

### 3

## Solução numérica para problemas de fluxo multifásico

Neste capítulo são definidas as hipóteses necessárias para a formulação do problema hidromecânico de fluxo multifásico num meio poroso rígido, bem como são apresentadas as equações de equilíbrio e de continuidade que governam o processo.

As equações que governam o fluxo multifásico são equações diferenciais parciais. A obtenção da solução numérica de qualquer problema físico requer, inicialmente, a habilidade da criação do modelo matemático correspondente.

### 3.1.

#### Classes de métodos numéricos disponíveis

Os métodos tradicionais para a solução numérica de equações diferenciais são os métodos de Diferenças Finitas (MDF), Volumes Finitos (MVF) e de Elementos Finitos (MEF). O MDF foi sempre empregado na área de mecânica dos Fluidos, enquanto o MEF o foi para a área estrutural na solução de problemas de elasticidade. Até o início de 1970, tinha-se, portanto, o MDF com grande experiência na área de fluídos, mas sem habilidades para tratar geometrias complexas, e o MEF hábil no tratamento da geometria, mas sem ferramentas para tratar os termos advectivos presentes nas equações do movimento. As primeiras tentativas de uso do método Garlekin para problemas com advecção forte não tiveram sucesso, uma vez que o método Garlekin é adequado apenas para problemas puramente difusivos. O uso do método de Garlekin em elementos finitos é equivalente ao uso de diferenças centrais em diferenças finitas produzindo problemas de instabilidade em problemas de advecção dominante. Esse e outros problemas similares, que possuem a adequada interpretação física pelo não-funcionamento, motivaram pesquisas para o aprimoramento do método dos volumes finitos (MVF), no qual as equações aproximadas são obtidas através de balanços de conservação no volume elementar. A possibilidade de associar a interpretação física à

matemática influiu de modo considerável para que praticamente todos os analistas envolvidos com o MDF passassem a usar o MVF. Esses dois métodos, por serem semelhantes para algumas situações, são muitas vezes confundidos. Deve ficar claro que o MDF é simplesmente a substituição do operador diferencial pelo seu correspondente numérico, enquanto o MVF realiza um balanço de conservação da propriedade para cada volume elementar para obter a correspondente equação aproximada.

Por tanto, tanto o MDF como o MEF não trabalham com volumes de controle e sim com apenas os pontos de malha, e, como consequência, não são conservativos em nível discreto. O MVF tem requerimentos computacionais inferiores em comparação ao MEF, mas não é tão flexível para lidar com geometrias complexas quando comparado a EF.

Neste trabalho se empregará o MVF, a preferência é em função a robustez, devido às características conservativas.

### 3.2. Equações de conservação

#### 3.2.1. Equação de fluxo - conservação do volume (continuidade)

Elemento do solo:

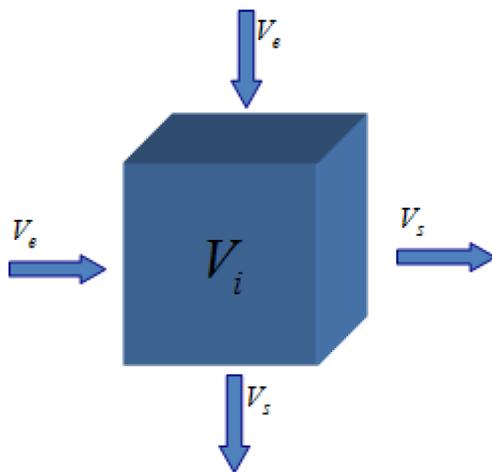


Figura 6 – Volume elementar para os balanços de conservação de volume.

$$\frac{V_s - V_e}{\Delta t} = -\frac{\partial V_i}{\partial t} \dots\dots\dots(3.1)$$

$V_e$  = volume do fluido (NAPL) na entrada do elemento [ $L^3$ ]

$V_s$  = volume do fluido (NAPL) na saída do elemento [ $L^3$ ]

$V_i$  = volume do fluido (NAPL) dentro do elemento [ $L^3$ ]

