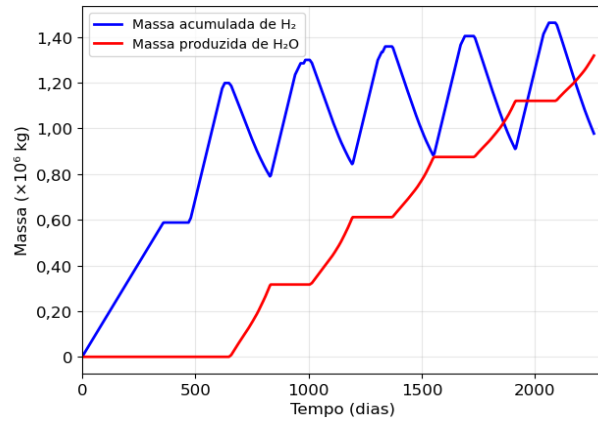
Cenário 1.1.1.4



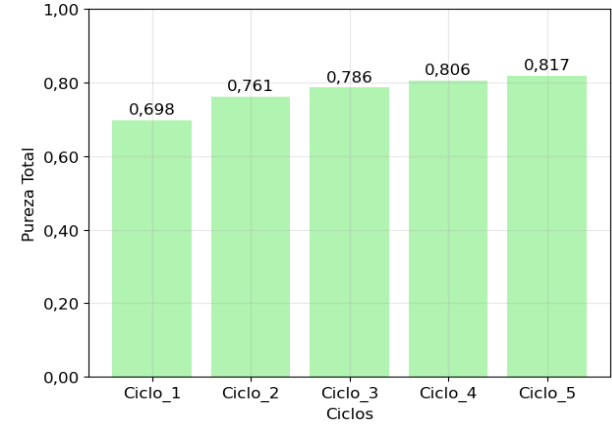
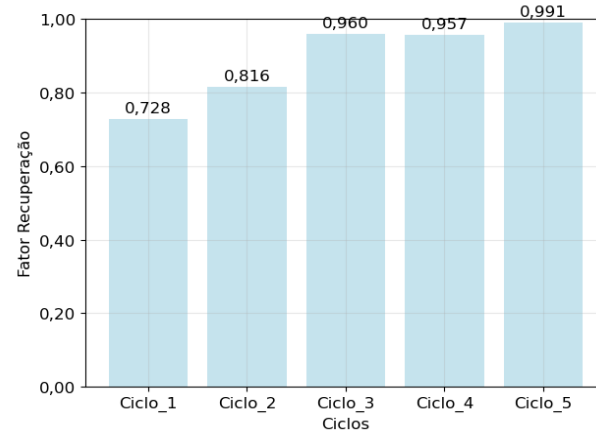
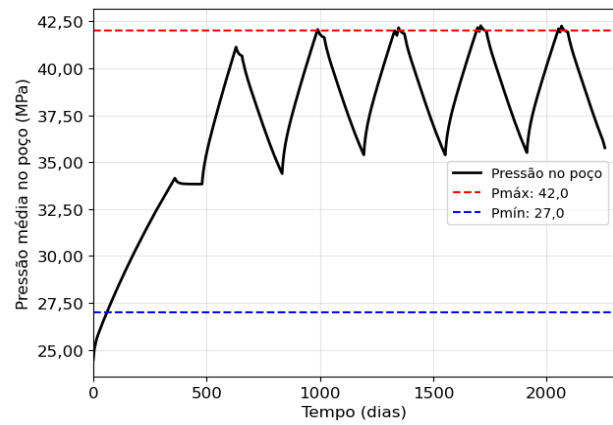
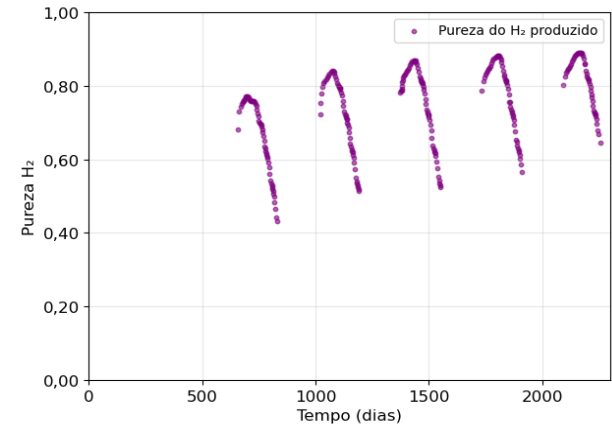
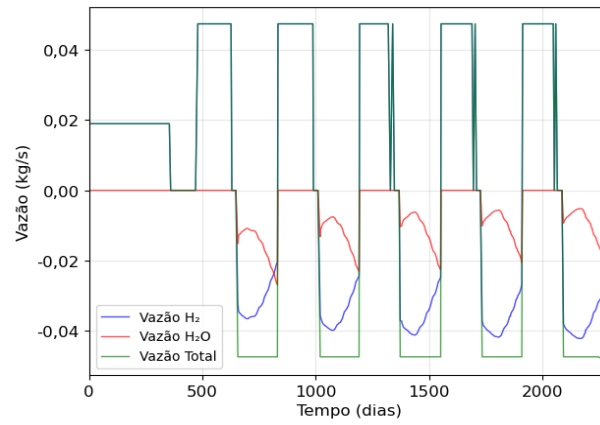
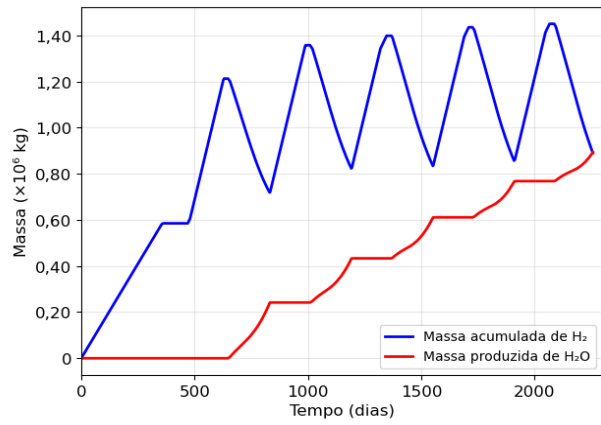
Cenário 1.1.2.1



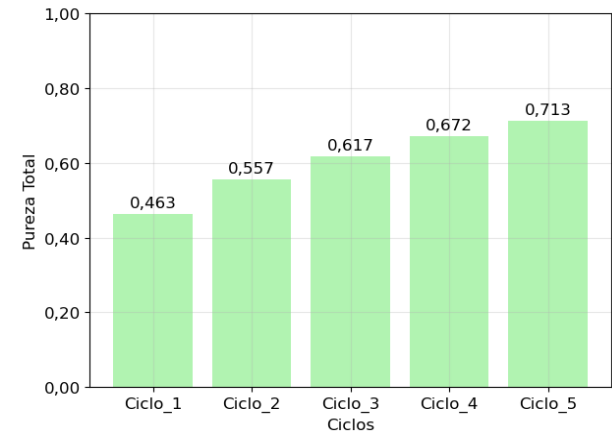
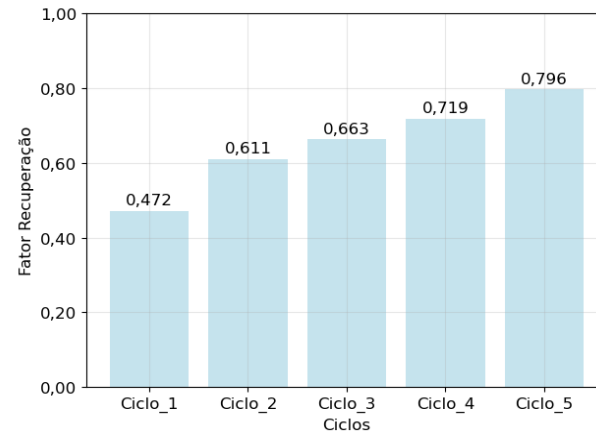
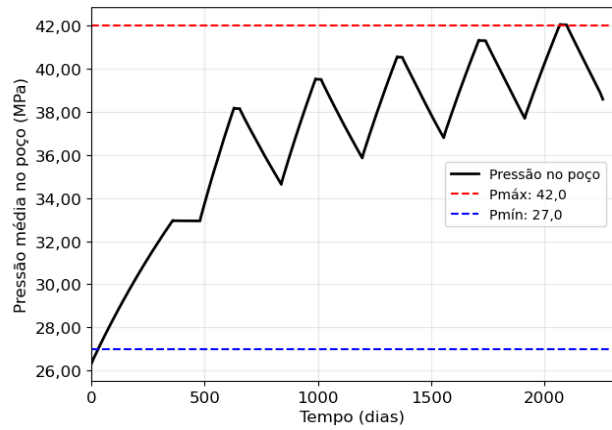
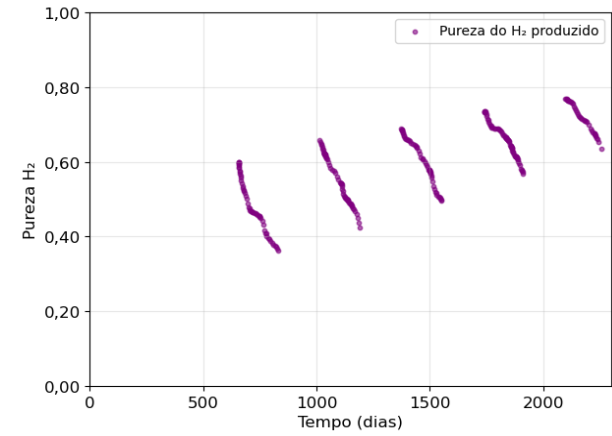
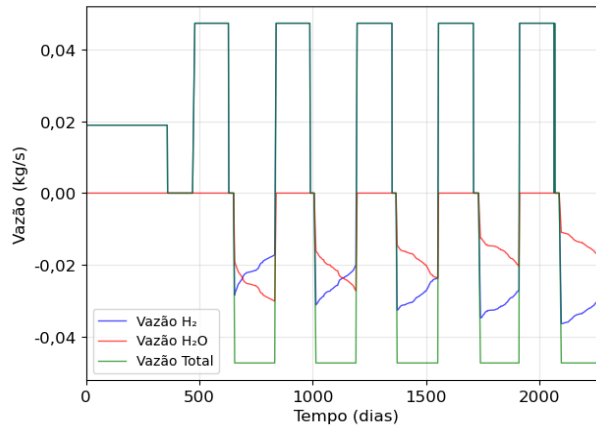
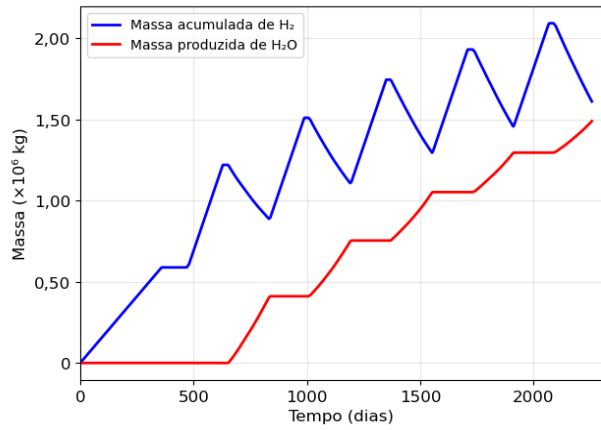
Cenário 1.1.2.2



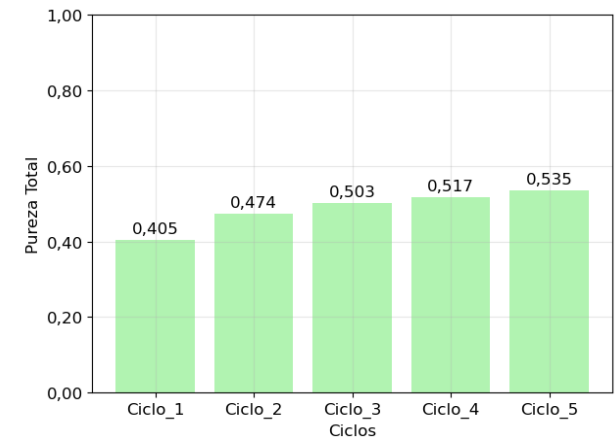
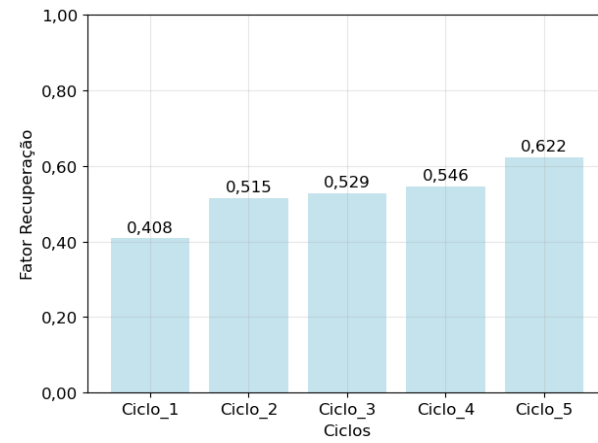
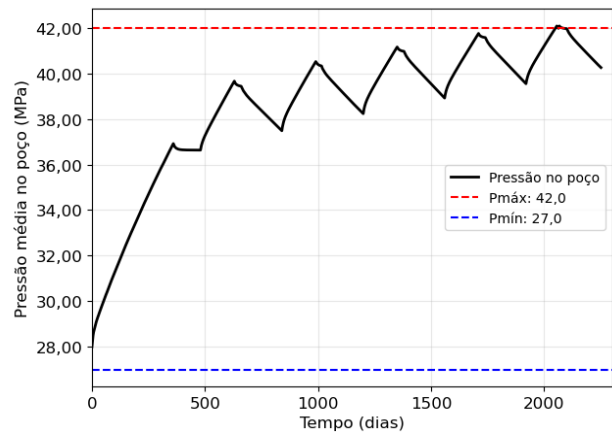
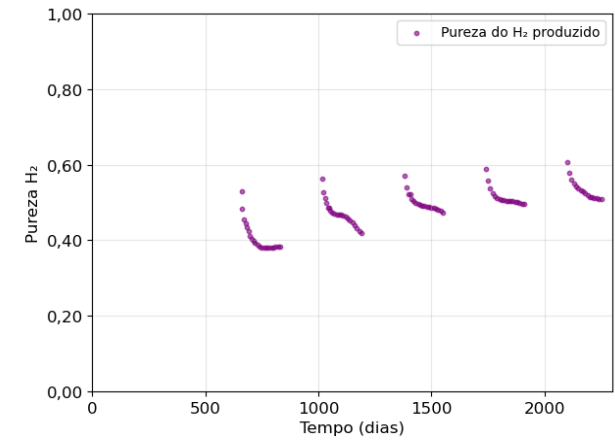
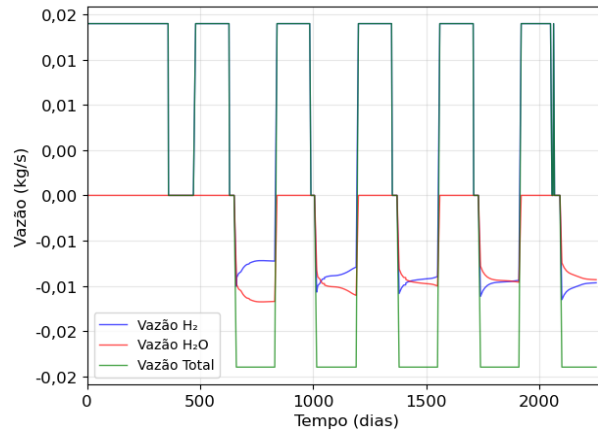
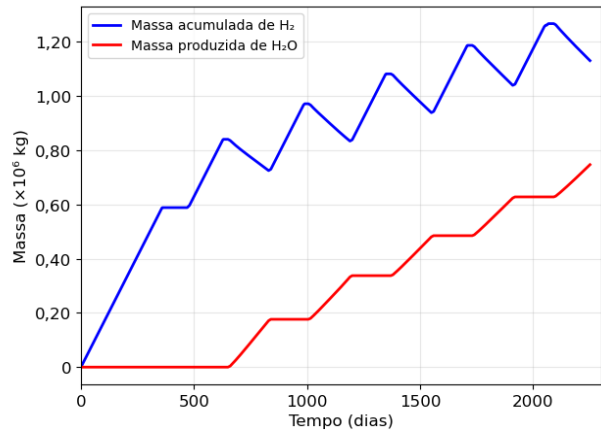
Cenário 1.1.2.3



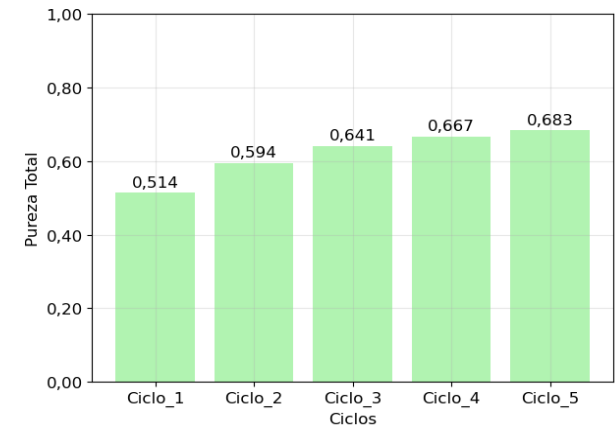
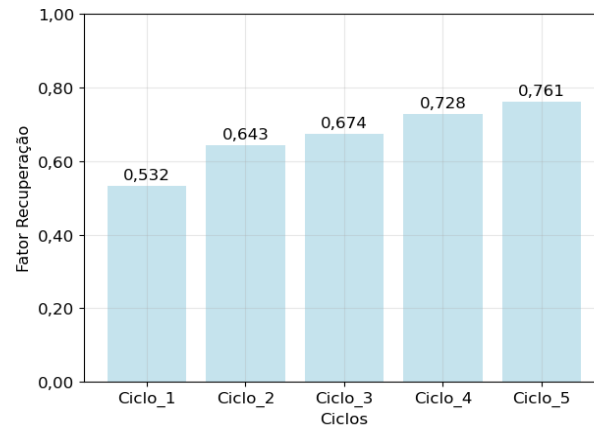
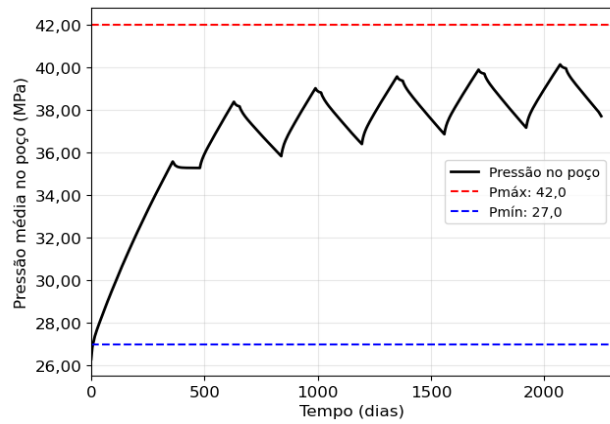
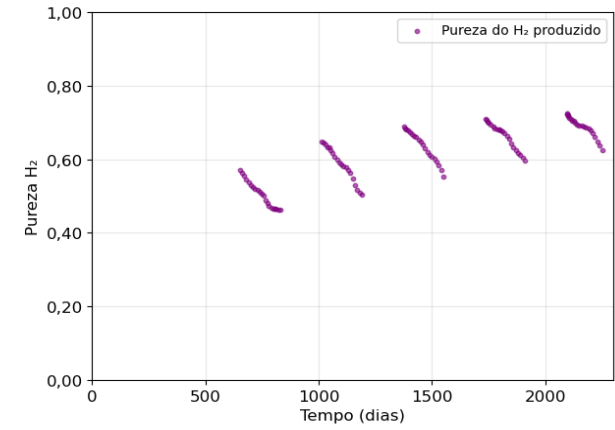
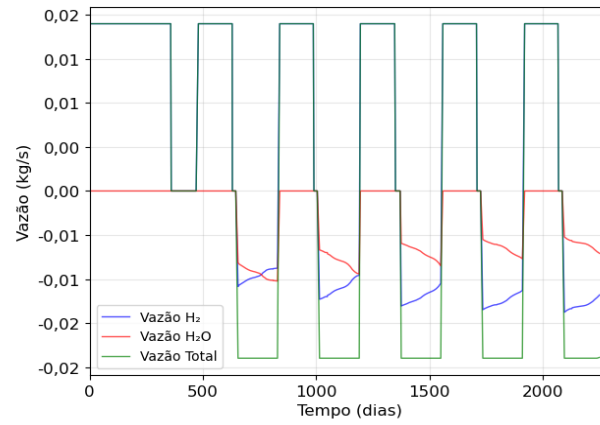
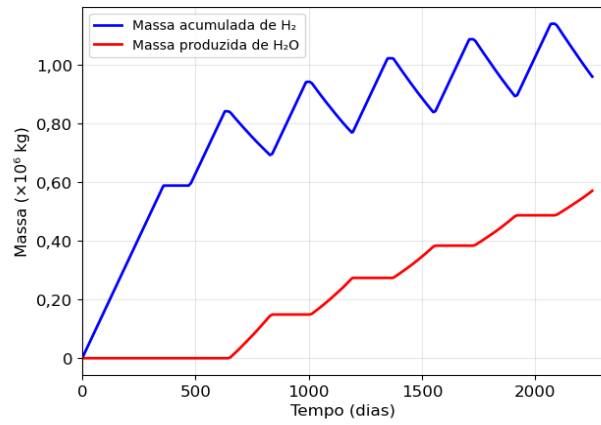
Cenário 1.1.2.4



