



Fabrizio Fernández

**Modelagem numérica de fluxo bifásico e
transporte de contaminantes em
meios porosos**

Dissertação de Mestrado

Dissertação apresentada como requisito parcial para
obtenção do grau de Mestre pelo Programa de Pós-
Graduação em Engenharia Civil do Departamento de
Engenharia Civil da PUC-Rio.

Orientador: Prof. Eurípedes do Amaral Vargas Jr.
Co-Orientador: Dr. Alonso Joaquin Juvinao Carbono

Rio de Janeiro
Agosto de 2015



Fabrizio Fernández

**Modelagem numérica de fluxo bifásico e
transporte de contaminantes em
meios porosos**

Dissertação apresentada como requisito parcial para obtenção do grau de Mestre pelo Programa de Pós-Graduação em Engenharia Civil do Departamento de Engenharia Civil do Centro Técnico Científica da PUC-Rio. Aprovada pela Comissão Examinadora abaixo assinada.

Prof. Eurípedes do Amaral Vargas Jr.

Orientador

Departamento de Engenharia Civil – PUC-Rio

Prof^a. Raquel Quadros Velloso

Departamento de Engenharia Civil – PUC-Rio

Prof^a. Andrea Ferreira Borges

Universidade Federal do Rio de Janeiro

Prof. José Eugenio Leal

Coordenador Setorial do

Centro Técnico Científico - PUC-Rio

Rio de Janeiro, 11 de agosto de 2015.

Todos os direitos reservados. É proibida a reprodução total ou parcial do trabalho sem autorização da universidade, do autor e do orientador.

Fabrizio Fernández

Graduou-se em Engenharia Civil na UNCuyo - Universidad Nacional de Cuyo, Mendoza, Argentina em 2012. Atualmente encontra-se em processo de admissão ao programa de doutorado oferecido pelo Departamento de Engenharia Civil da PUC-Rio.

Ficha Catalográfica

Fernández, Fabrizio

Modelagem numérica de fluxo bifásico e transporte de contaminantes em meios porosos / Fabrizio Fernández; orientadores: Eurípedes do Amaral Vargas Jr., Alonso Joaquin Juvinao Carbono – 2015.

100 f. : il. (color.) ; 30 cm

Dissertação (mestrado) – Pontifícia Universidade Católica do Rio de Janeiro, Departamento de Engenharia Civil, 2015.

Inclui bibliografia

1. Engenharia civil – Teses. 2. Fluxo bifásico. 3. Transporte de contaminantes. 4. Meios porosos heterogêneos. 5. Análise numérica. 6. Elementos finitos mistos e híbridos. 7. Elementos finitos descontínuos. I. Vargas Júnior, Eurípedes do Amaral. II. Carbono, Alonso Joaquin Juvinao. III. Pontifícia Universidade Católica do Rio de Janeiro. Departamento de Engenharia Civil. IV. Título.

CDD: 624

A Irene e Jacinto.

Agradecimentos

A todas as pessoas que conformam o Departamento de Engenharia Civil.

À agência federal de fomento CAPES pelo apoio financeiro que possibilitou a presente dissertação.

Ao Professor Vargas, pelas enriquecedoras discussões que contribuíram na orientação deste trabalho e na minha formação.

Ao Juan Pablo, pelo incentivo de realizar a experiência do curso de mestrado na PUC-Rio.

Ao Alonso, pela contribuição das implementações computacionais que foram base das utilizadas neste trabalho.

Resumo

Fernández, Fabricio; Vargas Jr., Eurípedes do Amaral; Carbono, Alonso Joaquin Juvinao. **Modelagem numérica de fluxo bifásico e transporte de contaminantes em meios porosos**. Rio de Janeiro, 2015. 100p. Dissertação de Mestrado - Departamento de Engenharia Civil, Pontifícia Universidade Católica do Rio de Janeiro.

O objetivo deste trabalho é ser uma contribuição ao entendimento dos mecanismos envolvidos na migração por gravidade dos compostos orgânicos chamados de DNAPLs, quando eles são liberados em meios porosos e em meios porosos fraturados, para aportar ao desenvolvimento de tecnologias efetivas orientadas principalmente à localização e à remediação do sistema subterrâneo contaminado. Primeiramente são apresentados os conceitos elementares envolvidos nos modelos matemáticos que descrevem o fluxo bifásico em meios porosos, o processo de modelagem de um problema geral da natureza, os modelos conceituais, os matemáticos e os numéricos, e a aplicabilidade dos modelos conceituais conforme a considerações de escala. Em segundo lugar, são desenvolvidas as equações matemáticas que governam os fenômenos em estudo e são apresentadas as soluções às equações governantes a partir de técnicas computacionais e esquemas de integração numérica. As equações do fluxo bifásico são resolvidas mediante técnicas de elementos finitos mistos hibridizados (EFHM) e elementos finitos descontínuos (GD), e as equações do transporte de contaminantes são resolvidas mediante a técnica dos elementos finitos convencionais (EF). Seguidamente são avaliados numericamente problemas de transporte de contaminantes em 1D e 2D, problemas de transporte de contaminantes com transferência de massa, problemas de fluxo bifásico em 2D, e problemas acoplados envolvendo tanto fluxo bifásico como transporte de contaminantes com transferência de massa. Finalmente, são apresentadas as conclusões do trabalho desenvolvido bem como sugestões para trabalhos futuros.

Palavras-chave

Fluxo bifásico; Transporte de contaminantes; Meios porosos heterogêneos; Análise numérica; Elementos finitos mistos e híbridos; Elementos finitos descontínuos.

Abstract

Fernández, Fabricio; Vargas Jr., Eurípedes do Amaral (Advisor); Carbone, Alonso Joaquin Juvinao (Co-Advisor). **Numerical modelling of two-phase flow and contaminant transport in heterogeneous media**. Rio de Janeiro, 2015. 100p. M.Sc. Dissertation – Departamento de Engenharia Civil, Pontifícia Universidade Católica do Rio de Janeiro.

The objective of this work is to contribute to the understanding of the mechanisms involved in the gravity migration of organic compounds, called DNAPLs, when they are released in a porous media and in a fractured porous media, and to contribute to the development of effective technologies mainly oriented to the location and remediation of contaminated underground system. Firstly, some basic concepts are presented, especially those involved in the mathematical models that describe the two-phase flow in porous media, the conceptual models, the mathematical models, as well as the numerical models. Secondly, the mathematical equations that govern the phenomena under study are developed and the solutions to the governing equations from computational techniques and numerical integration schemes are presented. The biphasic flow equations are solved using mixed and hybridized finite element techniques (EFHM) and discontinuous finite element (GD), and the contaminant transport equations are solved by the conventional technique of finite element (FE). Then, some problems are numerically evaluated in 1D and 2D, such as transport of contaminants with and without mass transfer, two-phase flow problems in 2D, and attached problems involving both biphasic flow and contaminant transport with mass transfer. Finally, the conclusions of this thesis as well as the suggestions for future works are presented.

Keywords

Two phase flow; Contaminant transport, Heterogeneous porous media; Numerical analysis; Mixed and hybrid finite elements; Discontinuous finite elements;

Sumário

1	Introdução	14
1.1.	Objetivos	16
1.2.	Escopo do trabalho	16
2	Fluxo de fluidos imiscíveis no subsolo	18
2.1.	Grau de saturação	18
2.2.	Tensão interfacial e molhabilidade	19
2.3.	Pressão capilar	20
2.4.	Permeabilidade relativa	22
3	Considerações sobre a modelagem do problema do fluxo e transporte de contaminantes em meios porosos, em meios porosos fraturados, e em meios fraturados	24
3.1.	Introdução à modelagem	24
3.2.	Modelo conceitual do fluxo e transporte em meio poroso. Enfoque de domínio contínuo	26
3.3.	Modelos conceituais do fluxo e transporte em meio poroso fraturado e em meio fraturado	27
3.3.1.	Modelo contínuo equivalente	28
3.3.2.	Modelo de dupla porosidade	29
3.3.3.	Modelo de fraturas discretas	29
3.4.	Considerações de escala: Aplicabilidade dos modelos conceituais	30
3.4.1.	Escala 1: Muito próxima ao campo	30
3.4.2.	Escala 2: Próxima ao campo	31
3.4.3.	Escala 3: Longe do campo	31
3.4.4.	Escala 4: Muito longe do campo	32
4	Formulação matemática do problema de fluxo bifásico em meios porosos e transporte de contaminantes	33
4.1.	Formulação matemática do fluxo bifásico em meios porosos	33
4.2.	Formulação matemática do transporte de contaminantes	37
4.3.	Dissolução do contaminante	41

4.3.1. Dissolução limitada por uma taxa de transferência de massa	42
5 Modelagem numérica do fluxo bifásico e transporte de contaminantes	47
5.1. Modelagem numérica do fluxo bifásico	47
5.1.1. Resolução das equações de fluxo bifásico mediante o método dos elementos finitos	48
5.1.2. Aproximação do fluxo	48
5.1.3. Aproximação da saturação	55
5.2. Modelagem numérica do transporte de contaminantes	59
5.2.1. Resolução da equação de transporte mediante o método dos elementos finitos	59
5.2.2. Resolução da equação de transporte com dissolução mediante o método dos elementos finitos	61
5.2.3. Restrições da malha no método dos elementos finitos	63
6 Implementação computacional das formulações numéricas para simulação de fluxo bifásico em meios porosos e transporte de contaminantes	65
6.1. Transporte de contaminantes: Caso 1D	65
6.2. Transporte de contaminantes: Caso 2D	68
6.2.1. Caso I: Fonte de contaminação tipo pulso 2D	69
6.2.2. Caso II: Fonte de contaminação contínua 2D	72
6.2.3. Transporte de contaminantes com dissolução da fase não molhante	74
6.2.4. Infiltração de DNAPL em meio heterogêneo	77
6.2.5. Infiltração de DNAPL em meio heterogêneo e transporte de contaminantes no sistema de águas subterrâneas	83
7 Conclusões e sugestões	94
Referências Bibliográficas	97

Lista de figuras

Figura 1: Cenário de contaminação esquemática decorrentes de um derramamento de DNAPL (Kueper, et al., 1991).	15
Figura 2: a) Tensões interfaciais. b) Interface curva de dois fluidos invisíveis (Bear, 1972).	19
Figura 3: Interface água-NAPL num canal de poro entre dois grãos de areia (Bastian, 1999).	20
Figura 4: Pressão capilar a partir do modelo de Brooks e Corey.	22
Figura 5: Permeabilidades relativas a partir do modelo de Brooks e Corey.	23
Figura 6: Esquema elementar do processo de modelagem.	25
Figura 7: Variação da porosidade, ao redor de um ponto como função do tamanho do volume médio (Bear, et al., 1993).	26
Figura 8: Diferentes modelos conceituais para meios rochosos fraturados. (a) Meio poroso fraturado real. (b) Modelo contínuo equivalente. (c) Modelo contínuo equivalente com zonas de alta condutividade hidráulica. (d) Modelo de dupla porosidade. (e) Modelo de fraturas discretas (Cook, 2003).	27
Figura 9: Escala muito próxima ao campo (Bear, et al., 1993).	30
Figura 10: Escala Próxima ao campo. (Bear, et al., 1993)	31
Figura 11: Escala: Longe do campo (Bear, et al., 1993).	32
Figura 12: Escala Muito longe do campo (Bear, et al., 1993).	32
Figura 13: Velocidades da fase α num ponto infinitesimal do domínio Ω .	34
Figura 14: Concentração relativa em função do tempo, como resultado de um decaimento de primeira ordem para diferentes fatores de decaimento λ .	38
Figura 15: Isoterma de sorção.	38
Figura 16: Condições de contorno para um problema de fluxo e transporte de contaminantes. (a) Sistema de fluxo. (b) Condições de contorno para transporte de contaminantes (Zheng, et al., 2002).	40
Figura 17: Modelo de transferência de massa na direção normal entre as fases.	42
Figura 18: Área interfacial por unidade de volume de vazios.	43
Figura 19: Curva típica de pressão capilar e saturação da fase molhante durante os processos de drenagem e embebição.	43
Figura 20: Consideração do fluxo na mobilidade não molhante.	54

Figura 21: Variáveis utilizadas no limitador de inclinação.	59
Figura 22: Ilustração esquemática do transporte de contaminantes 1D.	66
Figura 23: Avanço do frente de contaminação: 5 elementos.	67
Figura 24: Avanço do frente de contaminação: 10 elementos.	67
Figura 25: Avanço do frente de contaminação: 20 elementos.	67
Figura 26: Avanço do frente de contaminação: 50 elementos.	68
Figura 27: Malha de elementos finitos de três nós T3.	69
Figura 28: Solução analítica. Fonte tipo pulso 2D.	70
Figura 29: Resultado numérico. Fonte tipo pulso 2D.	71
Figura 30: Comparativa dos resultados numéricos e analíticos ao longo da linha $y = 14.8\text{m}$. Caso fonte tipo pulso 2D.	71
Figura 31: Solução analítica. Fonte contínua 2D.	73
Figura 32: Resultado numérico. Fonte contínua 2D.	73
Figura 33: Comparativa dos resultados numéricos e analíticos ao longo da linha $y = 14.8\text{m}$. Caso fonte contínua 2D.	74
Figura 34: Resultado numérico. Transporte com dissolução de massa.	76
Figura 35: Variação da concentração no nó de controle.	76
Figura 36: Análise paramétrica da taxa de transferência de massa.	77
Figura 37: Geometria e condições de contorno para a simulação 2D da infiltração vertical de um DNAPL em um meio heterogêneo (Helmig, 1997).	78
Figura 38: Relações de pressão capilar. Modelo Brooks-Corey.	79
Figura 39: Permeabilidades relativas. Modelo Brooks-Corey.	79
Figura 40: Malha de elementos finitos utilizada na simulação numérica.	80
Figura 41: Resultados experimentais depois de 920s (Helmig, 1997).	80
Figura 42: Resultados numéricos depois de 920s. Método <i>Fully Upwind Galerkin</i> (Helmig, 1997).	81
Figura 43: Resultados numéricos depois de 920s. Método HMFE-GD.	81
Figura 44: Resultados experimentais depois de 2360s (Helmig, 1997).	82
Figura 45: Resultados numéricos depois de 2360s. Método <i>Fully Upwind Galerkin</i> (Helmig, 1997).	82
Figura 46: Resultados numéricos depois de 2360s.	83
Figura 47: Geometria e condições de contorno para a simulação 2D da infiltração vertical e transporte de contaminantes dum DNAPL em meio heterogêneo.	84
Figura 48: Exemplo 1 - Grau de heterogeneidade baixa.	86
Figura 49: Exemplo 2 - infiltração de DNAPL em meio heterogêneo e transporte	

de contaminantes. Grau de heterogeneidade média 88

Figura 50: Exemplo 3 - infiltração de DNAPL em meio heterogêneo e transporte
de contaminantes. Grau de heterogeneidade alta. 91

Lista de tabelas

Tabela 1: Parâmetros de transporte - Caso 1D	66
Tabela 2: Parâmetros de transporte - Fonte tipo pulso 2D	70
Tabela 3: Parâmetros de transporte - Fonte contínua 2D	72
Tabela 4: Parâmetros de transporte - Caso com dissolução	75
Tabela 5: Parâmetros de dissolução - Caso com dissolução	75
Tabela 6: Propriedades do meio - Infiltração em meio heterogêneo	78
Tabela 7: Propriedades dos fluidos - Infiltração em meio heterogêneo	78
Tabela 8: Propriedades do meio - Exemplos teóricos de infiltração e transporte de contaminantes	85
Tabela 9: Propriedades dos fluidos - Exemplos teóricos de infiltração e transporte de contaminantes	85
Tabela 10: Propriedades de transporte - Exemplos teóricos de infiltração e transporte de contaminantes	85
Tabela 11: Parâmetros de simulação - Exemplos teóricos de infiltração e transporte de contaminantes	85

1

Introdução

As águas subterrâneas constituem a segunda fonte de água doce mais importante do planeta com uma porcentagem de aproximadamente 30% do total (Gleick, 1993), além de ser consideradas como uma parte essencial no ciclo hidrológico. É, portanto, um recurso natural estratégico de importância no desenvolvimento das sociedades e das economias atuais, porque pode ser utilizada na dotação de água para uso doméstico, tanto rural quanto urbano, para irrigação e para a indústria.

O crescimento da população associado a um modo de vida baseado no consumo produz um aumento consequente na demanda de produção agrícola e industrial, que envolve grandes quantidades de produtos químicos nos processos produtivos. Isto implica o aumento na probabilidade de contaminação do sistema das águas subterrâneas.

O conjunto de compostos químicos de particular interesse são os compostos orgânicos mais densos do que a água, relativamente pouco solúveis, e geralmente com uma viscosidade menor à água, chamados de DNAPL (*Dense Nonaqueous Phase Liquids*). Os solventes halogenados, bifenilos policlorados (PCB), pesticidas e alcatrões de carvão, são os DNAPLs amplamente utilizados na indústria e na agricultura.

Devido a derrames acidentais, instalações de armazenamento não devidamente controladas, e práticas inadequadas de eliminação final, estes produtos químicos são frequentemente introduzidos no ambiente subterrâneo. Na liberação, geralmente em forma de líquido, ao ser mais densos do que a água, os compostos deslocam a água e descem pela zona vadosa, posteriormente pela zona saturada, até atingir a uma barreira impermeável, como pode ser a matriz rochosa ou uma camada de argila, onde são acumulados.

Se o leito rochoso for fraturado, os DNAPLs poderiam penetrar nas fraturas e atingir no aquífero profundo do sistema, e permanecer no sistema fraturado gerando uma fonte contínua de contaminação, devido à sua baixa solubilidade, na forma de pluma dissolvida. A baixa solubilidade faz que os compostos sejam dissolvidos na água, num longo período de tempo com uma

permanência no sistema ao longo prazo, e muitas vezes, dando origem a níveis de contaminação de ordens de magnitude maior do que os níveis para água potável impostos pelas agências reguladoras. (USEPA, 1994)

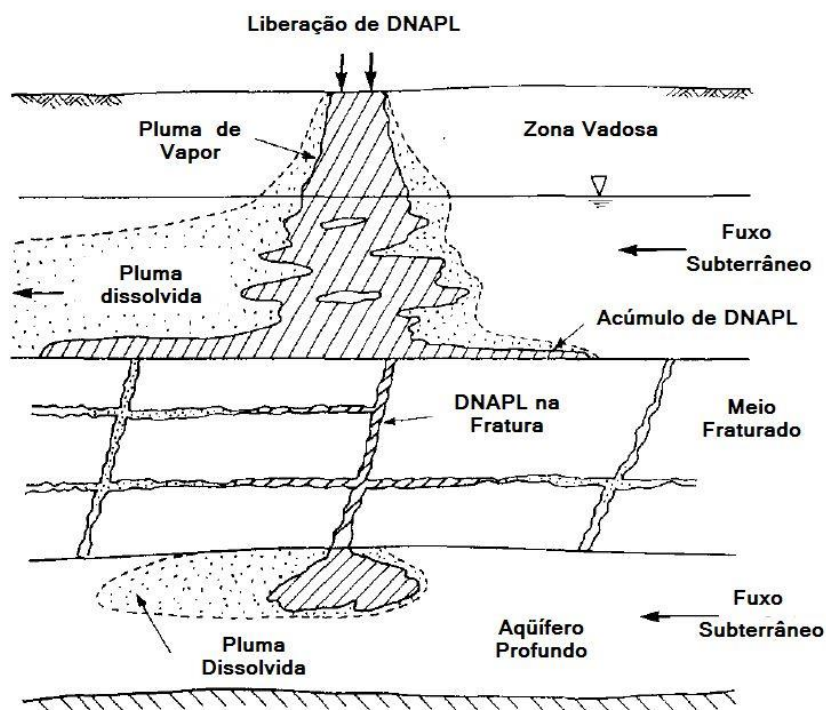


Figura 1: Cenário de contaminação esquemática decorrentes de um derramamento de DNAPL (Kueper, et al., 1991).

Os esforços de remediação e remoção dos compostos contaminantes das águas subterrâneas são processos lentos influenciados significativamente pela baixa taxa de liberação por parte das fraturas e das camadas de argilas. Ainda que estes esforços em geral possam ter um efeito significativo a nível local, com pouca influencia sobre o aqüífero profundo.

A detecção da ocorrência do processo de contaminação é primordial para aplicar técnicas de remediação adequadas, porém resulta dificultado pela presença de heterogeneidades e anisotropias no sistema.

Assim, o cenário de contaminação decorrente de um derramamento de DNAPLs representa um grave problema de contaminação das águas subterrâneas no ambiente do subsolo, mesmo em pequenas quantidades.

1.1. Objetivos

Os objetivos deste trabalho estão focalizados em contribuir no entendimento dos mecanismos envolvidos na migração, por gravidade, dos compostos orgânicos chamados de DNAPLs, quando eles são liberados em meios porosos e em meios porosos fraturados.

O entendimento destes fenômenos pretende aportar ao desenvolvimento de tecnologias efetivas orientadas principalmente à localização e à remediação do sistema subterrâneo contaminado.

Para atingir os objetivos se propõe:

- Analisar diferentes cenários de fluxo bifásico em meios porosos e meios fraturados em condições saturadas;
- Utilizar modelação numérica como ferramenta para obter uma solução adequada às equações matemáticas que governam o fluxo no sistema e validar o modelo numérico com casos simples;
- Considerar diferentes cenários representativos da natureza do subsolo no processo de modelagem numérica, incluindo heterogeneidades e anisotropia na distribuição dos parâmetros físicos e hidráulicos, a fim de identificar a sensibilidade das variáveis no fenômeno;
- Considerar um enfoque aleatório na distribuição dos parâmetros físicos no modelo numérico, tanto no sistema de fraturas quanto no meio poroso, a fim de emular as evidências aleatórias na distribuição real dos parâmetros físicos no meio natural.

1.2. Escopo do trabalho

O seguinte trabalho estrutura-se em sete capítulos que serão brevemente descritos a continuação.

No capítulo 2 são apresentados os conceitos elementares envolvidos nos modelos matemáticos que descrevem o fluxo bifásico em meios porosos.

No capítulo 3 são apresentados os conceitos envolvidos no processo de modelagem de um problema geral da natureza, os modelos conceituais, os modelos matemáticos e os modelos numéricos, e também a aplicabilidade dos modelos conceituais conforme a considerações de escala.

No capítulo 4 são desenvolvidas as equações matemáticas que governam o fluxo bifásico em meios porosos, o transporte de contaminantes em meios porosos, e a dissolução com transferência de massa entre as fases.