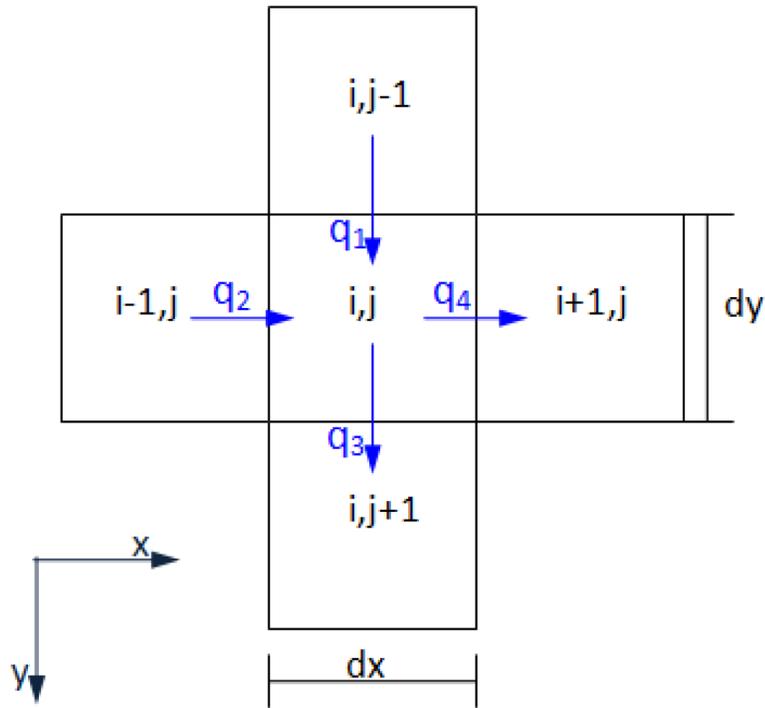


Figura 7 - Formulação em volume de controle para duas dimensões.

$$\underbrace{q_3 + q_4}_{V_s/\Delta t} - \underbrace{(q_1 + q_2)}_{V_e/\Delta t} = -\frac{\partial \theta_n}{\partial t} dx dy = -n \frac{\partial S_n}{\partial t} dx dy \dots\dots\dots (3.2)$$

$q$ : vazão [ $L^3$ ]

$\theta_n$ : conteúdo volumétrico do NAPL [ $L^3 L^{-3}$ ].

$S_n$ : saturação do NAPL [-]

$n$ : porosidade [-]

$x$ : eixo das ordenadas

$y$ : eixo das abscissas

$$q = -K_n i dA \quad \dots\dots\dots (3.3)$$

$K_n$ : permeabilidade do solo ao NAPL [ $LT^{-1}$ ]

$i$ : gradiente hidráulico [-]

$H_n$ : carga de energia total (pressão + elevação) do NAPL [L]

$h_n$ : carga de pressão do NAPL [L]

$dA$ : diferencial de área [ $L^2$ ]

Em x:

$$q = -K_n \frac{\partial H_n}{\partial x} = -K \frac{\partial h_n}{\partial x} \dots\dots\dots (3.4)$$

Em y:

$$q = -K_n \frac{\partial H_n}{\partial y} = -K \left( \frac{\partial h_n}{\partial y} - 1 \right) \dots\dots\dots (3.5)$$

$$\frac{\partial}{\partial x} \left[ K_n \left( \frac{\partial h_n}{\partial x} \right) \right] + \frac{\partial}{\partial y} \left[ K_n \left( \frac{\partial h_n}{\partial y} - 1 \right) \right] = \frac{\partial \theta_n}{\partial t} \dots\dots\dots (3.6)$$

$$\frac{\partial}{\partial x} \left[ K_n (S_n) \left( \frac{\partial h_n}{\partial S_n} \frac{\partial S_n}{\partial x} \right) \right] + \frac{\partial}{\partial y} \left[ K_n (S_n) \left( \frac{\partial h_n}{\partial S_n} \frac{\partial S_n}{\partial y} - 1 \right) \right] = n \frac{\partial S_n}{\partial t} \dots\dots\dots (3.7)$$

Então a equação de movimento para o fluxo multifásico em meios porosos é dado pela equação 3.6, que estabelece a relação entre a velocidade do fluxo e o campo de carga que o gera. Esta equação inclui a influência da carga de pressão na permeabilidade. Na equação 3.7 se coloca todos os termos em função da Saturação para facilitar a solução já que os valores da saturação não podem ser negativos nem maiores que 1.