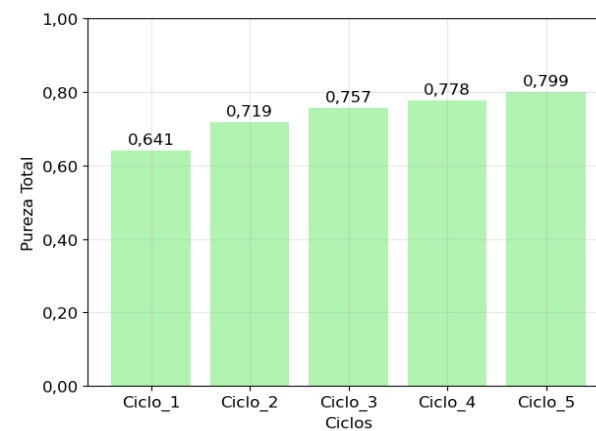
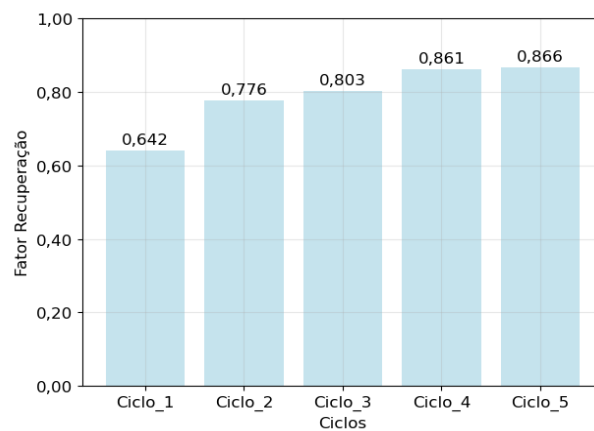
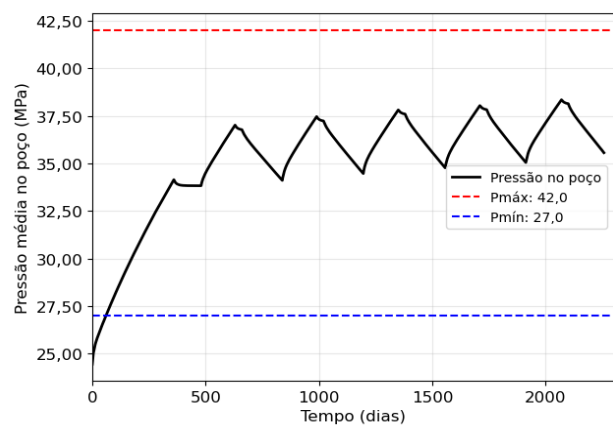
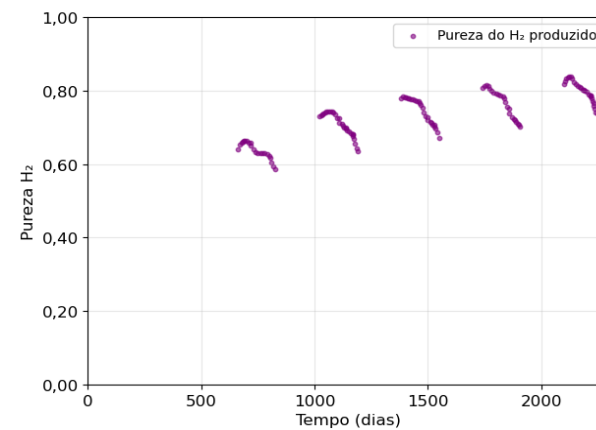
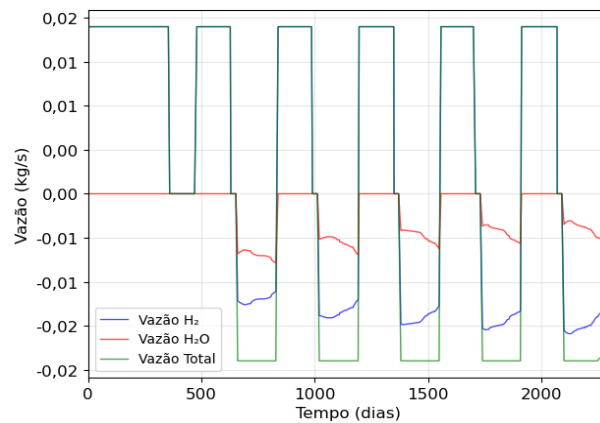
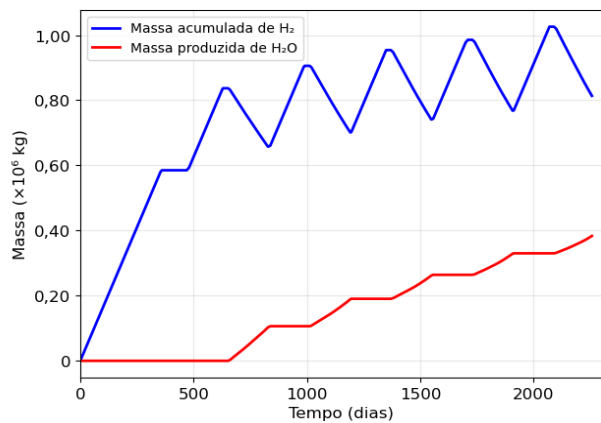
Cenário 1.1.3.1



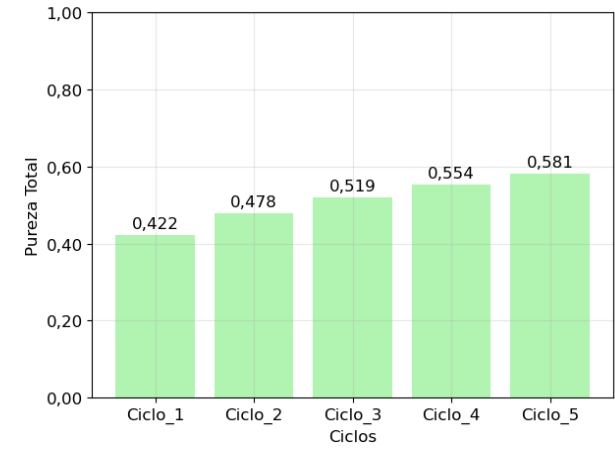
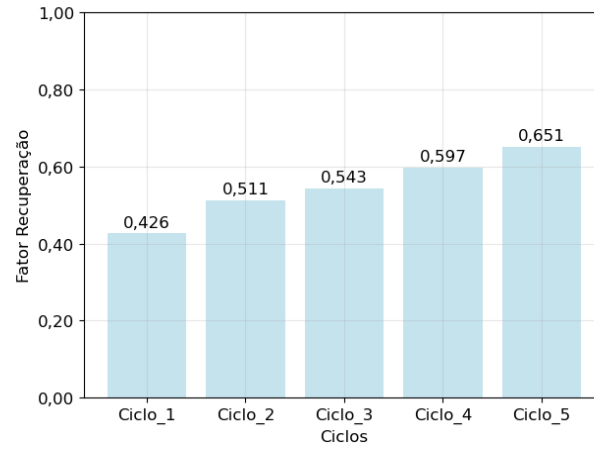
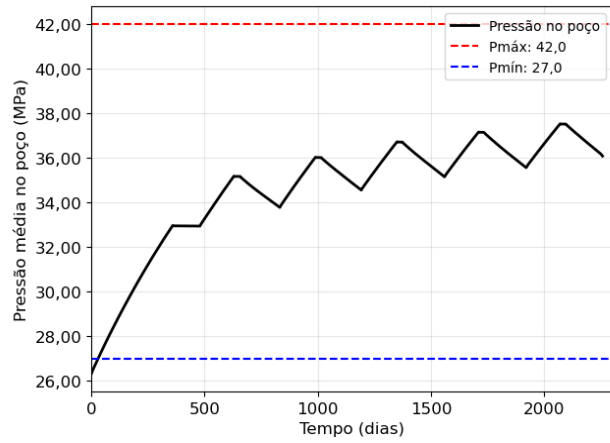
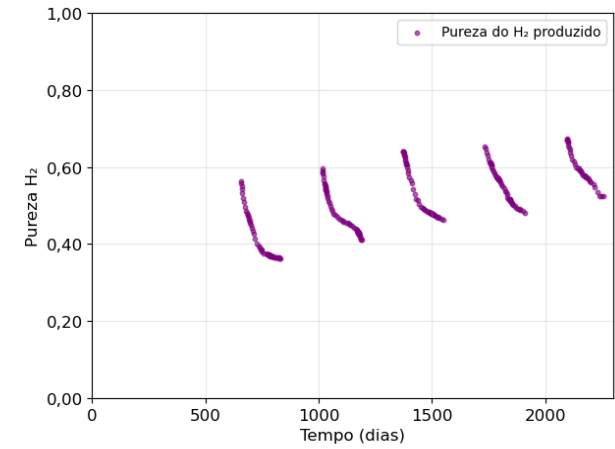
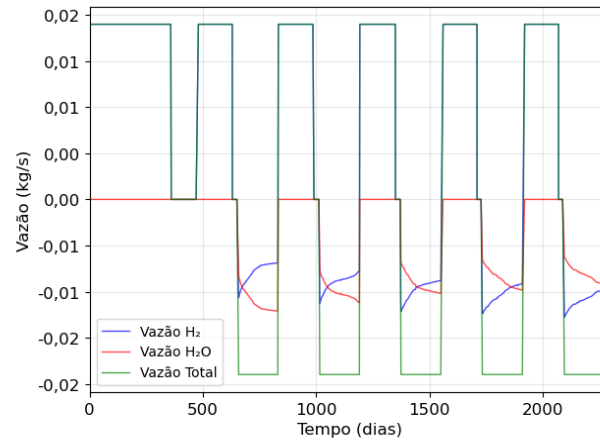
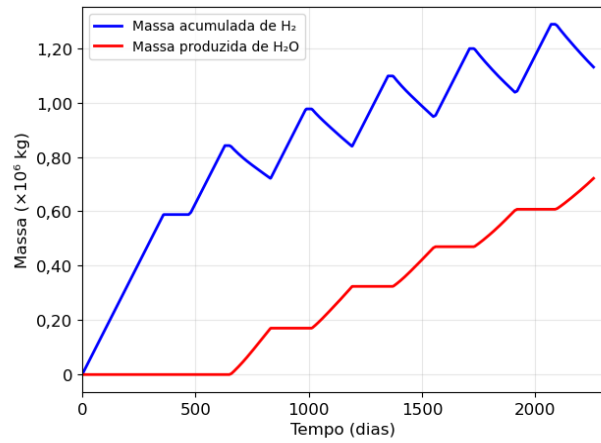
Cenário 1.1.3.2



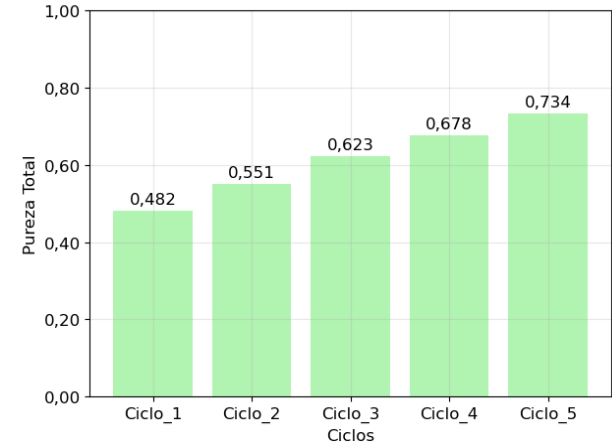
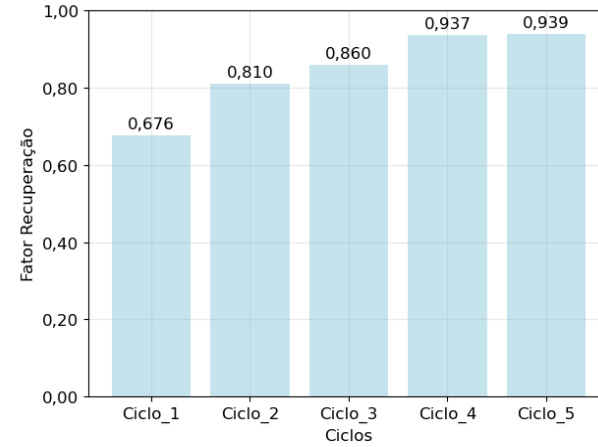
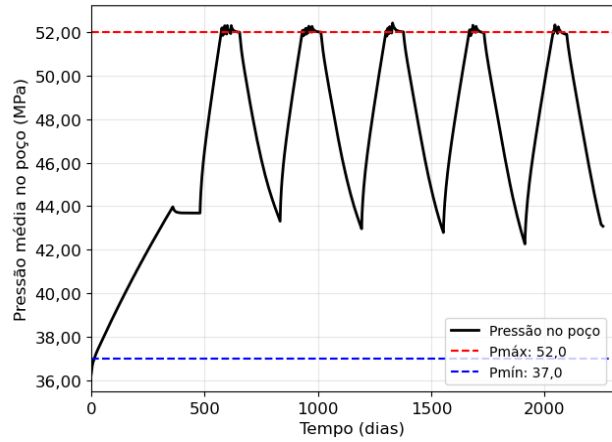
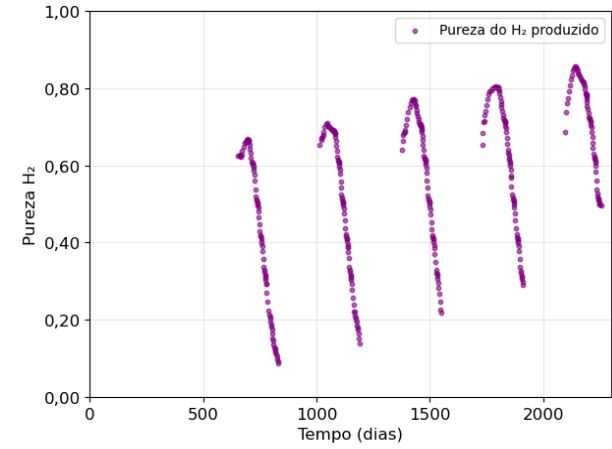
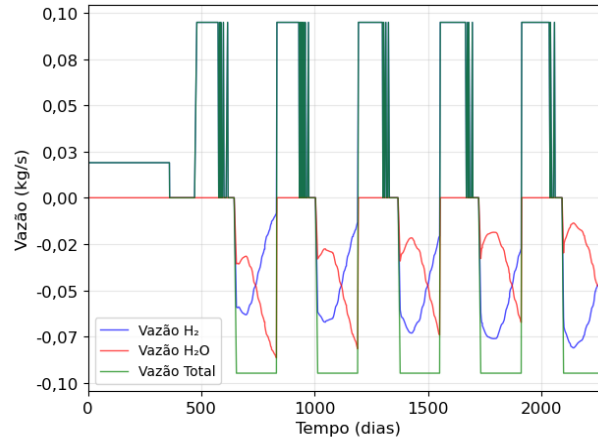
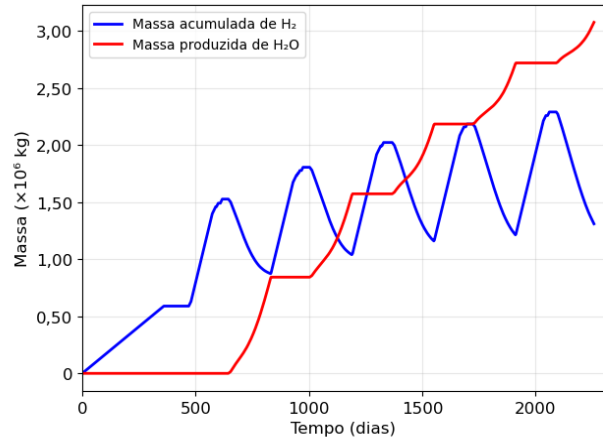
Cenário 1.1.3.3



