

Lead institution: Instituto de Física da Universidade de São Paulo	
Supervisor name: Caetano Rodrigues Miranda	Department: Departamento de Física de Materiais e Mecânica DMFT
Recipient: https://www.rcgi.poli.usp.br/opportunities/ Ref: 23PDR240 – Post-Doctoral Deadline for submission: April 30th, 2024	Type: Post-Doctoral Period: (hours/week) 40hs/week Number of months: 24 Intended beginning date: May/June, 2024
Project title: (Portuguese and English) Computational Fluid Dynamics of geological carbon storage at the Rio Bonito Formation. Dinâmica de Fluidos Computacional no armazenamento geológico de carbono na formação Rio Bonito.	
Research theme area: (Portuguese and English) Ciência dos Materiais, Dinâmica de Fluidos, Engenharia, Física, Química, Energia e áreas afins. Materials Science, Fluid Dynamics, Engineering, Physics, Chemistry, Energy, and related areas.	
Abstract (Portuguese and English) O pesquisador irá trabalhar com um time multidisciplinar em projetos relacionados ao armazenamento geológico de carbono. O objetivo principal é analisar o impacto do acoplamento das simulações de escalas de poro com a de reservatório e avaliar o potencial do uso dessa abordagem multiescala na redução das incertezas nas previsões da efetividade do trapeamento e migração da pluma de CO ₂ no reservatório, contribuindo para melhorar as avaliações de injetividade e segurança do armazenamento geológico de carbono. Adicionalmente a abordagem proposta será aplicada para identificar estratégias para maximizar a mineralização de CO ₂ em conciliação com a maximização de CO ₂ cumulativo injetado, considerando o contexto geológico dos arenitos da formação do Rio Bonito, localizada na bacia do Paraná. O candidato irá colaborar com os pesquisadores do projeto 58 - Avaliação do Potencial de aplicação de BECCS na bacia sedimentar do Paraná, Brasil do FAPESP-Shell Centro de Pesquisa	



para a Inovação de Gás da POLI-USP na Universidade de São Paulo. Resumo do programa e os projetos podem ser encontrados no site da RCGI (<http://www.rcgi.poli.usp.br/>).

The researcher will work with a multidisciplinary team on projects related to geological carbon storage. The aim is to analyze the impact of coupling pore-scale molecular simulation results to reservoir scale simulations, and to evaluate the potential of this multi-scale approach to reduce uncertainties in predictions on mineral trapping effectiveness and CO₂ plume migration, contributing to improving injectivity and safety assessments of geological carbon storage. Additionally, the proposed approach will be applied to identify strategies to maximize the CO₂ mineralization in conciliation with the maximization of cumulative injected CO₂, considering the geological context of Rio Bonito Formation sandstones located in the Paraná basin.

The candidate will collaborate with researchers from project 58 - Applied Assessment for the potential of BECCS in the Paraná sedimentary basin in Brazil of the FAPESP-Shell Research Centre for Gas Innovation of POLI-USP at the University of São Paulo. A summary of the program and projects can be found on the RCGI website (<http://www.rcgi.poli.usp.br/>).

Description (Portuguese and English)

As atividades de pós-doutorado são projetadas para três anos (sendo parte de um projeto temático de cinco anos) e seguirão uma lista de tarefas (relatórios científicos e redação de artigos serão realizados concomitantemente):

1. Revisão da literatura;
2. Recolha de dados e desenvolvimento de modelos: Recolher dados geológicos relevantes, incluindo as características do reservatório, como a permeabilidade, a porosidade e as propriedades das rochas. Obter informações sobre as propriedades do fluido, como a densidade e a viscosidade do CO₂. Adquirir condições de fronteira, condições iniciais e quaisquer dados de campo disponíveis para efeitos de validação. Desenvolver um modelo computacional que represente a formação geológica do subsolo e os processos de fluxo de fluido;
3. Simulação e análise numérica: Executar a simulação CFD utilizando o modelo e a configuração definidos. Resolver numericamente as equações determinantes para simular o fluxo de fluido, a



migração de CO₂ e outros fenômenos relevantes na formação geológica. Monitorizar e registar as principais variáveis de interesse ao longo da simulação. Analisar os resultados da simulação para obter informações sobre o comportamento do CO₂ no reservatório. Avaliar factores como padrões de migração de CO₂, eficiência de aprisionamento capilar ou potenciais vias de fuga.