**3.2.2. Equação de transporte - conservação da massa (continuidade)**

Elemento do solo:

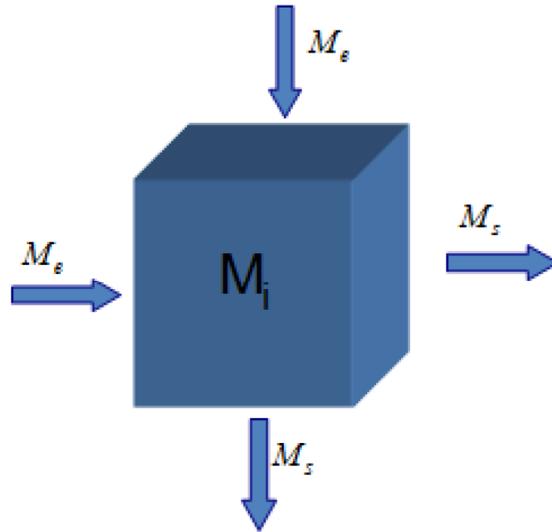


Figura 8 - Volume elementar para os balanços de conservação de massa.

$$\frac{M_s - M_e}{\Delta t} = - \frac{\partial M_i}{\partial t} \dots\dots\dots (3.8)$$

$M_e$  = massa do contaminante na entrada do elemento [M]

$M_s$  = massa do contaminante na saída do elemento [M]

$M_i$  = massa do contaminante dentro do elemento [M]

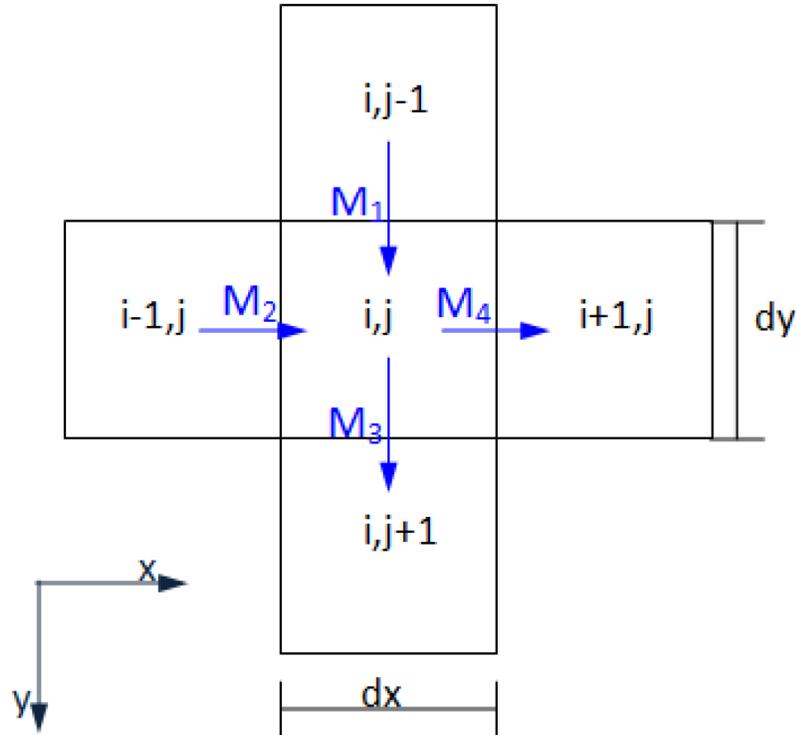


Figura 9 - Formulação em volume de controle para duas dimensões.

$$\underbrace{M_3 + M_4}_{M_{sai}} - \underbrace{(M_1 + M_2)}_{M_{ent}} = -\frac{\partial m}{\partial t} = -(n(S_w + S_n J) + \rho_b K_d) \frac{\partial C}{\partial t} dx dy \dots\dots(3.9)$$

M: massa [M]

$S_w$ : saturação d'água [-]

J: coeficiente de partição de NAPL-água [-]

$\rho_d$ : densidade seca [ $ML^{-3}$ ]

$K_d$ : coeficiente de partição entre a concentração na fase sólida e a concentração na fase aquosa [-]

C: concentração volumétrica do contaminante na fase aquosa [ $ML^{-3}$ ]

$$M = vAJC \dots\dots\dots(3.10)$$

v: velocidade [ $LT^{-2}$ ]

A: área [ $L^2$ ]