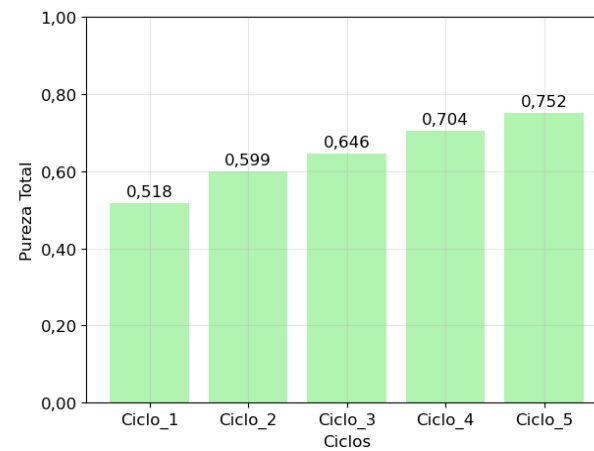
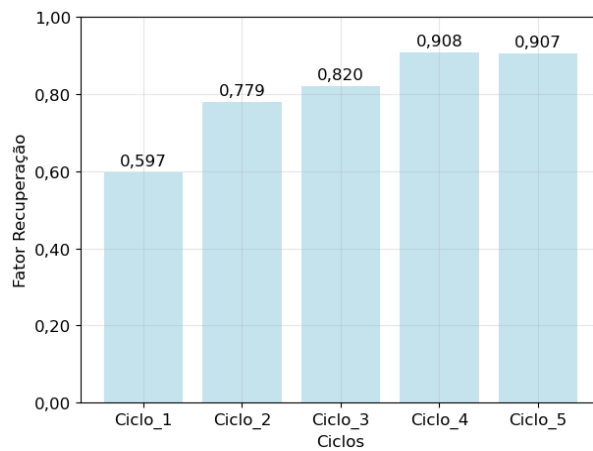
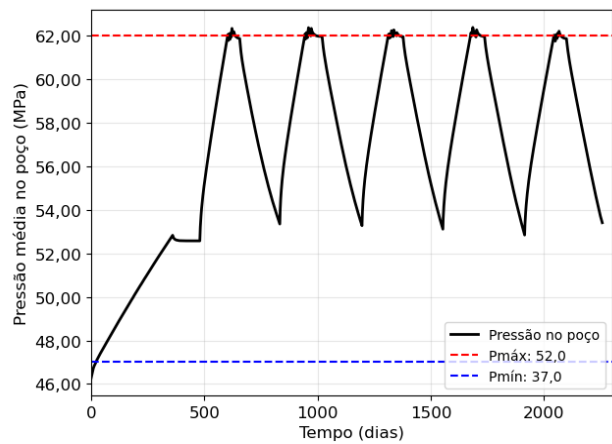
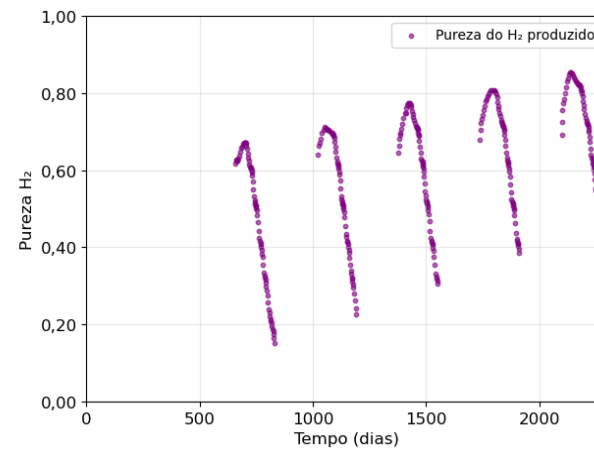
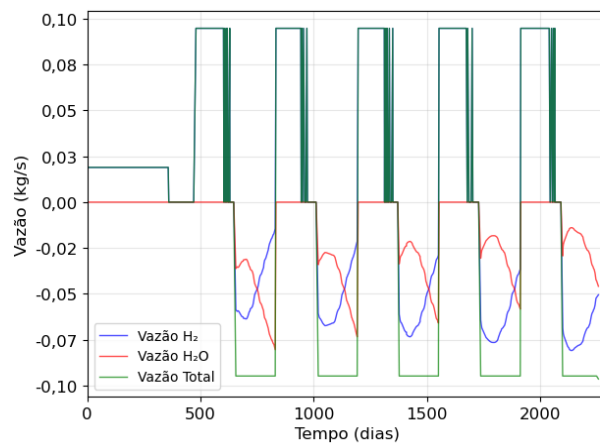
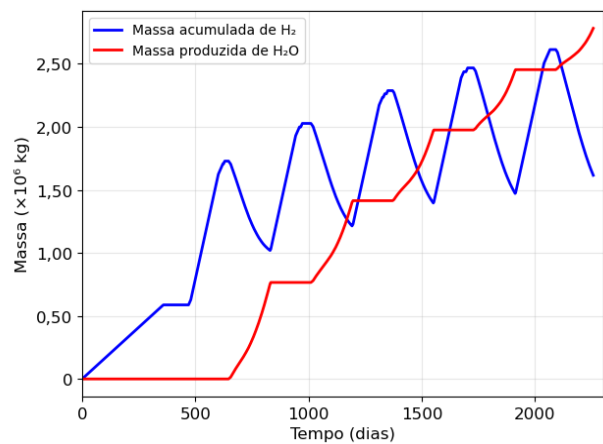
Cenário 1.1.3.4



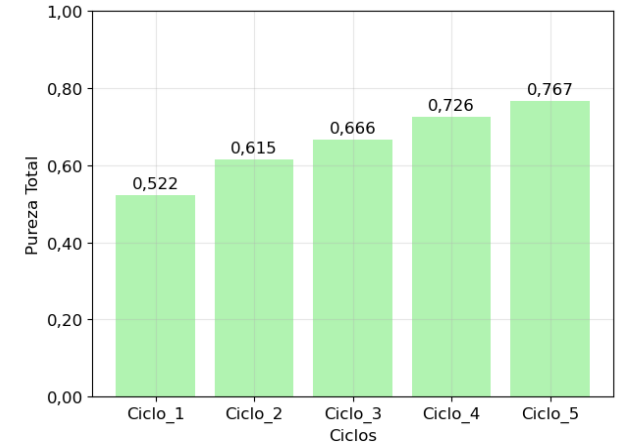
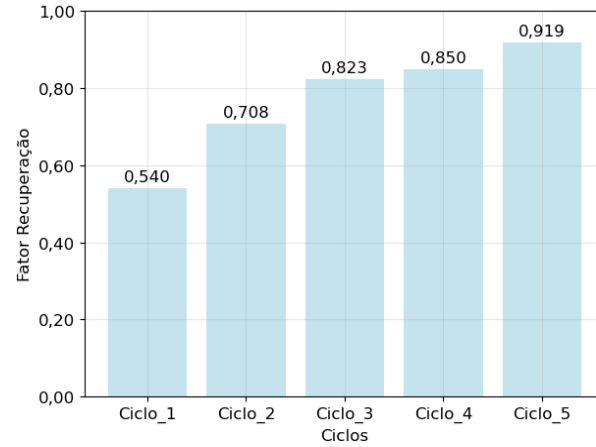
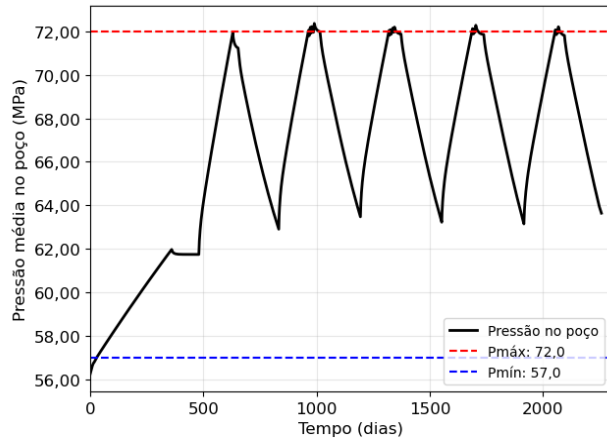
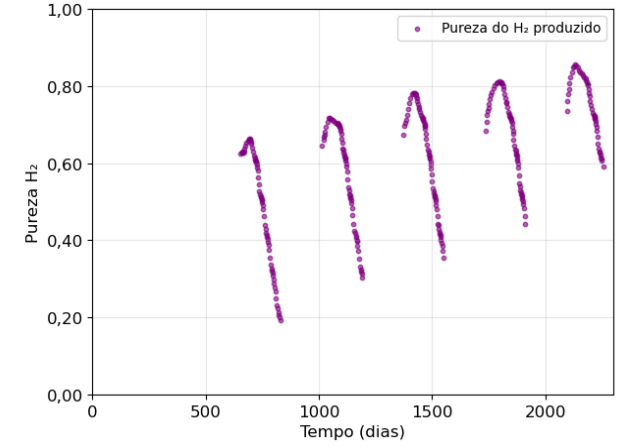
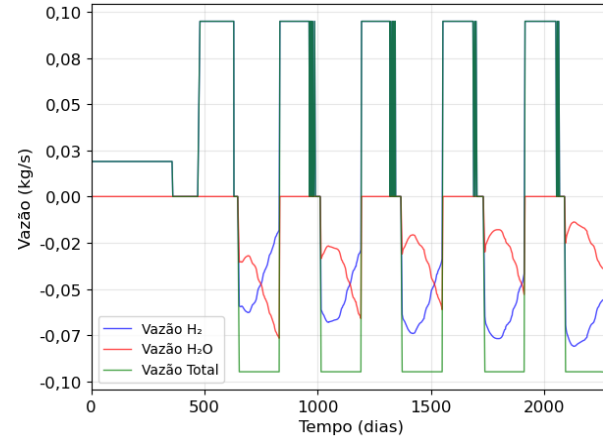
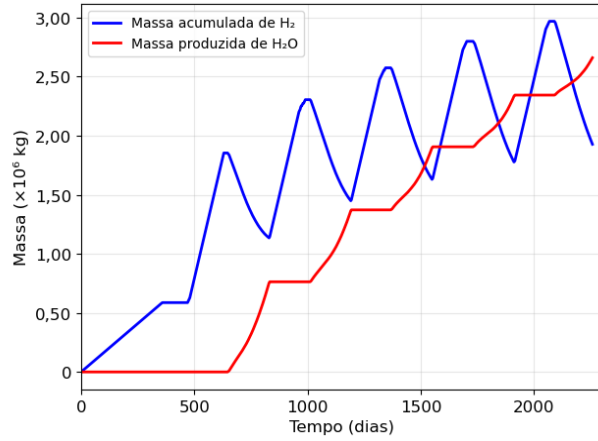
Cenário 1.2.1.1



Cenário 1.3.1.1



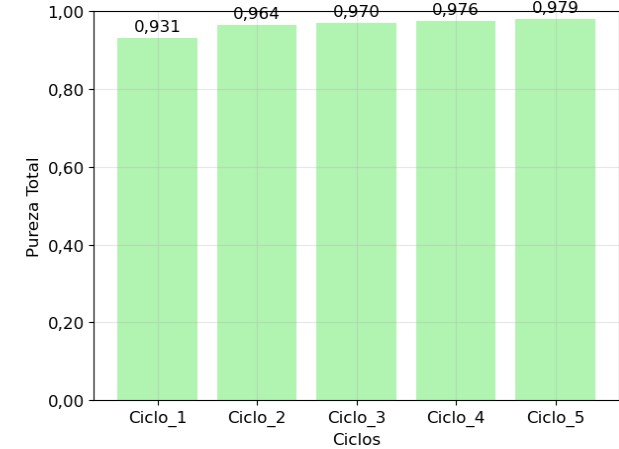
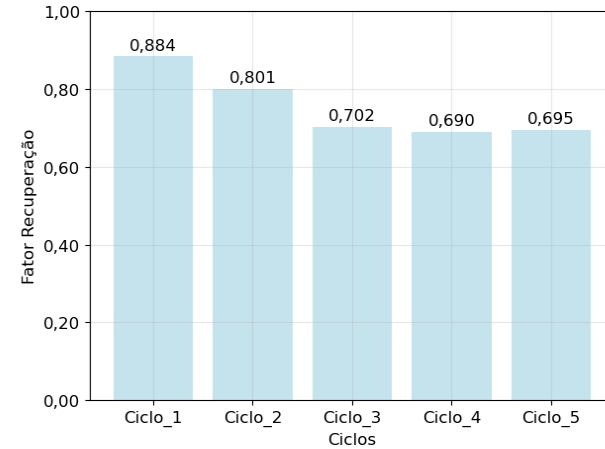
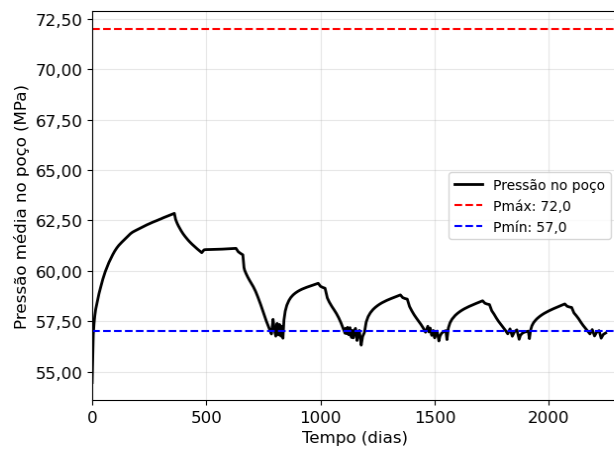
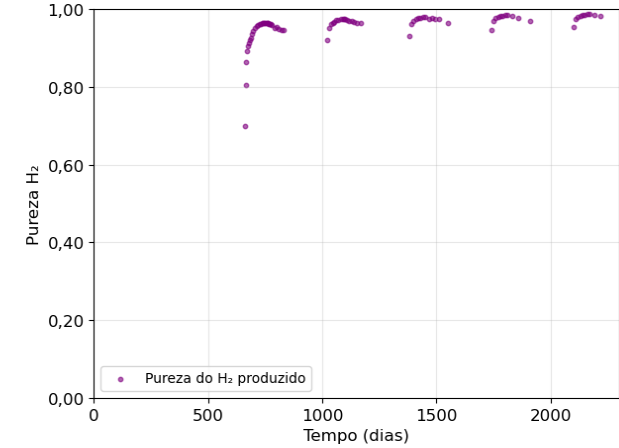
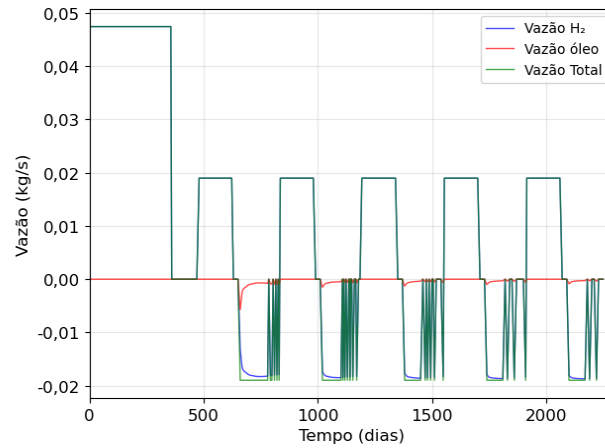
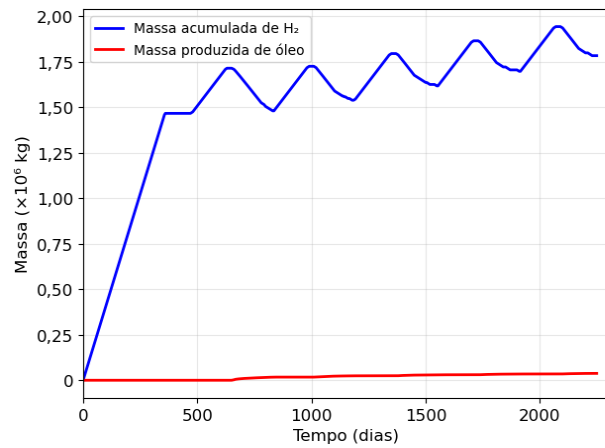
Cenário 1.4.1.1



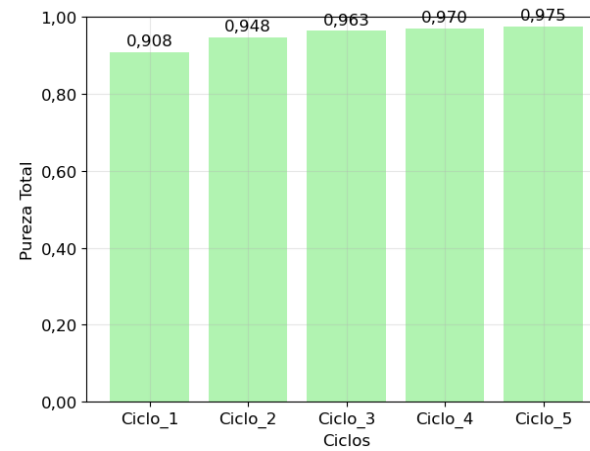
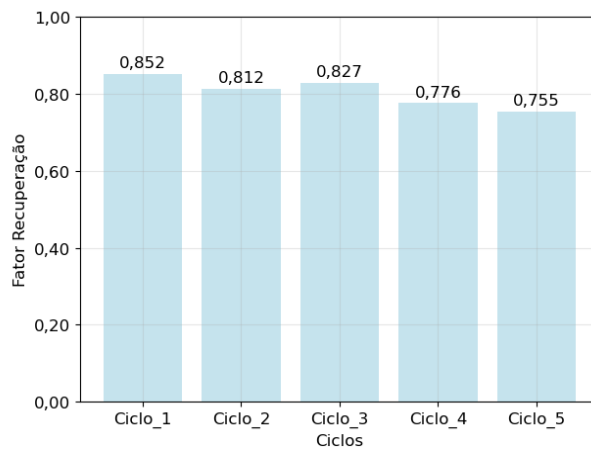
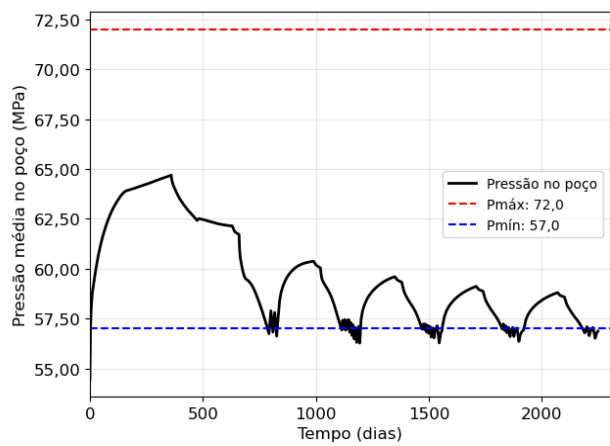
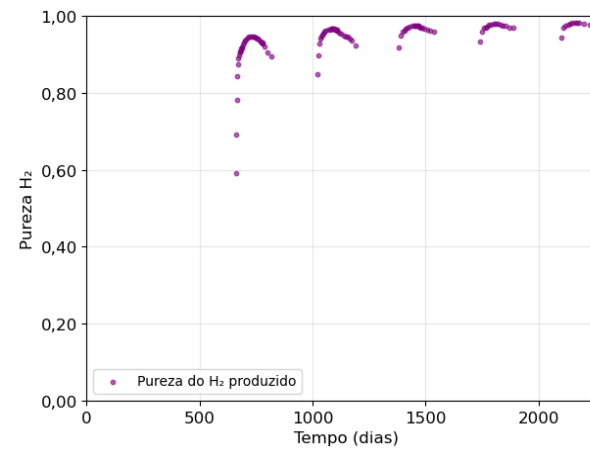
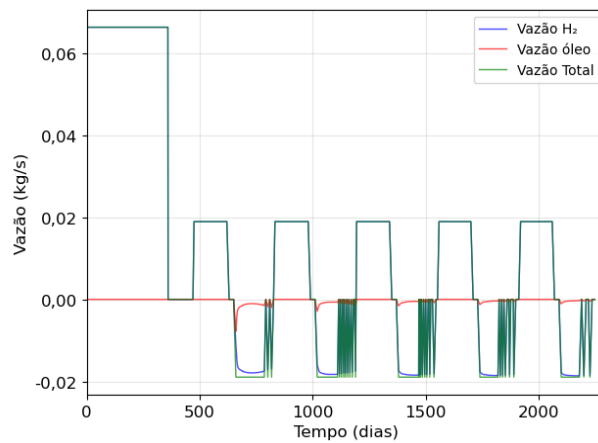
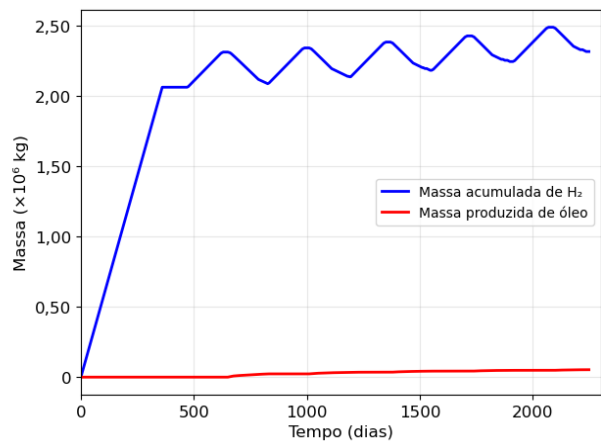
APÊNDICE II

