

### 3 Modelos matemáticos e formulação numérica

Os modelos matemáticos para fluxos em meios porosos fraturados que transformam os modelos conceituais em equações seguem basicamente a equação de Richards que se baseia na lei de Darcy e na equação de continuidade. A formulação numérica usada para resolver estas equações diferenciais de fluxo será solucionada pelo método dos elementos finitos.

Neste capítulo se aborda brevemente as equações diferenciais governantes dos fluxos em meios porosos fraturados e o enfoque para sua solução numérica.

#### 3.1. Equações governantes

As equações que descrevem o fluxo em meios porosos fraturados com saturação variável requerem que as equações cumpram certas condições tanto para a matriz porosa quanto para as fraturas. Therrien & Sudicky (1996) indicam as seguintes suposições a serem consideradas na modelagem: a) o fluido é incompressível, b) o meio poroso fraturado não é deformável e c) o sistema está em condições isotérmicas. A seguir, brevemente indicam-se as equações que vêm sendo usadas para estas análises de fluxo em meios porosos fraturados.

A equação que descreve o fluxo para um modelo contínuo equivalente de um meio não saturado é uma forma modificada da equação de Richards, Cooley (1983) e Huyakorn et al. (1984).

$$\frac{\partial}{\partial x_i} \left( k_{ij} k_{rw} \frac{\partial(\psi + z)}{\partial x_j} \right) \pm Q = \frac{\partial(\theta_s S_w)}{\partial t} \quad i, j = 1, 2, 3 \quad (3.1)$$

Na equação (3.1),  $k_{ij}$  é o tensor de condutividade hidráulica,  $k_{rw} = k_{rw}(S_w)$  é a permeabilidade relativa do meio com relação ao grau de saturação de água  $S_w$ ,

$\psi = \psi(x_i, t)$  é a carga de pressão,  $z$  é a carga de elevação, e  $\theta_s$  é teor de umidade volumétrica de saturação ou porosidade,  $Q$  pode ser uma fonte ou um sumidouro.

O grau de saturação pode ser obtido da equação (3.2).

$$S_w = \frac{\theta}{\theta_s} \quad (3.2)$$

sendo  $\theta$  a umidade volumétrica.

A equação (3.1) é altamente não linear e pode ser resolvida em termos  $\psi$  e  $S_w$ , sendo  $S_w = S_w(\psi)$ , na qual esta relação geralmente é obtida experimentalmente. A permeabilidade relativa pode ser expressa em termos de carga total ou grau de saturação.

As relações usadas para fluxo não saturado seguem as relações apresentadas por Van Genuchten (1980) que baseou seu trabalho no de Mualem (1976 apud Therrien & Sudicky, 1996), na qual a relação saturação – pressão é expressa na equação (3.3):

$$S_e = \left[ \frac{1}{1 + (\alpha P_c)^n} \right]^m, \quad m = 1 - \frac{1}{n}; \quad 0 < m < 1 \quad (3.3)$$

E a permeabilidade relativa é expressa na equação (3.4).

$$K_{rw} = S_e^{1/2} \left[ 1 - (1 - S_e^{1/m})^m \right]^2 \quad (3.4)$$

Nestas expressões,  $S_e$  representa o grau de saturação,  $\alpha$  e  $m$  são parâmetros obtidos de ajustar as equações (3.3) e (3.4) com resultados experimentais,  $P_c = -\psi$  é a pressão de capilaridade e  $S_e$  pode ser obtida da equação(3.5):

$$S_e = \frac{(S_w - S_{wr})}{1 - S_{wr}} = \frac{\theta - \theta_r}{\theta_s - \theta_r} \quad (3.5)$$

onde,  $S_{wr}$  é a saturação residual,  $\theta_r$  é o teor umidade volumétrica residual e  $\theta_s$  é o teor umidade volumétrica de saturação.

Para maiores detalhes desta parte, revisar Van Genuchten (1980), Bear et al. (1993), Therrien & Sudicky (1996), Šimůnek et al. (2003) e Telles (2006).

Zhou et al.(2003) indicam que para a zona não saturada do meio poroso fraturado, o modelo de redes de fraturas discretas precisa da capacidade de simular o fluxo na matriz, assim como nas fraturas. Cada fratura deverá ter assinado uma curva de condutividade hidráulica e uma curva de retenção. Estas curvas características serão obtidas a partir das formulações de Van Genuchten (1980) para pressões capilares e permeabilidade relativa.