No capítulo 5 são apresentadas as soluções das equações governantes do fluxo bifásico e transporte de contaminantes, a partir da implementação de técnicas computacionais e esquemas de integração numérica. As equações do fluxo bifásico serão resolvidas mediante técnicas de elementos finitos mistos hibridizados (EFHM) e elementos finitos descontínuos (GD). As equações do transporte de contaminantes serão resolvidas mediante a técnica dos elementos finitos convencional (EF).

No capítulo 6 são apresentados as soluções analíticas disponíveis para os casos simples que serão utilizadas para testar a validade e a resposta do algoritmo numérico implementado. Serão avaliados problemas de transporte de contaminantes em 1D e 2D, problemas de transporte de contaminantes com transferência de massa, problemas de fluxo bifásico em 2D, e um problema que envolve tanto fluxo bifásico como transporte de contaminantes com transferência de massa.

Finalmente, no capítulo 7 são apresentadas as conclusões do trabalho desenvolvido bem como sugestões para trabalhos futuros.

2

Fluxo de fluidos imiscíveis no subsolo

O movimento dos DNAPLs no subsolo ocorre em três formas principais: na forma de fase líquida deslocando a água nos poros ou nas fraturas, na forma dissolvida na água formando a pluma dissolvida e transportando-se como soluto, e na forma volatilizada nas regiões não saturadas (Figura 1).

Um grande número de fatores afeta o fluxo de dois fluidos imiscíveis no meio poroso entre os quais são: forças capilares, forças viscosas, forças gravitacionais, a viscosidade dos fluidos e a tensão interfacial que os separa, as propriedades químicas e físicas das paredes dos poros ou das fraturas, as morfologias do espaço poroso e da rede de fraturas, e a molhabilidade dos fluidos (Sahimi, 2011).

Neste capítulo são apresentados os conceitos elementares que permitem definir as principais variáveis envolvidas nos modelos matemáticos que descrevem o fluxo bifásico em meios porosos.

2.1.

Grau de saturação

Quando o espaço de vazios no meio poroso está ocupado por mais de uma fase, a saturação da fase, ou grau de saturação da fase em um ponto, é a fracção do volume de vazio do meio poroso ocupado pela fase dentro do **V**olume **E**lementar **R**epresentativo, VER, (Figura 7) ao redor do ponto considerado,

$$S_{\alpha} = \frac{V_{\alpha,VER}}{V_{v,VER}} \quad (2-1)$$

onde $V_{\alpha,VER}$ é o volume de cada fase α presente no VER, e $V_{v,VER}$ é o volume de vazios no VER.

$$\sum_{\alpha} S_{\alpha} = 1 \quad (2-2)$$

2.2.

Tensão interfacial e molhabilidade

Quando um líquido está em contato com outra substância imiscível (líquido, gás ou sólido) existe uma energia interfacial livre entre a superfície de contato, que surge da diferente atração das moléculas dentro de cada fase com respeito à superfície de contato.

Desde que a superfície de contato possui energia livre se contrai se pode fazê-lo, e a energia interfacial livre se manifesta como uma tensão interfacial. (Bear, 1972)

A tensão interfacial σ_{ik} para duas substâncias i e k é definida como o trabalho requerido para separar uma área unitária de substância i da k .

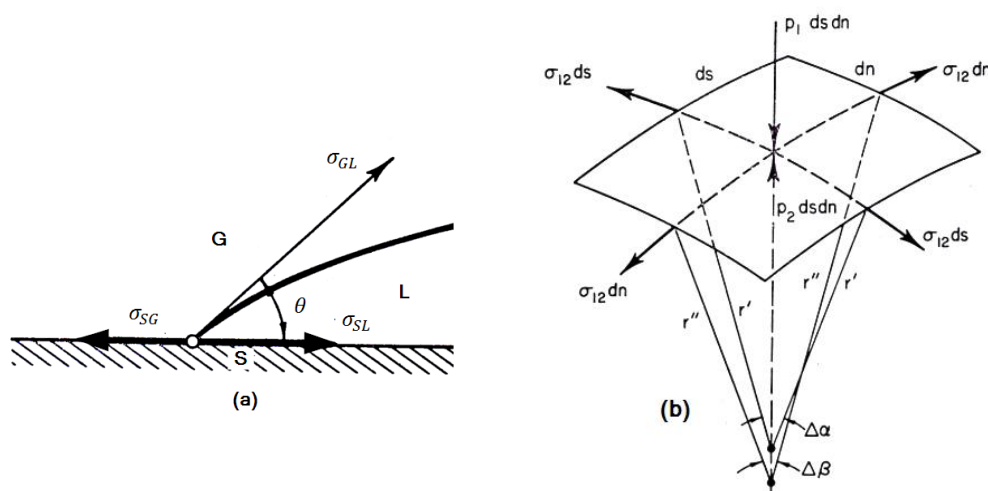


Figura 2: a) Tensões interfaciais. b) Interface curva de dois fluidos invisíveis (Bear, 1972).

A Figura 2, mostra dois fluidos imiscíveis, G e L , em contato com uma superfície sólida S , onde θ ($0 < \theta < 180$) é o ângulo entre a interface e a superfície SL e é chamado de *ângulo de contato*. θ é medido por convenção através do fluido mais denso.

Do equilíbrio das tensões atuantes surge:

$$\sigma_{GL} \cos \theta = \sigma_{SG} - \sigma_{SL} \quad (2-3)$$

onde $\sigma_{GL} \cos \theta$ é chamada de *tensão de adesão*, e define a preferência dos fluidos a aderir-se ou repeler-se da superfície.

Quando $\theta < 90$, o fluido é chamado de *fluido molhante*. Quando $\theta > 90$, o fluido é chamado de *fluido não molhante*.

A condição de molhante ou não molhante das fases depende da composição química dos fluidos e do sólido que forma a superfície.

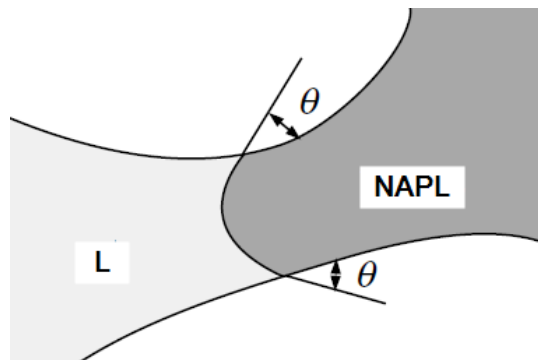


Figura 3: Interface água-NAPL num canal de poro entre dois grãos de areia (Bastian, 1999).

A Figura 3 mostra como num canal de poro entre dois grãos de areia, a fase líquida (água) se define como o fluido molhante sobre a superfície, e o NAPL como o fluido não molhante.

2.3. Pressão capilar

Na presença de dois fluidos imiscíveis dentro de um poro no meio poroso, existe uma descontinuidade nas pressões na interface que separa os fluidos. A diferença entre as pressões na interface é a *pressão capilar*,

$$p_c = p_n - p_w \quad (2-4)$$

onde p_c é a pressão capilar, p_n é a pressão do fluido não molhante, e p_w é a pressão do fluido molhante.

Para determinar analiticamente p_c é considerado o equilíbrio de uma área elementar num ponto da interface definida por os raios principais r' e r'' (Figura 2) e avaliando a variação da direção das forças atuantes em lados opostos; se obtém a equação (2-5):

$$\Delta p = p_c = p_2 - p_1 = \sigma_{12} \left(\frac{1}{r'} + \frac{1}{r''} \right) = \frac{2\sigma_{12}}{r} \quad (2-5)$$

onde r é o rádio médio de curvatura.

No meio poroso natural, a geometria dos vazios nos poros é complexa, irregular e difícil de descrever analiticamente mediante r' e r'' , é por isto que o modelo de um tubo capilar de radio r pode ser utilizado para obter uma expressão analítica simplificada para p_c :

$$p_c = \frac{2\sigma \cos \theta}{r} \quad (2-6)$$

onde para outras formas do capitar $2/r$ é substituído por $1/r^*$ onde r^* representa um rádio equivalente.

A pressão capilar depende da forma da interface entre as fases, que é modificada com o grau de saturação de cada fase, por tanto p_c pode ser expressa em função da saturação da fase molhante $p_c = p_c(S_w)$.

Como o ângulo de contato θ varia segundo a direção do deslocamento dentro do poro ou capilar, e como os efeitos de estrangulamentos dos capilares são normais dentro de um meio natural, a relação $p_c = p_c(S_w)$ é uma relação com *histerese*.

Quando o meio está inicialmente saturado com a fase molhante o processo de deslocamento é chamado de *drenagens* e a curva $p_c = p_c(S_w)$ e chamada de *curva de drenagens*. Quando o meio está inicialmente saturado com a fase não molhante o processo de deslocamento é chamado de *embebição* e a curva $p_c = p_c(S_w)$ e chamada de *curva de embebição*.

De este modo, p_c não depende só de S_w mas também depende da historia do meio em consideração.

Brooks e Corey (Brooks, et al., 1964) em base a numerosos ensaios de drenagens para diversos tipos de meios porosos, recomendaram a seguinte expressão para $p_c = p_c(S_w)$:

$$S_e = \left(\frac{p_b}{p_c} \right)^\lambda \quad \forall p_c : p_c > p_b \quad (2-7)$$

$$S_e = (S_w - S_{w0}) / (1 - S_{w0}) \quad (2-8)$$

onde S_e é chamada de saturação efetiva e é definida na equação (2-8), S_w é a saturação da fase molhante, S_{wo} é a saturação residual da fase molhante, p_b é a pressão de deslocamento, e λ é o índice de distribuição de tamanhos de poros do meio.

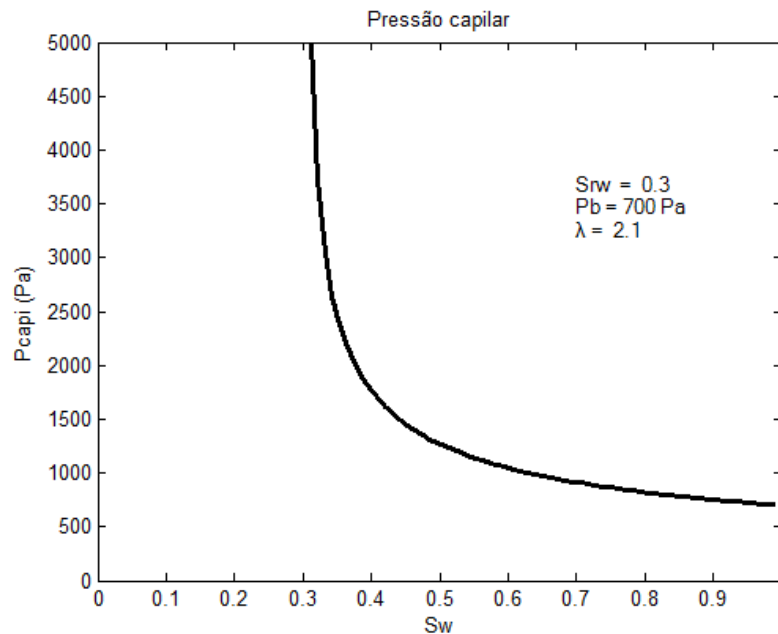


Figura 4: Pressão capilar a partir do modelo de Brooks e Corey.

2.4.

Permeabilidade relativa

Considerando a presença simultânea de dois fluidos num meio poroso, cada ponto do meio é ocupado parcialmente pelos fluidos. A permeabilidade relativa permite refletir o fato de que a presença de um fluido afeta diretamente na capacidade do meio de poder transmitir ou fazer fluir o outro.

A permeabilidade da fase α que depende de sua saturação pode ser expressa como:

$$K_{\alpha} = k_{r\alpha}(S_{\alpha}) K \quad (2-9)$$

$$0 \leq k_{r\alpha}(S_{\alpha}) \leq 1 \quad (2-10)$$

onde $k_{r\alpha}$ é a permeabilidade relativa da fase, K é a permeabilidade intrínseca do meio que independe dos fluidos e S_{α} é a saturação da fase.

Evidências experimentais indicam que o conceito da permeabilidade relativa que só depende da saturação da fase, é uma boa aproximação para todos os problemas práticos (Bear, 1972).

Fazendo uso de modelos teóricos para idealizar o meio poroso junto com considerações experimentais definidas pelas equações (2-7) e (2-8), a permeabilidade relativa é expressa como:

$$k_{rw} = (S_e)^{(2+3\lambda)/\lambda} \quad (2-11)$$

$$k_{rnw} = (1 - S_e)^2 (1 - S_e^{(2+\lambda)/\lambda}) \quad (2-12)$$

onde λ é o índice de distribuição de tamanhos de poros no meio, e deve ser estimado experimentalmente, S_e é a saturação efetiva e é definida pela equação (2-7).

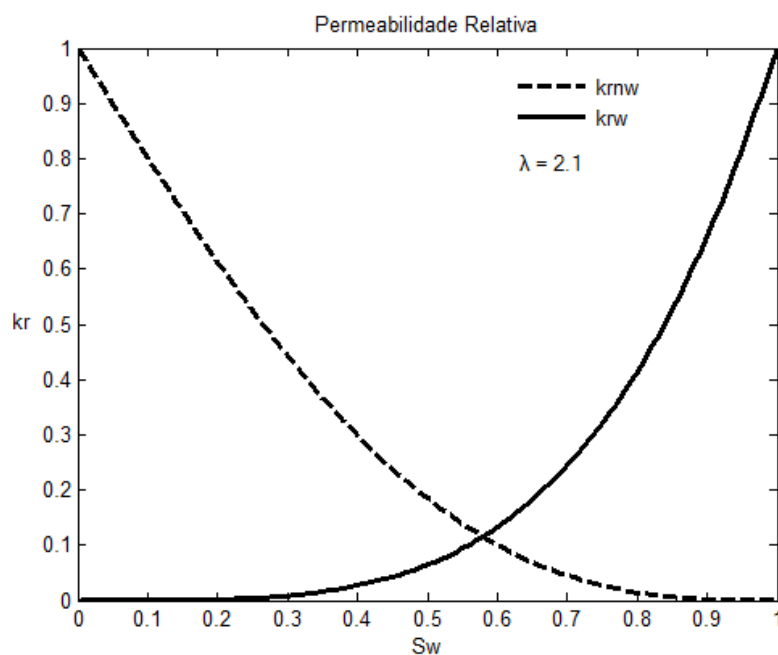


Figura 5: Permeabilidades relativas a partir do modelo de Brooks e Corey.

3

Considerações sobre a modelagem do problema do fluxo e transporte de contaminantes em meios porosos, em meios porosos fraturados, e em meios fraturados

No seguinte capítulo, no início são apresentados os conceitos envolvidos no processo de modelagem de um problema geral da natureza, em particular são considerados os modelos conceituais, os modelos matemáticos e os modelos numéricos. Seguidamente são apresentadas considerações relevantes sobre o modelo conceitual do fluxo e transporte de contaminante em meio poroso com enfoque de domínio contínuo. Logo são considerados os modelos conceituais do fluxo e transporte de contaminantes em meio poroso fraturado e em meio fraturado, onde são diferenciados os modelos de contínuo equivalente, os modelos contínuo equivalente com zonas de alta condutividade hidráulica, os modelos de dupla porosidade e os modelos de fraturas discretas. E por fim é discutida a aplicabilidade dos modelos conceituais conforme a considerações de escala do problema analisado.

3.1.

Introdução à modelagem

O fluxo e o transporte de contaminantes em meios porosos, em meios porosos fraturados, e em meios fraturados são processos da natureza que constituem sistemas complexos onde uma grande quantidade de variáveis são envolvidas. Estas variáveis, por sua vez, possuem escalas diferentes, macroscópicas e microscópicas, por tanto para lograr analisar e fazer predições do comportamento desses sistemas frente a diferentes condições de interesse, se precisa definir e delimitar um número finito de variáveis no sistema, e isto é realizado mediante o uso de modelos.

Um modelo pode ser definido como uma forma simplificada do sistema que representa, onde só aproximadamente logra emular o comportamento deste último. Os modelos levam em conta diferentes hipóteses simplificadoras que refletem o entendimento da natureza do sistema e de seu comportamento. Devido ao fato de que essas simplificações se relacionam com o objetivo do modelo, não existe um único modelo para um sistema analisado.

Os modelos utilizados neste trabalho, devido aos objetivos do mesmo, são modelos conceituais, modelos matemáticos e modelos numéricos. Não são considerados modelos físicos ou de laboratório, nem modelos análogos.

No processo de modelagem, o primeiro passo é construir um modelo conceitual do problema. O modelo conceitual resulta de assumir um conjunto de hipóteses que reduzem o sistema real a uma versão simplificada do mesmo, e que responde aos objetivos específicos do modelo.

O segundo passo é construir um modelo matemático. O modelo matemático consiste na definição, mediante expressões matemáticas, do domínio e das fronteiras do problema, do balanço das quantidades físicas envolvidas, das equações de movimento do fluxo, das equações constitutivas dos materiais, das condições iniciais, e das condições de fronteira que estabelecem as relações do domínio com seu entorno. Se as expressões matemáticas resultantes deste passo pudessem ser resolvidas analiticamente, a solução é chamada de *solução analítica* ou *exata* do problema. Porém, geralmente, é só possível de obter em problemas simples.

O terceiro passo é construir um modelo numérico. O modelo numérico é o conjunto de métodos utilizados para encontrar a solução numérica do modelo matemático, mediante a introdução de novas hipóteses simplificadoras com respeito ao modelo matemático, e por tanto, representa uma versão diferente aproximada do sistema real.

Na Figura 6 são estabelecidos de forma resumida os passos básicos do processo de modelagem.

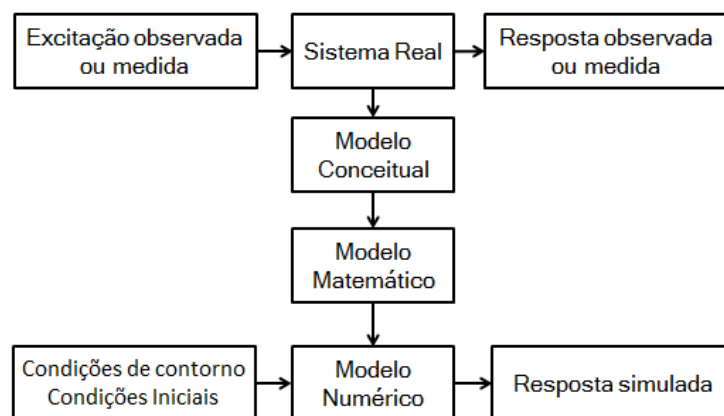


Figura 6: Esquema elementar do processo de modelagem.

3.2.

Modelo conceitual do fluxo e transporte em meio poroso. Enfoque de domínio contínuo

O meio poroso é formado por uma matriz de sólidos e por um espaço de vazios ocupado pelos fluidos. Isto é considerado válido para cada ponto do domínio.

Se para um único fluido que ocupa todos os vazios se resolveram as equações de Navier-Stokes dentro do domínio do fluido sujeito as condições de borde na interface sólido-fluido, não se poderia verificar os resultados neste nível (Bear, et al., 1987).

O enfoque contínuo do meio poroso é baseado na representação macroscópica de interações microscópicas, mediante valores médios das quantidades físicas do fluxo a traves de um elemento de volume representativo centrado em cada ponto do domínio. De modo que essas quantidades médias constituem um campo contínuo e diferenciável das variáveis sobre o domínio, permitindo a solução mediante métodos de análise matemáticos.

Este enfoque permite que os valores médios das variáveis possam ser medidas no campo ou no laboratório, possibilitando a obtenção de coeficientes que caracterizem o meio a nível macroscópico, e a verificação dos resultados obtidos no processo de modelagem.

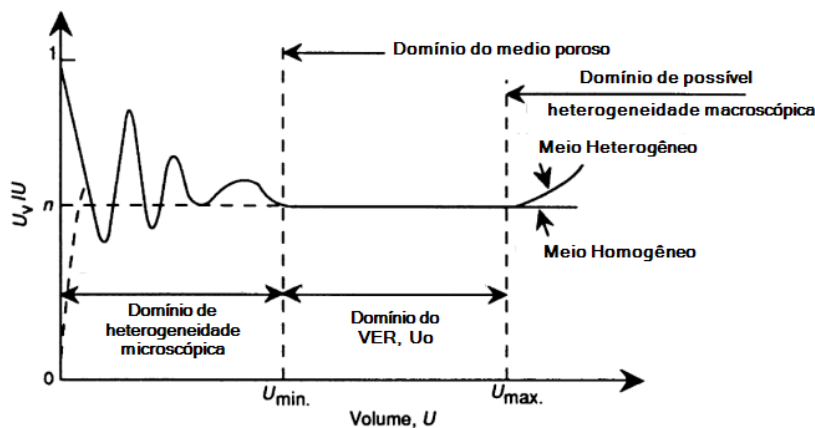


Figura 7: Variação da porosidade, ao redor de um ponto como função do tamanho do volume médio (Bear, et al., 1993).

O enfoque contínuo equivalente requer a definição do **V**olume **E**lementar **R**epresentativo (VER) onde os parâmetros que descrevem o meio macroscópico,

como a porosidade, a permeabilidade, entre outros, permanecem constantes neste volume.

Na Figura 7 é estabelecida a definição do VER baseada na porosidade, onde U representa o volume de uma esfera centrada num ponto, U_v representa o volume de vazios em U . Por tanto, o VER é definido para o valor de $U = U_0$ tal que a relação U_v/U independe de U .

A definição do VER é estendida a todos os coeficientes macroscópicos relevantes. O enfoque é apenas possível se é definido um VER comum para todos os coeficientes macroscópicos.

3.3.

Modelos conceituais do fluxo e transporte em meio poroso fraturado e em meio fraturado

Os modelos conceituais utilizados nos meios que envolvem macro poros ou fraturas tentam abordar o problema associado à representação adequada da heterogeneidade no meio.

As diferentes abordagens podem ser agrupadas em três classes: meio poroso equivalente, o modelo de dupla porosidade, e o modelo de rede de fraturas discretas (Cook, 2003) (Blessent, et al., 2014).