QUADROS RESUMO DO RESERVATÓRIO MADURO DE ÓLEO

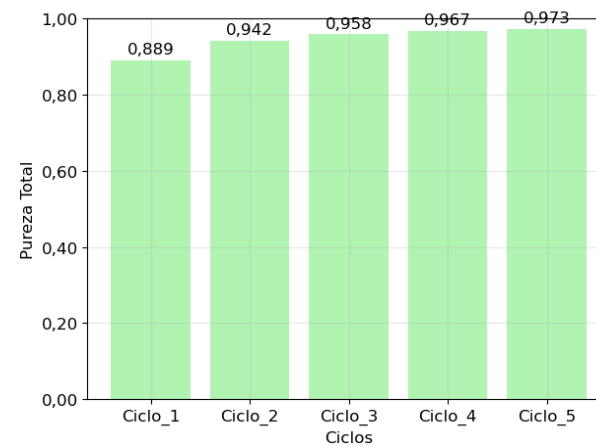
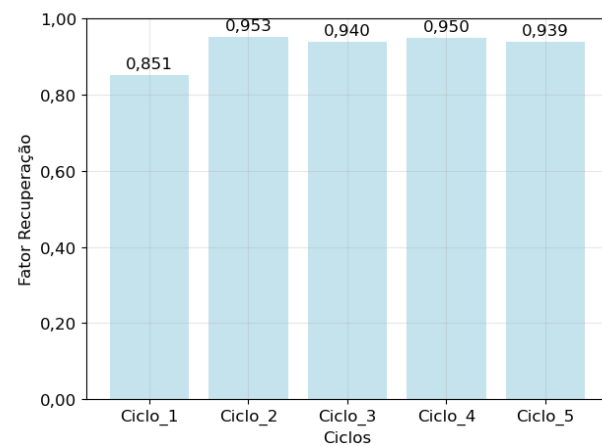
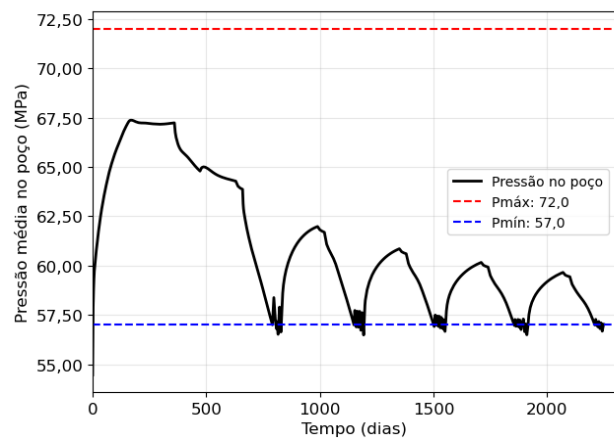
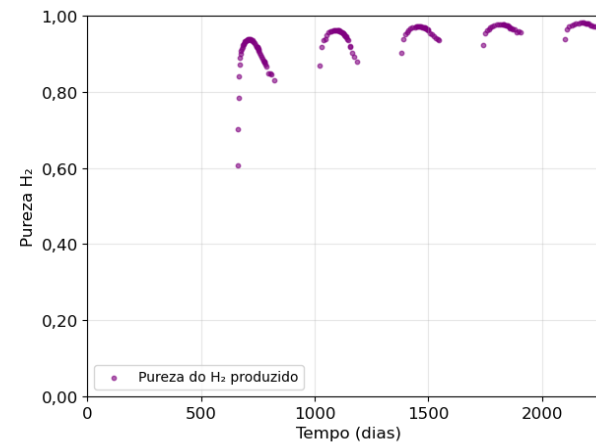
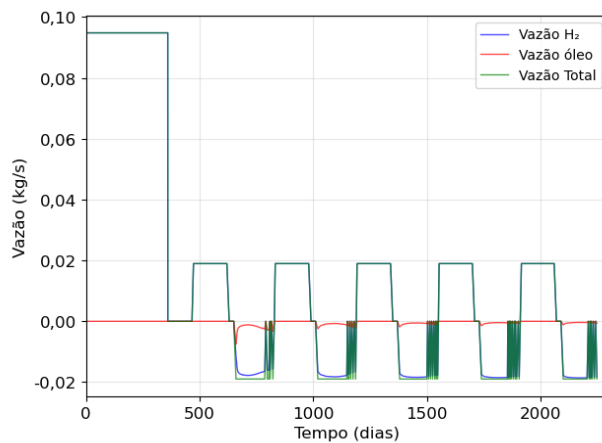
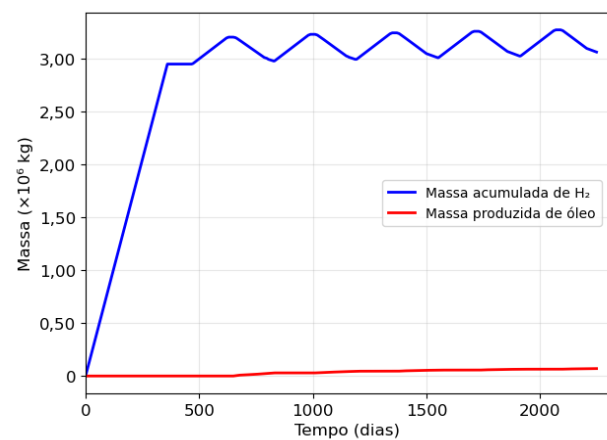
Cenário 2.1.1



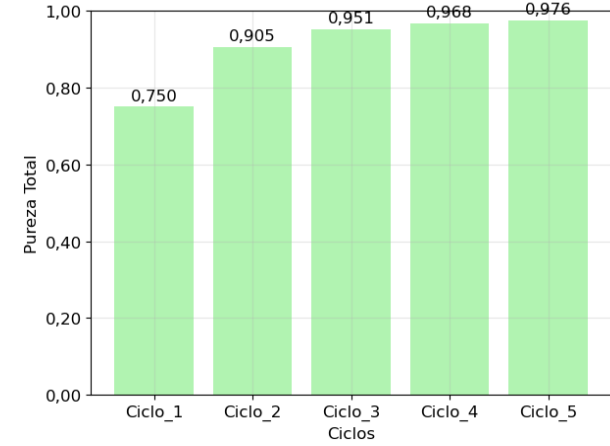
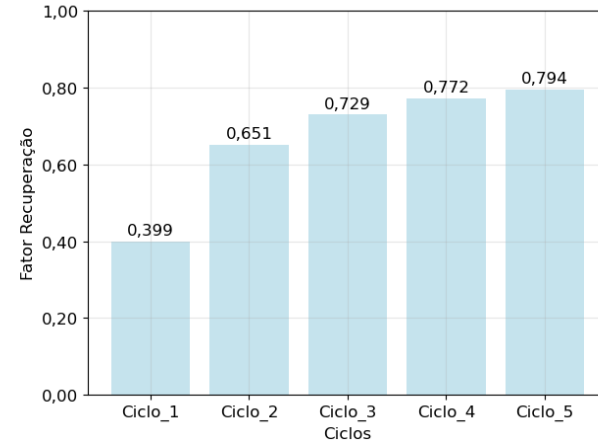
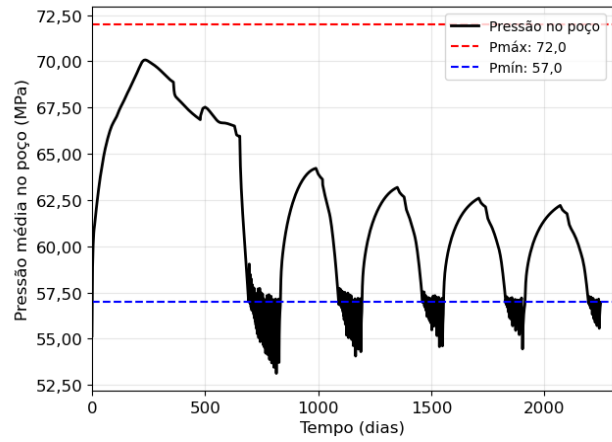
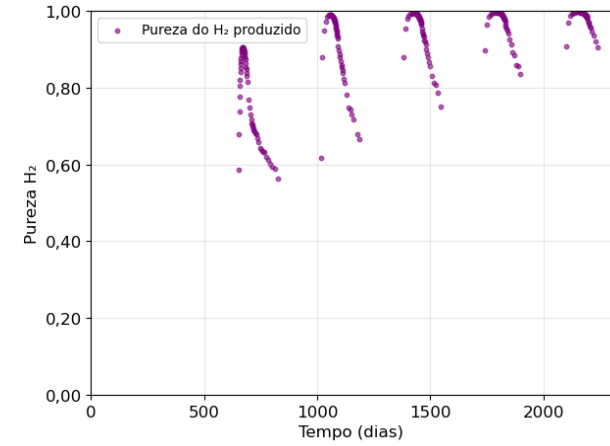
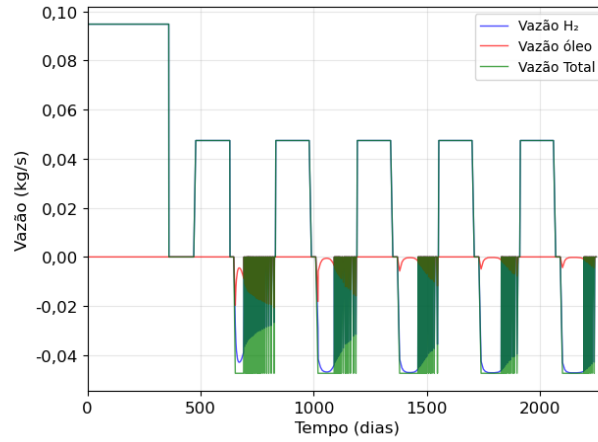
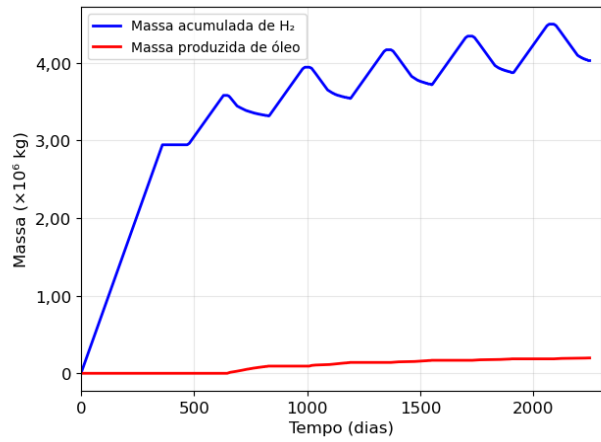
Cenário 2.1.2



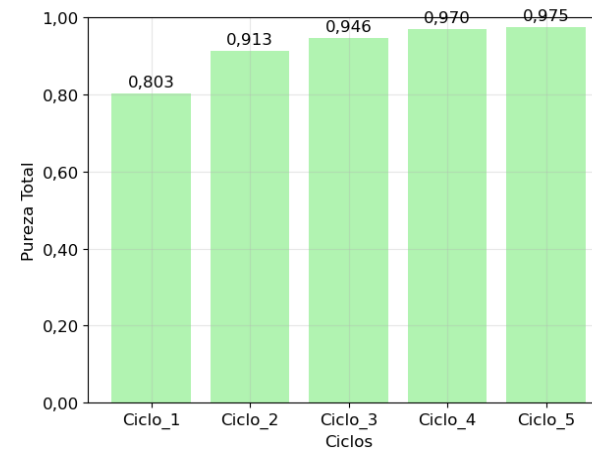
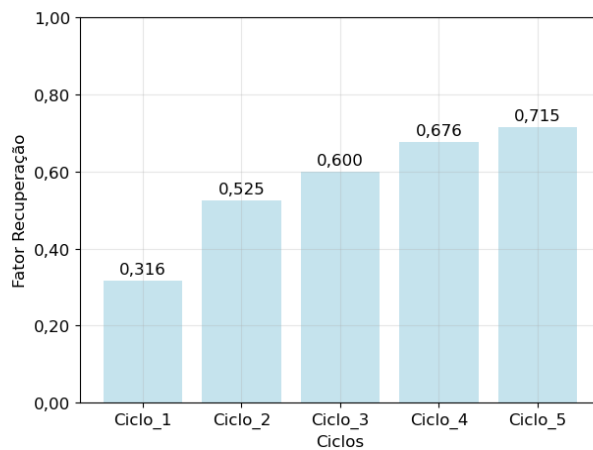
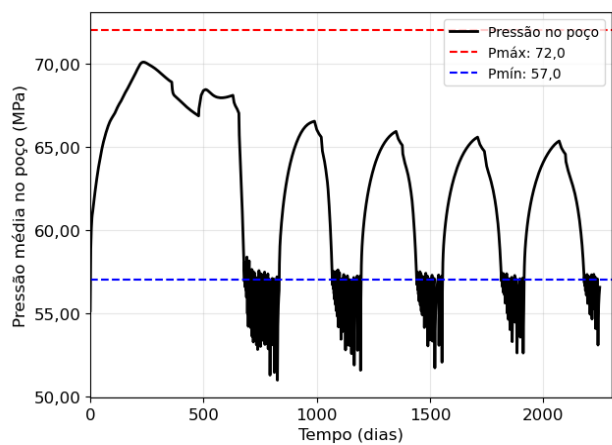
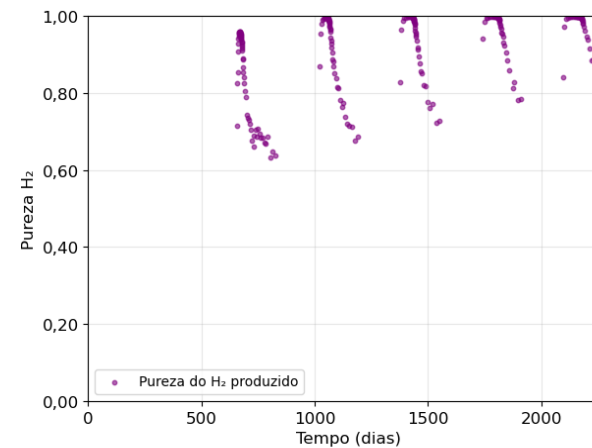
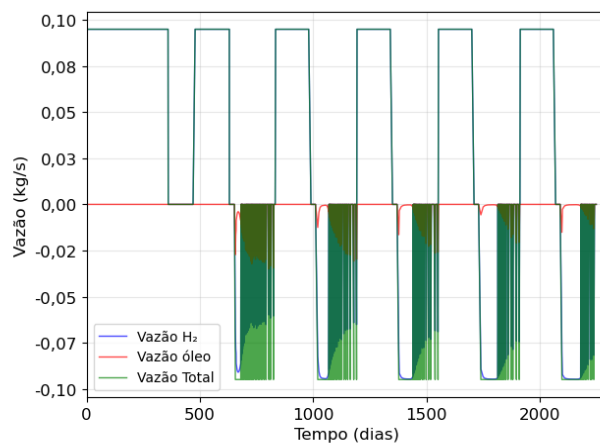
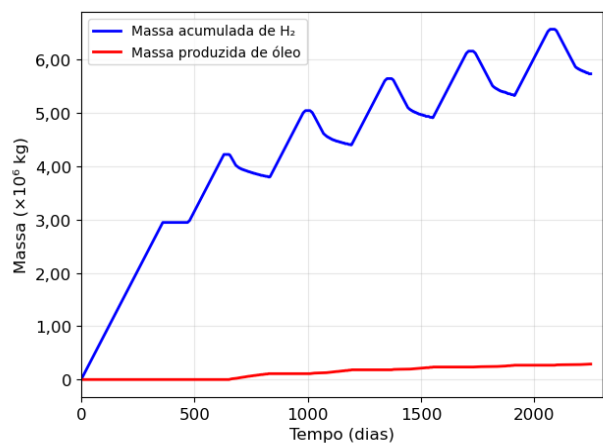
Cenário 2.1.3



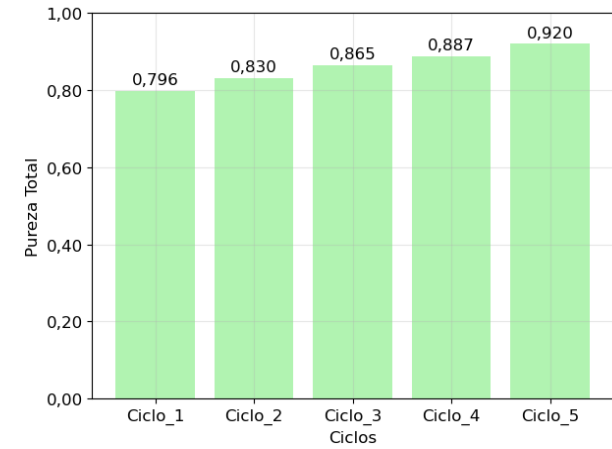
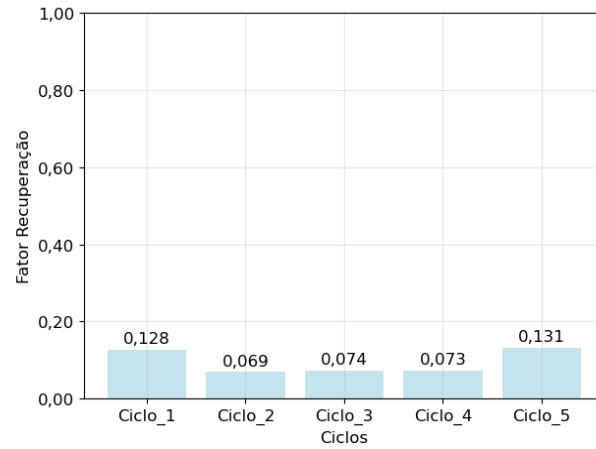
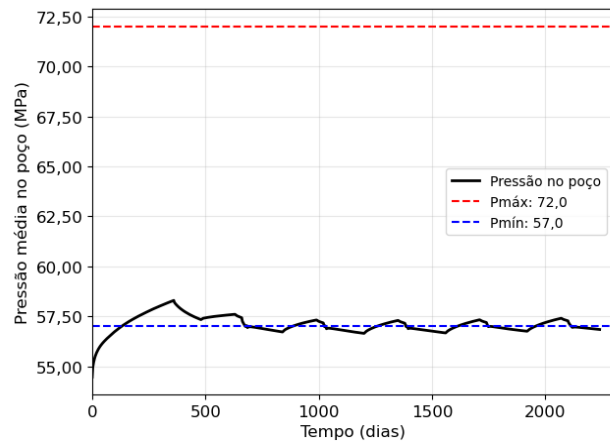
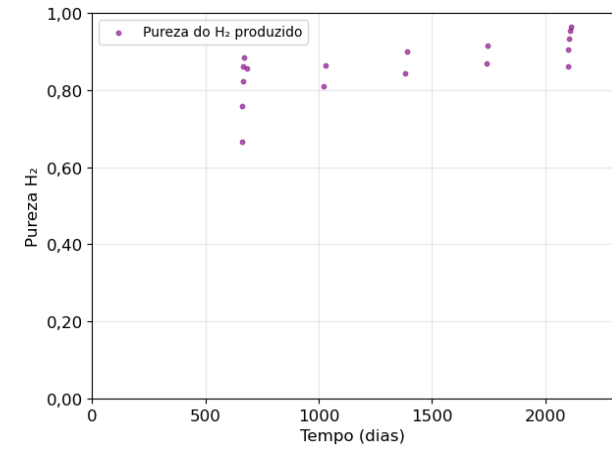
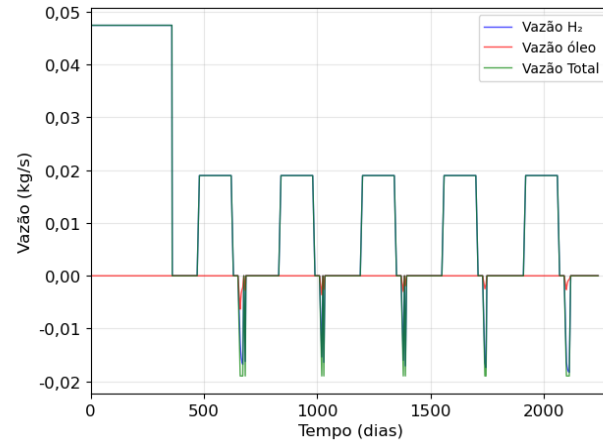
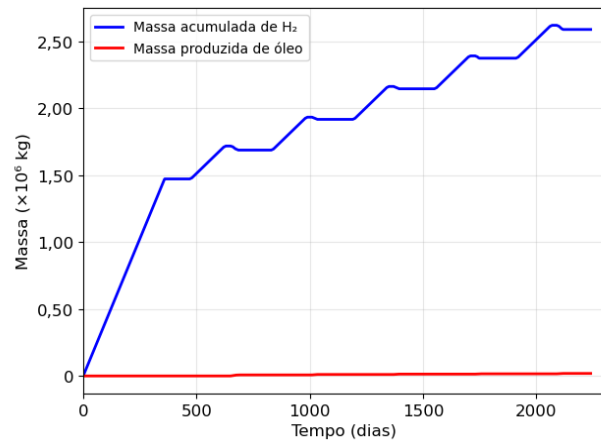
Cenário 2.1.4