Therrien & Sudicky (1996) indicam que as fraturas são idealizadas como um modelo de placas paralelas em duas dimensões, isto implica que, a carga total seja uniforme através da fratura. Berkowitz et al. (1988), Sudicky e McLaren (1992) indicam que a equação que descreve o fluxo não saturado para um modelo de fraturas discretas de uma abertura uniforme  $2b$  pode ser conseguida a partir da equação de fluxo não saturado de uma fratura. Esta equação é descrita a seguir:

$$\frac{\partial}{\partial x_i} (2b) \left( k_f k_{r_{wf}} \frac{\partial (\psi_f + z_f)}{\partial x_j} \right) - q_{I^-}^n + q_{I^+}^n \pm Q_f = (2b) \frac{\partial S_{wf}}{\partial t} \quad (3.6)$$

$i, j = 1, 2$

Na equação (3.6),  $2b$  é a abertura da fratura,  $k_{r_{wf}}$  é a permeabilidade relativa da fratura,  $\psi_f = \psi_f(t)$  e  $z_f$  são as cargas de pressões e de elevação, para a fratura respectivamente,  $S_{wf}$  é o grau de saturação da fratura, e  $Q_f$  indicaria uma fonte ou um sumidouro.

De acordo com Bear (1972) a condutividade hidráulica saturada da fratura  $k_f$  e dada por:

$$k_f = \frac{\rho g (2b)^2}{12\mu} \quad (3.7)$$

Na equação (3.7),  $\rho$  e  $\mu$  são a densidade do fluido e viscosidade, respectivamente, e  $g$  é a aceleração da gravidade.

As equações (3.1) e (3.6) estão relacionadas através da transferência de fluxo  $-q_{I^-}^n$  e  $q_{I^+}^n$  que são os termos de transferência nas superfícies  $I^-$  e  $I^+$  da fratura com o meio poroso ou meio contínuo equivalente.

Para maiores detalhes desta parte, revisar Bear et al. (1993), Therrien & Sudicky (1996), Šimůnek et al. (2003), Zhang e Fredlund (2003) e Liu et al. (2003).

### **3.2. Método numérico de solução**

As equações governantes estabelecidas anteriormente necessitam ser resolvidas para validar as hipóteses do modelo assumido do comportamento de fluxo no meio poroso fraturado, de acordo a condições iniciais e de contorno particulares. As soluções das equações parciais podem ser obtidas de forma analítica ou usando métodos numéricos.

De forma analítica podem obter-se soluções exatas, mas precisaria que os parâmetros e contornos sejam quase ideais. A vantagem de uma solução analítica é que oferece uma solução que resulta ser relativamente simples de se obter. Existem soluções analíticas para a equação de fluxo, a maioria destas relacionadas a resolver a questão hidráulica de poços que mostram uma simetria radial simplificando a solução.

Para os casos no qual o método analítico de resolução não proporciona uma adequada adaptação física do problema, um caminho alternativo é a aproximação numérica. Isto se consegue fazendo que as variáveis contínuas sejam substituídas por variáveis discretas que são definidas nas células ou nós da malha, desta forma, a equação diferencial que estava definida em todo o domínio do problema é substituída por um número de equações algébricas finitas que poderão ser resolvidas utilizando técnicas matriciais. Telles (2006) aponta que neste tipo de solução se pode considerar qualquer tipo de variação no espaço e no tempo dos parâmetros dentro do domínio do problema.

Konikow & Mercer (1988) indicam que existem essencialmente duas categorias de métodos numéricos aceitas para resolver estas equações de fluxo, o método de diferenças finito (MDF) e o método dos elementos finitos (MEF). Estas por sua vez têm alternativas e diferentes tratamentos quando implementadas. Ambas as abordagens requerem que o domínio seja subdividido por uma grelha (malha) para um número de subdomínios pequenos (células ou elementos) que estão associadas com os pontos nodais (sejam nos centros ou

periferias das subáreas). Um estudo mais detalhado sobre este assunto pode ser encontrado em Remson et al. (1971), Mercer & Faust (1981) e Wang & Anderson (1982).

Estes métodos numéricos apresentam vantagem e limitações, de acordo com a utilidade e problema físico a abordar. No caso das diferenças finitas, sua matemática é mais simples e relativamente mais fácil de implementar computacionalmente, por apresentarem malhas retangulares regulares, facilitando, desta forma, o ingresso dos dados. Nos métodos dos elementos finitos a matemática relacionada à solução de problemas é mais complexa, o ingresso de dados é mais caprichoso, desde que este método permite a elaboração de malha de formas mais irregulares. Porém, na maioria dos casos os resultados são mais precisos em comparação ao método das diferenças finitas.