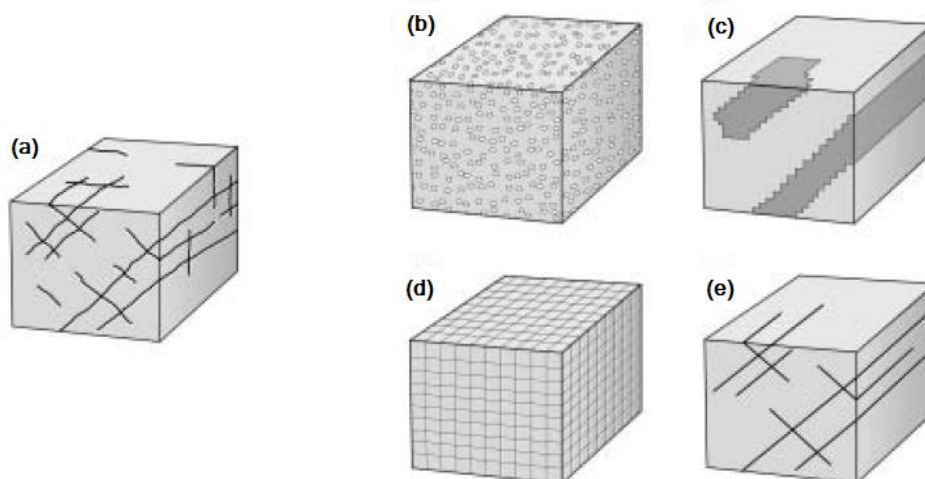


Figura 8: Diferentes modelos conceituais para meios rochosos fraturados. (a) Meio poroso fraturado real. (b) Modelo contínuo equivalente. (c) Modelo contínuo equivalente com zonas de alta condutividade hidráulica. (d) Modelo de dupla porosidade. (e) Modelo de fraturas discretas (Cook, 2003).

A continuação, são apresentadas as características principais de cada modelo conceitual respeito ao fluxo e ao transporte de contaminantes em meios porosos e meios porosos fraturados.

3.3.1. Modelo contínuo equivalente

No modelo contínuo equivalente o meio poroso fraturado e o meio fraturado são aproximados mediante um meio poroso contínuo equivalente. O efeito das heterogeneidades devido às fraturas, é levado em conta mediante a escolha adequada de parâmetros macroscópicos.

O enfoque contínuo é aplicável tanto ao domínio fraturado quanto ao domínio poroso fraturado, sempre que um VER, possa ser determinado para um problema e domínio específicos. (Bear, et al., 1993)

Um parâmetro essencial no modelado do fluxo e transporte de contaminantes em meios fraturados e meios porosos, é o tensor de permeabilidade equivalente. A permeabilidade a ser utilizada no modelo contínuo equivalente, será obtida mediante ensaios de campo ou de laboratório, realizados no domínio de interesse.

Se as fraturas podem ser agrupadas em conjuntos e cada conjunto de fraturas tem uma abertura constante, um espaçamento uniforme e uma orientação dominante, o tensor de permeabilidade equivalente pode ser encontrado analiticamente a partir da superposição dos tensores de cada conjunto de fraturas (ODA, 1985),

$$[K] = \sum_{i=1}^m \frac{g a_i^3}{12 b_i v} \begin{bmatrix} 1 - (n_x^i)^2 & -n_x^i n_y^i & -n_x^i n_z^i \\ -n_y^i n_x^i & 1 - (n_y^i)^2 & -n_y^i n_z^i \\ -n_z^i n_x^i & -n_z^i n_y^i & 1 - (n_z^i)^2 \end{bmatrix} + [kr] \quad (3-1)$$

onde $[K]$ é o tensor de permeabilidade equivalente, m é o número de conjuntos de fraturas, a_i é a abertura da fratura do conjunto, b_i é o espaçamento entre as fraturas, n_x^i é o componente x do vetor dos cossenos diretores da normal à fratura, $[kr]$ é tensor de permeabilidade do meio poroso ou da rocha intata, v é o coeficiente de viscosidade dinâmica do fluido, e g é a aceleração da gravidade.

A equação (3-1) assume como válida a sobreposição das permeabilidades das fraturas e da rocha intacta, ignorando a complexa interconexão entre as fraturas e o fluxo entre as fraturas e a rocha (HE, et al., 2012).

3.3.2. Modelo de dupla porosidade

Também chamado de contínuo superposto, contínuo duplo, ou dupla porosidade, é um modelo conceitual onde o meio poroso fraturado é substituído por dois domínios superpostos que interatuam: um deles representa a rede de fraturas e o outro representa ao meio poroso.

Neste modelo, cada subdomínio tem parâmetros diferentes que descrevem o fluxo e o transporte de contaminantes de forma individual, porém, os domínios superpostos interatuam mediante parâmetros que levam em conta a transferência de massa entre eles.

A principal vantagem deste modelo é que na modelagem do fluxo transiente o atraso na resposta hidráulica de uma rocha fraturada causada pelo fluido nos blocos da matriz menos permeáveis pode ser simulada. Em tais casos, o fluido é liberado primeiro desde as fraturas e em seguida desde a matriz, devido a um gradiente de pressão que é criado entre o fluido da matriz e o fluido contido nas fraturas (Cook, 2003).

3.3.3. Modelo de fraturas discretas

O modelo de redes de fraturas discretas ou DFN (**D**iscrete **F**racture **N**etwork) é uma abordagem que considera os processos de fluxo e transporte de fluidos em maciços rochosos fraturados através de um sistema de fraturas conectadas.

A técnica foi criada na década de 1980 para problemas 2D e 3D e posteriormente continuou seu desenvolvimento com diversas aplicações na engenharia ambiental, na engenharia de reservatórios, e em outras áreas de geociências e geoengenharia (Jing, et al., 2007).

No modelo de fraturas discretas as fraturas são definidas e representadas explicitamente a partir das propriedades individuais: abertura, orientação e comprimento.

Esta definição individual permite levar em conta um alto grau de heterogeneidades na definição do domínio no processo de modelagem do médio

fraturado, e em consequência permite criar um modelo detalhado do domínio do fluxo e transporte de contaminantes no meio fraturado.

Os requerimentos computacionais do modelo são diretamente proporcionais ao nível de detalhe na definição da rede de fraturas, por tanto os modelos resultam computacionalmente limitados a um número relativamente pequeno de fraturas que podem ser incluídas na rede.

No modelo de fraturas discretas pode se considerar o fluxo e o transporte de contaminantes decorrente tanto nas fraturas quanto na matriz rochosa. Porém, se a permeabilidade da matriz é muito baixa em relação às fraturas, pode se levar em conta uma simplificação ao considerar que o fluxo ocorre só através das fraturas.

3.4.

Considerações de escala: Aplicabilidade dos modelos conceituais

A escolha do tipo de modelo que melhor representa o domínio fraturado está relacionada com os objetivos específicos do modelo, o recurso computacional disponível, e principalmente com a escala do problema.

Respeito à escala do problema analisado, é possível classificar os diversos problemas de fluxo e transporte de contaminantes sobre domínios rochosos, porosos ou fraturados (Bear, et al., 1993).

Estas escalas são detalhadas a continuação.

3.4.1.

Escala 1: Muito próxima ao campo

O interesse é focalizado no fluxo e transporte dentro de uma fratura discreta com possibilidade de troca de quantidades entre o meio poroso e seu redor.

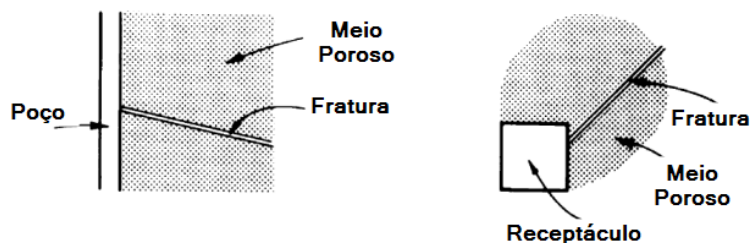


Figura 9: Escala muito próxima ao campo (Bear, et al., 1993).

Esta escala se corresponde com uma representação discreta de uma única fratura mediante o modelo DNF.

3.4.2.

Escala 2: Próxima ao campo

O fluxo e o transporte de contaminante são considerados num domínio que contem um número reduzido de fraturas. Os parâmetros que definem cada fratura devem ser estabelecidos de maneira explícita, podendo ser uma definição estocástica ou determinística. A construção estocástica, a diferença da construção determinística, utiliza parâmetros aleatórios na definição das fraturas.

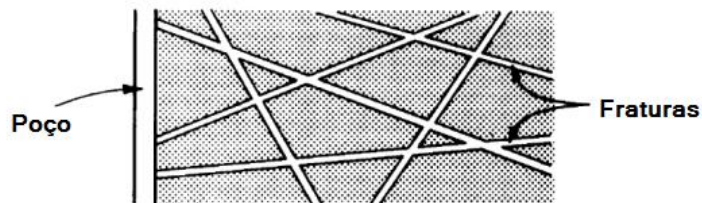


Figura 10: Escala Próxima ao campo. (Bear, et al., 1993)

Esta escala se corresponde com um modelo discreto de uma rede de fraturas no domínio poroso. Isto é que o modelo discreto DNF poderia ser aplicado para o modelado nesta escala.

3.4.3.

Escala 3: Longe do campo

O fluxo e o transporte de contaminantes podem ser considerados simultaneamente através de dois contínuos superpostos: um formado pelas fraturas e outro pelos poros; podendo existir a possibilidade de troca de quantidades entre os dois contínuos.

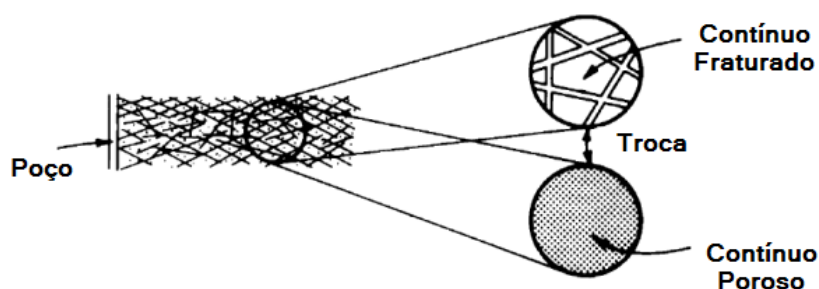


Figura 11: Escala: Longe do campo (Bear, et al., 1993).

Esta escala se corresponde com um modelo de dupla porosidade, onde a definição de dois contínuos é requerida. Pode-se definir mais de dois contínuos superpostos, em função das características do problema a modelar.

3.4.4.

Escala 4: Muito longe do campo

O fluxo em todo o domínio do meio poroso fraturado pode ser considerado que ocorre num contínuo único. As propriedades geométricas do espaço vazio refletem a rede de fraturas e os blocos do meio poroso em seu conjunto.



Figura 12: Escala Muito longe do campo (Bear, et al., 1993).

Esta escala se corresponde com o modelo contínuo equivalente. Isto é que o modelo contínuo equivalente poderia ser aplicado para o modelado nesta escala.

4

Formulação matemática do problema de fluxo bifásico em meios porosos e transporte de contaminantes

No seguinte capítulo são desenvolvidas e apresentadas as equações matemáticas que governam o fluxo bifásico em meios porosos, o transporte de contaminantes em meios porosos, e os processos governantes na dissolução entre as fases dentro do fluxo bifásico como consequência do transporte de contaminantes.

As equações apresentadas neste capítulo serão logo resolvidas numericamente por diferentes métodos e esquemas numéricos apresentados no capítulo quinto.

4.1.

Formulação matemática do fluxo bifásico em meios porosos

O fluxo de fluidos imiscíveis num meio poroso é formulado para cada fase presente no meio a partir da conservação de massa da fase num ponto qualquer do domínio Ω , e a partir de uma lei de movimento que descreva o movimento dessa fase no meio.

A vazão infinitesimal de uma fase α num ponto qualquer do domínio considerado Ω é a diferença entre a vazão total de entrada e a vazão total de saída,

$$dQ = dQ^{\text{ent}} - dQ^{\text{sai}} \quad (4-1)$$

Considerando as velocidades apresentadas na Figura 13, são definidas as vazões de entrada e de saída da fase mediante as equações (4-2) e (4-3),

$$dQ^{\text{ent}} = v_x \, dz \, dy + v_y \, dz \, dx + F_\alpha \, dV \quad (4-2)$$

$$dQ^{\text{sai}} = \left(v_x + \frac{\partial v_x}{\partial x} dx \right) dz \, dy + \left(v_y + \frac{\partial v_y}{\partial y} dy \right) dz \, dx \quad (4-3)$$

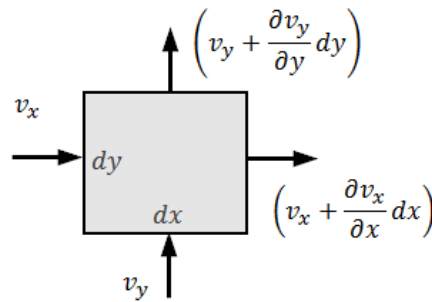


Figura 13: Velocidades da fase α num ponto infinitesimal do domínio Ω .

A vazão da fase α no elemento de volume $dV = dx \, dz \, dy$ pode também ser expressa em função da variação no tempo do volume da fase α presente nos vazios:

$$dQ = \frac{\partial}{\partial t} (dV_\alpha) = \frac{\partial}{\partial t} (S_\alpha \, dV_v) = \frac{\partial}{\partial t} (S_\alpha \, \phi \, dV) \quad (4-4)$$

Combinando as equações (4-2), (4-3) e (4-4) na equação (4-1), assumindo que os fluidos são incompressíveis, e que o volume de sólidos do meio poroso não varia com o tempo, se atinge à equação (4-5) que representa a conservação de massa para cada fase α presente em cada ponto do domínio Ω :

$$\phi \frac{\partial S_\alpha}{\partial t} + \nabla \cdot \{v_\alpha\} = F_\alpha \quad (4-5)$$

$$\alpha = n, w$$

onde ϕ é a porosidade do meio, n é a fase não molhante, w é a fase molhante, e S_α , F_α , e v_α são a saturação, o termo fonte ou a taxa de fluxo externo, e a velocidade da fase α , respetivamente.

Assumindo a lei de movimento de Darcy, a velocidade da fase α está representada pela equação (4-6),

$$v_\alpha = -\frac{k_{r\alpha}}{\mu_\alpha} K (\nabla p_\alpha + \rho_\alpha g \nabla z) \quad | \quad \alpha = n, w \quad (4-6)$$

onde K é o tensor de permeabilidade intrínseca do meio, p_α , ρ_α , $k_{r\alpha}$, e μ_α são a pressão, a densidade, a permeabilidade relativa e a viscosidade da fase α , respectivamente.

Assumindo o fluxo bifásico no meio, as saturações das fases estão restritas a:

$$S_n + S_w = 1 \quad (4-7)$$

As pressões das fases são relacionadas pela pressão capilar mediante a equação (2-4),

$$p_c = p_n - p_w \quad (4-8)$$

O potencial do fluxo Φ_α de cada fase α , é definido como:

$$\Phi_\alpha = p_\alpha + \rho_\alpha g z \quad (4-9)$$

Combinando as equações (4-8) e (4-8) é definido o potencial capilar,

$$\Phi_c = \Phi_n - \Phi_w = p_c + (p_n - p_w)g z \quad (4-10)$$

Assumindo que a velocidade total ou a vazão específica total é dada por a soma das velocidades de cada fase presente no meio,

$$v_t = v_n + v_w \quad (4-11)$$

definindo a mobilidade da fase α como:

$$\lambda_\alpha = \frac{k_{r\alpha}}{\mu_\alpha} \quad (4-12)$$

expressando a equação (4-11) em termos da lei de Darcy (4-6) e considerando a definição de mobilidade da fase dada pela (4-12), temos:

$$v_t = -\lambda_t K \nabla \Phi_w - \lambda_n K \nabla \Phi_c = v_a + v_c \quad (4-13)$$

onde $\lambda_t = \lambda_n + \lambda_w$ é a mobilidade total.

A velocidade da fase molhante, v_w , pode ser expressa em termos da velocidade v_a mediante a seguinte definição de $f_w = \frac{\lambda_w}{\lambda_t}$,

$$v_w = f_w v_a \quad (4-14)$$

As equações governantes do fluxo são o balance de massa dada pela combinação das equações (4-5), (4-7) e (4-13), e a equação da saturação da fase molhante em termos de v_a e f_w dada pela (4-16),

$$\nabla \cdot \{v_a + v_c\} = F_n + F_w \quad (4-15)$$

$$\phi \frac{\partial S_w}{\partial t} + \nabla \cdot \{f_w v_a\} = F_w \quad (4-16)$$

O sistema formado pelas equações (4-15) e (4-16) está submetido a condições iniciais e a condições de contorno que descrevem as saturações iniciais, as pressões no contorno e os fluxos externos.

A equação (4-15) está submetida às seguintes condições de contorno:

$$p_w \vee p_n = p^D \quad \forall \Gamma^D \in \Omega \quad (4-17)$$

$$(v_a + v_c) \cdot \vec{n} = q^N \quad \forall \Gamma^N \in \Omega \quad (4-18)$$

A equação (4-16) está submetida a

$$S_w = S^0 \quad \forall \Omega \quad (4-19)$$

$$S_w \vee S_n = S^N \quad \forall \Gamma^N \in \Omega \quad (4-20)$$

onde $\Gamma = \Gamma^N \cup \Gamma^D$ é o contorno do domínio computacional Ω , e Γ^N com Γ^D são os contornos não superpostos, correspondentes aos contornos de Dirichlet e Neumann respectivamente.

q^N e p^D são os valores prescritos da vazão injetada no contorno e da pressão sobre Γ^N e Γ^D respectivamente, \vec{n} é o vetor unitário normal ao contorno, S^0 é a saturação inicial, e S^N é a saturação no contorno do fluido injetado sobre Γ^N .

4.2.

Formulação matemática do transporte de contaminantes

A equação governante do transporte de contaminante submetido a sorção linear e decaimento de primeira ordem, onde o fluido é assumido incompressível e o meio indeformável, é dada por:

$$\frac{\partial}{\partial x_i} \left(D_{ij} \frac{\partial C}{\partial x_j} \right) - v_i \frac{\partial C}{\partial x_i} - R \lambda C = R \frac{\partial C}{\partial t} \quad (4-21)$$

onde C é a concentração do soluto transportado no fluido, D_{ij} é o tensor de dispersão, v_i é a velocidade média das águas subterrâneas, λ é a constante de decaimento, e R é o coeficiente de retardamento.

Assumindo que o decaimento é de primeira ordem, como aquele devido a certas reações químicas (reações radioativas ou biodegradação), este tipo de reações é representado pela equação (4-22),

$$\frac{\partial C}{\partial t} = -\lambda C \quad (4-22)$$

A solução da equação (4-22) é dada pela (4-23),

$$C(t) = C_0 e^{-\lambda t} \quad (4-23)$$

A meia-vida de um composto é o tempo requerido para que a massa do composto diminua até a metade da massa inicial, considerando unicamente a influência do decaimento (Zheng, et al., 2002).

A partir da equação (4-23) o fator de decaimento λ em função da vida média do composto é dada pela equação (4-24),

$$\lambda = \frac{\ln 2}{t_{1/2}} \quad (4-24)$$

onde $t_{1/2}$ é a meia-vida do soluto.

O decaimento assim definido envolve tanto o decaimento da fase dissolvida quanto o decaimento da fase sorvida.

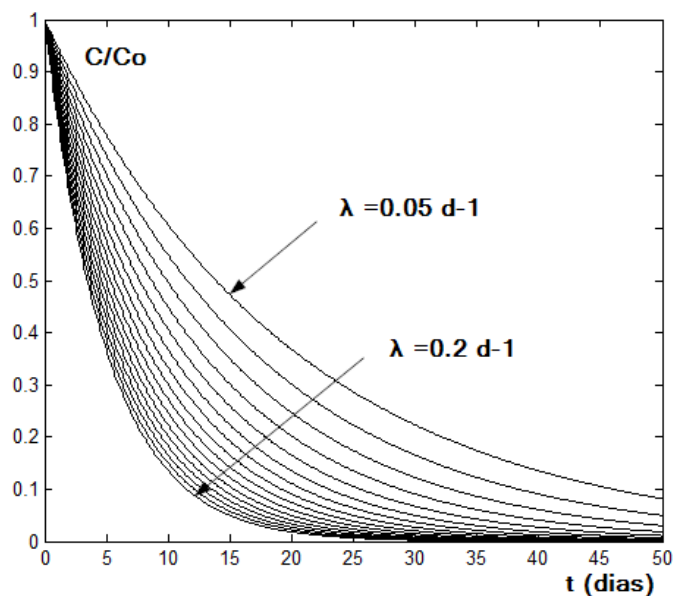


Figura 14: Concentração relativa em função do tempo, como resultado de um decaimento de primeira ordem para diferentes fatores de decaimento λ .

A sorção é considerada a partir do coeficiente de distribuição K_d que é dado pela equação (4-25), ao assumir como válida uma isoterma de sorção linear (Figura 15).

$$\frac{\partial \bar{C}}{\partial C} = K_d \quad (4-25)$$

onde C representa a concentração dissolvida, e \bar{C} representa a concentração de soluto sorvido.

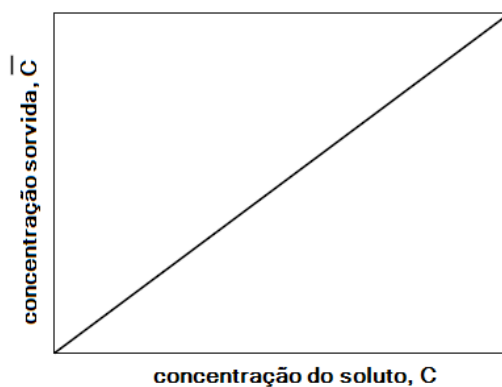


Figura 15: Isotherma de sorção.

Esta relação de concentrações afeta ao balanço de massa no elemento do domínio. Esta variação é representada na equação de transporte a partir do coeficiente de retardamento R dada pela equação (4-26),

$$R = 1 + \frac{\rho_b}{\eta} K_d \quad (4-26)$$

onde ρ_b é a densidade volumétrica do meio e K_d é o coeficiente linear de distribuição.

A equação de transporte (4-21) requer condições iniciais e de contorno no domínio Ω .

As condições iniciais estabelecem o valor da variável desconhecida dentro do domínio, antes do que o sistema seja considerado no tempo. De maneira geral a condição inicial pode ser considerada como (Zheng, et al., 2002):

$$C(x, y, z, 0) = C^0(x, y, z) \quad \forall \Omega \quad (4-27)$$

As condições de contorno permitem obter uma solução particular da equação de transporte e modelar condições reais associadas a um problema específico.

Na condição de contorno do *Tipo I*, também chamada de *Dirichlet*, a concentração é especificada ou prescrita no contorno:

$$C(x, y, z, t) = c(x, y, z) \quad \forall \Gamma_1 \mid t > 0 \quad (4-28)$$

onde Γ_1 é o contorno de concentração prescrita, e $c(x, y, z)$ é a concentração especificada no contorno Γ_1 .

Na condição de contorno do *Tipo II*, também chamada de *Neumann*, o gradiente da concentração é especificado na direção normal ao contorno do domínio:

$$-D_{ij} \frac{\partial C}{\partial x_j} = f_i(x, y, z) \quad \forall \Gamma_2 \mid t > 0 \quad (4-29)$$

onde $f_i(x, y, z)$ é uma função que representa o fluxo dispersivo normal ao contorno Γ_2 .