Cenário 2.1.5

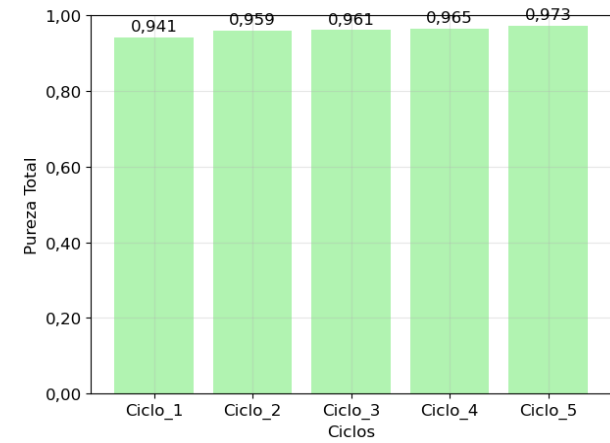
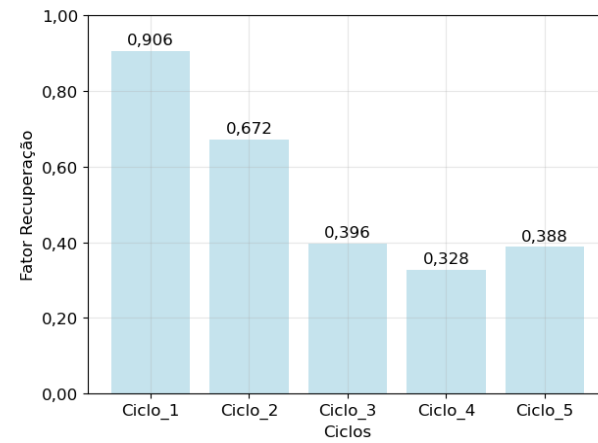
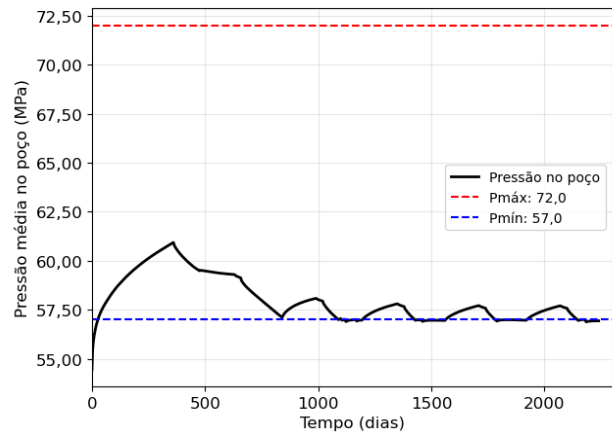
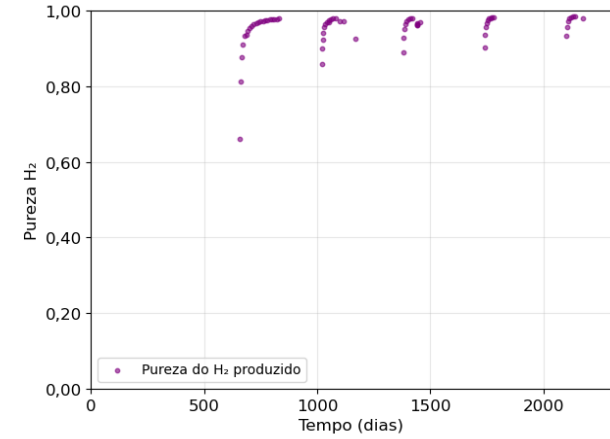
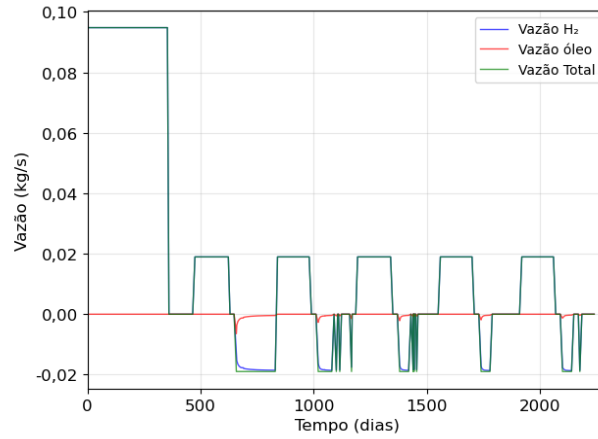
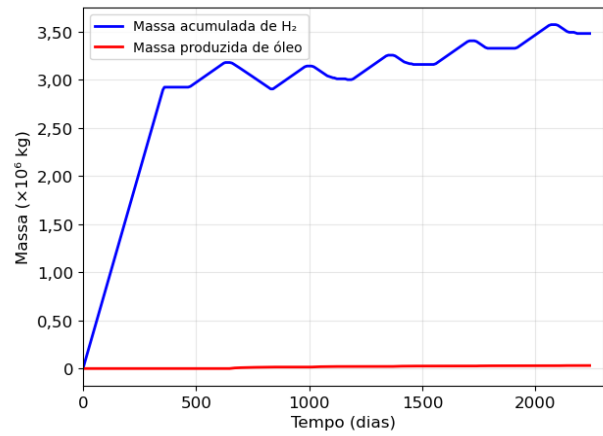


Cenário 2.2.1

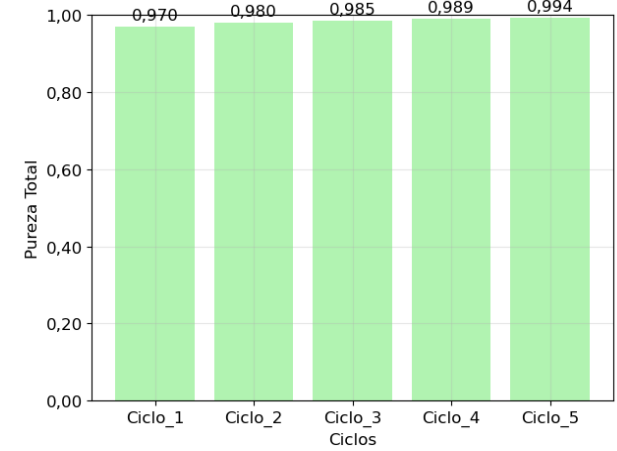
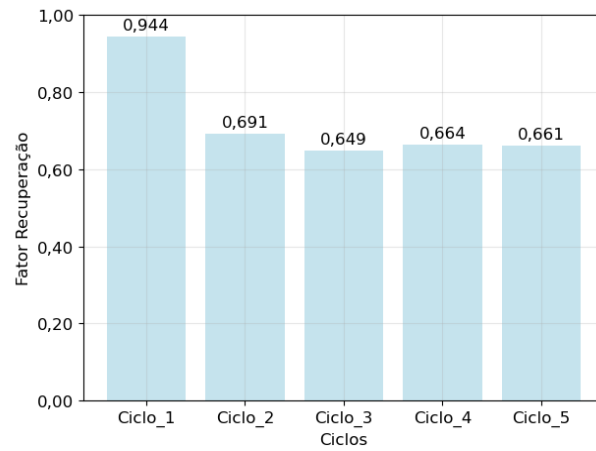
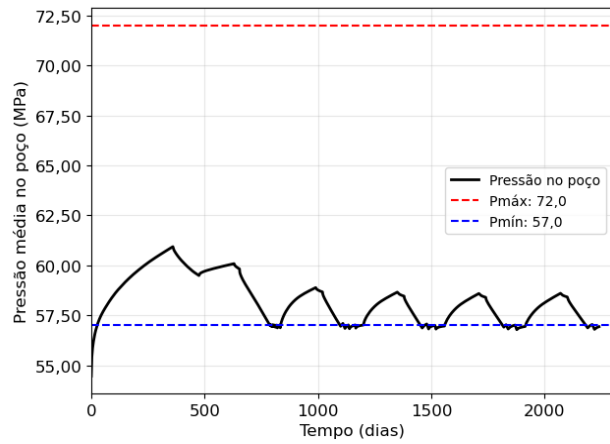
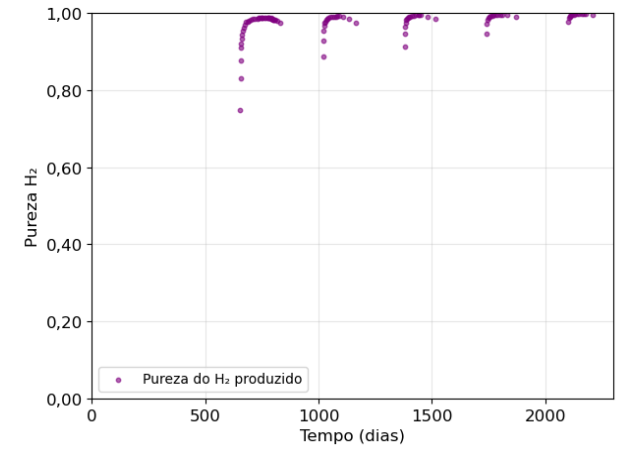
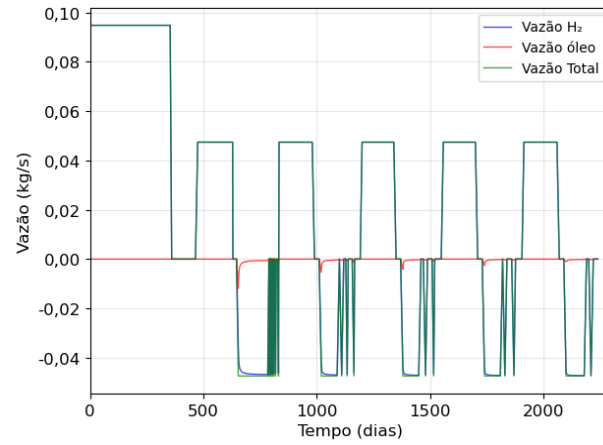
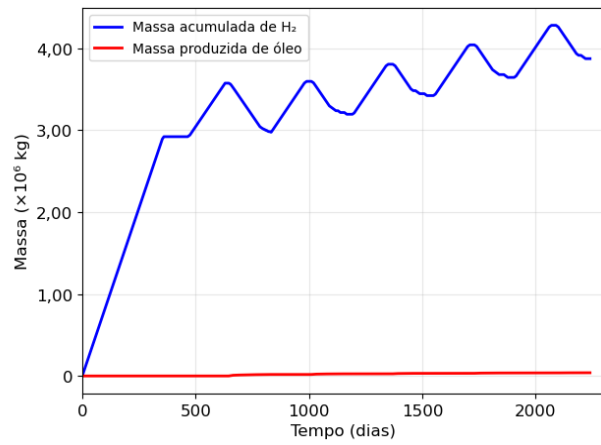


Cenário 2.2.2

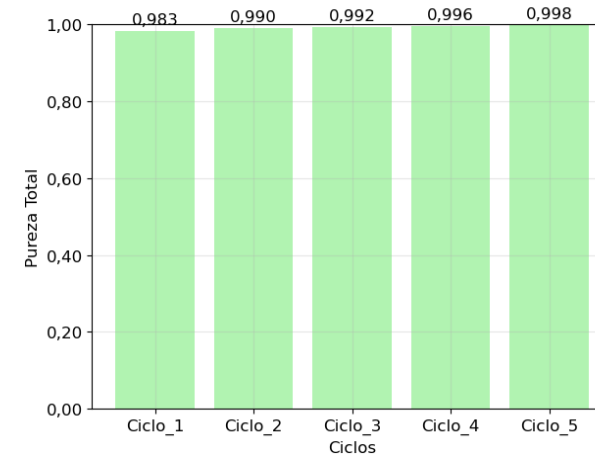
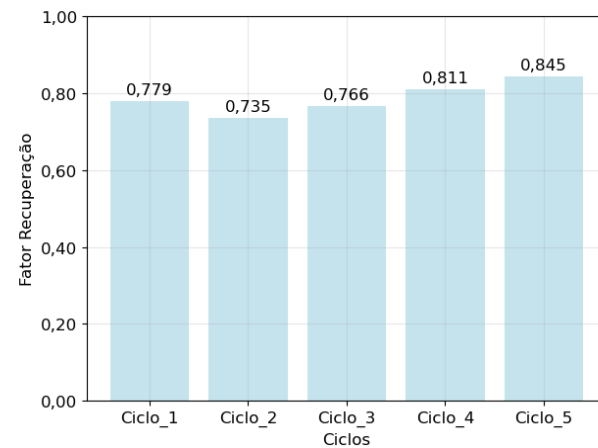
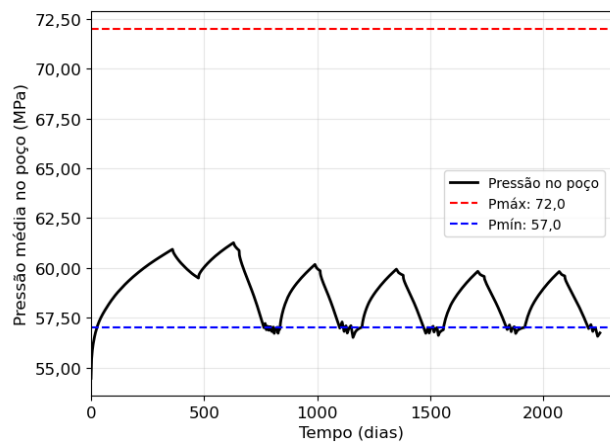
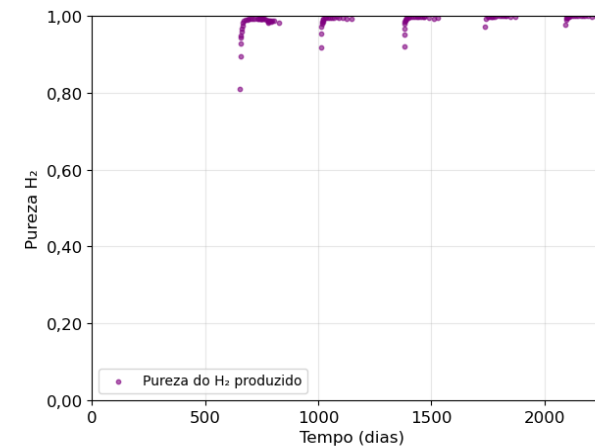
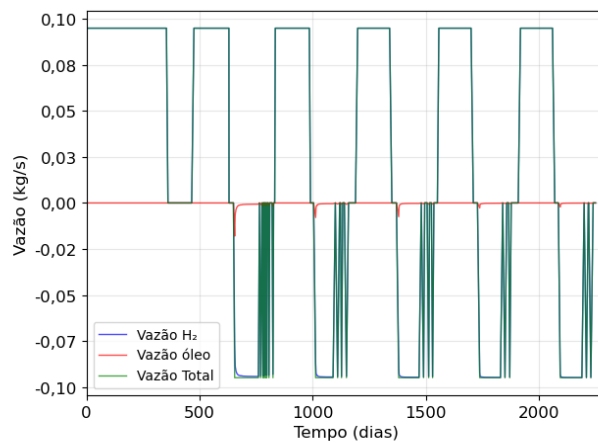
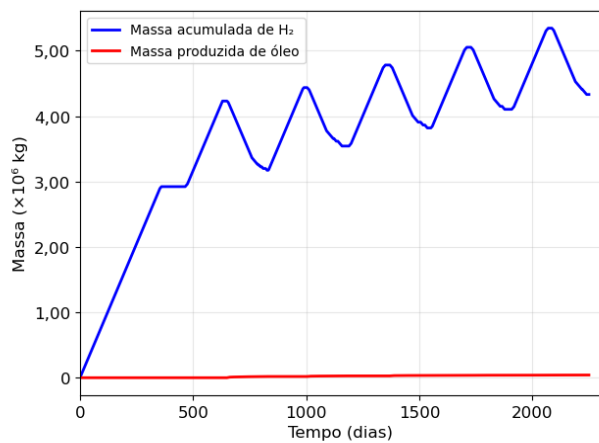
Cenário 2.2.3



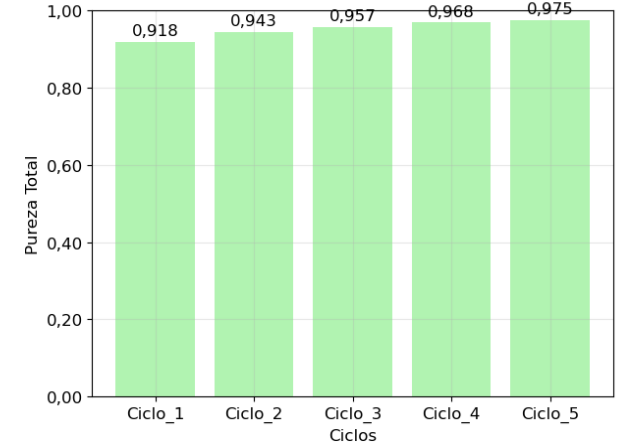
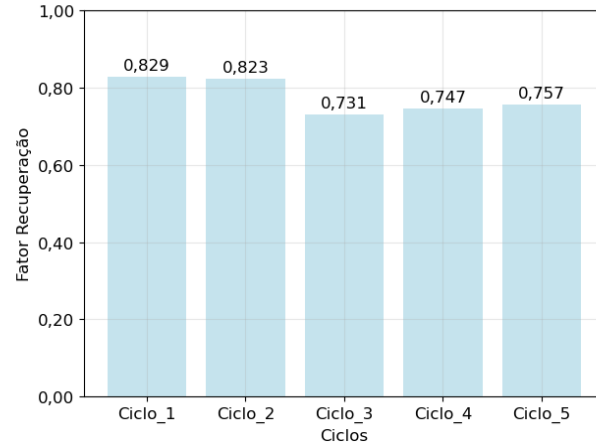
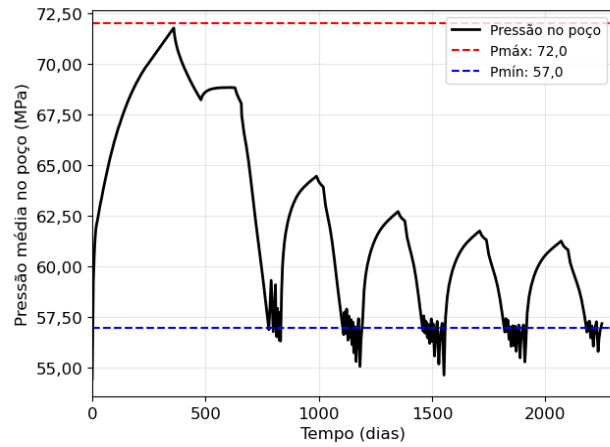
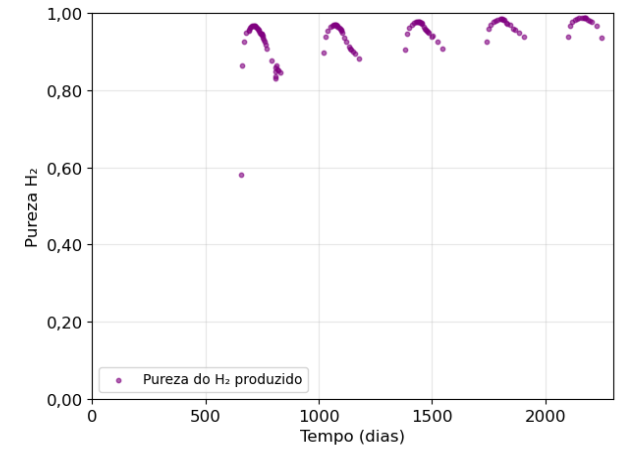
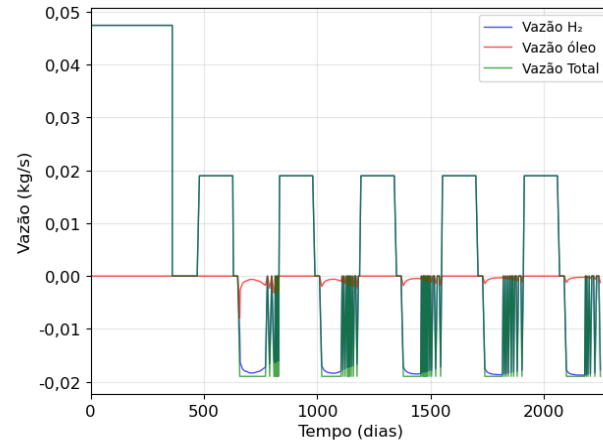
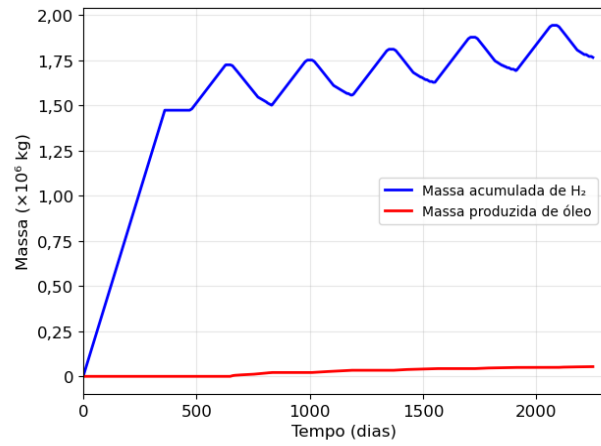
Cenário 2.2.4