No método dos elementos finitos as malhas podem contornar geometrias complexas e mais reais, com adaptabilidade e flexibilidade aceitável, permitindo refinar a malha em zonas que requer maior precisão dos resultados. Em contraparte, o método de diferenças finitas não permite que a malha se ajuste a geometrias irregulares, sendo esta uma limitação deste método de marcada diferença com o método dos elementos finitos. Na Figura 3.1 podemos observar uma aplicação hipotética das malhas de diferenças finitas e de elementos finitos para um domínio de contorno irregular.

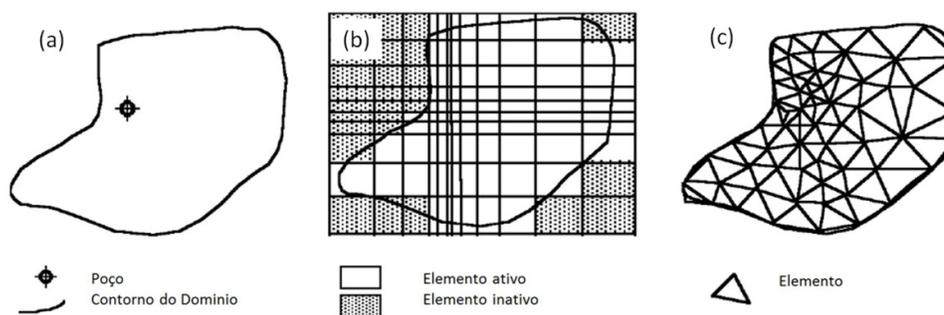


Figura 3.1: (a) Zona de influencia de um poço, (b) Modelo discretizado pelo MDF, (c) Modelo discretizado pelo MEF.

Para o presente trabalho, o método de elementos finitos será usado como método para resolver as equações governantes de fluxo.

### 3.2.1. Métodos dos elementos finitos

O método de elementos finitos (MEF) é um procedimento de análise numérico que divide o domínio de integração contínuo em um número finito de pequenas regiões que se denominam “elementos finitos”. Desta forma, o meio contínuo torna-se um meio discreto na qual os pontos de interseção das linhas dos elementos finitos se denominam nós e é nos nós onde se calculamos valores pontuais (ex. carga de pressão, etc.) utilizando-se uma função base para determinar o valor da variável de estado dentro do elemento.

Para este trabalho se utilizará o método de Galerkin para transformar as equações diferenciais em equações algébricas. Para maiores detalhes sobre a formulação do método recomenda-se revisar Neuman (1975), Zienkiewicz (1977) e Pinder & Gray (1977).

### 3.2.2. Solução numérica

O método dos elementos finitos será aplicado para discretizar o domínio e o método de diferenças finitas para discretizar o tempo. Com esta metodologia se dará solução a equação (3.1) correspondente a um modelo contínuo equivalente. A mesma metodologia poderá ser usada posteriormente para o tratamento da equação (3.6) relacionado aos meios porosos fraturados. Neste item, apenas para a equação (3.1), a discretização do domínio e do tempo está sendo desenvolvida.

#### 3.2.2.1. Discretização do espaço

O primeiro passo é definir uma função de aproximação para a carga de pressão. Neste caso  $\psi_n$ :

$$\hat{\psi}(x, y, z, t) = \sum_{n=1}^M \phi_n(x, y, z, t) \psi_n(t) \quad (3.8)$$

Na equação (3.8),  $\phi_n$  são funções lineares básicas ou funções de interpolação linear,  $\psi_n$  é a carga de pressão nodal desconhecida, solução da equação (3.1), e  $M$  é o número total de nós.

O método de Galerkin usado para discretizar um domínio  $\Omega$ , a partir da equação (3.1), propõe a seguinte forma:

$$\int_{\Omega} \left[ \frac{\partial(\theta_s S_w)}{\partial t} - \frac{\partial}{\partial x_i} \left( k_{ij} k_{rw} \frac{\partial(\hat{\psi} + z)}{\partial x_j} \right) \pm Q \right] \phi_n d\Omega = 0 \quad (3.9)$$

os termos:

$$\frac{\partial(\theta_s S_w)}{\partial t} k_{ij} k_{rw}$$

Podem ser expressos:

$$\frac{\partial(\theta_s S_w)}{\partial t} \cong S_w S_s \frac{\partial \psi}{\partial t} + \theta_s \frac{\partial S_w}{\partial t} \quad (3.10)$$