Na condição de contorno do *Tipo III*, também chamada de *Cauchy*, é especificada a concentração e o gradiente ao longo do contorno. Esta condição é uma combinação das anteriores do *Tipo I* e *Tipo II*:

$$-D_{ij} \frac{\partial C}{\partial x_j} + v_i C = g_i(x, y, z) \quad \forall \Gamma_3 \mid t > 0 \quad (4-30)$$

onde $g_i(x, y, z)$ é uma função que representa o fluxo total dispersivo e advectivo normal ao contorno Γ_3 .

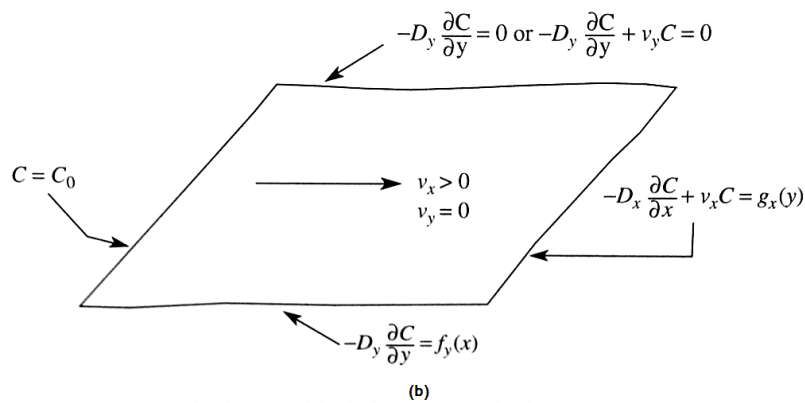
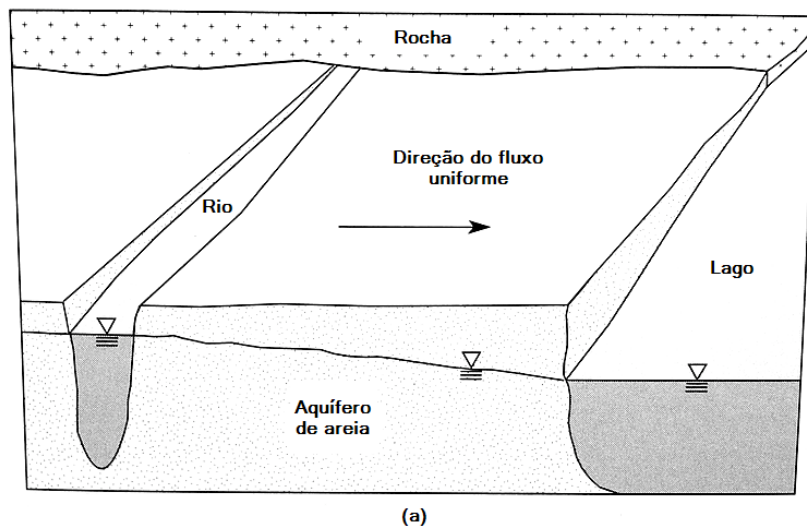


Figura 16: Condições de contorno para um problema de fluxo e transporte de contaminantes. (a) Sistema de fluxo. (b) Condições de contorno para transporte de contaminantes (Zheng, et al., 2002).

O tensor de dispersão que expressa o fluxo dispersivo em termos das coordenadas x, y é dado por (Zheng, et al., 2002):

$$D_{xx} = \alpha_L \frac{v_x^2}{|v|} + \alpha_T \frac{v_y^2}{|v|} + D^* \quad (4-31)$$

$$D_{yy} = \alpha_T \frac{v_x^2}{|v|} + \alpha_L \frac{v_y^2}{|v|} + D^* \quad (4-32)$$

$$D_{xy} = (\alpha_L - \alpha_T) \frac{v_y v_x}{|v|} \quad (4-33)$$

onde D^* é o coeficiente de difusão molecular, α_T e α_L são respectivamente a dispersividade transversal e longitudinal, v_y é a velocidade do fluxo no meio na direção y , e $|v|$ é o vetor resultante das componentes v_x e v_y das velocidades do fluxo das águas subterrâneas.

4.3. Dissolução do contaminante

A concentração do contaminante no sistema de águas subterrâneas nos pontos de contato entre os fluidos invisíveis é consequência de uma transferência de massa entre os fluidos. Assim, em função da forma em que acontece esta transferência, a distribuição da concentração do contaminante pode ser considerada constante e com um valor correspondente ao estado de equilíbrio termodinâmico, ou pode ser considerada variável no tempo.

A distribuição da concentração do contaminante baseada no equilíbrio termodinâmico pode existir quando a transferência de massa é potencialmente mais significativa que o transporte advectivo-dispersivo-reativo. Por outro lado, se o transporte no sistema for mais significativo do que a transferência de massa entre as fases, o equilíbrio termodinâmico nas fases pode não ser atingido e a transferência de massa irá ocorrer de modo de variar as concentrações em direção à condição de equilíbrio (Seagren, et al., 1999) (Borges, 2002).

Com o objetivo de levar em consideração o fenômeno da dissolução do contaminante na fase não molhante e poder modelar problemas numericamente, a continuação se apresenta o modelo matemático deste fenômeno. Posteriormente, ele será incorporado às equações governantes do transporte de contaminantes.

4.3.1.

Dissolução limitada por uma taxa de transferência de massa

Quando o equilíbrio não existe entre as concentrações do composto i dentro de cada fase, a transferência de massa entre as fases acontecerá de tal maneira de mudar a composição do sistema para o equilíbrio (Seagren, et al., 1999).

Matematicamente, a transferência de massa na direção normal entre as fases é descrita pela equação (4-34) (Seagren, et al., 1999):

$$J = k_{tm} (C_{equi} - C_i) \quad (4-34)$$

onde J é o fluxo de massa de contaminante por unidade de área, k_{tm} é a taxa de transferência de massa, C_{equi} é a concentração da substância i corresponde à condição de equilíbrio termodinâmico entre as fases, C_i é a concentração da substância ou composto i na fase.

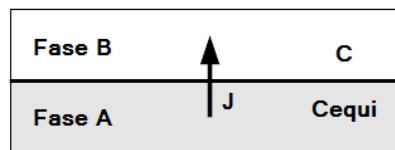


Figura 17: Modelo de transferência de massa na direção normal entre as fases.

O fluxo de massa de contaminante é expresso por área de interface entre as fases. Esta área é estimada em função da curva capilar do solo para os fluidos em consideração, do ângulo de contato, e da tensão interfacial entre eles.

No caso em que o ângulo de contato do fluido molhante é zero, a área da interface por unidade de volume de poros do meio é dada pela equação (4-35) (Bradford, et al., 1997):

$$A_{nw}(S_w) = \frac{\phi_{nw}(S_w) + C_{nw}}{\sigma_{nw}} \quad (4-35)$$

onde A_{nw} é a área da interface entre os fluidos não molhante e molhante por unidade de volume de poros do meio, S_w é o grau de saturação do fluido molhante, σ_{nw} é a tensão interfacial entre as fases, $\phi_{nw}(S_w)$ representa a área

sob a curva capilar do solo e é dada pela equação (4-36), e C_{nw} é uma constante de integração numericamente igual à área sob a curva capilar no trecho inicial de drenagem primária ($1 - S_{rn} < S_w < 1$).

$$\phi_{nw}(S_w) = - \int_{1-S_{rn}}^{S_w} P_{nw}(z) dz \quad (4-36)$$

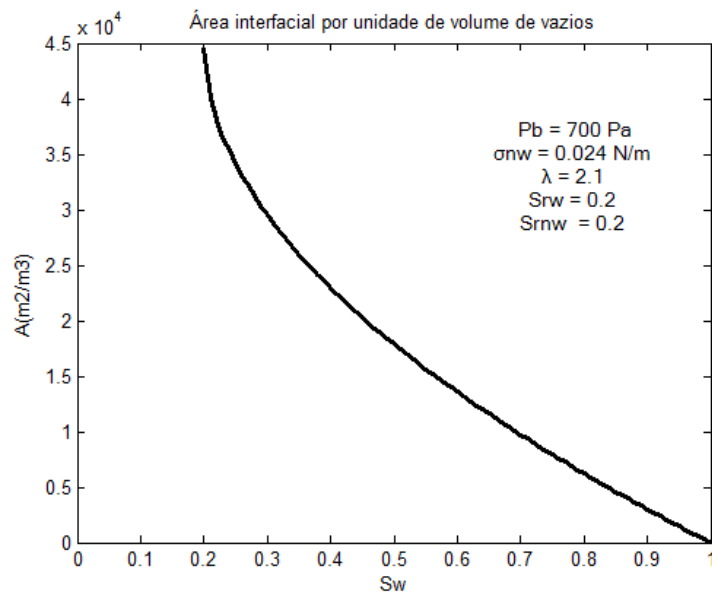


Figura 18: Área interfacial por unidade de volume de vazios.

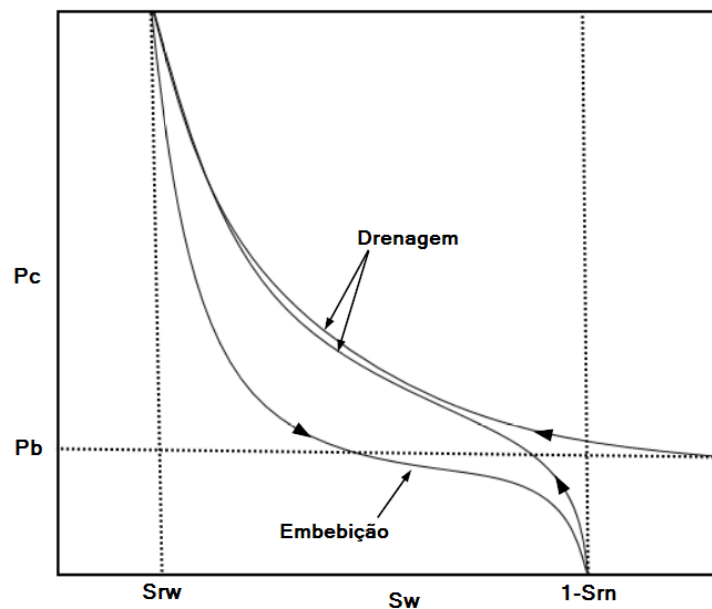


Figura 19: Curva típica de pressão capilar e saturação da fase molhante durante os processos de drenagem e embebição.

Considerando um volume elementar representativo do meio poroso com volume total V_t , em presença de dois fluidos imiscíveis, um molhante e outro não molhante com massas M_w e M_{nw} respectivamente, a conservação de massa no volume elementar é dada pela equação (4-37),

$$\frac{\partial}{\partial t} \left(\frac{M_n}{V_t} \right) + \frac{\partial}{\partial t} \left(\frac{M_w}{V_t} \right) = 0 \quad (4-37)$$

ou seja que toda variação de massa na fase molhante tem que refletir-se numa variação numericamente igual à massa da fase não molhante.

As variações de massa entre cada fase devido ao processo de transferência de massa por dissolução é dado pela equação (4-34) e a área interfacial pela equação (4-35),

$$\frac{\partial M_{trans}}{\partial t} = J A_{nw} V_v \quad (4-38)$$

onde V_v é o volume de vazios do meio.

Para relacionar a variação da saturação das fases no tempo com a variação de massa que é transferida por unidade de tempo, são utilizadas as relações entre a saturação da fase, o volume de vazios, o volume total e a porosidade do meio

$$S_\alpha = \frac{V_\alpha}{V_v} \quad (4-39)$$

$$\eta = \frac{V_v}{V_t} \quad (4-40)$$

A massa da fase α é a densidade da fase multiplicada por o volume da fase:

$$M_\alpha = \rho_\alpha V_\alpha \quad (4-41)$$

Combinando as equações (4-39) (4-40) (4-41) e assumindo que a densidade da fase e a porosidade do meio são mantidas constantes, é obtida a equação (4-42) que representa a variação da massa da fase α no tempo. Assim:

$$\frac{\partial M_{\alpha}}{\partial t} = \rho_{\alpha} \eta V_t \frac{\partial S_{\alpha}}{\partial t} \quad (4-42)$$

Considerando que as variações de massa são devidas somente às variações geradas pela transferência de massa dada pela equação (4-38), e combinando as equações (4-42) e (4-34) (4-35) é obtida a variação da saturação da fase α no tempo:

$$\frac{\partial S_{\alpha}}{\partial t} = \frac{k_{tm} (C_{equi} - C_i) A_{nw}}{\rho_{\alpha}} \quad (4-43)$$

Durante as variações das saturações molhante e não molhante, se a transferência de massa é na direção da fase não molhante para a fase molhante, a equação (4-43) resulta positiva e resulta negativa ao inverso.

A variação no tempo da concentração de um composto i na fase molhante é obtida mediante a equação (4-42),

$$\frac{\partial C_i}{\partial t} = \frac{\partial}{\partial t} \left(\frac{M_w}{V_w} \right) = \frac{\partial}{\partial t} \left(\frac{M_w}{S_w \eta V_t} \right) \quad (4-44)$$

$$\frac{\partial C_i}{\partial t} = \frac{1}{\eta V_t} \left(\frac{\partial M_w}{\partial t} \frac{1}{S_w} + \frac{\partial}{\partial t} \left(\frac{1}{S_w} \right) M_w \right) \quad (4-45)$$

Combinando a equação (4-45), (4-42) e a equação (4-46),

$$\frac{\partial}{\partial t} \left(\frac{1}{S_w} \right) = - \frac{\partial S_w}{\partial t} \frac{1}{S_w^2} \quad (4-46)$$

é obtida a variação no tempo da concentração de um composto i na fase molhante:

$$\frac{\partial C_i}{\partial t} = \frac{k_{tm} (C_{\text{equi}} - C_i) A_{nw} - C_i \frac{\partial S_w}{\partial t}}{S_w} \quad (4-47)$$

O modelo de dissolução queda representado matematicamente pelas equações (4-43) e (4-47).

5

Modelagem numérica do fluxo bifásico e transporte de contaminantes

Neste capítulo são apresentadas as soluções das equações governantes do fluxo bifásico e transporte de contaminantes, obtidas a partir de a implementação de técnicas computacionais e esquemas de integração numérica. As equações do fluxo bifásico serão resolvidas mediante técnicas de elementos finitos mistos hibridizados (HMFE) e elementos finitos descontínuos (GD). As equações do transporte de contaminantes serão resolvidas mediante a técnica dos elementos finitos convencional (EF). Na aproximação da equação de transporte serão apresentadas as restrições da malha que permitem minimizar o erro numérico na aproximação, causado principalmente pelo termo advectivo.

5.1.

Modelagem numérica do fluxo bifásico

O fluxo simultâneo de fluidos imiscíveis em meios porosos ocorre numa ampla variedade de problemas e aplicações na engenharia. As equações que regem esses fluxos são inerentemente não lineares, e na natureza, as geometrias e propriedades dos materiais que caracterizam os problemas em engenharia de petróleo e engenharia das águas subterrâneas, podem ser bastante irregulares e heterogêneos. Como resultado, a simulação numérica muitas vezes oferece a única abordagem viável para a modelagem matemática de fluxo multifásico (Allen, 1985).

Uma aproximação precisa do fluxo e uma baixa dependência da malha são características desejáveis para que um esquema ou método numérico seja adequado para a modelagem numérica do fluxo bifásico no meio heterogêneo (Hoteit, et al., 2008). Essa aproximação precisa pode ser obtida mediante a técnica numérica dos elementos finitos mistos MFE (Brezzi, et al., 1991).

No MFE convencional para equações elípticas ou parabólicas, são calculadas simultaneamente as pressões na célula e os fluxos nas interfaces. O resultado é um sistema linear relativamente grande e indefinido. Por isso é

utilizado o método misto hibridizado que provê um sistema linear e simétrico com as pressões nas faces como principais incógnitas (Hoteit, et al., 2008).

O método hibridizado HMFE é algebricamente equivalente ao método convencional misto MFE, porém mais eficiente (Brezzi, et al., 1991).

Conforme à metodologia utilizada por Hoteit e Firoozabadi (Hoteit, et al., 2008) o método Galerkin descontínuo resulta ótimo para descrever problemas de domínios não estruturados além de fornecer conservação de massa a nível local sobre os elementos. Neste trabalho é utilizado o método de Galerkin descontínuo (DG) com um esquema temporal de Runge-Kuta para aproximar a saturação, e o método misto hibridizado (HMFE) para aproximar a pressão no fluxo bifásico.

5.1.1.

Resolução das equações de fluxo bifásico mediante o método dos elementos finitos

O esquema numérico utilizado é o *Implicit-Pressure-Explicit-Saturation* (IMPES), onde a equação da pressão e a equação da saturação são resolvidas sequencialmente pelos métodos HMFE e DG respetivamente. O processo é detalhado a continuação.

5.1.2.

Aproximação do fluxo

O método HMFE é baseado no espaço Raviart-Thomas RT_0 que define o vetor velocidade sobre cada célula de elementos finitos K em termos de fluxos através da face da célula E .

A velocidade $v_{a,K}$ (4-13) sobre o elemento K é definida a partir dos fluxos através das faces E_i do elemento e as funções do espaço RT_0 ,

$$v_{a,K} = \sum_{E \in \partial K} q_{a,K,E} w_{K,E} \quad (5-1)$$

onde $\partial K = \{E_i; i = 1, \dots, N_e\}$ e N_e é o número de faces em cada elemento da malha.

Considerando uma definição modificada do tensor de permeabilidade dada pela equação (5-2), pode ser reescrita a equação da velocidade $v_{a,K}$ no elemento K ,

$$\tilde{K}^{-1} = \frac{1}{\lambda_t} K^{-1} \quad (5-2)$$

$$\tilde{K}_K^{-1} v_{a,K} = -\nabla \Phi_w \quad (5-3)$$

A formulação variacional do HMFE é obtida multiplicando a equação (5-3) pelas funções de interpolação $w_{E,K}$ do espaço RT_0 , e integrando por partes sobre o elemento K :

$$\int_K w_{E,K} \tilde{K}_K^{-1} v_{a,K} = \int_K \Phi_w \nabla \cdot w_{E,K} - \int_{\partial K} \Phi_w w_{E,K} \cdot n_{E,K} \quad (5-4)$$

As funções de interpolação $w_{E,K}$ do espaço RT_0 , são funções linearmente independentes e satisfazem as propriedades dadas pelas seguintes equações:

$$\nabla \cdot w_{E,K} = \frac{1}{|K|} \quad (5-5)$$

$$w_{E,K} \cdot \vec{n}_{E',K} = \begin{cases} 1/|E| & \Leftrightarrow E = E' \\ 0 & \Leftrightarrow E \neq E' \end{cases} \quad (5-6)$$

onde $|K|$ e $|E|$ são o volume e a área do elemento K e a face E , respectivamente.

Considerando as propriedades das funções de interpolação (equações (5-6) e (5-5)) na formulação variacional do HMFE dada pela equação (5-4), é obtida a equação (5-8):

$$\int_K w_{E,K} \tilde{K}_K^{-1} v_{a,K} = \frac{1}{|K|} \int_K \Phi_w - \frac{1}{\sum |E|_i} \int_E \Phi_w \quad (5-7)$$

$$\int_K w_{E,K} \tilde{K}_K^{-1} v_{a,K} = \Phi_{w,K} - \Lambda_{w,K,E} \quad (5-8)$$

onde $\Phi_{w,K}$ é o potencial médio da fase molhante do elemento K , e $\Lambda_{w,K,E}$ é o potencial da fase molhante do elemento K na face E .

Considerando a definição de $v_{a,K}$ dada pela equação (5-1) na equação (5-8), é obtida a equação (5-9):

$$\sum_{E' \in \partial K} q_{a,K,E'} A_{K,E,E'} = \Phi_{w,K} - \Lambda_{w,K,E} \quad (5-9)$$

onde,

$$A_{K,E,E'} = \int_K w_{K,E} \tilde{K}_K^{-1} w_{K,E'} \quad (5-10)$$

Mediante a definição de duas constantes independentes do potencial e do fluxo (equação (5-11)) é obtida uma expressão explícita do fluxo $q_{a,K,E}$ em termos do potencial médio no elemento $\Phi_{w,K}$ e o potencial médio das faces $\Lambda_{w,K,E}$ do elemento K (Hoteit, et al., 2008):

$$\beta_{K,E,E'} = A_{K,E,E'}^{-1} \quad ; \quad \alpha_{K,E} = \sum_{E' \in \partial K} \beta_{K,E,E'} \quad ; \quad \alpha_K = \sum_{E \in \partial K} \alpha_{K,E} \quad (5-11)$$

$$q_{a,K,E} = \alpha_{K,E} \Phi_{w,K} - \sum_{E' \in \partial K} \beta_{K,E,E'} \Lambda_{w,K,E'} \quad (5-12)$$

As equações de continuidade no contorno dos elementos são impostas mediante a somatória dos fluxos nos contornos, e igualando os potenciais nas faces entre os elementos.

$$q_{a,K,E} + q_{a,K,E'} = 0 \quad | \quad E = \partial K \cap \partial K' \quad (5-13)$$

$$\Lambda_{w,K',E} = \Lambda_{w,K,E} = \Lambda_{w,E} \quad | \quad E = \partial K \cap \partial K' \quad (5-14)$$

A equação de continuidade do fluxo (5-13) é combinada com a equação (5-12) para obter um sistema algébrico onde as incógnitas são: o potencial no elemento $\Phi_{w,K}$, e os potenciais nas faces $\Lambda_{w,E}$,

$$-R^T \Phi_w + M \Lambda_w = V \quad (5-15)$$

onde R é uma matriz retangular de K filas e E colunas, M é uma matriz quadrada de E filas e E colunas, e V é um vetor de E filas e onde são incorporadas as condições de contorno. Assim:

$$R_{K,E} = \alpha_{K,E} \mid E \in \partial K \quad (5-16)$$

$$M_{E,E'} = \sum_{E,E' \in \partial K} \beta_{K,E,E'} \mid E \notin \Gamma^D \quad (5-17)$$

$$V_E = \sum_{E' \in \partial K \cap \Gamma^D} \beta_{K,E,E'} \Lambda_{w,E'} \quad (5-18)$$

5.1.2.1.