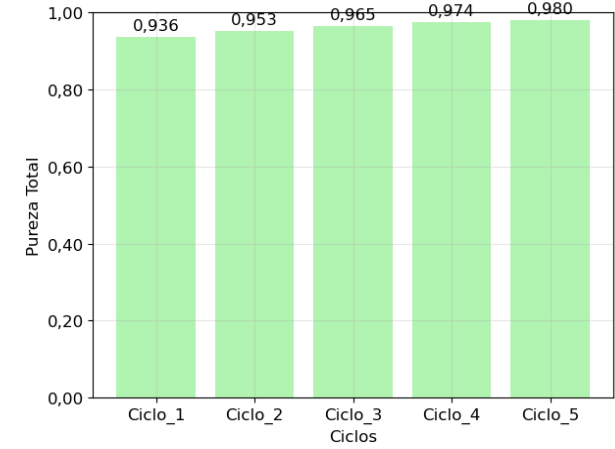
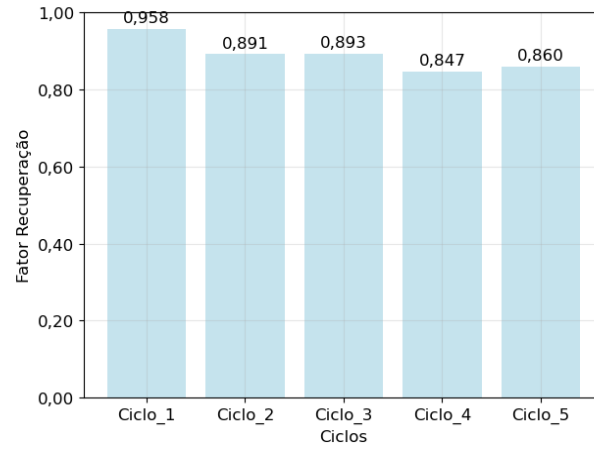
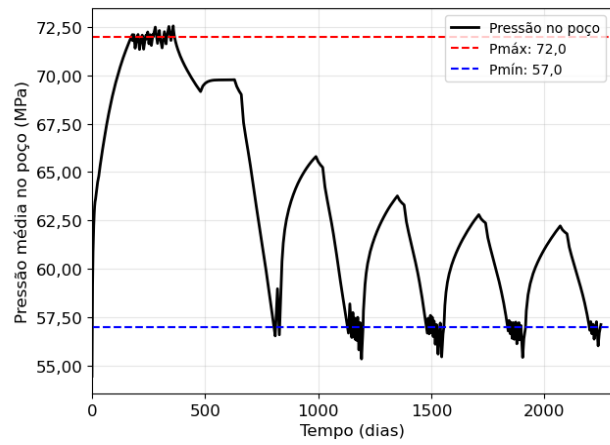
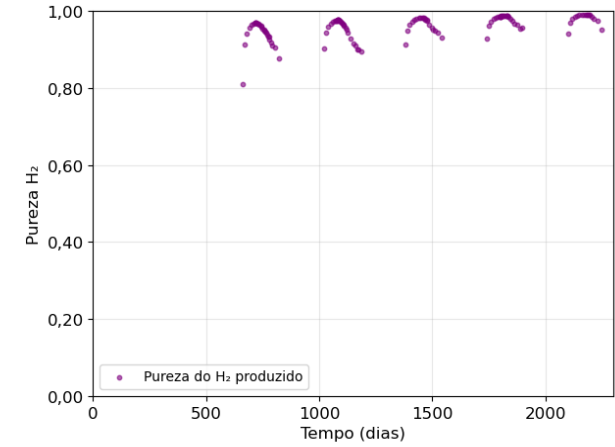
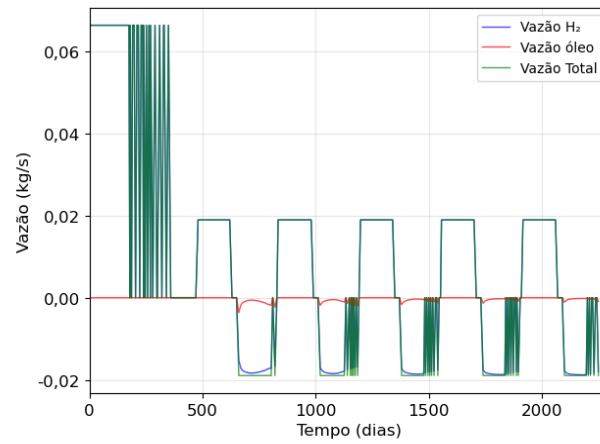
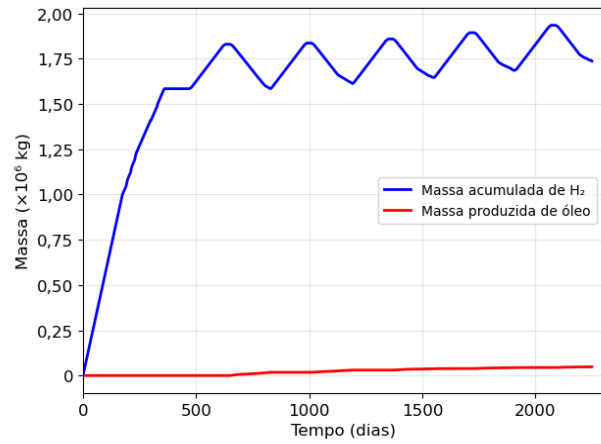
Cenário 2.2.5



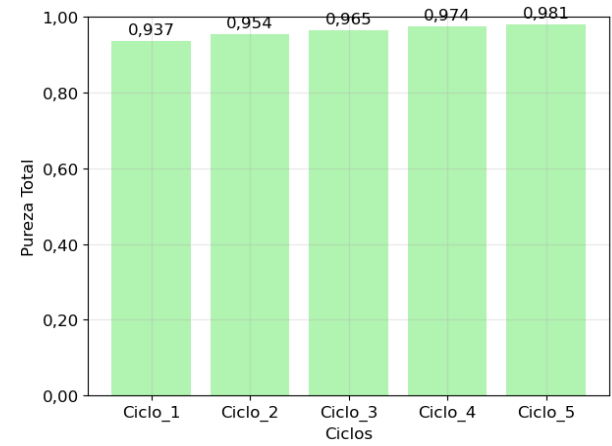
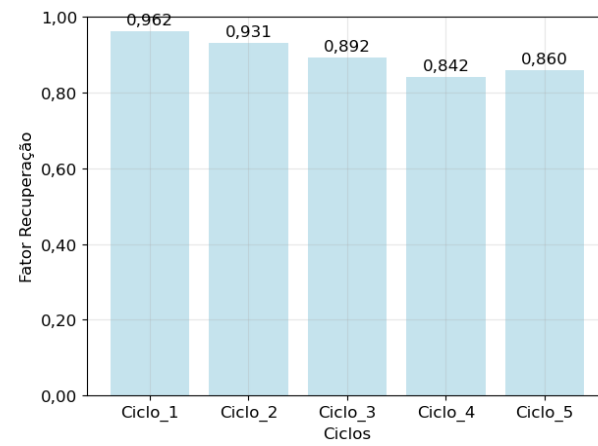
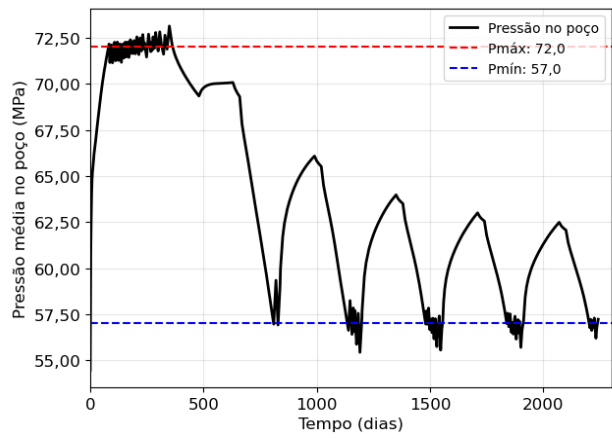
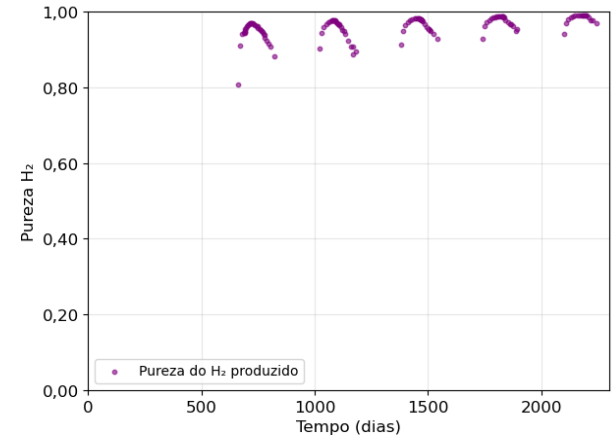
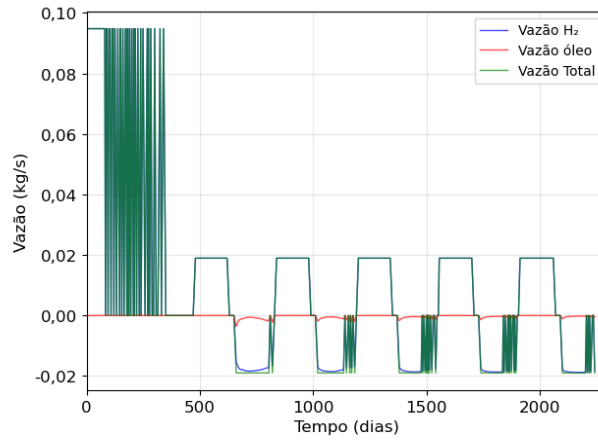
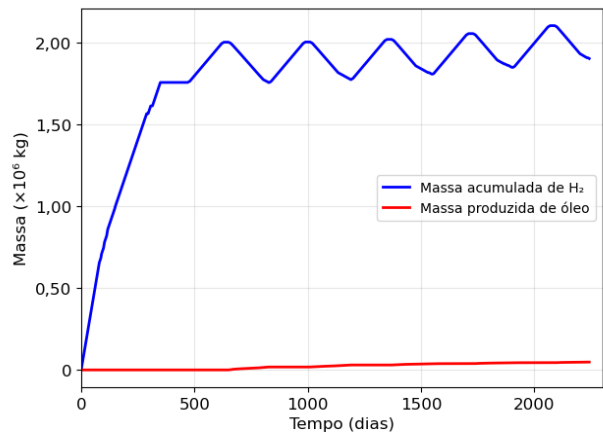
Cenário 2.3.1



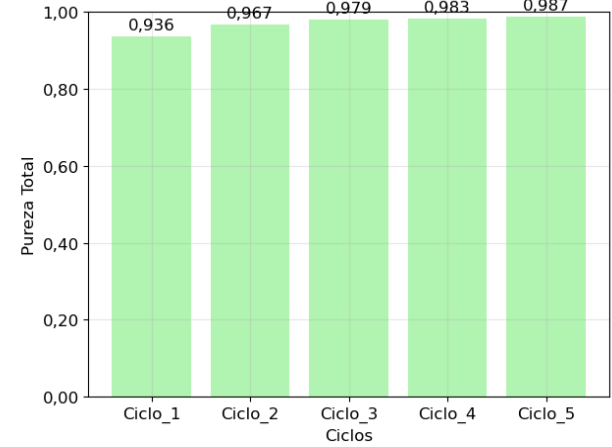
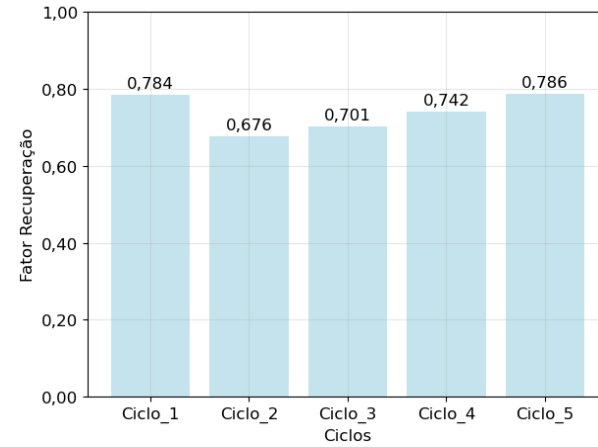
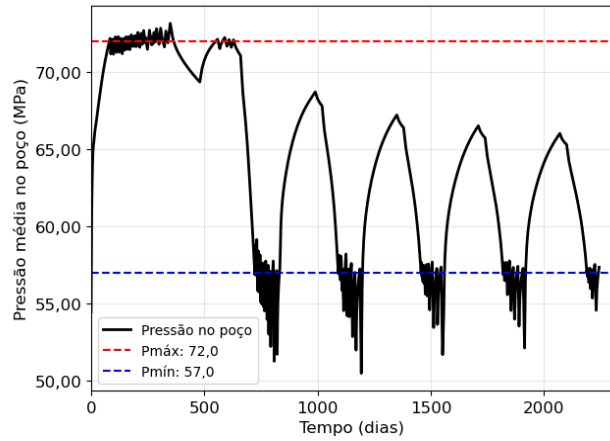
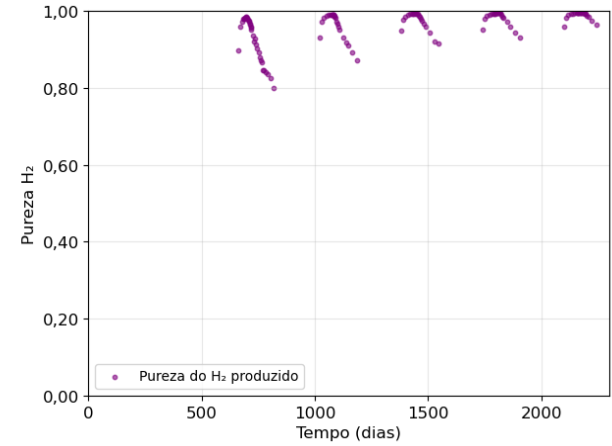
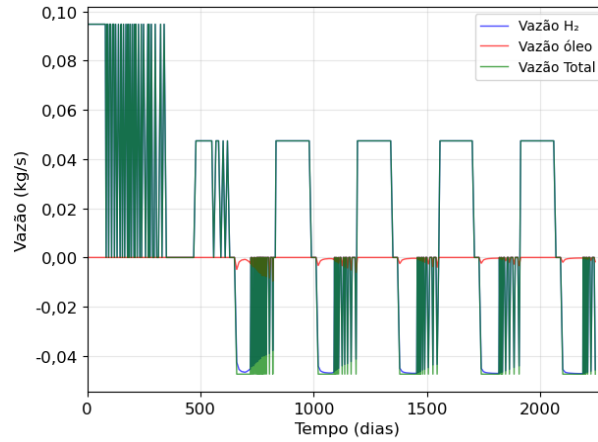
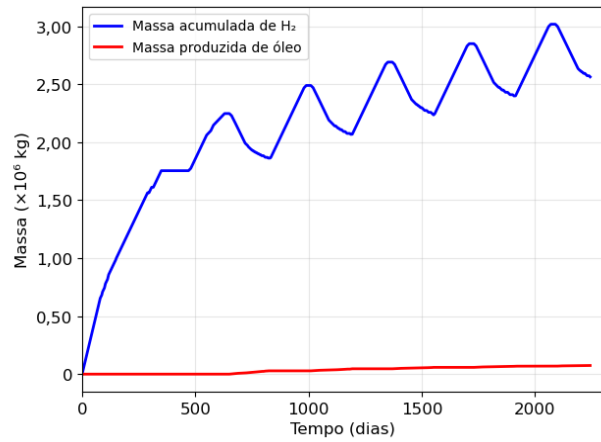
Cenário 2.3.2



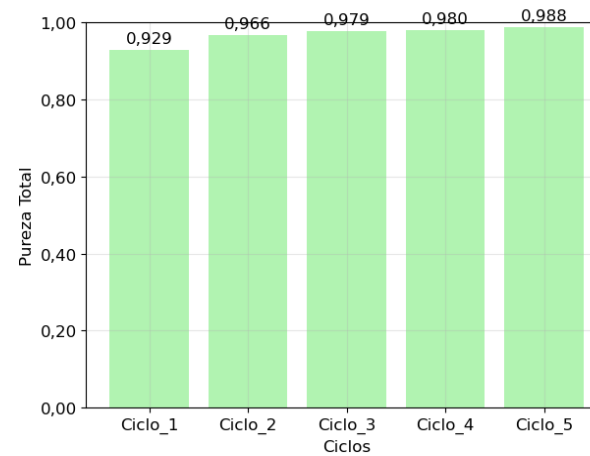
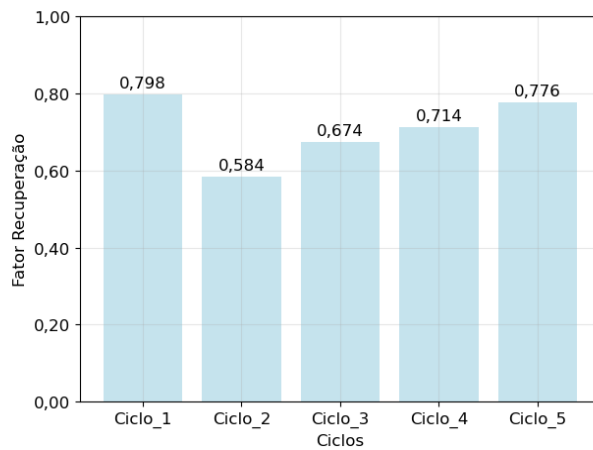
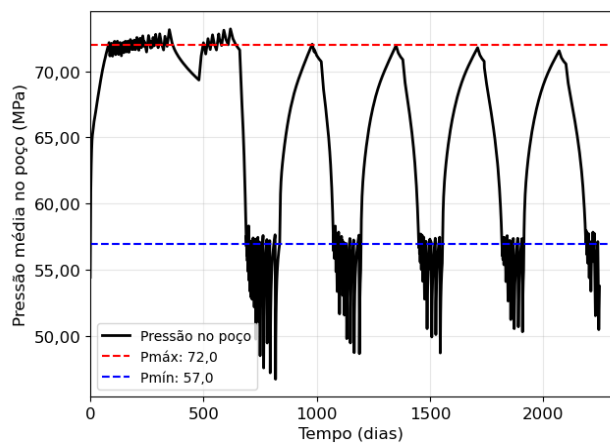
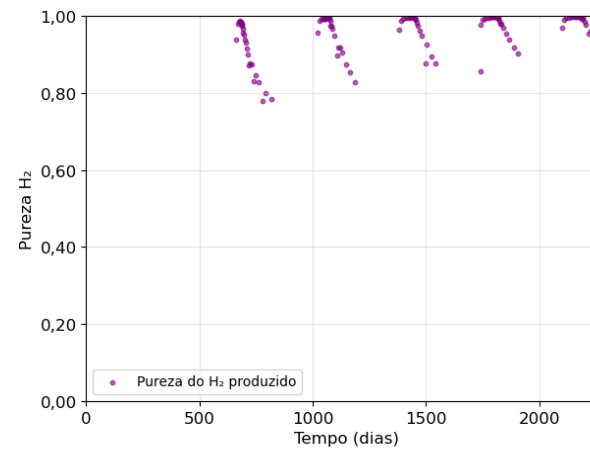
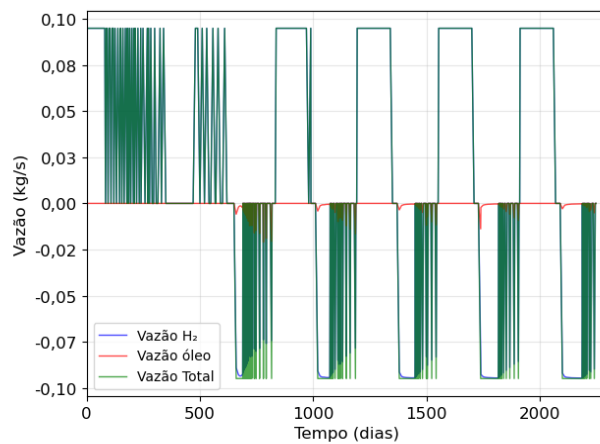
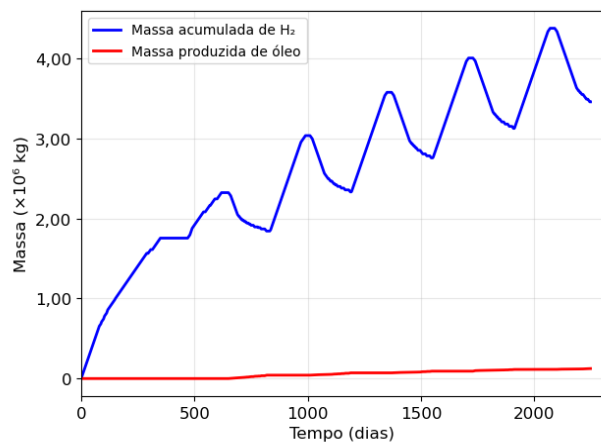
Cenário 2.3.3