$$K_{ij}(\psi) = k_{ij} k_{rw} \quad (3.11)$$

Sendo  $S_s$  o coeficiente específico de armazenamento do meio poroso. Então, a equação (3.9) é reescrita como:

$$\int_{\Omega} \left[ S_w S_s \frac{\partial \hat{\psi}}{\partial t} + \theta_s \frac{\partial S_w}{\partial t} - \frac{\partial}{\partial x_i} \left( K_{ij}(\hat{\psi}) \frac{\partial(\hat{\psi} + z)}{\partial x_j} \right) \pm Q \right] \phi_n d\Omega = 0 \quad (3.12)$$

Separando os termos da integral, a equação (3.9) pode ser reescrita como:

$$\begin{aligned} & \int_{\Omega} \left( S_w S_s \frac{\partial \hat{\psi}}{\partial t} + \theta_s \frac{\partial S_w}{\partial t} \right) \phi_n d\Omega - \int_{\Omega} \left[ \frac{\partial}{\partial x_i} \left( K_{ij}(\hat{\psi}) \frac{\partial(\hat{\psi} + z)}{\partial x_j} \right) \right] \phi_n d\Omega \\ & + \int_{\Omega} Q \phi_n d\Omega = 0 \end{aligned} \quad (3.13)$$

No segundo termo da equação (3.13), a integral se desenvolve por partes, sendo esta modificada para:

$$\int_{\Omega} \left[ \frac{\partial}{\partial x_i} \left( K_{ij}(\hat{\psi}) \frac{\partial(\hat{\psi} + z)}{\partial x_j} \right) \right] \phi_n d\Omega = - \int_{\Omega} K_{ij}(\hat{\psi}) \frac{\partial(\hat{\psi} + z)}{\partial x_j} \frac{\partial \phi_n}{\partial x_i} d\Omega$$

$$+ \int_{\Gamma} K_{ij}(\widehat{\psi}) \frac{\partial \widehat{\psi}}{\partial x_i} \phi_n d\Gamma \quad (3.14)$$

Na equação (3.14), o termo  $\int_{\Gamma} K_{ij}(\widehat{\psi}) \frac{\partial \widehat{\psi}}{\partial x_i} \phi_n d\Gamma$  é o fluxo normal ao contorno  $\Gamma$  do domínio  $\Omega$ . Como a carga de elevação não tem variação nos eixos  $x$  e  $y$ , então:

$$\frac{\partial Z}{\partial X} = \frac{\partial Z}{\partial Y} = 0, e \quad \frac{\partial Z}{\partial Z} = 1$$

A equação (3.14) é reescrita desta forma:

$$\begin{aligned} \int_{\Omega} \left[ \frac{\partial}{\partial x_i} \left( K_{ij}(\widehat{\psi}) \frac{\partial(\widehat{\psi} + z)}{\partial x_j} \right) \right] \phi_n d\Omega &= - \int_{\Omega} K_{ij}(\widehat{\psi}) \frac{\partial \widehat{\psi}}{\partial x_j} \frac{\partial \phi_n}{\partial x_i} d\Omega \\ - \int_{\Omega} K_{iz}(\widehat{\psi}) \frac{\partial \phi_n}{\partial x_j} d\Omega &+ \int_{\Gamma} K_{ij}(\widehat{\psi}) \frac{\partial \widehat{\psi}}{\partial x_i} \phi_n d\Gamma \end{aligned} \quad (3.15)$$

Substituindo a equação (3.15) na equação (3.13), temos:

$$\begin{aligned} \int_{\Omega} \left( S_w S_s \frac{\partial \widehat{\psi}}{\partial t} + \theta_s \frac{\partial S_w}{\partial t} \right) \phi_n d\Omega &+ \int_{\Omega} K_{ij}(\widehat{\psi}) \frac{\partial \widehat{\psi}}{\partial x_j} \frac{\partial \phi_n}{\partial x_i} d\Omega + \\ \int_{\Omega} K_{iz}(\widehat{\psi}) \frac{\partial \phi_n}{\partial x_j} d\Omega &- \int_{\Gamma} K_{ij}(\widehat{\psi}) \frac{\partial \widehat{\psi}}{\partial x_i} \phi_n d\Gamma + \int_{\Omega} Q \phi_n d\Omega = 0 \end{aligned} \quad (3.16)$$