Discretização da equação do balanço de massa

O balanço volumétrico de massa é representado pela equação (4-15), que é integrada localmente sobre o elemento K utilizando o teorema da divergência:

$$\int_{\partial K} (v_{a,K} n_{\partial K} + v_{c,K} n_{\partial K}) = \int_K F_T \quad (5-19)$$

A velocidade capilar $v_{c,K}$ no elemento K na equação (5-19), pode ser discretizada analogamente a $v_{a,K}$, em termos do fluxo capilar $q_{c,K,E}$ utilizando as funções de interpolação $RT0$,

$$v_{c,K} = \sum_{E \in \partial K} q_{c,K,E} w_{K,E} \quad (5-20)$$

Utilizando as definições das equações (5-20) e (5-1) na equação (5-19) e utilizando as propriedades das funções de interpolação definidas pelas equações (5-5) e (5-6), é obtida a equação (5-21):

$$\sum_{E \in \partial K} q_{a,K,E} = - \sum_{E \in \partial K} q_{c,K,E} + \int_K F_T \quad (5-21)$$

Utilizando no termo da direita da equação (5-21) a equação (5-12), que expressa explicitamente o fluxo $q_{a,K,E}$ em termos do potencial médio $\Phi_{w,K}$ e do potencial médio das faces $\Lambda_{w,K,E}$, e fazendo o somatório para todas as faces do elemento, é possível obter a equação (5-22):

$$\sum_{E \in \partial K} (\alpha_{K,E} \Phi_{w,K}) - \sum_{E \in \partial K} \left(\sum_{E' \in \partial K} \beta_{K,E,E'} \Lambda_{w,K,E'} \right) = F_K \quad (5-22)$$

onde,

$$F_K = - \sum_{E \in \partial K} q_{c,K,E} + \int_K F_T \quad (5-23)$$

Utilizando as constantes dadas pelas equações (5-11), a equação (5-22) pode ser expressa como:

$$\alpha_K \Phi_{w,K} - \sum_{E \in \partial K} \alpha_{K,E} \Lambda_{w,K,E} = F_K \quad (5-24)$$

A equação (5-24) pode ser expressa em forma matricial mediante a equação (5-25), que representa um sistema algébrico onde as incógnitas são: o potencial no elemento $\Phi_{w,K}$, e os potenciais nas faces $\Lambda_{w,E}$:

$$D \Phi_w - R \Lambda_w = F \quad (5-25)$$

onde a matriz D é uma matriz diagonal de K filas e K colunas.

O sistema formado pelas equações (5-15) e (5-25) permite eliminar Φ_w e expressar Λ_w mediante a equação (5-26):

$$(M - R^T D^{-1} R) \Lambda_w = V + R^T D^{-1} F \quad (5-26)$$

Resolvido o sistema anterior, o potencial Φ_w e o fluxo $q_{a,K,E}$ são determinados mediante as equações (5-24) e (5-12) respectivamente.

5.1.2.2. Aproximação do fluxo capilar

O fluxo capilar q_c na equação (5-23) é calculado mediante o potencial capilar no elemento Φ_c , que por sua vez, é calculado utilizando as saturações dos elementos no passo de tempo prévio.

A velocidade capilar $v_{c,K}$, no elemento K , dada pela equação (5-20) é discretizada de forma análoga a $v_{a,K}$ na equação (5-8), com a diferença de que a definição de $v_{c,K}$ envolve a mobilidade da fase não molhante. Mobilidade que por sua vez pode ser nula, e nesse caso, o cálculo de \tilde{K}_K^{-1} não poderia ser realizado de forma análoga a $v_{a,K}$. Por tanto, a discretização de $v_{c,K}$ apresenta redefinições dos parâmetros $\alpha_{K,E}$ e $\beta_{K,E,E'}$ (definidos anteriormente para $v_{a,K}$) que surgem de não considerar a definição de \tilde{K}_K^{-1} e incorporar a mobilidade não molhante λ_n no momento da integração.

Como resultado da aproximação, o fluxo capilar pode-se expressar em termos do potencial capilar no elemento $\Phi_{c,K}$, e do potencial capilar na face $\Lambda_{c,k,E}$,

$$q_{c,K,E} = \hat{\lambda}_{n,E} \left(\sum_{E' \in \partial K} \hat{A}_{K,E,E'}^{-1} \Phi_{c,K} - \sum_{E' \in \partial K} \hat{A}_{K,E,E'}^{-1} \Lambda_{c,K,E'} \right) \quad (5-27)$$

onde, analogamente com a discretização de $v_{a,K}$

$$\hat{A}_{K,E,E'}^{-1} = \int_K w_{K,E} K_K^{-1} w_{K,E'} \quad (5-28)$$

A mobilidade $\lambda_{n,E}$ é calculada a partir da direção do fluxo. Se o fluxo for positivo, o fluxo sai do elemento e a mobilidade considerada é a mobilidade do próprio elemento. No caso do fluxo que ingressa ao elemento, considera-se a mobilidade do elemento vizinho.

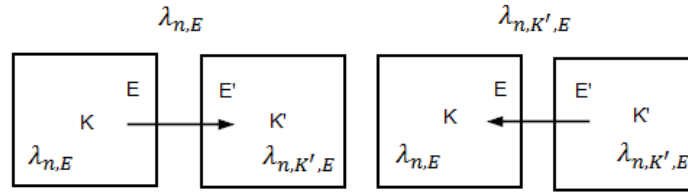


Figura 20: Consideração do fluxo na mobilidade não molhante.

$$\hat{\lambda}_{n,E} = \begin{cases} \lambda_{n,K,E} & \Leftrightarrow q_{c,E} \geq 0 \\ \lambda_{n,K',E} & \Leftrightarrow q_{c,E} < 0 \end{cases} \quad (5-29)$$

O fluxo $q_{c,E}$ é conhecido a partir do potencial capilar Φ_c e as saturações dos elementos do passo de tempo prévio $t = t^{n-1}$.

A equação (5-27) pode ser escrita da seguinte forma reduzida como:

$$q_{c,K,E} = \hat{\alpha}_{K,E} \Phi_{c,K} - \sum_{E' \in \partial K} \hat{\beta}_{K,E,E'} \Lambda_{c,K,E'} \quad (5-30)$$

onde,

$$\hat{\beta}_{K,E,E'} = \lambda_{n,K,E} \hat{A}_{K,E,E'}^{-1} \quad ; \quad \hat{\alpha}_{K,E} = \lambda_{n,K,E} \sum_{E' \in \partial K} \hat{A}_{K,E,E'}^{-1} \quad (5-31)$$

Para relacionar os diferentes elementos da malha são impostas as condições de continuidade do fluxo e de continuidade do potencial nas faces compartilhadas,

$$q_{c,K,E} + q_{c,K',E'} = 0 \quad | \quad E = \partial K \cap \partial K' \quad (5-32)$$

$$\Lambda_{c,K',E} = \Lambda_{c,K,E} = \Lambda_{c,E} \quad | \quad E = \partial K \cap \partial K' \quad (5-33)$$

As equações de continuidade (5-32) (5-33) permitem eliminar o fluxo $q_{c,K,E}$ e construir um sistema algébrico onde a variável principal desconhecida é o potencial capilar na face $\Lambda_{c,E}$,

$$\hat{M} \Lambda_c = \hat{V} - \hat{R}^T \Phi_c \quad (5-34)$$

onde as matrizes \hat{M} , \hat{R} e o vetor \hat{V} têm a mesma estrutura que aquelas definidas pelas equações (5-16), (5-17) e (5-18).

Resolvido o sistema e conhecidos os valores de Φ_c e Δ_c o fluxo capilar é localmente calculado mediante a equação (5-30).

5.1.3. Aproximação da saturação

A equação governante da saturação no fluxo bifásico (4-16) é colocada na forma discreta numericamente mediante o método numérico Galerkin descontínuo (GD).

O método dos elementos finitos descontínuos é um procedimento numérico de formulação local que possui vantagens e desvantagens relativas ao tipo de problema específico a resolver.

No trabalho de B. Q. Li (Li, 2006) são analisadas as principais considerações sobre o método com um enfoque principalmente orientado aos problemas de dinâmica dos fluidos e transferência de calor. Em *The Development of Discontinuous Galerkin Methods* (Cockburn, et al., 2000) é apresentada uma revisão teórica do método e seu desenvolvimento para uma variedade de aplicações.

No caso de problemas de fluxo bifásico, conforme é notado por Hoteit (Hoteit, et al., 2008), o método GD tem a característica de conservação de massa a nível local ou elementar, e aproxima melhor frentes abruptas de saturação do que os métodos de primeira ordem. Em quanto que as oscilações na aproximação da saturação são tratadas mediante um limitador de inclinação (*slope limiter*).

O método GD é descrito e implementado em dois pasos: uma aproximação espacial e uma aproximação temporal da saturação (Hoteit, et al., 2008).

A continuação é apresentada a implementação para a resolução da equação governante da saturação no fluxo bifásico mediante o método numérico Galerkin descontínuo.

5.1.3.1.

Aproximação da saturação da fase molhante

A saturação da fase molhante $S_{w,k}$ em cada elemento K do domínio Ω é aproximada num espaço de elementos finitos descontínuos mediante funções polinomiais de primeira ordem.

A saturação da fase molhante $S_{w,k}$ do elemento K é expressa de maneira aproximada como:

$$S_{w,k}(x, t) = \sum_{j=1}^{n_v} S_{w,k,j}(t) \varphi_{k,j}(x) \quad (5-35)$$

onde n_v é o número de nós do elemento K , $\varphi_{k,j}$ é a função de forma ou de interpolação de primeira ordem, e $S_{w,k,j}$ é a saturação da fase molhante no elemento K no nó j .

O valor da função da fração de fluxo da fase molhante $f_{w,k} = \lambda_w / \lambda_t$ no elemento K é relacionado com o nó j mediante as mesmas funções de interpolação:

$$f_{w,k} = \sum_{j=1}^{n_v} f_{w,k,j} \varphi_{k,j} \quad (5-36)$$

Colocando as equações (5-35) e (5-36) na equação (4-16) de saturação da fase molhante em termos de v_a e f_w , e integrando a ponderação do resíduo sobre o elemento K , temos:

$$\int_K \left(\phi \frac{\partial S_w}{\partial t} + \nabla \cdot \{f_w v_a\} - F_w \right) \varphi_{k,i} = 0 \quad (5-37)$$

$$\int_K \left(\phi \frac{\partial S_w}{\partial t} \right) \varphi_{k,i} = \int_K -\nabla \cdot \{f_w v_a\} \varphi_{k,i} + \int_K (F_w) \varphi_{k,i} \quad (5-38)$$

Integrando a equação (5-38) conforme ao teorema de Green, temos:

$$\int_k \left(\phi \frac{\partial S_w}{\partial t} \right) \varphi_{k,i} = \int_k f_w v_a \nabla \varphi_{k,i} - \int_{\partial k} \varphi_{k,i} f_w v_a \vec{n} + \int_k (F_w) \varphi_{k,i} \quad (5-39)$$

Combinando os termos dos somatórios das equações (5-35) e (5-36) na equação (5-39), temos:

$$\begin{aligned} \sum_{j=1}^{n_v} \phi \frac{dS_{w,k,j}}{dt} \int_k \varphi_{k,j} \varphi_{k,i} = \\ \sum_{j=1}^{n_v} \left(f_{w,k,j} \int_k \varphi_{k,j} v_a \nabla \varphi_{k,i} - \hat{f}_{w,\partial k,j} \int_{\partial k} \varphi_{k,i} \varphi_{k,j} v_a \vec{n} \right) + \int_k (F_w) \varphi_{k,i} \end{aligned} \quad (5-40)$$

onde $\hat{f}_{w,\partial k,j}$ é o valor *upstream* de $f_{w,k,j}$ no nó j definido a partir do campo das velocidades v_a .

Particionando o domínio e considerando a contribuição nodal, a equação (5-40) constitui um sistema de equações diferenciais ordinárias de ordem n_v sobre cada elemento K ,

$$\left\{ \frac{dS_{w,k}}{dt} \right\} = [M^{-1}] \left\{ \{f_w\} [A] - \{\hat{f}_w\} [B] + \{F_w\} \right\} \quad (5-41)$$

ou em forma equivalente,

$$\left\{ \frac{dS_{w,k}}{dt} \right\} = \mathcal{A}(f_{w,k}, \hat{f}_{w,\partial k,j}) \quad (5-42)$$

onde $S_{w,k}$ é um vetor de dimensão n_v .

Para aproximar o operador no tempo da equação (5-41), utiliza-se um esquema de segunda ordem Runge-Kutta (Hoteit, et al., 2004). A fim de garantir a estabilidade do método, utiliza-se um procedimento de limitador de inclinação ou *slope limiter* (Hoteit, et al., 2008).

O procedimento computacional é o seguinte:

- Computa-se a saturação intermedia $\tilde{S}_{w,k}^{n+1/2}$ a partir do valor conhecido inicial $S_{w,k}^n$.

$$\tilde{S}_{w,k}^{n+1/2} = S_{w,k}^n + \frac{\Delta t}{2} \mathcal{A} \left(f_{w,k}(S_{w,k}^n), \hat{f}_{w,\partial k,j}(S_{w,k}^n) \right) \quad (5-43)$$

Neste passo, a fracção da fase molhante é calculada localmente sobre cada elemento K .

- Computa-se a saturação intermedia $\tilde{S}_{w,k}^{n+1}$ a partir dos valores $S_{w,k}^n$ e $\tilde{S}_{w,k}^{n+1/2}$.

$$\tilde{S}_{w,k}^{n+1} = S_{w,k}^n + \Delta t \mathcal{A} \left(f_{w,k}(\tilde{S}_{w,k}^{n+1/2}), \hat{f}_{w,\partial k,j}(\tilde{S}_{w,k}^{n+1/2}) \right) \quad (5-44)$$

- Atualiza-se o valor da saturação mediante o *slope limiter*.

$$S_{w,k}^{n+1} = \mathcal{L}(\tilde{S}_{w,k}^{n+1}) \quad (5-45)$$

O *slope limiter* utilizado é multidimensional, formulado para evitar mínimos e máximos locais nos nós da malha (Chavent, et al., 1986). Em cada vértice do elemento a saturação deve estar dentro do mínimo e do máximo das saturações médias dos elementos vizinhos.

O operador da equação (5-45) é a solução do problema de mínimos quadrados dado pela equação (5-46) (Hoteit, et al., 2008):

$$\min_{W \in \mathbb{R}^{n_v}} \|W - \tilde{S}_{w,k}\| \quad (5-46)$$

com as seguintes restrições:

$$\begin{cases} \bar{W} = \frac{1}{n_v} \sum_{i=1}^{n_v} W_i = \bar{S}_{w,k} \\ \bar{S}_{w,\min_i} \leq W_i \leq \bar{S}_{w,\max_i} \end{cases} \quad (5-47)$$

onde

$$\bar{S}_{w,k} = \frac{1}{|K|} \int_K S_{w,k} \quad (5-48)$$

$$\bar{S}_{w,\min} = \min_{k \in T_i} \{\bar{S}_{w,k}\} \quad (5-49)$$

$$\bar{S}_{w,\max} = \max_{k \in T_i} \{\bar{S}_{w,k}\} \quad (5-50)$$

e onde T_i representa todos os elementos ao redor do nó i conforme à Figura 21.

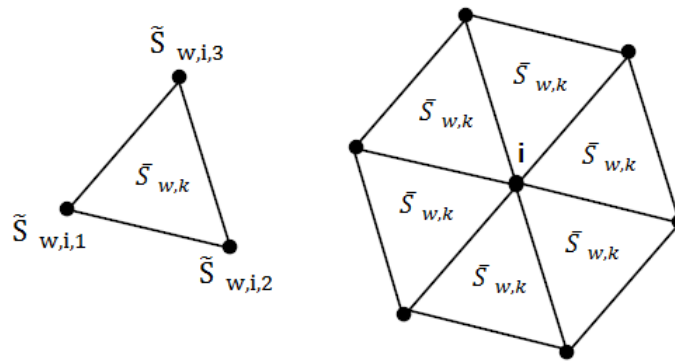


Figura 21: Variáveis utilizadas no limitador de inclinação.

O problema numérico dado pela equação (5-46) pode ser resolvido eficientemente por meio de um procedimento iterativo que requer, no máximo, $2 n_v$ iterações para convergir (Hoteit, et al., 2008).

5.2.

Modelagem numérica do transporte de contaminantes

A equação governante do transporte de contaminantes (4-21) deve ser resolvida em todo o domínio Ω , levando em conta as condições iniciais e as condições de contorno particulares do problema analisado.

A abordagem analítica da equação (4-21) é geralmente intratável devido às irregularidades no domínio Ω e às características não homogêneas da região do fluxo (Sun, 1989). Por tanto, a equação governante do transporte de contaminantes é resolvida mediante a implementação computacional de técnicas de integração numéricas orientadas à resolução de equações diferenciais, como o método dos elementos finitos.

5.2.1.

Resolução da equação de transporte mediante o método dos elementos finitos

O método dos elementos finitos permite obter uma aproximação numérica da equação (4-21) sobre o domínio Ω para diferentes condições iniciais e condições de contorno.

No método dos elementos finitos de Galerkin ou *standard*, a função desconhecida $C(x, y, t)$, que é a solução da equação (4-21), é aproximada mediante funções lineares sobre o espaço 2D:

$$C(x, y) \approx \hat{C}(x, y) = \sum_{j=1}^n c_j w_j(x, y) \quad (5-51)$$

onde n é o número de nós do domínio.

A solução aproximada utilizando $\hat{C}(x, y)$ é

$$\frac{\partial}{\partial x_i} \left(D_{ij} \frac{\partial \hat{C}}{\partial x_j} \right) - v_i \frac{\partial \hat{C}}{\partial x_i} - R \lambda \hat{C} - R \frac{\partial \hat{C}}{\partial t} = \Omega(x, y) \neq 0 \quad (5-52)$$

A equação de Galerkin que minimiza o resíduo é

$$\int_A \Omega(x, y) w_i(x, y) dA = 0, \quad i = 1, 2, \dots, n \quad (5-53)$$

onde $w_i(x, y)$ são funções de ponderação sobre os n nós do domínio.

Substituindo a equação (5-52) na (5-53) e aplicando o teorema de Green ao termo da segunda derivada na equação resultante, é obtida a equação (5-54):

$$\begin{aligned} & \int_A - \left\{ D_{xx} \frac{\partial \hat{C}}{\partial x} \frac{\partial w_i}{\partial x} + D_{xy} \frac{\partial \hat{C}}{\partial y} \frac{\partial w_i}{\partial x} + D_{yx} \frac{\partial \hat{C}}{\partial x} \frac{\partial w_i}{\partial y} + D_{yy} \frac{\partial \hat{C}}{\partial y} \frac{\partial w_i}{\partial y} \right\} dx dy - \\ & \int_{\Gamma} \left\{ D_n \frac{\partial \hat{C}}{\partial n} w_i \right\} d\Gamma - \int_A \left\{ v_x \frac{\partial \hat{C}}{\partial x} w_i + v_y \frac{\partial \hat{C}}{\partial y} w_i + R \lambda \hat{C} w_i \right\} dx dy - \\ & \int_A \left\{ R \frac{\partial \hat{C}}{\partial t} w_i \right\} dx dy = 0, \quad i = 1, 2, \dots, n \end{aligned} \quad (5-54)$$

O termo correspondente à condição de contorno natural sobre Γ é separado em duas parcelas: uma de entrada e outra de saída. A parcela de entrada é substituída pela condição de contorno *Tipo III* (4-30) e a parcela de saída fica sem modificações.

$$\int_{\Gamma} \left\{ D_n \frac{\partial \hat{C}}{\partial n} w_i \right\} d\Gamma = -[v \hat{C} \vec{n} w_i]_{in} + \left[\frac{q_o C_o}{\eta} w_i \right]_{in} - \left[D_n \frac{\partial \hat{C}}{\partial n} w_i \right]_{out} \quad (5-55)$$

Substituindo as equações (5-55) e (5-51) na (5-54), e integrando sobre os elementos do domínio discretizado, resulta a equação (5-56):

$$\sum_{j=1}^n C_j \{M^D + M^v + M^\lambda + M_{in}^s + M_{out}^E\} + \sum_{j=1}^n \frac{\partial C_j}{\partial t} \{M^M\} = F_{in}^s \quad (5-56)$$

onde os coeficientes de cada uma das matrizes da equação são avaliados pela integração sobre cada elemento do domínio discretizado.

A derivada no tempo é aproximada linearmente.

$$\frac{\partial C_j}{\partial t} \cong \frac{(C_j)_{k+1} - (C_j)_k}{\Delta t} \quad (5-57)$$

onde k é o nível de tempo anterior, e $k + 1$ o nível de tempo novo.

Substituindo a equação (5-57) na (5-56) e considerando o aporte de cada elemento ao nó global da malha, o sistema final de equações é dado por a equação (5-58):

$$\left\{ \epsilon [M] + \frac{1}{\Delta t} [M^M] \right\} \{C\}_{k+1} = \left\{ -(1 - \epsilon) [M] + \frac{1}{\Delta t} [M^M] \right\} \{C\}_k + \{F^S\} \quad (5-58)$$

Onde ϵ é o fator de ponderação do tempo ($0 \leq \epsilon \leq 1$). Se $\epsilon = 1$ o esquema discreto no tempo é chamado de implícito; se $\epsilon = 0$ o esquema é chamado de explícito; se $\epsilon = 0.5$ o esquema é chamado de centrado no tempo ou de Crank-Nicolson (Zheng, et al., 2002). Para este último caso, a aproximação resulta incondicionalmente estável com precisão de segunda ordem (Peaceman, 1977).

Na equação (5-58) o termo $[M]$ é a matriz global de transporte definida pela equação (5-59), e $\{F^S\}$ é o vetor de fluxo de entrada no contorno *Tipo III*.

$$[M] = M^D + M^v + M^\lambda + M_{in}^s + M_{out}^E \quad (5-59)$$

5.2.2.