Cenário 2.3.4



Cenário 2.3.5



APÊNDICE III

ARQUIVO *PROBLEM.HH*

```
#ifndef DUMUX_INJECTION_PROBLEM_HH
#define DUMUX_INJECTION_PROBLEM_HH

#include <dune/grid/yasgrid.hh>
#include <dune/alugrid/grid.hh>

#include <dumux/discretization/cellcentered/mpfa/omethod/staticinteractionvolume.hh>
#include <dumux/discretization/ccmpfa.hh>
#include <dumux/discretization/cctpfa.hh>
#include <dumux/discretization/box.hh>

#include <dumux/porousmediumflow/problem.hh>
#include <dumux/porousmediumflow/2p2c/model.hh>
#include <dumux/material/fluidsystems/H2heavyoil.hh>

#include "spatialparams.hh"

namespace Dumux
{

#ifdef ENABLECACHING
#define ENABLECACHING 0
#endif

template <class TypeTag>
class InjectionProblem;
namespace Properties
{
    // Create new type tags
    namespace TTag
    {
        struct Injection { using InheritsFrom = std::tuple<TwoPTwoC>; };
        struct InjectionBox { using InheritsFrom = std::tuple<Injection, BoxModel>; };
        struct InjectionCCTpfa { using InheritsFrom = std::tuple<Injection, CCTpfaModel>; };
        struct InjectionCCMpfa { using InheritsFrom = std::tuple<Injection, CCMpfaModel>; };
    } // end namespace TTag

    // Set the grid type
    template<class TypeTag>
    struct Grid<TypeTag, TTag::Injection>
    {
        using type = Dune::ALUGrid<2, 2, Dune::cube, Dune::nonconforming>;
    };

    // Set the problem property
    template<class TypeTag>
    struct Problem<TypeTag, TTag::Injection>
    {
        using type = InjectionProblem<TypeTag>;
    };

    // Set fluid configuration
    template<class TypeTag>
```

```

struct FluidSystem<TypeTag, TTag::Injection>
{
    using type = FluidSystems::H2HeavyOil<GetPropType<TypeTag, Properties::Scalar>>;
};

// Set the spatial parameters
template<class TypeTag>
struct SpatialParams<TypeTag, TTag::Injection>
{
    using GridGeometry = GetPropType<TypeTag, Properties::GridGeometry>;
    using Scalar = GetPropType<TypeTag, Properties::Scalar>;
    using type = InjectionSpatialParams<GridGeometry, Scalar>;
};

// Define whether mole(true) or mass(false) fractions are used
template<class TypeTag>
struct UseMoles<TypeTag, TTag::Injection> { static constexpr bool value = true; };

// Enable caching or not (reference solutions created without caching)
template<class TypeTag>
struct EnableGridGeometryCache<TypeTag, TTag::Injection> { static constexpr bool value =
ENABLECACHING; };
template<class TypeTag>
struct EnableGridVolumeVariablesCache<TypeTag, TTag::Injection> { static constexpr bool value =
ENABLECACHING; };
template<class TypeTag>
struct EnableGridFluxVariablesCache<TypeTag, TTag::Injection> { static constexpr bool value =
ENABLECACHING; };

// use the static interaction volume around interior vertices in the mpfa test
template<class TypeTag>
struct PrimaryInteractionVolume<TypeTag, TTag::InjectionCCMpfa>
{
private:
    using Scalar = GetPropType<TypeTag, Properties::Scalar>;
    using NodalIndexSet = GetPropType<TypeTag, Properties::DualGridNodalIndexSet>;

    // structured two-d grid
    static constexpr int numIvScvs = 4;
    static constexpr int numIvScvfs = 4;

    // use the default traits
    using Traits = CCMpfaODefaultStaticInteractionVolumeTraits< NodalIndexSet, Scalar, numIvScvs,
numIvScvfs >;
public:
    using type = CCMpfaOStaticInteractionVolume< Traits >;
};
} // end namespace Properties

template <class TypeTag>
class InjectionProblem : public PorousMediumFlowProblem<TypeTag>
{
    using ParentType = PorousMediumFlowProblem<TypeTag>;
    using GridView = typename GetPropType<TypeTag, Properties::GridGeometry>::GridView;
    using GridGeometry = GetPropType<TypeTag, Properties::GridGeometry>;
    using Scalar = GetPropType<TypeTag, Properties::Scalar>;
    using FluidSystem = GetPropType<TypeTag, Properties::FluidSystem>;

    using ModelTraits = GetPropType<TypeTag, Properties::ModelTraits>;
    using Indices = typename ModelTraits::Indices;

```

```

// primary variable indices
enum
{
    pressureIdx = Indices::pressureIdx,
    switchIdx = Indices::switchIdx
};

// phase presence
enum
{
    naplPhaseOnly = Indices::firstPhaseOnly,
    gPhaseOnly = Indices::secondPhaseOnly,
    naplgPhaseOnly = Indices::bothPhases
};

// equation indices
enum
{
    contiOILEqIdx = Indices::conti0EqIdx + FluidSystem::NAPLIdx,
    contiH2EqIdx = Indices::conti0EqIdx + FluidSystem::H2Idx,
};

// phase indices
enum
{
    gPhaseIdx = FluidSystem::H2Idx,
    naplPhaseIdx = FluidSystem::NAPLIdx, // fase líquida não aquosa
    NAPLIdx = FluidSystem::NAPLIdx,
    H2Idx = FluidSystem::H2Idx
};

using PrimaryVariables = GetPropType<TypeTag, Properties::PrimaryVariables>;
using NumEqVector = GetPropType<TypeTag, Properties::NumEqVector>;
using GridVariables = GetPropType<TypeTag, Properties::GridVariables>;
using ElementVolumeVariables = typename GridVariables::GridVolumeVariables::LocalView;
using ElementFluxVariablesCache = typename GridVariables::GridFluxVariablesCache::LocalView;
using BoundaryTypes = GetPropType<TypeTag, Properties::BoundaryTypes>;
using Element = typename GridView::template Codim<0>::Entity;
using GlobalPosition = typename Element::Geometry::GlobalCoordinate;
using FVElementGeometry = typename GetPropType<TypeTag, Properties::GridGeometry>::LocalView;
using SubControlVolumeFace = typename FVElementGeometry::SubControlVolumeFace;

//! Property that defines whether mole or mass fractions are used
static constexpr bool useMoles = ModelTraits::useMoles();

public:
InjectionProblem(std::shared_ptr<const GridGeometry> gridGeometry)
: ParentType(gridGeometry), currentTime_(0)
{
    nTemperature_ = getParam<int>("Problem.NTemperature");
    nPressure_ = getParam<int>("Problem.NPressure");
    pressureLow_ = getParam<Scalar>("Problem.PressureLow");
    pressureHigh_ = getParam<Scalar>("Problem.PressureHigh");
    temperatureLow_ = getParam<Scalar>("Problem.TemperatureLow");
    temperatureHigh_ = getParam<Scalar>("Problem.TemperatureHigh");
    temperature_ = getParam<Scalar>("Problem.InitialTemperature");
    depthBOR_ = getParam<Scalar>("Problem.DepthBOR");
    name_ = getParam<std::string>("Problem.Name");
    pressureUpperLimit_ = getParam<Scalar>("Problem.PressureUpperLimit");
}

```

```

pressureLowerLimit_ = getParam<Scalar>("Problem.PressureLowerLimit");
wellHeight_ = getParam<Scalar>("Problem.WellHeight");

// initialize the tables of the fluid system
FluidSystem::init(/*Tmin=*/temperatureLow_,
                 /*Tmax=*/temperatureHigh_,
                 /*nT=*/nTemperature_,
                 /*pmin=*/pressureLow_,
                 /*pmax=*/pressureHigh_,
                 /*np=*/nPressure_);

// stating in the console whether mole or mass fractions are used
if(useMoles)
    std::cout << "problem uses mole-fractions" << std::endl;
else
    std::cout << "problem uses mass-fractions" << std::endl;

setWellElements_();
wellFlowComputation_ = false;

}

void setSimulationTime(Scalar currentTime)
{
    currentTime_ = currentTime;
}

void setInjectionAllowed(bool I_allowed)
{
    injectionAllowed_ = I_allowed;
}

bool injectionIsAllowed() const
{
    return injectionAllowed_;
}

void setProductionAllowed(bool P_allowed)
{
    productionAllowed_ = P_allowed;
}

bool productionIsAllowed() const
{
    return productionAllowed_;
}

/*!
 * \name Problem parameters
 */
// \{
void setWellElements_()
{
    const auto& gridGeometry = this->gridGeometry();
    for(const auto& element : elements(gridGeometry.gridView())){
        auto fvGeometry = localView(gridGeometry);
        fvGeometry.bind(element);
        for(const auto& scv : scvs(fvGeometry)){
            // if element contains vertice at well, add its index the vector wellElements
            if(isAtWell_(scv.dofPosition())){

```

```

        auto eIdx = gridGeometry.elementMapper().index(element);
        wellElements_.insert(eIdx);
    }
}
}

void setFlowComputation(bool fc)
{wellFlowComputation_ = fc;}

const std::set<int> getWellElements() const
{return wellElements_;}

const std::string& name() const
{ return name_; }

Scalar temperature() const
{ return temperature_; }

Scalar pressureUpperLimit() const
{ return pressureUpperLimit_; }

Scalar pressureLowerLimit() const
{ return pressureLowerLimit_; }

BoundaryTypes boundaryTypesAtPos(const GlobalPosition &globalPos) const
{
    BoundaryTypes bcTypes;
    // Scalar L = this->gridGeometry().bBoxMax()[0];

    // if (L - globalPos[0] <= eps_)
    // {
    //     bcTypes.setAllDirichlet();
    // }
    // else
    {
        bcTypes.setAllNeumann();
    }
    return bcTypes;
}

PrimaryVariables dirichletAtPos(const GlobalPosition &globalPos) const
{
    PrimaryVariables priVars;
    Scalar L = this->gridGeometry().bBoxMax()[0];
    Scalar rightP = getParam<Scalar>("Problem.rightP");

    if (L - globalPos[0] <= eps_)
    {
        priVars.setState(naplgPhaseOnly);
        priVars[pressureIdx] = rightP;
    }
    return priVars;
}

NumEqVector neumann(const Element& element,
    const FVElementGeometry& fvGeometry,
    const ElementVolumeVariables& elemVolVars,
    const ElementFluxVariablesCache& elemFluxVarsCache,
    const SubControlVolumeFace& scvf) const

```

```

{
  NumEqVector values(0.0);
  const auto& priVars_ = elemVolVars[scvf.insideScvIdx()].priVars();
  Scalar injectedPhaseMass = getParam<Scalar>("Problem.InjectionRate1");
  Scalar injectedPhaseMass2 = getParam<Scalar>("Problem.InjectionRate2");
  Scalar productionPhaseMass = getParam<Scalar>("Problem.ProductionRate1");
  Scalar TEnd = getParam<Scalar>("TimeLoop.TEnd");
  Scalar period = TEnd / 100;
  Scalar T_Inj_Colch = getParam<Scalar>("Problem.T_Inj_Colch");
  Scalar T_Fech_1 = getParam<Scalar>("Problem.T_Fech_1");
  Scalar T_Inj_1 = getParam<Scalar>("Problem.T_Inj_1");
  Scalar T_Inj_2 = getParam<Scalar>("Problem.T_Inj_2");
  Scalar T_Inj_3 = getParam<Scalar>("Problem.T_Inj_3");
  Scalar T_Inj_4 = getParam<Scalar>("Problem.T_Inj_4");
  Scalar T_Inj_5 = getParam<Scalar>("Problem.T_Inj_5");
  Scalar T_Prod_1 = getParam<Scalar>("Problem.T_Prod_1");
  Scalar T_Prod_2 = getParam<Scalar>("Problem.T_Prod_2");
  Scalar T_Prod_3 = getParam<Scalar>("Problem.T_Prod_3");
  Scalar T_Prod_4 = getParam<Scalar>("Problem.T_Prod_4");
  Scalar T_Prod_5 = getParam<Scalar>("Problem.T_Prod_5");
  int currentPeriod = static_cast<int>(currentTime_ / period);

  if(wellFlowComputation_)
  {
    return values;
  }
  const auto globalPos = scvf.ipGlobal();

  if (isAtWell_(globalPos))
  {
    // Inicializa com vazões zero
    values[contiH2EqIdx] = 0.0;
    values[contiOILEqIdx] = 0.0;

    // Define os períodos ativos
    bool isInjectionPeriod =
      (currentPeriod < T_Inj_Colch) ||
      (currentPeriod < T_Inj_1 && T_Fech_1 < currentPeriod) ||
      (currentPeriod < T_Inj_2 && T_Prod_1 < currentPeriod) ||
      (currentPeriod < T_Inj_3 && T_Prod_2 < currentPeriod) ||
      (currentPeriod < T_Inj_4 && T_Prod_3 < currentPeriod) ||
      (currentPeriod < T_Inj_5 && T_Prod_4 < currentPeriod);

    bool isProductionPeriod =
      (currentPeriod <= T_Prod_1 && T_Inj_1 < currentPeriod) ||
      (currentPeriod <= T_Prod_2 && T_Inj_2 < currentPeriod) ||
      (currentPeriod <= T_Prod_3 && T_Inj_3 < currentPeriod) ||
      (currentPeriod <= T_Prod_4 && T_Inj_4 < currentPeriod) ||
      (currentPeriod <= T_Prod_5 && T_Inj_5 < currentPeriod);

    // Lógica de injeção
    if (injectionAllowed_ && isInjectionPeriod)
    {
      values[contiH2EqIdx] = (currentPeriod < T_Inj_Colch)
        ? -injectedPhaseMass
        : -injectedPhaseMass2;
    }

    // Lógica de produção
    else if (productionAllowed_ && isProductionPeriod)

```

```

    {
        values[contiH2EqIdx] = priVars_[1] * productionPhaseMass;
        values[contiOILEqIdx] = (1 - priVars_[1]) * productionPhaseMass;
    }

    // Período de espera mantém vazões zero (já inicializado)
}
return values;
}

PrimaryVariables initialAtPos(const GlobalPosition &globalPos) const
{
    return initial_(globalPos);
}

bool isAtWell_(const GlobalPosition& globalPos) const
{
    return std::abs(globalPos[0]) <= eps_ && globalPos[1] > wellHeight_;
}

private:
    PrimaryVariables initial_(const GlobalPosition &globalPos) const
    {
        PrimaryVariables priVars(0.0);

        Scalar densityOIL = FluidSystem::HeavyOil::liquidDensity(temperature_,
getParam<Scalar>("Problem.P0"));
        Scalar P0 = getParam<Scalar>("Problem.P0") + densityOIL*this-
>spatialParams().gravity(globalPos)[1]*(globalPos[1]);
        priVars[pressureIdx] = P0;
        priVars[switchIdx] = getParam<Scalar>("Problem.S0");
        priVars.setState(naplgPhaseOnly);
        return priVars;
    }

    Scalar temperature_;
    Scalar depthBOR_;
    static constexpr Scalar eps_ = 1e-6;
    bool wellFlowComputation_;
    std::set<int> wellElements_;
    int nTemperature_;
    int nPressure_;
    Scalar pressureLow_, pressureHigh_;
    Scalar temperatureLow_, temperatureHigh_;
    Scalar currentTime_;
    std::string name_;
    bool injectionAllowed_ = true;
    bool productionAllowed_ = false;
    Scalar pressureUpperLimit_;
    Scalar pressureLowerLimit_;
    Scalar wellHeight_;
};

} // end namespace Dumux

#endif