Em x:

$$M = vAJ \frac{\partial C}{\partial x} dy \dots\dots\dots(3.11)$$

Em y:

$$M = vAJ \frac{\partial C}{\partial y} dx \dots\dots\dots(3.12)$$

$$\frac{\partial}{\partial x} \left[ vJ \left( \frac{\partial C}{\partial x} \right) \right] + \frac{\partial}{\partial y} \left[ vJ \left( \frac{\partial C}{\partial y} \right) \right] = (n(S_w + S_n J) + \rho_b K_d) \frac{\partial C}{\partial t} \dots\dots\dots(3.13)$$

As propriedades matemáticas da equação de transporte variam dependendo de quais termos da equação são dominantes em um determinado sistema. Quando o transporte do soluto é dominado por advecção, como é comum em muitos problemas campo, a equação de transporte se assemelha a um tipo de equação hiperbólica (semelhantes às equações que descrevem a propagação de uma onda ou de um choque frontal). Em contrapartida, quando um sistema é dominado por fluxos dispersivos e difusivos, como pode ocorrer quando as velocidades do fluido são relativamente baixas, o transporte torna-se mais equação de natureza parabólica (semelhante à equação de fluxo transiente das águas subterrâneas). Porque as propriedades do sistema e a velocidade do fluxo podem variar significativamente, o processo dominante (e as propriedades matemáticas da equação que rege) pode variar de ponto a ponto e ao longo do tempo no domínio da simulação. O desafio da solução numérica é representar frentes do soluto sem introduzir oscilações errôneas ou dispersão não física, e a fazê-lo sem exigir um custo elevado, da utilização de recursos computacionais. Neste trabalho só se considerará o termo advectivo.

**3.3.  
Solução numérica**

**3.3.1.  
Solução numérica da equação de fluxo**

Soluções numéricas das equações do fluxo multifásico têm sido apresentadas para o problema específico de contaminação de aquíferos superficiais. Na literatura, existe uma ampla informação disponível na área de petróleo, sobretudo para simulações de reservatórios (Coats, 1982 *apud* Weaver, 1988).

Como mencionado anteriormente se usará o método dos volumes finitos para resolver as equações prateadas. Para este método, a região de fluxo é dividida em uma malha de volumes regulares quadrados.

Pelo fato da equação (3.7) ser uma equação altamente não linear se deve ter muito cuidado ao usar os métodos numéricos. A permeabilidade  $K(S)$  é dependente da Saturação. Portanto, na maioria dos casos de interesse prático, soluções são obtidas numericamente com o auxílio de computadores.

Para relacionar a Saturação com a permeabilidade se usou o *Modelo Brooks e Corey-Burdine*. O modelo para a permeabilidade relativa do NAPL em sistemas trifásicos (água-NAPL-ar) combina a equação de Poiseville relacionando a permeabilidade da capacidade do tamanho de poros com o modelo de pressão capilar de Brooks e Corey.

$$K_{nr}(S_n, S_{wr}) = \left( \frac{S_n - S_{nr}}{1 - S_{nr}} \right)^2 \left( \left( \frac{S_t - S_{wr}}{1 - S_{wr}} \right)^{\epsilon-2} - \left( \frac{S_w - S_{wr}}{1 - S_{wr}} \right)^{\epsilon-2} \right) \dots\dots\dots(3.14)$$

$$S_{wr} = S_w \dots\dots\dots(3.15)$$

$$S_t = S_n + S_w \dots\dots\dots (3.16)$$

$$\epsilon = 3 + 2/\lambda \dots\dots\dots(3.17)$$

$$K_{nr}(S_n, S_w) = \left( \frac{S_n - S_{nr}}{1 - S_{nr}} \right)^2 \left( \frac{S_n}{1 - S_{wr}} \right)^{\varepsilon - 2} \dots\dots\dots(3.18)$$

$$K_n = \frac{k}{\mu_n} \rho_n g K_{nr} \dots\dots\dots(3.19)$$

$$K_n = K_{ns} K_{nr} \dots\dots\dots(3.20)$$

$$K_{ns} = \frac{k}{\mu_n} \rho_n g \dots\dots\dots(3.21)$$

Onde:

- $K_{nr}$ : condutividade hidráulica relativa do meio para o NAPL [ $LT^{-1}$ ]
- $S_{wr}$ : saturação residual d'água [-]
- $S_{nr}$ : saturação residual do NAPL [-]
- $S_i$ : saturação total líquida [-]
- $\varepsilon$ : constante dependente da distribuição do tamanho de poros [-]
- $k$ : permeabilidade intrínseca do meio [ $L^2$ ]
- $\mu_n$ : viscosidade dinâmica do NAPL [ $ML^{-1}T^{-1}$ ]
- $\rho_n$ : densidade do NAPL [ $ML^{-3}$ ]
- $g$ : aceleração da gravidade [ $LT^{-2}$ ]
- $K_{ns}$ : condutividade hidráulica saturada do meio para o NAPL [ $LT^{-1}$ ]

A mínima saturação de ar (ar entrampado) é estimada da condição de que a permeabilidade relativa da água será a metade. Esta relação é:

$$S_{ar} = (1 - S_w) \left( 1 - \left( \frac{1}{2} \right)^{1/\varepsilon} \right) \dots\dots\dots(3.22)$$

Então a máxima saturação do NAPL será:

$$S_{mn} = 1 - S_w - S_{ar} \dots\dots\dots(3.23)$$

*Função Brooks e Corey:*

A função de Brooks e Corey relaciona a saturação do fluido à carga de pressão capilar por meio de dos parâmetros de correlação dependentes do solo ( $\psi$  e  $\lambda$ ).

$$\begin{cases} \bar{S}_t = 1, \text{ para } \beta_{an} h_{an} \leq \psi \\ \bar{S}_t = \left[ \frac{\beta_{an} h_{an}}{\psi} \right]^{-\lambda}, \text{ para } \beta_{an} h_{an} > \psi \end{cases} \dots\dots\dots (3.21)$$

$$\begin{cases} \bar{S}_w = \left[ \frac{\beta_{nw} h_{nw}}{\psi} \right]^{-\lambda}, \text{ para } \beta_{nw} h_{nw} > \psi \\ \bar{S}_w = 1, \text{ para } \beta_{nw} h_{nw} \leq \psi \end{cases} \dots\dots\dots (3.22)$$

$$\bar{S}_t = \bar{S}_w + \bar{S}_n \dots\dots\dots (3.23)$$

$$\bar{S}_t = \frac{S_w + S_n - S_m}{1 - S_m} \dots\dots\dots (3.24)$$

$$\bar{S}_w = \frac{S_w - S_m}{1 - S_m} \dots\dots\dots (3.25)$$

$$\bar{S}_n = \frac{S_n}{1 - S_m} \dots\dots\dots (3.26)$$

$$S_m = S_{nr} + S_{wr} \dots\dots\dots (3.27)$$

$$S_{nr} = 0 \dots\dots\dots (3.28)$$

$$S_{wr} = S_w \dots\dots\dots (3.29)$$

$$S_m = S_{wr} = S_w \dots\dots\dots (3.30)$$

$$\bar{S}_t = \bar{S}_n \dots\dots\dots (3.31)$$

$$S_n = \bar{S}_n (1 - S_m) = \bar{S}_n (1 - S_w) \dots\dots\dots (3.32)$$

$$\beta_{an} = \frac{\sigma_{an}}{\sigma_{aw}} \dots\dots\dots (3.33)$$

$$h_{an} = h_a - h_n \dots\dots\dots (3.34)$$

$$h_a \approx 0 \dots\dots\dots (3.35)$$

$$h_{an} = -h_n \dots\dots\dots (3.36)$$

$$\begin{cases} S_n = 1 - S_w & \text{para } -\beta_{an}h_n \leq \psi \\ S_n = \left[ \frac{-\beta_{an}h_n}{\psi} \right]^{-\lambda} (1 - S_w) & \text{para } -\beta_{an}h_n > \psi \end{cases} \dots\dots\dots (3.37)$$

$$\begin{cases} h_n = -\frac{\psi}{\beta_{an}} & \text{para } S_n = 1 - S_w \\ h_n = -\frac{\psi}{\beta_{an}} (1 - S_w)^{1/\lambda} (S_n)^{-1/\lambda} & \text{para } S_n < 1 - S_w \end{cases} \dots\dots\dots (3.38)$$