Resolução da equação de transporte com dissolução mediante o método dos elementos finitos

O modelo de dissolução é representado matematicamente pelas equações (4-43) e (4-47).

$$\frac{\partial S_w}{\partial t} = \frac{k_{tm} (C_{equi} - C_i) A_{nw}}{\rho_w} \quad (4-43)$$

$$\frac{\partial C_i}{\partial t} = \frac{k_{tm} (C_{equi} - C_i) A_{nw} - C_i \frac{\partial S_w}{\partial t}}{S_w} \quad (4-47)$$

Para levar em consideração o processo de dissolução, a equação governante do transporte (4-21) é modificada mediante a adição do termo que representa um aporte na variação da concentração com o tempo.

$$\frac{\partial}{\partial x_i} \left(D_{ij} \frac{\partial C}{\partial x_j} \right) - v_i \frac{\partial C}{\partial x_i} - R \lambda C = R \frac{\partial C}{\partial t} + \left(\frac{\partial C_i}{\partial t} \right)_{diss} \quad (5-60)$$

A equação (5-60) resolve-se de maneira similar à (5-52). A função desconhecida $C(x, y, t)$, que é a solução, é aproximada mediante funções lineares sobre o espaço 2D. Em seguida, a equação resultante é integrada conforme à equação de Galerkin que minimiza o resíduo (5-53). O resultado é similar à equação (5-54), mas com o seguinte termo adicional:

$$\int_A \left(\frac{\partial \hat{C}_i}{\partial t} \right)_{diss} w_i \, dx \, dy, \quad i = 1, 2, \dots, n \quad (5-61)$$

Utilizando o modelo de dissolução dada pela equação (4-47), temos:

$$\int_A \left(\frac{k_{tm} (C_{equi} - \hat{C}_i) A_{nw} - \hat{C}_i \frac{\partial S_w}{\partial t}}{S_w} \right)_{diss} w_i \, dx \, dy \quad (5-62)$$

Reordenando os termos que contêm à variável \hat{C}_i , resulta:

$$\int_A \left(\frac{k_{tm} C_{equi} A_{nw}}{S_w} \right) w_i + \int_A \left(\frac{k_{tm} A_{nw} + \frac{\partial S_w}{\partial t}}{S_w} \right) \hat{C}_i w_i \quad (5-63)$$

Uma nova matriz de massa e um novo vetor de fluxo são definidos a partir da equação (5-63) e mediante o esquema numérico dado pela equação (5-56):

$$M^{\text{diss}} = \int_A \left(\frac{k_{\text{tm}} A_{\text{nw}} + \frac{\partial S_w}{\partial t}}{S_w} \right) \hat{C} w_i \quad (5-64)$$

$$F^{\text{diss}} = \int_A \left(\frac{k_{\text{tm}} C_{\text{equi}} A_{\text{nw}}}{S_w} \right) w_i \quad (5-65)$$

Estes aportes produto da dissolução permitem atingir a um novo esquema numérico geral da equação de transporte:

$$\sum_{j=1}^n C_j \{M^D + M^v + M^\lambda + M_{\text{in}}^s + M_{\text{out}}^E + M^{\text{diss}}\} + \sum_{j=1}^n \frac{\partial C_j}{\partial t} \{M^M\} = F_{\text{in}}^s + F^{\text{diss}} \quad (5-66)$$

O sistema dado pela equação (5-66) resolve-se com o mesmo esquema numérico já apresentado anteriormente pela equação (5-58).

5.2.3. Restrições da malha no método dos elementos finitos

O erro numérico na aproximação da equação de transporte é causado principalmente pelo termo advectivo (Frind, 1995), podendo ter um efeito significativo sobre o resultado final obtido e por tanto, sobre a validade da simulação. Para controlar os efeitos dessa dispersão numérica, são restringidos três parâmetros: o tamanho do elemento, o passo do tempo, e o fator de ponderação do tempo.

O tamanho do elemento em direção do fluxo é restrito pelo critério do número de Peclet, dado pela equação (5-67):

$$Pe = \frac{|v| \Delta L}{|D|} \leq 2 \quad (5-67)$$

onde $|v| = |q|/\eta$ é a magnitude do vetor velocidade, $|D|$ é o coeficiente de dispersão efetiva na direção de $|v|$, e $|L|$ é o comprimento do elemento na direção do fluxo.

O passo do tempo é restrito pelo critério de Courant e deve ser cumprido em cada elemento da malha. Ele é dado pela equação (5-68):

$$Cr = \frac{|v| \Delta t}{R \Delta L} \leq \frac{Pe}{2} \quad (5-68)$$

No caso de sistemas com decaimento, uma restrição adicional no passo do tempo é relacionada com a queda de massa. A queda de massa pelo decaimento num elemento qualquer tem que ser menor que a massa no elemento no começo do passo de tempo. Este critério é dado pela equação (5-69):

$$\Delta t \leq \frac{1}{\lambda} \quad (5-69)$$

6

Implementação computacional das formulações numéricas para simulação de fluxo bifásico em meios porosos e transporte de contaminantes

Neste capítulo são apresentados diferentes cenários conceituais com o objetivo de avaliar os resultados obtidos mediante as formulações numéricas desenvolvidas¹ e apresentadas no capítulo anterior. As soluções analíticas disponíveis para os casos simples serão utilizadas para testar a validade e a resposta do algoritmo numérico.

No primeiro lugar serão avaliados problemas de transporte de contaminantes em uma e duas dimensões. No segundo lugar serão avaliados problemas de transporte de contaminantes com transferência de massa. No terceiro lugar serão avaliados problemas de fluxo bifásico em duas dimensões. E por último será avaliado um problema que envolve tanto fluxo bifásico como transporte de contaminantes com transferência de massa.

Os parâmetros utilizados nas simulações foram estabelecidos com rangos segundo os encontrados na bibliografia, e a simbologia utilizada está conforme às equações apresentadas nos capítulos anteriores do presente trabalho.

6.1.

Transporte de contaminantes: Caso 1D

O problema de transporte em 1D é tratado com o objetivo de estabelecer uma sequência de complexidade nos modelos apresentados no presente trabalho.

O problema consiste em determinar o frente de contaminação no tempo numa coluna vertical de material poroso quando um contaminante é injetado de maneira contínua como é indicado na Figura 22.

A solução analítica da equação de transporte de contaminantes 1D para o uma fonte contínua no contorno, é dada pela equação (6-1) (Ogata, et al., 1961):

¹ As implementações numéricas das equações de transporte de contaminantes podem ser obtidas no seguinte site: <https://sites.google.com/site/fabriciofernandezweb/>

$$\frac{C}{C_o} = \frac{1}{2} \left[\operatorname{erfc} \left(\frac{1 - vt}{2\sqrt{Dt}} \right) + \exp \left(\frac{v}{D} \right) \operatorname{erfc} \left(\frac{1 + vt}{2\sqrt{Dt}} \right) \right] \quad (6-1)$$

onde C_o é a concentração no contorno, v é a velocidade do fluxo no meio, D é o coeficiente de dispersão, e t é o tempo.

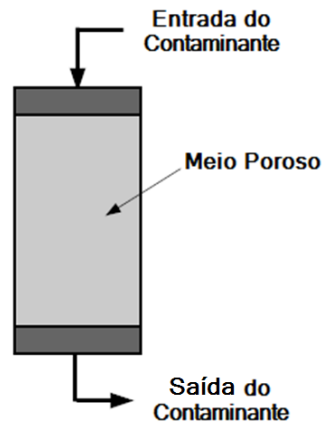


Figura 22: Ilustração esquemática do transporte de contaminantes 1D.

Os parâmetros utilizados na simulação 1D são apresentados na Tabela 1.

Tabela 1: Parâmetros de transporte - Caso 1D

coeficiente de dispersão D	m^2/d	0.001
velocidade do fluxo no meio v	m/d	0.1
coeficiente de retardamento R	--	1.0
concentração no contorno C_o	kg/m^3	1.0
porosidade η	--	0.2
fator de ponderação do tempo ϵ	--	0.5
constante de decaimento λ	$1/d$	0.0
tempo da simulação t	d	5
elementos finitos utilizados	--	5-10-20-50

A continuação é apresentada a validação consistente em comparar os resultados analíticos com os resultados numéricos para diferentes números de elementos finitos utilizados na discretização do domínio.

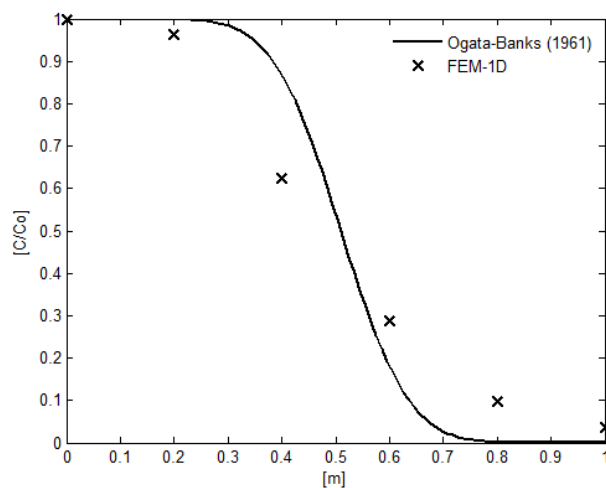


Figura 23: Avanço do frente de contaminação: 5 elementos.

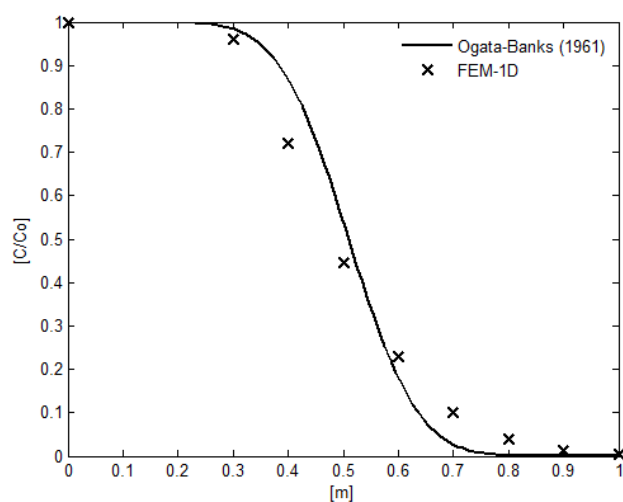


Figura 24: Avanço do frente de contaminação: 10 elementos.

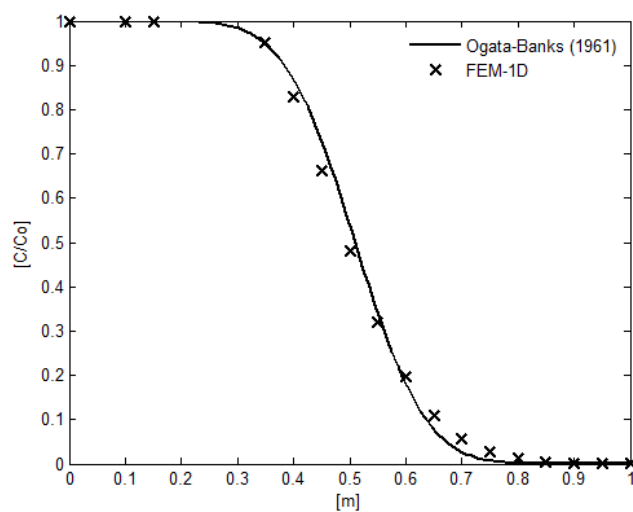


Figura 25: Avanço do frente de contaminação: 20 elementos.

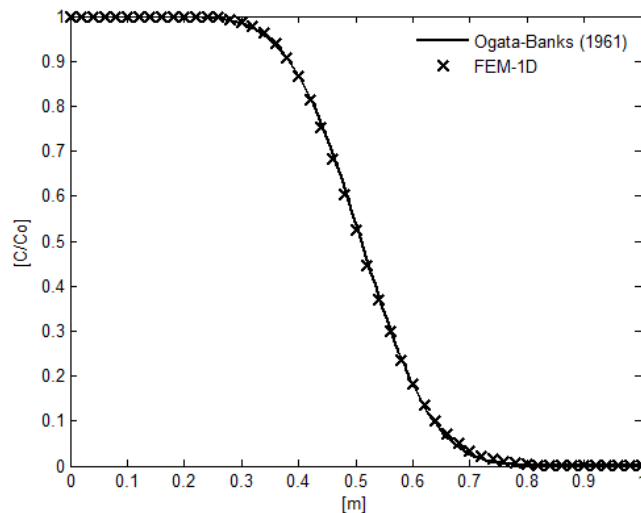


Figura 26: Avanço do frente de contaminação: 50 elementos.

Os resultados demonstram que a formulação numérica com elementos finitos 1D logra resultados próximos aos analíticos.

O avanço da frente de contaminação resulta mais próxima à solução analítica quanto mais elementos são utilizados na discretização.

6.2.

Transporte de contaminantes: Caso 2D

A continuação serão apresentados três problemas de transporte de contaminantes em duas dimensões. O primeiro problema considera um pulso instantâneo de concentração como condição inicial. O segundo considera uma fonte pontual de concentração como condição mantida no tempo. E o terceiro considera que a concentração se deve à transferência de massa desde a fase não molhante para a fase aquosa.

Para os casos apresentados será utilizada uma malha de elementos finitos formada por elementos triangulares de três nós (T3) de 0,45m de longitude média. A malha é apresentada na Figura 27:

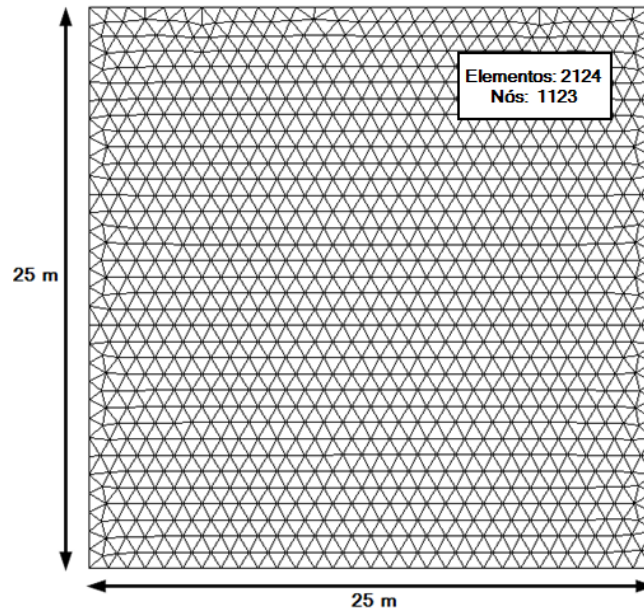


Figura 27: Malha de elementos finitos de três nós T3.

6.2.1.

Caso I: Fonte de contaminação tipo pulso 2D

A solução analítica ao problema do transporte de contaminantes com a condição de fonte tipo pulso 2D, é dada pela equação (6-2) (De Josselin De Jong, 1958):

$$C(x, y, t) = \frac{C_o A}{4 \pi t \sqrt{D_x D_y}} \exp \left(-\frac{((x - x_o) - v_x t)^2}{4 D_x t} - \frac{(y - y_o)^2}{4 D_y t} \right) \quad (6-2)$$

Onde A representa a área contaminada.

Os parâmetros utilizados para avaliar os resultados analíticos e numéricos são apresentados na Tabela 2.

Tabela 2: Parâmetros de transporte - Fonte tipo pulso 2D

dispersividade transversal α_T	m	0,5
dispersividade longitudinal α_L	m	0,5
coeficiente de retardamento R	--	1,0
porosidade η	--	0,2
fator de ponderação do tempo ϵ	--	0,5
constante de decaimento λ	1/d	0,0
velocidade do fluxo na direção x v_x	m/d	0,1
velocidade do fluxo na direção y v_y	m/d	0,0
tempo da simulação t	d	100
posição inicial x_0	m	5

A continuação são apresentados os resultados numérico e analítico para o problema considerado.

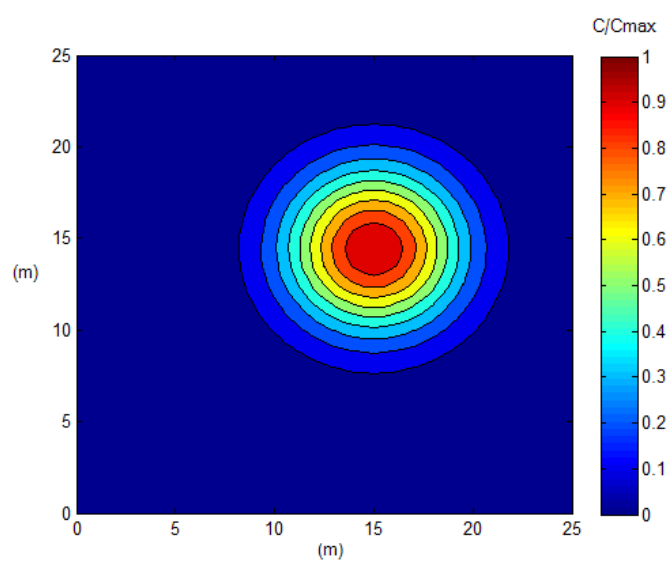


Figura 28: Solução analítica. Fonte tipo pulso 2D.

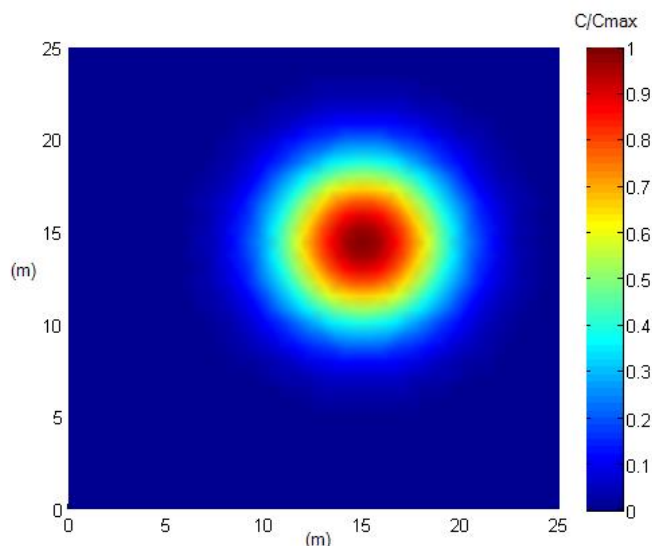


Figura 29: Resultado numérico. Fonte tipo pulso 2D.

A Figura 28 e a Figura 29 demonstram que os resultados numéricos reproduzem de maneira muito próxima os resultados analíticos para os parâmetros analisados.

Observa-se na Figura 29 uma forma hexagonal na distribuição de concentrações dos resultados numéricos. Isto se deve à malha de elementos finitos utilizada no processo de discretização do domínio, que ao ser estruturada apresenta dificuldade para lograr a forma circular.

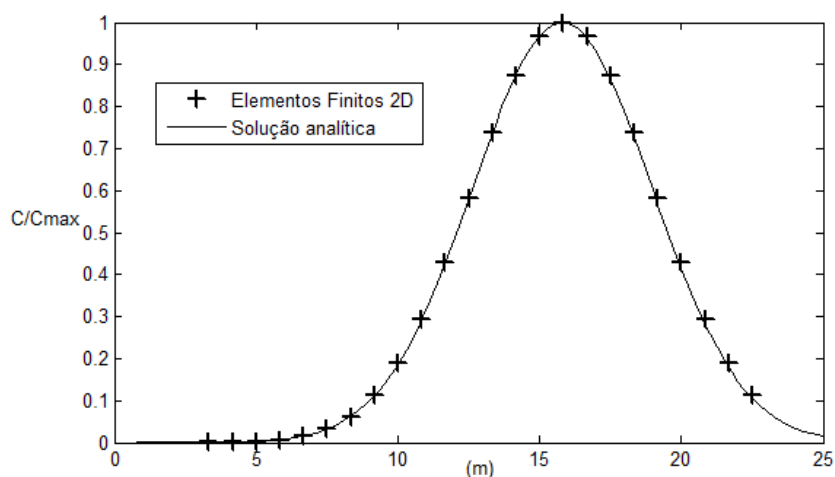


Figura 30: Comparativa dos resultados numéricos e analíticos ao longo da linha $y = 14.8\text{m}$. Caso fonte tipo pulso 2D.

Observa-se a coincidência da translação total da cresta de máxima concentração e da área de influencia total no instante $t = 100 d$, em ambas as soluções.

Como conclusão, o método numérico logra reproduzir o resultado analítico. Consequentemente, pode-se utilizá-lo para analisar casos onde a solução analítica não esteja disponível (como nos casos de geometrias complexas, com presença de heterogeneidades, ou anisotrópicos).

6.2.2.

Caso II: Fonte de contaminação contínua 2D

A solução analítica da concentração no tempo para a condição de fonte contínua em 2D, pode ser obtida a partir da solução apresentada em *Natural mixing processes in rivers* (Sayre, 1973).

Para o caso estacionário de uma fonte tipo linha, a solução é dada por a equação (6-3):

$$C(x,y) = \frac{W_o}{2 \pi d \sqrt{D_x D_y}} \exp\left(\frac{v x}{2 D_x}\right) K_o \left[\frac{v}{\sqrt{4 D_x}} \sqrt{\frac{x^2}{D_x} + \frac{y^2}{D_y}} \right] \quad (6-3)$$

onde W_o é a taxa de liberação do contaminante, d é a profundidade do aquífero e K_o é a função de Bessel modificada de ordem zero.

Os parâmetros utilizados na simulação são apresentados na Tabela 3.

Tabela 3: Parâmetros de transporte - Fonte contínua 2D

dispersividade transversal α_T	m	0,9
dispersividade longitudinal α_L	m	0,9
coeficiente de retardamento R	--	1,0
porosidade η	--	0,2
fator de ponderação do tempo ϵ	--	0,5
constante de decaimento λ	1/d	0,0
velocidade do fluxo na direção x v_x	m/d	0,1
velocidade do fluxo na direção y v_y	m/d	0,0
tempo da simulação t	d	3000
taxa de liberação W_o	kg/d	2

A continuação são apresentados os resultados numéricos e analíticos da distribuição de concentração no tempo, para a condição fonte contínua em 2D.

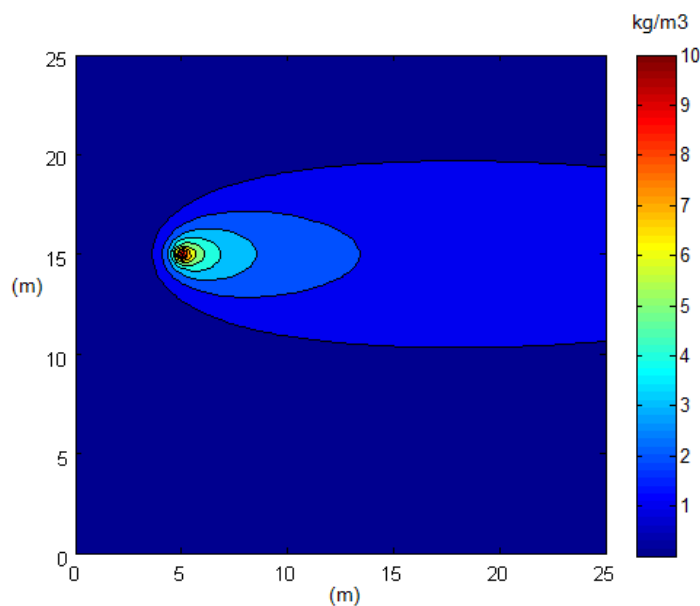


Figura 31: Solução analítica. Fonte contínua 2D.