```

ARQUIVO MAIN.CC

```
#include <config.h>

#include <ctime>
#include <iostream>
#include <fstream>

#include <dumux/common/quad.hh>

#include <dune/common/parallel/mpihelper.hh>
#include <dune/common/timer.hh>
#include <dune/grid/io/file/dgfparsers/dgfexception.hh>
#include <dune/grid/io/file/vtk.hh>
#include <dune/istl/io.hh>

#include <dumux/discretization/method.hh>
#include <dumux/discretization/cellcentered/mpfa/scvgradients.hh>

#include <dumux/common/properties.hh>
#include <dumux/common/parameters.hh>
#include <dumux/common/valgrind.hh>

#include "problem.hh"

#include <dumux/common/dumuxmessage.hh>
#include <dumux/nonlinear/newtonsolver.hh>
#include <dumux/linear/seqsolverbackend.hh>
#include <dumux/assembly/fvassembler.hh>

#include <dumux/io/vtkoutputmodule.hh>
#include <dumux/io/grid/gridmanager.hh>
#include <dumux/io/grid/gridmanager_alu.hh>
#include <dune/grid/io/file/gmshreader.hh>
#include <dune/grid/io/file/gmshwriter.hh>

#include <dumux/io/pointcloudvtkwriter.hh>
#include <vector>
#include <dumux/io/vtkoutputmodule.hh>
#include <dumux/io/velocityoutput.hh>

/// Function to write out the scv-wise velocities (overload for mpfa)
template<class GridGeometry, class GridVariables, class Sol,
         std::enable_if_t<GridGeometry::discMethod == Dumux::DiscretizationMethod::ccmpfa, int> = 0>
void writeMpfaVelocities(const GridGeometry& gridGeometry,
                        const GridVariables& gridVariables,
                        const Sol& x)
{
    using Scalar = typename GridVariables::Scalar;
    using GlobalPos = typename GridGeometry::SubControlVolume::GlobalPosition;

    const auto velocities = Dumux::CCmpfaScvGradients::computeVelocities(gridGeometry, gridVariables, x,
/*phaseIdx*/0);
    Dumux::PointCloudVtkWriter<Scalar, GlobalPos> writer(velocities.first);
    writer.addPointData(velocities.second, "velocity (m/s)");
}
```

```

    writer.write("mpfa_scv_velocities");
}

//! Function to write out the scv-wise velocities (overload for NOT mpfa)
template<class GridGeometry, class GridVariables, class Sol,
        std::enable_if_t<GridGeometry::discMethod != Dumux::DiscretizationMethod::ccmpfa, int> = 0>
void writeMpfaVelocities(const GridGeometry& gridGeometry,
                        const GridVariables& gridVariables,
                        const Sol& x)
{}

template<class Scalar, class GridVariables, class Problem, class GridGeometry, class SolutionVector>
void nodalDensityStorage(const GridGeometry& gridGeometry,
                        const GridVariables& gridVariables,
                        const Problem& problem,
                        const SolutionVector& xf,
                        std::vector<Scalar>& nodalDensities)
{
    // reset nodalDensities vector
    for(auto& dens : nodalDensities)
        dens = 0.0;

    //create vector to store the sum of the volumes of the scvs around each node
    //(to be used in average computation)
    auto numNodes = gridGeometry.numDofs();
    std::vector<Scalar> volumes;
    volumes.resize(numNodes);

    auto gridView = gridGeometry.gridView();

    // loop over all elements
    for (const auto& element : elements(gridView))
    {
        // get geometry of the element
        auto fvGeometry = localView(gridGeometry);
        // get element volume variables, which stores variables such as density, porosity, viscosity... (see class in
documentation)
        auto&& elemVolVars = localView(gridVariables.curGridVolVars());
        fvGeometry.bind(element);

        // bind element volume variables to the geometry and the solution vector
        // so it will interpolate the solution xf inside the element
        elemVolVars.bind(element, fvGeometry, xf);

        //loop on the subcontrol-volumes inside the element
        for (const auto& scv : scvs(fvGeometry))
        {
            // get the node associated to the scv
            auto node = scv.dofIndex();

            //compute density at scv
            const auto scvDensity = elemVolVars[scv].density(/*phase index*/1);

            //compute scv volume
            const auto scvVolume = scv.volume();

            volumes[node] += scvVolume;

            nodalDensities[node] += scvVolume*scvDensity;
        }
    }
}

```

```

    }

    for (unsigned int i = 0; i < numNodes; i++)
    {
        nodalDensities[i] /= volumes[i];
    }
}

template<class NumEqVector, class LocalAssembler, class AssemblerType, class GridGeometry, class Problem,
class SolutionVector>
NumEqVector totalFlowAtWell(std::shared_ptr<AssemblerType> assembler,
                             const GridGeometry& gridGeometry,
                             Problem& problem,
                             const SolutionVector& xf)
{
    problem.setFlowComputation(true);
    NumEqVector flow(0.0);

    SolutionVector res(gridGeometry.numDofs());
    auto& gridVars = assembler->gridVariables();
    gridVars.update(xf);

    const auto wellElements = problem.getWellElements();

    for(auto& eIdx : wellElements)
    {
        const auto& element = gridGeometry.element(eIdx);
        LocalAssembler localAssembler(*assembler, element, xf);
        localAssembler.assembleResidual(res);
    }

    for(const auto& vertex : vertices(gridGeometry.gridView()))
    {
        auto vIdx = gridGeometry.gridView().indexSet().index(vertex);
        const auto coord = vertex.geometry().center();
        if(problem.isAtWell_(coord))
        {
            flow += res[vIdx];
        }
    }

    problem.setFlowComputation(false);
    return flow;
}

template<class GridGeometry, class GridVariables, class Problem, class SolutionVector>
typename GridVariables::Scalar averagePressureAtWell(const GridGeometry& gridGeometry,
                                                     const GridVariables& gridVariables,
                                                     const Problem& problem,
                                                     const SolutionVector& xf,
                                                     int phaseIdx = 1)
{
    using Scalar = typename GridVariables::Scalar;

    auto fvGeometry = localView(gridGeometry);
    auto elemVolVars = localView(gridVariables.curGridVolVars());

    const auto wellElements = problem.getWellElements();

```

```

Scalar pressureSum = 0.0;
int count = 0;

for (auto eIdx : wellElements)
{
    const auto& element = gridGeometry.element(eIdx);
    fvGeometry.bind(element);
    elemVolVars.bind(element, fvGeometry, xf);

    for (const auto& scv : scvs(fvGeometry))
    {
        pressureSum += elemVolVars[scv].pressure(phaseIdx);
        ++count;
    }
}

return count > 0 ? pressureSum / count : 0.0;
}

int main(int argc, char** argv) try
{
    using namespace Dumux;

    // define the type tag for this problem
    using TypeTag = Properties::TTag::TYPETAG;
    using NumEqVector = GetPropType<TypeTag, Properties::NumEqVector>;
    ///////////////////////////////////////////////////////////////////
    ///////////////////////////////////////////////////////////////////

    // initialize MPI, finalize is done automatically on exit
    const auto& mpiHelper = Dune::MPIHelper::instance(argc, argv);

    // print dumux start message
    if (mpiHelper.rank() == 0)
        DumuxMessage::print(/*firstCall=*/true);

    // initialize parameter tree
    Parameters::init(argc, argv);

    ///////////////////////////////////////////////////////////////////
    // try to create a grid (from the given grid file or the input file)
    ///////////////////////////////////////////////////////////////////

    GridManager<GetPropType<TypeTag, Properties::Grid>> gridManager;
    gridManager.init("inclinada10g.msh");

    ///////////////////////////////////////////////////////////////////
    // run instationary non-linear problem on this grid
    ///////////////////////////////////////////////////////////////////

    // we compute on the leaf grid view
    const auto& leafGridView = gridManager.grid().leafGridView();

    // create the finite volume grid geometry
    using GridGeometry = GetPropType<TypeTag, Properties::GridGeometry>;
    auto gridGeometry = std::make_shared<GridGeometry>(leafGridView);
    gridGeometry->update();

    // the problem (initial and boundary conditions)
    using Problem = GetPropType<TypeTag, Properties::Problem>;

```

```

auto problem = std::make_shared<Problem>(gridGeometry);

// the solution vector
using SolutionVector = GetPropType<TypeTag, Properties::SolutionVector>;
SolutionVector x(gridGeometry->numDofs());
problem->applyInitialSolution(x);
auto xOld = x;

// the grid variables
using GridVariables = GetPropType<TypeTag, Properties::GridVariables>;
auto gridVariables = std::make_shared<GridVariables>(problem, gridGeometry);
gridVariables->init(x);

// get some time loop parameters
using Scalar = GetPropType<TypeTag, Properties::Scalar>;
auto tEnd = getParam<Scalar>("TimeLoop.TEnd");
auto dt = getParam<Scalar>("TimeLoop.DtInitial");
auto maxDt = getParam<Scalar>("TimeLoop.MaxTimeStepSize");

// initialize the vtk output module
VtkOutputModule<GridVariables, SolutionVector> vtkWriter(*gridVariables, x, problem->name());
using VelocityOutputType = GetPropType<TypeTag, Properties::VelocityOutput>;
vtkWriter.addVelocityOutput(std::make_shared<VelocityOutputType>(*gridVariables));
using IOFields = GetPropType<TypeTag, Properties::IOFields>;
IOFields::initOutputModule(vtkWriter); // Add model specific output fields
vtkWriter.addVolumeVariable([](const auto& volVars)
{return volVars.viscosity(0);}, "Viscosidade do líquido [Pa·s]");
vtkWriter.addVolumeVariable([](const auto& volVars)
{return volVars.viscosity(1);}, "Viscosidade do gás [Pa·s]");
vtkWriter.addVolumeVariable([](const auto& volVars)
{return volVars.density(0);}, "Densidade do líquido [kg/m³]");
vtkWriter.addVolumeVariable([](const auto& volVars)
{return volVars.density(1);}, "Densidade do gás [kg/m³]");
vtkWriter.write(0.0);

// instantiate time loop
auto timeLoop = std::make_shared<CheckPointTimeLoop<Scalar>>(0.0, dt, tEnd);
timeLoop->setMaxTimeStepSize(maxDt);

// the assembler with time loop for instationary problem
using Assembler = FVAssembler<TypeTag, DiffMethod::numeric>;
using LocalAssembler = Dumux::BoxLocalAssembler<TypeTag, Assembler, DiffMethod::numeric, true>;
auto assembler = std::make_shared<Assembler>(problem, gridGeometry, gridVariables, timeLoop, xOld);

// the linear solver
using LinearSolver = ILU0BiCGSTABBackend;
auto linearSolver = std::make_shared<LinearSolver>();

// the non-linear solver
using NewtonSolver = Dumux::NewtonSolver<Assembler, LinearSolver>;
NewtonSolver nonLinearSolver(assembler, linearSolver);

// set some check points for the time loop
timeLoop->setPeriodicCheckPoint(tEnd/75);

// Declaração do vetor para armazenar as densidades nodais
std::vector<Scalar> nodalDensities(gridGeometry->numDofs(), 0.0);

// Declaração do vetor para armazenar o fluxo
NumEqVector cumulativeMasses(0.0);

```

```

// Abrir arquivo para escrita dos fluxos
std::ofstream fluxOutput("fluxos.csv");
if (!fluxOutput.is_open())
{
    std::cerr << "Erro ao abrir o arquivo de saída para fluxos." << std::endl;
    return 1;
}
// Define precisão e notação científica para saída numérica
fluxOutput << std::scientific;

// Escreve cabeçalho em formato CSV
fluxOutput << "Tempo (s),Fluxo_oil (kg/s),Fluxo_H2 (kg/s),Pressao media (Pa)" << std::endl;

// time loop
timeLoop->start(); do
{
    // Obtém o tempo atual da simulação
    Scalar currentTime = timeLoop->time();

    // Atualiza o tempo de simulação no problema
    problem->setSimulationTime(currentTime);

    Scalar avgPressure = averagePressureAtWell(*gridGeometry, *gridVariables, *problem, x, 1);
    std::cout << "Average pressure at well: " << avgPressure << " Pa" << std::endl;

    // Limite superior de pressão
    Scalar pressureUpperLimit_ = problem->pressureUpperLimit();
    if (avgPressure > pressureUpperLimit_ && problem->injectionIsAllowed())
    {
        problem->setInjectionAllowed(false); // para a injeção
        std::cout << "Injeção DESABILITADA (pressão acima do limite)" << std::endl;
    }
    else if (avgPressure <= pressureUpperLimit_ && !problem->injectionIsAllowed())
    {
        problem->setInjectionAllowed(true); // reinicia a injeção
        std::cout << "Injeção HABILITADA" << std::endl;
    }

    // Limite inferior de pressão
    Scalar pressureLowerLimit_ = problem->pressureLowerLimit();
    if (avgPressure < pressureLowerLimit_ && problem->productionIsAllowed())
    {
        problem->setProductionAllowed(false); // para a produção
        std::cout << "Produção DESABILITADA (pressão abaixo do limite)" << std::endl;
    }
    else if (avgPressure >= pressureLowerLimit_ && !problem->productionIsAllowed())
    {
        problem->setProductionAllowed(true); // reinicia a produção
        std::cout << "Produção HABILITADA" << std::endl;
    }

    // Print the current time (opcional)
    std::cout << "Current simulation time: " << currentTime << std::endl;

    // linearize & solve
    nonLinearSolver.solve(x, *timeLoop);

    auto flow = totalFlowAtWell<NumEqVector,LocalAssembler>(assembler, *gridGeometry,*problem,x);
    cumulativeMasses += flow*timeLoop->timeStepSize();
}

```

```

// make the new solution the old solution
xOld = x;
gridVariables->advanceTimeStep();

// advance to the time loop to the next step
timeLoop->advanceTimeStep();

// Escreve tempo atual e fluxo dos dois componentes no arquivo
fluxOutput << currentTime << ", " << flow[0] << ", " << flow[1] << ", " << avgPressure << std::endl;

// Atualiza os valores de densidade nodal a cada passo de tempo
nodalDensityStorage(*gridGeometry, *gridVariables, *problem, x, nodalDensities);

// Adiciona os valores de densidade ao arquivo de saída VTK
vtkWriter.addField(nodalDensities, "Nodal Density");

// write vtk output
if (timeLoop->isCheckPoint())
    vtkWriter.write(timeLoop->time());

// report statistics of this time step
timeLoop->reportTimeStep();

// set new dt as suggested by the newton solver
timeLoop->setTimeStepSize(nonLinearSolver.suggestTimeStepSize(timeLoop->timeStepSize()));
}

while (!timeLoop->finished());
timeLoop->finalize(leafGridView.comm());

////////////////////////////////////
// finalize, print dumux message to say goodbye
////////////////////////////////////

// print dumux end message
if (mpiHelper.rank() == 0)
    DumuxMessage::print(/*firstCall=*/false);

fluxOutput.close();

return 0;
}

catch (Dumux::ParameterException &e)
{
    std::cerr << std::endl << e << " ---> Abort!" << std::endl;
    return 1;
}

catch (Dune::DGFException & e)
{
    std::cerr << "DGF exception thrown (" << e <<
        "). Most likely, the DGF file name is wrong "
        "or the DGF file is corrupted, "
        "e.g. missing hash at end of file or wrong number (dimensions) of entries."
        << " ---> Abort!" << std::endl;
    return 2;
}

```

```

catch (Dune::Exception &e)
{
    std::cerr << "Dune reported error: " << e << " ---> Abort!" << std::endl;
    return 3;
}

```

```

catch (...)
{
    std::cerr << "Unknown exception thrown! ---> Abort!" << std::endl;
    return 4;
}

```

ARQUIVO *SPATIALPARAMS.HH*

```

#ifndef DUMUX_INJECTION_SPATIALPARAMS_HH
#define DUMUX_INJECTION_SPATIALPARAMS_HH

#include <dumux/common/parameters.hh> // necessário para usar getParamFromGroup
#include <dumux/common/properties.hh>
#include "problem.hh"
#include <dumux/material/spatialparams/fv.hh>
// #include <dumux/material/fluidmatrixinteractions/2p/regularizedbrooksorey_ajustado.hh>
#include <dumux/material/fluidmatrixinteractions/2p/regularizedbrooksorey.hh>
#include <dumux/material/fluidmatrixinteractions/2p/efftoabslaw.hh>

namespace Dumux {

template<class GridGeometry, class Scalar>
class InjectionSpatialParams
: public FVSpatialParams<GridGeometry, Scalar, InjectionSpatialParams<GridGeometry, Scalar>>
{
    using GridView = typename GridGeometry::GridView;
    using FVElementGeometry = typename GridGeometry::LocalView;
    using SubControlVolume = typename FVElementGeometry::SubControlVolume;
    using Element = typename GridView::template Codim<0>::Entity;
    using ParentType = FVSpatialParams<GridGeometry, Scalar, InjectionSpatialParams<GridGeometry,
Scalar>>;

    static constexpr int dimWorld = GridView::dimensionworld;

    using EffectiveLaw = RegularizedBrooksCorey<Scalar>;
    using GlobalPosition = typename Element::Geometry::GlobalCoordinate;

public:
    using PermeabilityType = Scalar;
    using MaterialLaw = EffToAbsLaw<EffectiveLaw>;
    using MaterialLawParams = typename MaterialLaw::Params;

    InjectionSpatialParams(std::shared_ptr<const GridGeometry> gridGeometry)
    : ParentType(gridGeometry)
    {
        fineK_ = getParam<double>("Problem.fineK");
        finePorosity_ = getParam<double>("Problem.fineP");

        const auto pep = getParam<double>("BeC.Pep");
        const auto swrp = getParam<double>("BeC.Swrp");
    }
}

```

```

const auto snrp = getParam<double>("BeC.Snrp");

const auto lambda = getParam<double>("BeC.Lambda");

productionParams_.setSwr(swrp);
productionParams_.setSnr(snrp);
productionParams_.setPe(pep);
productionParams_.setLambda(lambda);
}

PermeabilityType permeabilityAtPos(const GlobalPosition& globalPos) const
{
    return fineK_;
}

template<class ElementSolution>
Scalar porosity(const Element& element,
                const SubControlVolume& scv,
                const ElementSolution& elemSol) const
{
    return finePorosity_;
}

const MaterialLawParams& materialLawParamsAtPos(const GlobalPosition& globalPos) const
{
    return productionParams_;
}

template<class FluidSystem>
int wettingPhaseAtPos(const GlobalPosition& globalPos) const
{
    return FluidSystem::NAPLIdx;
}

private:
bool isAtRightBoundary_(const GlobalPosition &globalPos) const
{
    Scalar L = this->gridGeometry().bBoxMax()[0];
    return std::abs(globalPos[0] - L) <= eps_;
}

Scalar fineK_;
Scalar finePorosity_;
static constexpr Scalar eps_ = 1e-6;
Scalar currentTime_;
MaterialLawParams injectionParams_;
MaterialLawParams productionParams_;
bool injectionActive_ = true;
};

}

#endif

```

ARQUIVO *PARAMS.INPUT*

[TimeLoop]

DtInitial = 864000 # [s] (10 dias)
TEnd = 194400000 # [s] (2250 dias / 75 meses)
MaxTimeStepSize = 864000 # [s] (10 dias)

[Grid]

File = unstructured10g.msh

[Problem]

Name = 2.1.1.5-RO-C-6000 # [-] the name of the output files
DepthBOR = 6000 # [m] depth below ground surface
InitialTemperature = 323.15 # [K] 50°C initial temperature in the reservoir
NTemperature = 3 # [-] number of temperature table entries
NPressure = 50 # [-] number of pressure table entries
PressureLow = 1e5 # [Pa] lower pressure limit for tabularization
PressureHigh = 1e8 # [Pa] upper pressure limit for tabularization
TemperatureLow = 298.15 # [K] lower temperature limit for tabularization
TemperatureHigh = 353.15 # [K] upper temperature limit for tabularization

InjectionRate1 = 5e-3 # [kg/s] vazão de injeção colchão
InjectionRate2 = 5e-3 # [kg/s] vazão de injeção
ProductionRate1 = 5e-3 # [kg/s] vazão de produção

rightP = 6e7 # [Pa] Pressão na direita
P0 = 6e7 # [Pa] Pressão inicial
S0 = 0.0001
PressureUpperLimit = 7.2e7 # [Pa] Pressão máxima no poço
PressureLowerLimit = 5.7e7 # [Pa] Pressão mínima no poço
WellHeight = 367 # [m] altura da base do poço

T_Inj_Colch = 16.00 # [00.00% - 16.00%] 12 meses
T_Fech_1 = 20.00 # [16.00% - 20.00%] 3 meses
T_Inj_1 = 28.00 # [20.00% - 28.00%] 6 meses
T_Prod_1 = 36.00 # [28.00% - 36.00%] 6 meses
T_Inj_2 = 44.00 # [36.00% - 44.00%] 6 meses
T_Prod_2 = 52.00 # [44.00% - 52.00%] 6 meses
T_Inj_3 = 60.00 # [52.00% - 60.00%] 6 meses
T_Prod_3 = 68.00 # [60.00% - 68.00%] 6 meses
T_Inj_4 = 76.00 # [68.00% - 76.00%] 6 meses
T_Prod_4 = 84.00 # [76.00% - 84.00%] 6 meses
T_Inj_5 = 92.00 # [84.00% - 92.00%] 6 meses
T_Prod_5 = 100.00 # [92.00% - 100.00%] 6 meses

fineP = 0.16 # [%] Porosidade
fineK = 3e-14 # [m²] Permeabilidade absoluta

[BeC]

Swrp = 0.37 #
Snrp = 0.27 #
Pep = 3300 # [Pa]
Lambda = 1.6 #

[LoadSolution]

PriVarNamesState1 = p_liq x^N2_liq
PriVarNamesState2 = p_liq x^Oil_gas
PriVarNamesState3 = p_liq S_gas