Caso Geral:

$$h_n = -\frac{\psi}{\beta_{an}} (1 - S_w)^{1/\lambda} (S_n)^{-1/\lambda} \dots\dots\dots (3.39)$$

Onde:

$\bar{S}_t$ : saturação efetiva total líquida [-]

$\bar{S}_w$ : saturação efetiva de água [-]

$\bar{S}_n$ : saturação efetiva de NAPL [-]

$S_n$ : saturação atual do NAPL [-]

$S_{nr}$ : saturação relativa do NAPL [-]

$S_i$ : saturação líquida total [-]

$S_m$ : saturação irreduzível [-]

$\lambda$ : índice de distribuição do tamanho de poros [-]

$\psi$ : pressão de entrada do fluido não molhante função de Brooks e Corey [-]

$\beta_{nw}$ : fator escala de pressão capilar NAPL-água [-]

$\beta_{an}$ : fator escala de pressão capilar ar-NAPL [-]

$\sigma_{an}$ : tensão interfase ar-NAPL [MT<sup>-2</sup>]

$\sigma_{aw}$ : tensão interfase ar-água [MT<sup>-2</sup>]

$h_{an}$ : pressão capilar ar-NAPL [L]

$h_{nw}$ : pressão capilar NAPL-água [L]

$h_n$ : Pressão do NAPL [L]

$$Y = \frac{dh_n}{dS_n} = \frac{\psi}{\lambda \beta_{an}} \frac{(S_n)^{(-\lambda-1)}}{(1-S_w)^{-1/\lambda}} \dots\dots\dots (3.40)$$

Substituindo na equação 3.7:

$$\frac{\partial}{\partial x} \left[ K_n(S_n) \left( Y(S_n) \frac{\partial S_n}{\partial x} \right) \right] + \frac{\partial}{\partial y} \left[ K_n(S_n) \left( Y(S_n) \frac{\partial S_n}{\partial y} - 1 \right) \right] = n \frac{\partial S_n}{\partial t} \dots (3.41)$$

A aproximação numérica de uma equação diferencial parcial linear dá origem a um sistema linear de equações cuja matriz tem coeficientes constantes. Quando o problema é não linear como neste caso, novamente a aproximação dá origem a um sistema linear de equações, mas, desta feita, a matriz contém coeficientes dependentes da variável e deve, portanto, ser atualizada ao longo das iterações. A equação é linearizada transferindo para matriz dos coeficientes a não linearidade, a não linearidade introduz um nível iterativo a mais no processo, que é justamente a atualização da matriz. Por causa desta não-linearidade, um processo iterativo deve ser empregado para se obter a solução da equação matricial global a cada novo passo de tempo. Esta não linearidade pode ser tratada com base no algoritmo de Piccard.

O cálculo dos fluxos deve ser realizado em função dos valores da função nos pontos nodais, para isto, a função de interpolação tem o papel de conectar os pontos nodais. A tentativa é sempre propor uma função de interpolação com o menor erro possível e que, ao mesmo tempo, não envolva muitos pontos para não criar uma matriz com estrutura muito complexa. A tendência natural é especificar uma função de interpolação que tenha o menor erro de truncamento possível, e o esquema de diferencas centrais é o primeiro a ser lembrado, mas, o uso de este método de interpolação cria, quase sempre, coeficientes negativos, pois é impossível, em problemas reais, refinar a malha até forçar sua positividade.

A maneira de evitar o coeficiente negativo é usar outra aproximação para o termo advectivo. Uma aproximação de um lado só, de primeira ordem de aproximação, também conhecida como *upwind*, por exemplo, resolve o problema. O uso do *upwind* produz soluções fisicamente coerentes, mas tem a

propriedade de suavizar os altos gradientes, por serem dissipativos. Então na interfase de dois volumes a permeabilidade a utilizar será a maior dos dois volumes. Para resolver a equação de fluxo se usou o esquema upwind e o algoritmo de Picard.

### **3.3.2. Solução numérica da equação de transporte**

A equação de transporte também é uma equação altamente não linear e para resolvê-la se utilizará também o esquema upwind e o algoritmo de Picard.

Mas, a equação do transporte depende dos resultados da equação de fluxo, isto é, as saturações do NAPL e as velocidades do fluxo em cada volume pra cada passo do tempo. Ou seja, para resolver a equação de transporte, primeiro se deve resolver à equação de fluxo.