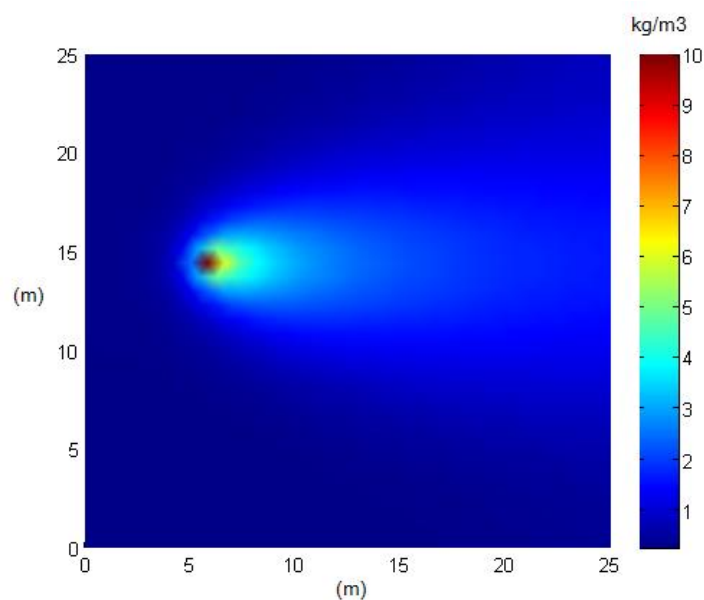


Figura 32: Resultado numérico. Fonte contínua 2D.

A Figura 31 e a Figura 32 demonstram que os resultados numéricos reproduzem de maneira muito próxima os resultados analíticos para os parâmetros analisados.

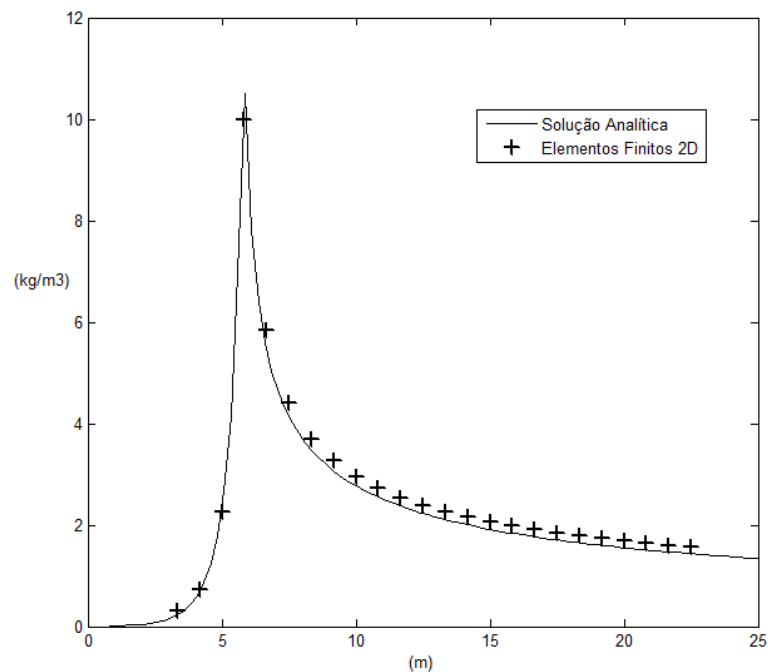


Figura 33: Comparativa dos resultados numéricos e analíticos ao longo da linha $y = 14.8\text{m}$. Caso fonte contínua 2D.

Na Figura 33 são apresentados os resultados das distribuições das concentrações no tempo, sobre uma linha que passa pelo ponto de máxima concentração. Pode-se observar que a aproximação numérica sobrestima minimamente a solução analítica depois do ponto fonte, e coincide no resto do domínio.

6.2.3. Transporte de contaminantes com dissolução da fase não molhante

A continuação serão apresentados os resultados numéricos das equações que incorporam os termos de dissolução do contaminante entre as fases:

$$\frac{\partial S_w}{\partial t} = \frac{k_{tm} (C_{equi} - C_i) A_{nw}}{\rho_w} \quad (4-43) \text{---} (4-47)$$

$$\frac{\partial C_i}{\partial t} = \frac{k_{tm} (C_{equi} - C_i) A_{nw} - C_i \frac{\partial S_w}{\partial t}}{S_w} \quad (4-47)$$

O problema a modelar consiste numa fonte contínua de contaminante no domínio 2D onde a concentração do contaminante na fase aquosa é progressivamente crescente conforme se produz a dissolução.

Os parâmetros utilizados neste exemplo são especificados na Tabela 4 e na Tabela 5. Todos os parâmetros estão definidos conforme as equações governantes apresentadas nos capítulos anteriores.

Tabela 4: Parâmetros de transporte - Caso com dissolução

dispersividade transversal α_T	m	0.5
dispersividade longitudinal α_L	m	0.5
coeficiente de retardamento R	--	1.0
porosidade η	--	0.2
fator de ponderação do tempo ϵ	--	0.5
constante de decaimento λ	1/d	0.0
velocidade do fluxo na direção x v_x	m/d	0.1
velocidade do fluxo na direção y v_y	m/d	0.0
tempo da simulação t	d	200

Tabela 5: Parâmetros de dissolução - Caso com dissolução

concentração no equilíbrio C_{equi}	kg/m ³	1.0
densidade ρ_{nw}	kg/m ³	1250
densidade ρ_w	kg/m ³	1000
saturação residual S_{rw}	--	0.2
saturação residual S_{mww}	--	0.2
pressão de entrada P_b	Pa	700
tensão interfacial σ_{nw}	N/m	0.024
índice de tamanhos de poros λ_{capi}	--	2.1
taxa de transferência de massa k_{tm}	m/d	4.30E-07

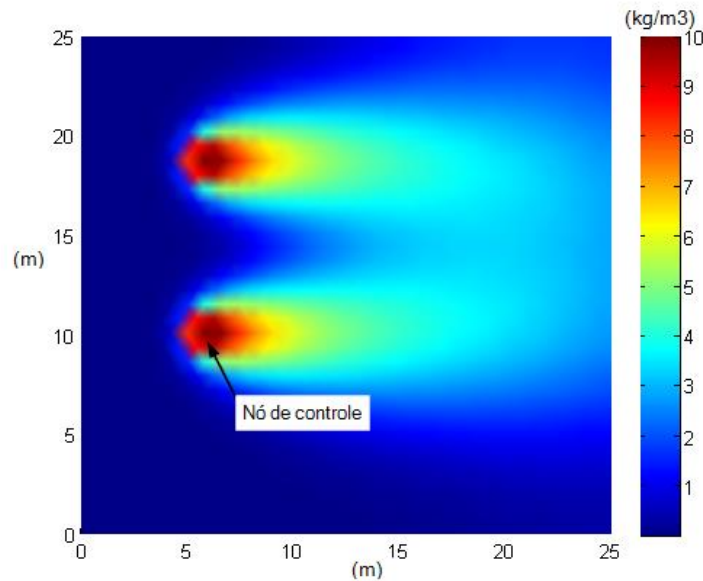


Figura 34: Resultado numérico. Transporte com dissolução de massa.

Na Figura 35 pode-se observar que a dissolução produz uma concentração gradualmente crescente no nó de controle quando é considerado um poro com aporte de massa contínua.

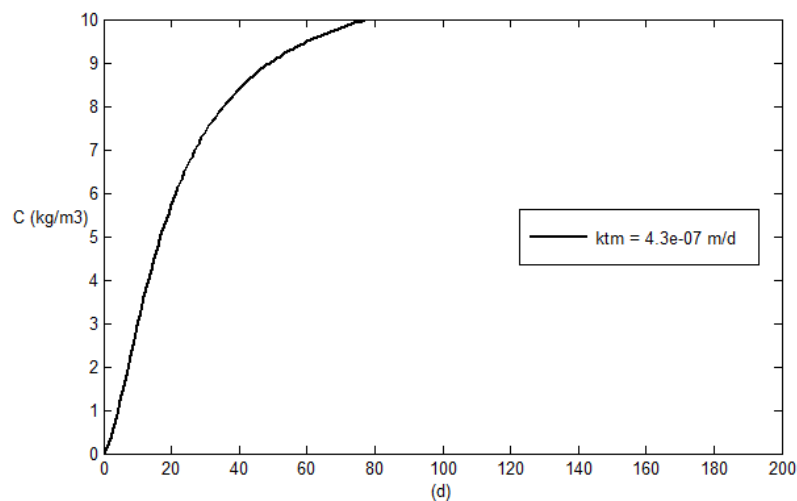


Figura 35: Variação da concentração no nó de controle.

Este tipo de modelo com dissolução considera de maneira progressiva o acréscimo de concentração na água de um contaminante que flui a través de um poro.

A dissolução é principalmente governada pela taxa de transferência de massa k_{tm} . Este parâmetro pode determinar uma transferência rápida, e em

consequência a concentração da água atinge rapidamente à condição de equilíbrio, ou uma transferência lenta sem atingir à condição de equilíbrio.

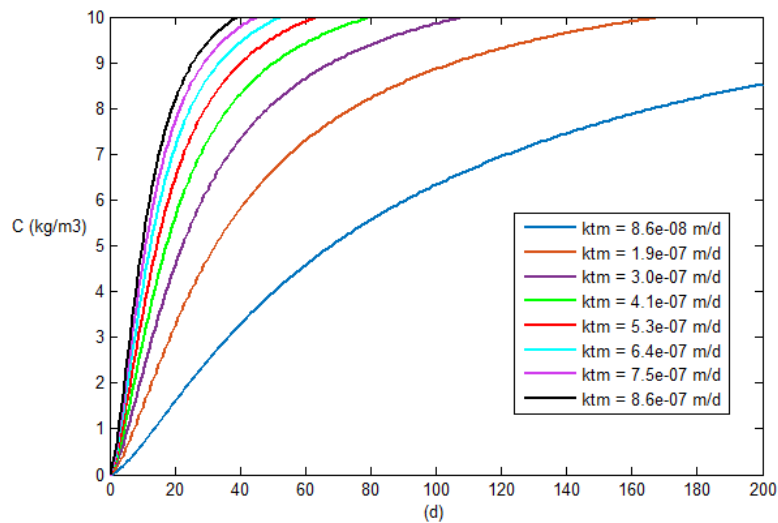


Figura 36: Análise paramétrica da taxa de transferência de massa.

A Figura 36 apresenta os resultados de uma análise paramétrica sobre o parâmetro de transferência de massa. Observar-se tanto o caso onde a transferência é rápida e atinge à condição de equilíbrio em poucos dias, como o caso onde não é atingido o equilíbrio no nó analisado. A concentração de equilíbrio é de 10 kg/m^3 .

6.2.4. Infiltração de DNAPL em meio heterogêneo

A continuação é avaliada a resposta numérica da implementação das equações de fluxo bifásico em meios porosos heterogêneos mediante a comparação dos resultados obtidos com os métodos HMFE e GD, e dos resultados obtidos no experimento físico de infiltração de tricloroetileno (TCE) sobre um meio heterogêneo apresentado em *Multiphase Flow and Transport Processes in the Subsurface* (Helmig, 1997).

Na Figura 37 observa-se a configuração geométrica do experimento com condições de contorno hidrostáticas nos laterais, e impermeáveis no topo e na base do modelo físico. Os materiais utilizados são duas areias com propriedades dadas na Tabela 6. São considerados a heterogeneidade do meio, os efeitos da gravidade e da pressão capilar, dados pelas curvas das Figura 38 e Figura 39.

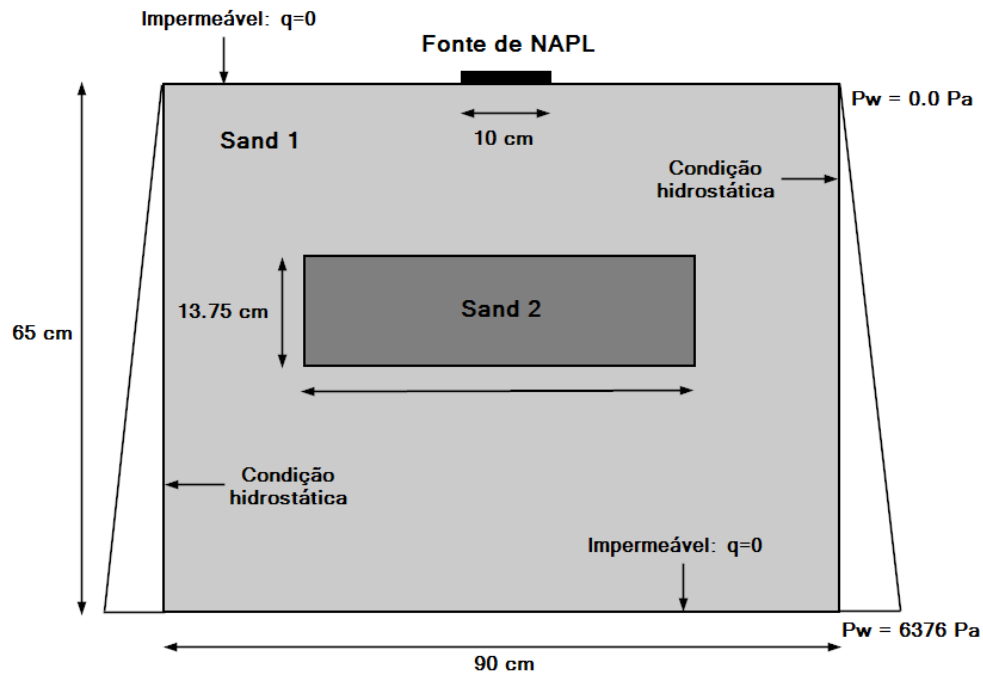


Figura 37: Geometria e condições de contorno para a simulação 2D da infiltração vertical de um DNAPL em um meio heterogêneo (Helmig, 1997).

Tabela 6: Propriedades do meio - Infiltração em meio heterogêneo

		Sand 1	Sand 2
permeabilidade intrínseca k	m^2	6.64E-11	7.15E-12
porosidade η	--	0.4	0.39
índice de tamanhos de poros λ_{capi}	--	2.7	2.0
pressão de entrada P_b	Pa	755	2060
saturação residual S_{rw}	--	0.09	0.12

Tabela 7: Propriedades dos fluidos - Infiltração em meio heterogêneo

		água	TCE
densidade ρ_{TCE}	kg/m^3	1000	1460
viscosidade μ	$kg/(m \cdot s)$	0.001	0.0009

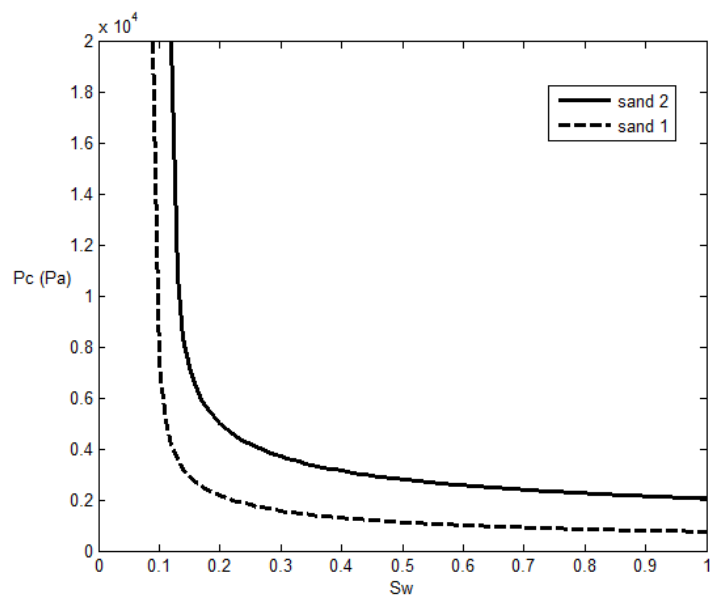


Figura 38: Relações de pressão capilar. Modelo Brooks-Corey.

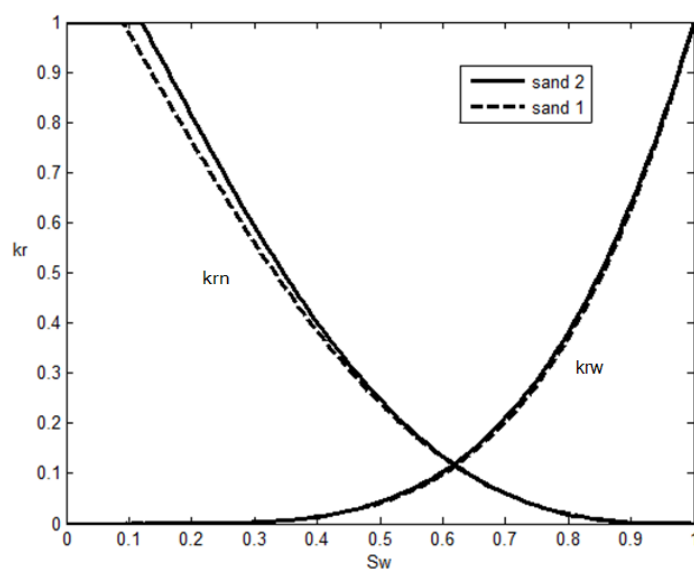


Figura 39: Permeabilidades relativas. Modelo Brooks-Corey.

Considera-se dois tempos de simulação, conforme aos dados do experimento: um tempo de 920s e outro de 2360s. A malha de elementos finitos utilizada é apresentada na Figura 40, onde a dimensão média dos elementos é de 2cm.

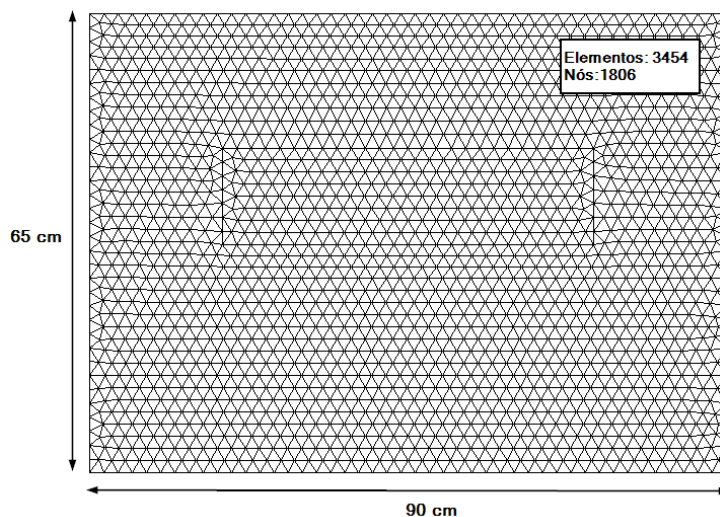


Figura 40: Malha de elementos finitos utilizada na simulação numérica.

Na Figura 41 são apresentados os resultados experimentais para um tempo de 920s. Observa-se que a frente de saturação resulta não simétrica com preferência do fluxo para a direita, e com formações de canais preferenciais. Este comportamento não homogêneo pode estar associado com pequenas dispersões dos parâmetros medidos no laboratório.

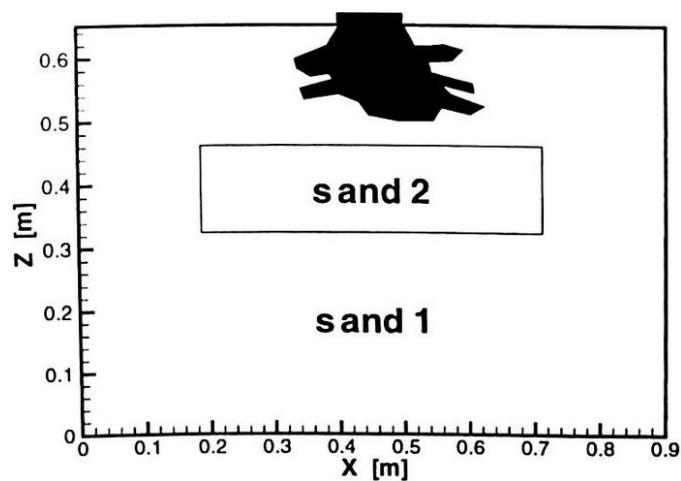


Figura 41: Resultados experimentais depois de 920s (Helmig, 1997).

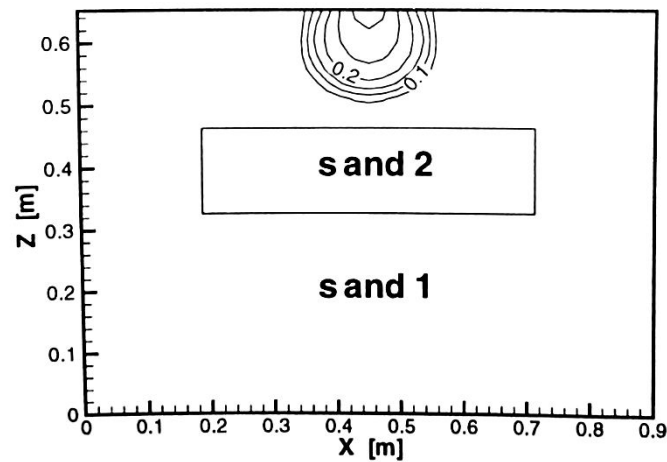


Figura 42: Resultados numéricos depois de 920s. Método *Fully Upwind Galerkin* (Helmig, 1997).

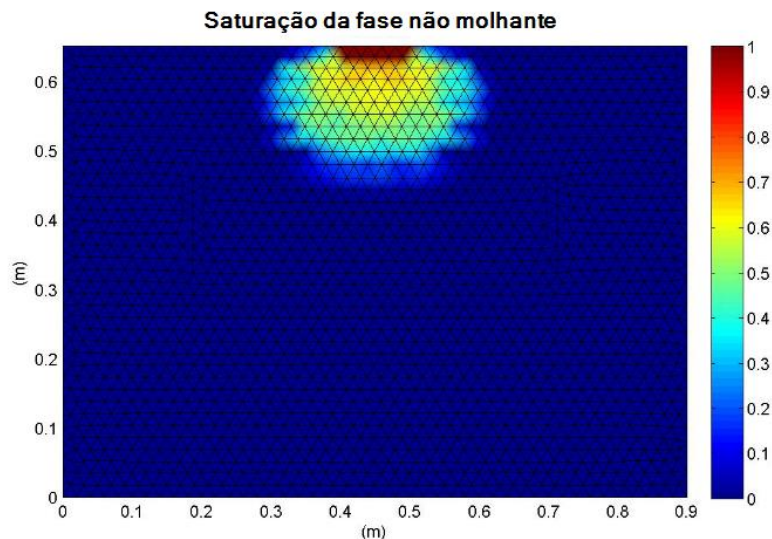


Figura 43: Resultados numéricos depois de 920s. Método HMFE-GD.

6.2.4.1.

Discussão dos resultados

Nas Figuras 46, 47 e 48, observa-se que as frentes de saturação para $t = 920s$ resultam similares. O frente de saturação obtido pelo método HMFE-GD apresenta características próximas aos resultados experimentais e valores maiores de saturação do que os resultados obtidos com o método *Fully Upwind Galerkin* (Helmig, 1997).