Substituindo a equação (3.8) na equação (3.16) para um elemento, temos:

$$\begin{aligned} \left[ \sum_e \int_{\Omega_e} \left( S_w S_s \frac{\partial \psi}{\partial t} + \theta_s \frac{\partial S_w}{\partial t} \right) \phi_n d\Omega_e \right] \frac{\partial \psi}{\partial t} &+ \left[ \sum_e \int_{\Omega_e} K_{ij}(\psi) \frac{\partial \phi_n}{\partial x_j} \frac{\partial \phi_n}{\partial x_i} d\Omega_e \right] \psi \\ + \sum_e \int_{\Omega_e} K_{iz}(\psi) \frac{\partial \phi_n}{\partial x_i} d\Omega_e &- \sum_e \int_{\Gamma_e} K_{ij}(\widehat{\psi}) \frac{\partial \widehat{\psi}}{\partial x_i} \phi_n d\Gamma_e + \sum_e Q \int_{\Omega_e} \phi_n d\Omega_e = 0 \end{aligned} \quad (3.17)$$

A equação (3.17) pode ser expressa da seguinte forma:

$$A(\psi)\psi + B(\psi) \frac{d\psi}{dt} + C(\psi) - D + E = 0 \quad (3.18)$$

onde,

$$A(\psi) = \sum_e \int_{\Omega_e} K_{ij}(\psi) \frac{\partial \phi_n}{\partial x_j} \frac{\partial \phi_n}{\partial x_i} d\Omega_e \quad (3.19)$$

$$B(\psi) = \sum_e \int_{\Omega_e} \left( S_w S_s \frac{\partial \psi}{\partial t} + \theta_s \frac{\partial S_w}{\partial t} \right) \phi_n d\Omega_e \quad (3.20)$$

$$C(\psi) = \sum_e \int_{\Omega_e} K_{iz}(\psi) \frac{\partial \phi_n}{\partial x_i} d\Omega_e \quad (3.21)$$

$$D = \sum_e \int_{\Gamma_e} K_{ij}(\hat{\psi}) \frac{\partial \hat{\psi}}{\partial x_i} \phi_n d\Gamma_e \quad (3.22)$$

$$E = \sum_e Q \int_{\Omega_e} \phi_n d\Omega_e \quad (3.23)$$

A solução numérica da equação de fluxo para meios fraturados é descrita em Telles (2006).

### 3.2.2.2. Discretização do tempo

Para discretizar o tempo é usado o método das diferenças finitas, assim, a equação (3.18) é expressa de seguinte forma:

$$A_{m+1} \{\psi\}_{m+1} + B_{m+1} \frac{\{\psi\}_{m+1} - \{\psi\}_m}{\Delta t} + C_{m+1} - D_{m+1} + E_{m+1} \quad (3.24)$$

Na equação (3.24),  $m + 1$  é o passo de tempo na qual a solução esta sendo analisada,  $m$  é o passo de tempo anterior,  $\Delta t$  é variação do tempo.

### 3.2.3. Estratégia de solução

A equação (3.24) é uma equação algébrica não linear, para resolvê-la se terá que usar um método iterativo para obter soluções das equações da matriz global correspondente a um tempo determinado. Os métodos iterativos são métodos que progressivamente vão calculando a solução de uma equação fazendo aproximações, este vai-se repetindo, melhorando o resultado anterior até que o

resultado mais recente satisfaça as tolerâncias indicadas. Para cada iteração, o sistema de equações já deverá ter sido relacionado com suas condições de contorno. A solução do sistema de equações é feita usando-se a eliminação de Gauss para problemas com um número de nós menor a 500 ou com uma largura de banda menor a 20, e nos outros casos, que são a maioria, se resolverá com o método do gradiente conjugado pré-condicionado com matriz simétrica desenvolvido por Mendoza et al. (1991). Para maiores detalhes revisar Šimůnek et al. (1995).

Existem vários métodos iterativos para aproximar a solução de sistemas de equações não lineares, entre eles podemos citar: o Método de Newton, Método de Newton- Raphson, Método Picard, Método de Picard Modificado e Método BFGS (Broyden-Fletcher-Goldfarb-Shanno). Este método BFGS, que é um método quase - Newton foi desenvolvido por Arora (1989) e foi implementado no programa de análise utilizado nesta dissertação por Telles (2006). Para o presente trabalho se usarão os métodos de Picard e BFGS. Uma comparação entre os métodos Picard e BFGS pode ser encontrada em Telles (2006). Para maiores referências desta parte, revisar Celia et al. (1987), Paniconi et al. (1991) e Telles (2006).