4. Validação das simulações de CFD, considerando benchmarks da literatura e os testes laboratoriais realizados por outros pesquisadores do RCGI;

5. Análise de sensibilidade e incerteza: Efetuar uma análise de sensibilidade para identificar os parâmetros ou entradas que influenciam significativamente os resultados da simulação. Avaliar a incerteza associada aos dados do modelo e avaliar o seu impacto nos resultados. Considerar cenários alternativos e efetuar simulações adicionais para ter em conta a incerteza;

6. Avaliação das propriedades de escala de poros para conectar com as simulações de escala de reservatório.

The postdoctoral activities are projected for two years, and will follow a list of tasks (scientific reports and paper writing will be performed concomitantly):

1. Literature review;

2. Data Collection and Model Development: Gather relevant geological data, including reservoir characteristics, such as permeability, porosity, and rock properties. Obtain information on the fluid properties, such as CO₂ density and viscosity. Acquire boundary conditions, initial conditions, and any available field data for validation purposes. Develop a computational model that represents the subsurface geological formation and fluid flow processes;

3. Numerical Simulation and Analysis: Run the CFD simulation using the defined model and setup. Solve the governing equations numerically to simulate the fluid flow, CO₂ migration, and other relevant phenomena within the geological formation. Monitor and record the key variables of interest throughout the simulation.

Analyze the simulation results to gain insights into the behavior of CO₂ within the reservoir. Evaluate factors such as CO₂ migration patterns, capillary trapping efficiency, or potential leakage pathways;



4. Validation of CFD simulations, considering literature's benchmarks laboratorial tests performed by other researchers at the RCGI;

5. Sensitivity and Uncertainty Analysis: Perform sensitivity analysis to identify the parameters or inputs that significantly influence the simulation results. Assess the uncertainty associated with the model inputs and evaluate its impact on the outcomes. Consider alternative scenarios and perform additional simulations to account for uncertainty;

6. Assessment of pore-scale properties for feeding reservoir-scale simulations.

Requirements to fill the position. (Ex: specific experience, minimum or maximum years after concluding the course) (Portuguese and English)

Este projeto é adequado para um candidato altamente motivado que possua:

- Sólida experiência em Dinâmica de Fluidos Computacional (CFD), Modelação Numérica e Analítica, Otimização e Processamento de Materiais;
- Excelentes capacidades de comunicação e capacidade de trabalhar em colaboração;
- O candidato deve ser doutor em Engenharia, Física, Química, Matemática, ou Computação.
- O candidato deve ter obtido o grau de doutor há menos de sete anos, prioridade para candidato que tenha recém-concluído o Doutorado, dentro do prazo normal de sua duração, com excelente histórico escolar na pós-graduação.

A experiência nos seguintes temas será considerada um extra:

- Expertise em reações geoquímicas.
- Alguma experiência em trabalho experimental, uma vez que a validação será efetuada utilizando ferramentas experimentais.
- Conhecimentos básicos ou experiência em um ou mais dos seguintes códigos/métodos: OpenFOAM, OpenMDAO, interFOAM, waves2Foam, COMSOL, TOUGH, TOUGHREACT, OpenGeoSys, ANSYS Fluent.



This project is suitable for a highly motivated candidate with:

- Strong background in Computational Fluid Dynamics (CFD), Numerical and Analytical Modeling, Optimization, and Material Processing.
- Excellent communication skills, and the ability to work collaboratively;
- The candidate must have a Ph.D. in Engineering, Physics, Chemistry, Mathematics, or Computing.
- The candidate must have obtained a doctorate degree less than seven years ago, a priority for candidates who have just completed the Doctorate, within the regular duration, with an excellent academic record in postgraduate studies.

Experience in this subject will be considered a plus:

- Strong background in geochemical reactions.
- Some experience with experimental work since validation will be done using experimental tools.

Basic knowledge or experience in one or more of the following codes/methods: OpenFOAM, OpenMDAO, interFOAM, waves2Foam, COMSOL, TOUGH, TOUGHREACT, OpenGeoSys, ANSYS Fluent.

Funding Notes: This Postdoc is funded by FAPESP. The fellowship will cover a standard maintenance stipend of R\$ 9.047,40 per month.

Work place: IF USP - Rua do Matão, 1371, Butantã, São Paulo - SP

Documents/Information to be Sent:

Ref: 23PDR240

1) Fill-in the application form:

<https://docs.google.com/forms/d/e/1FAIpQLSfv4KkheEQeMJKiDnkVkoQqDm5pvKU28bFJR5uNhYpJgU0Dhw/viewform>

Deadline: April 30th, 2024

In case you have any question, please write to rcgi.opportunities@usp.br