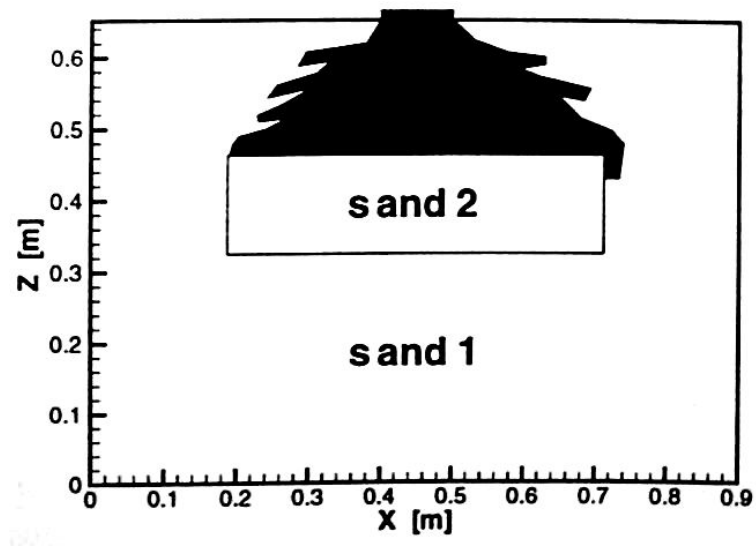


Figura 44: Resultados experimentais depois de 2360s (Helmig, 1997).

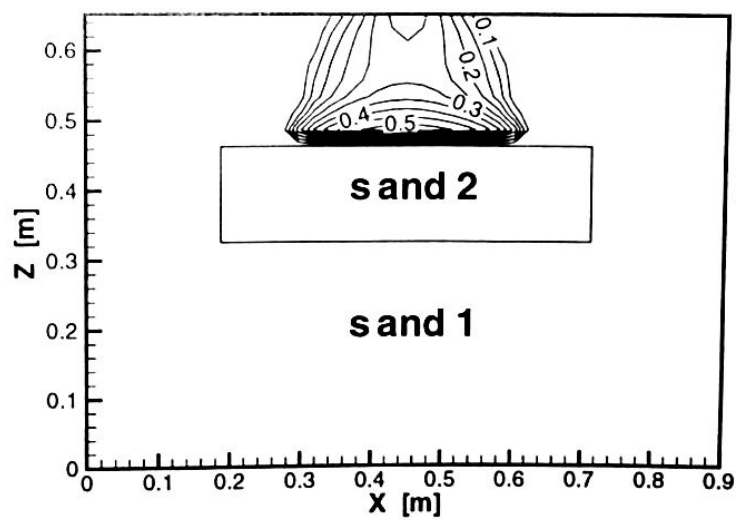


Figura 45: Resultados numéricos depois de 2360s. Método *Fully Upwind Galerkin* (Helmig, 1997).

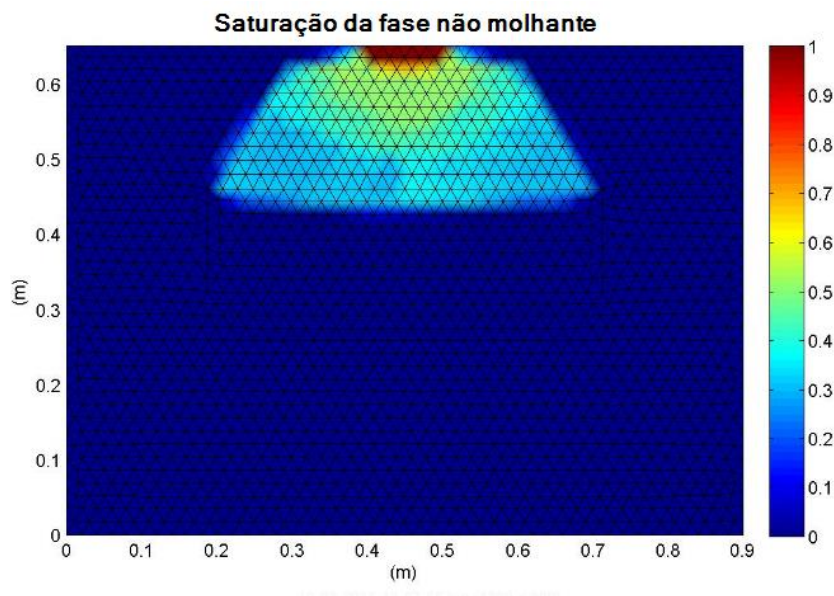


Figura 46: Resultados numéricos depois de 2360s.

6.2.4.2.

Discussão dos resultados

Nas Figuras 49, 50 e 51, observa-se que o método HMFE-GD apresenta uma forma da frente de saturação mais próxima ao resultado experimental do que o método *Fully Upwind Galerkin* (Helmig, 1997). Porém, o método HMFE-GD: a) Não apresenta uma saturação crescente no contato com o meio menos permeável. Possivelmente como resultado de processos capilares que espalhariam ao fluido para os laterais. b) A frente de saturação forma linhas quase retas nos laterais. c) A distribuição da saturação não resulta totalmente simétrica

6.2.5.

Infiltração de DNAPL em meio heterogêneo e transporte de contaminantes no sistema de águas subterrâneas

Nos seguintes exemplos é simulada a infiltração de um DNAPL, tricloroetileno (TCE), sobre um meio heterogêneo, formado predominantemente por um solo argiloso com barreiras horizontais constituídas por lentes de argilas impermeáveis (Figura 47).

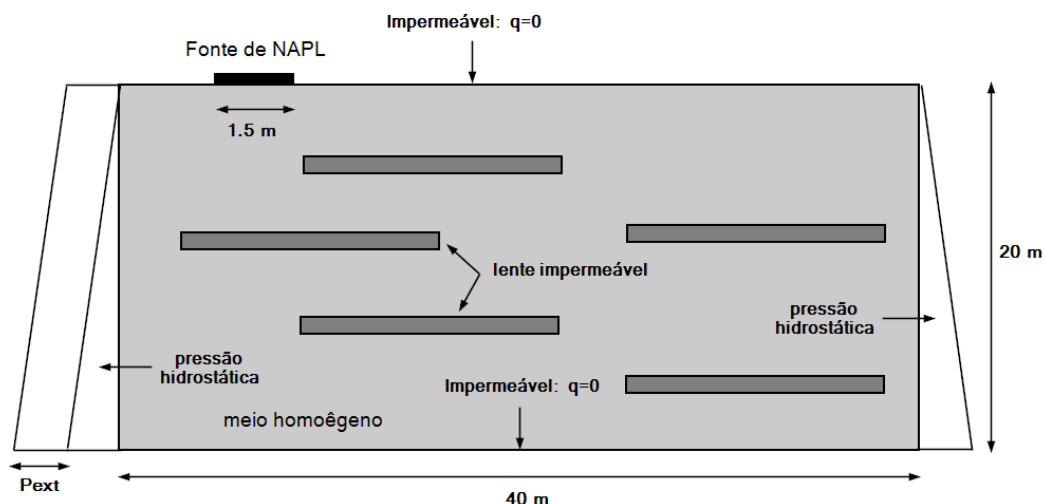


Figura 47: Geometria e condições de contorno para a simulação 2D da infiltração vertical e transporte de contaminantes dum DNAPL em meio heterogêneo.

Este caso teórico tem como objetivo avaliar a resposta simultânea dos algoritmos numéricos desenvolvidos para a resolução da equação de fluxo bifásico e transporte de contaminantes na fase aquosa, levando em consideração os efeitos da gravidade e da pressão capilar.

A fonte de DNAPL representa o vazamento de um reservatório de TCE, por exemplo, numa zona industrial. O vazamento é mantido por 120 dias com uma carga hidráulica constante equivalente a 1m de TCE.

As condições de contorno do problema são dadas na Figura 47: impermeável no topo e na base, e de fluxo estacionário segundo uma diferença de potencial constante, na esquerda e na direita.

As propriedades do meio, dos fluidos, das condições de transporte, e os parâmetros da simulação utilizados nos exemplos, são apresentados nas seguintes Tabelas 8, 9, 10 e 11, respectivamente.

Tabela 8: Propriedades do meio - Exemplos teóricos de infiltração e transporte de contaminantes

		Meio	Barreras
permeabilidade intrínseca k	m^2	3.00E-13	1.00E-19
porosidade η	--	0.3	0.1
índice de tamanhos de poros λ_{capi}	--	2.0	2.7
pressão de entrada P_b	Pa	1000	2000
saturação residual S_{rw}	--	0.1	0.2

Tabela 9: Propriedades dos fluidos - Exemplos teóricos de infiltração e transporte de contaminantes

		água	TCE
densidade ρ_{TCE}	kg/m^3	1000	1460
viscosidade μ	$kg/(m\ s)$	0.001	0.0009

Tabela 10: Propriedades de transporte - Exemplos teóricos de infiltração e transporte de contaminantes

dispersividade transversal α_T	m	0.5
dispersividade longitudinal α_L	m	0.5
coeficiente de retardamento R	--	1.0
fator de ponderação do tempo ϵ	--	0.5
constante de decaimento λ	1/d	0.0
concentração no equilíbrio C_{equi}	kg/m^3	10
tensão interfacial σ_{nw}	N/m	0.024
taxa de transferência de massa k_{tm}	m/d	7.78E-03

Tabela 11: Parâmetros de simulação - Exemplos teóricos de infiltração e transporte de contaminantes

tempo da simulação t	a	200
passo do tempo dt	h	10
tempo de injeção	d	120

A continuação serão apresentados três casos teóricos com diferentes graus de heterogeneidade. O objetivo é avaliar a resposta dos algoritmos segundo o grau de contaminação na fase aquosa e o avanço da frente de saturação. Os diferentes graus de heterogeneidades são estabelecidos mediante a presença de barreiras impermeáveis.

6.2.5.1.

Exemplo 1: infiltração de DNAPL em meio heterogêneo e transporte de contaminantes. Grau de heterogeneidade baixa.

Neste exemplo o grau de heterogeneidade é baixo, dado pela presença de duas lentes impermeáveis no meio poroso.

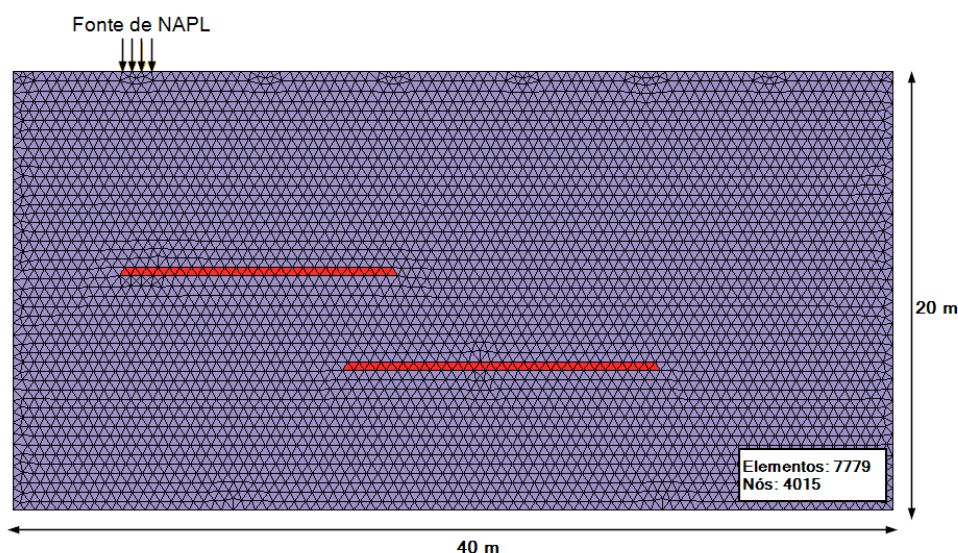
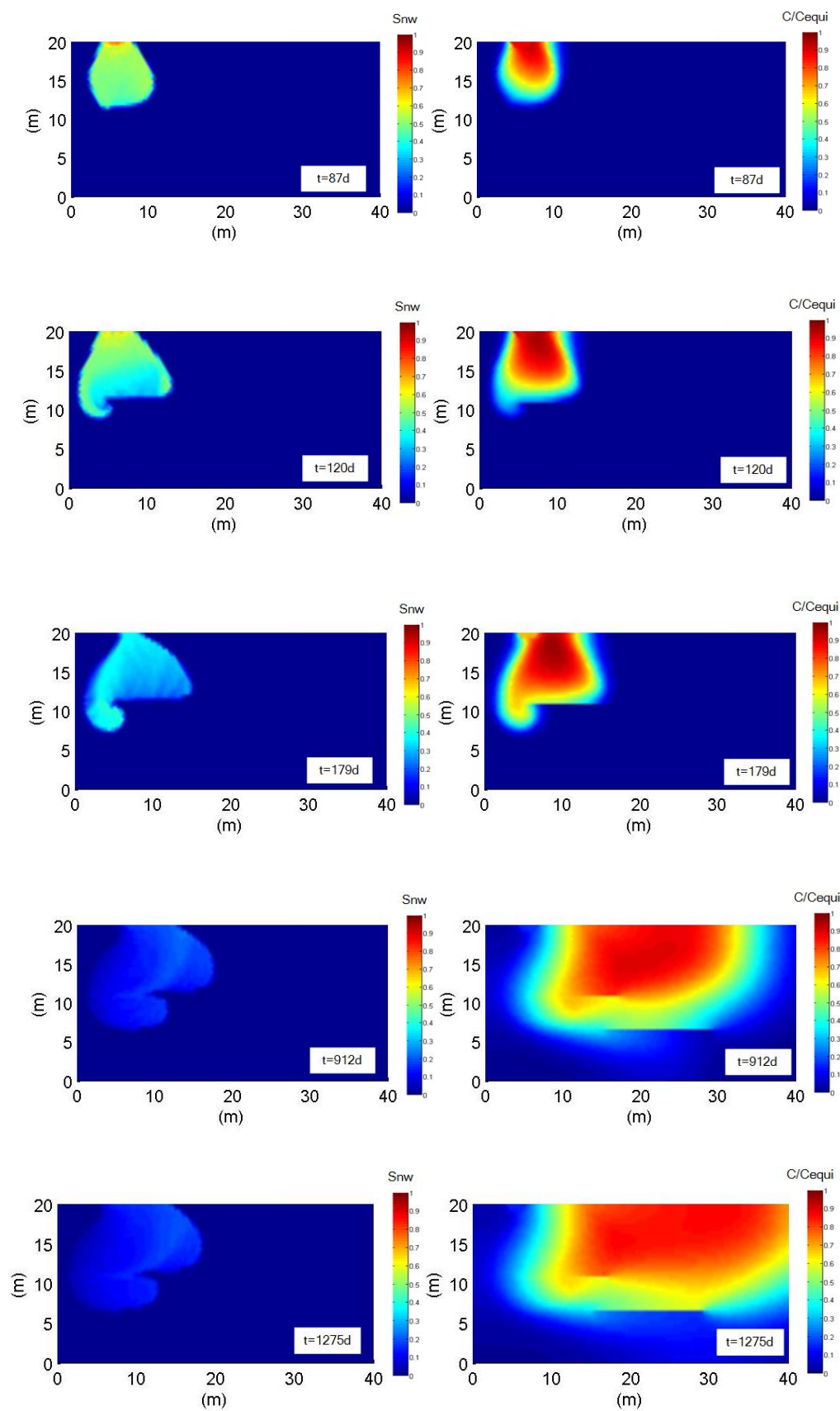
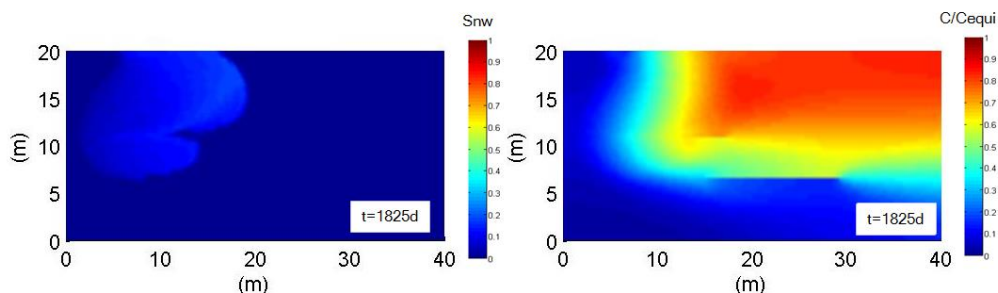


Figura 48: Exemplo 1 - Grau de heterogeneidade baixa.

A continuação serão apresentados os resultados numéricos do exemplo 1, numa sequência de figuras que correspondem aos tempos $t = 87, 120, 179, 545, 912, 1275$, e 1825 dias, respectivamente.

Em cada figura da sequência, na esquerda são mostrados os resultados numéricos da saturação do fluido não molhante no meio poroso, e na direita a concentração do composto TCE na fase molhante.





6.2.5.2.

Exemplo 2: infiltração de DNAPL em meio heterogêneo e transporte de contaminantes. Grau de heterogeneidade média.

Neste exemplo o grau de heterogeneidade é médio, dado pela presença de diversas lentes impermeáveis agrupadas de maneira menos homogênea respeito do exemplo anterior.

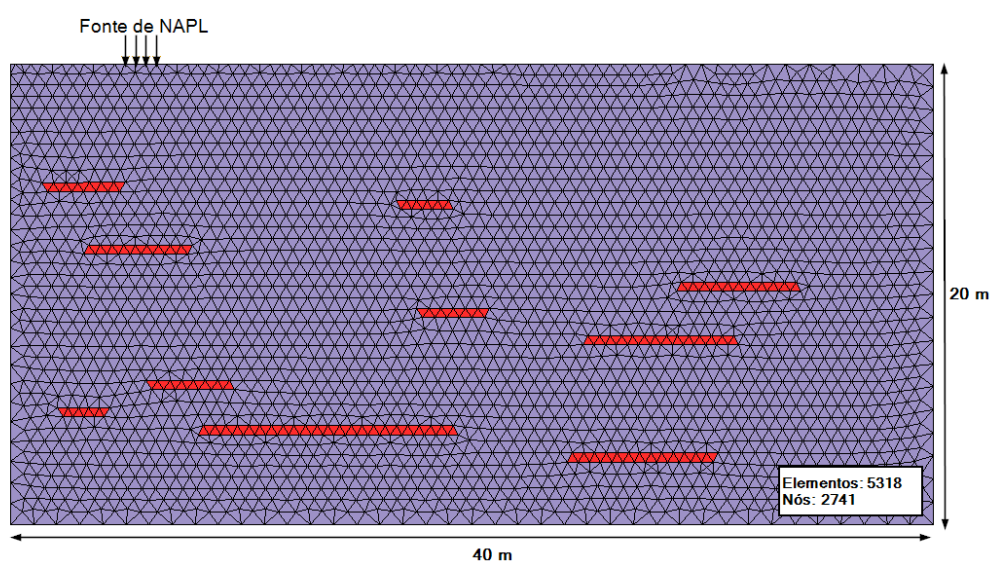
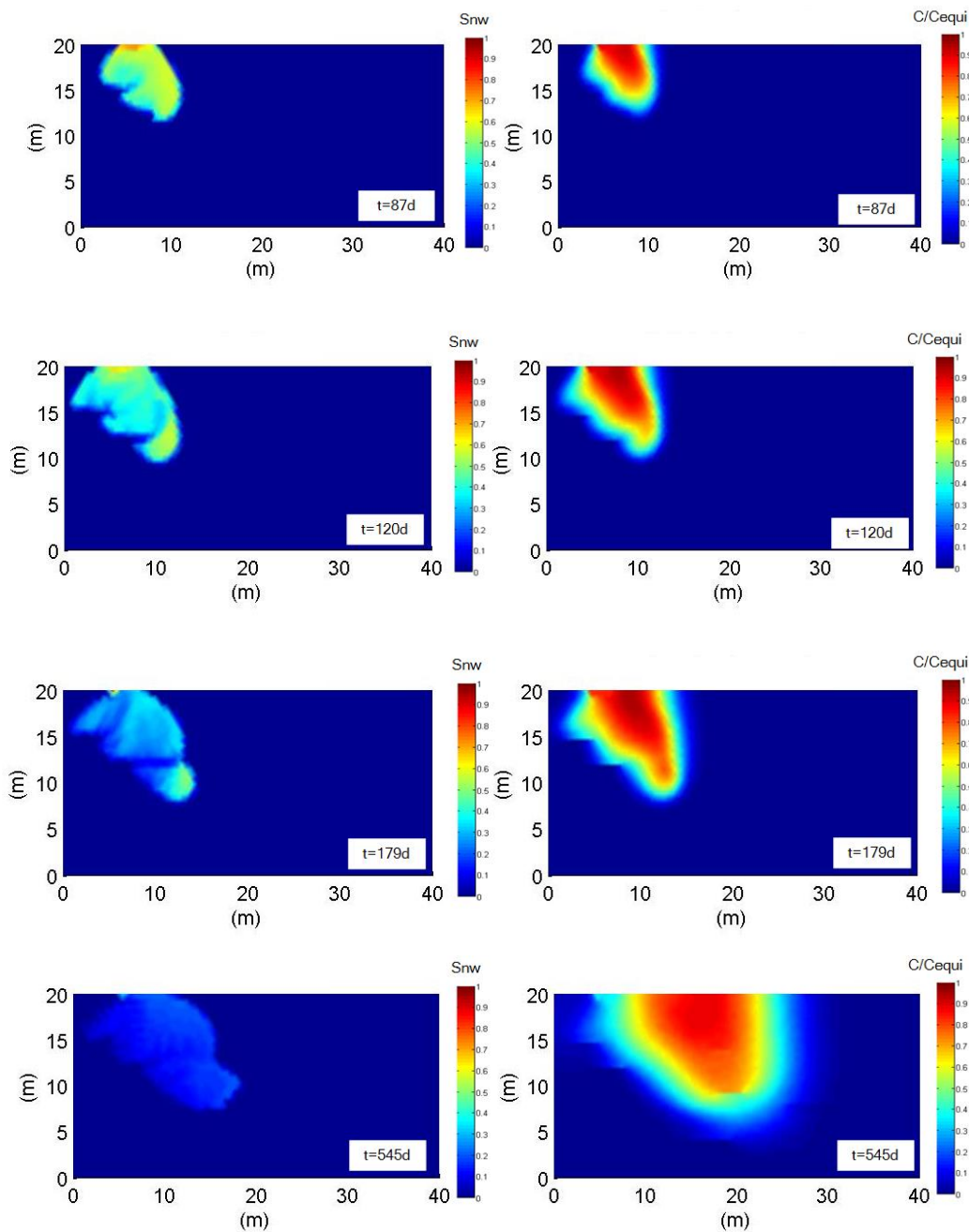
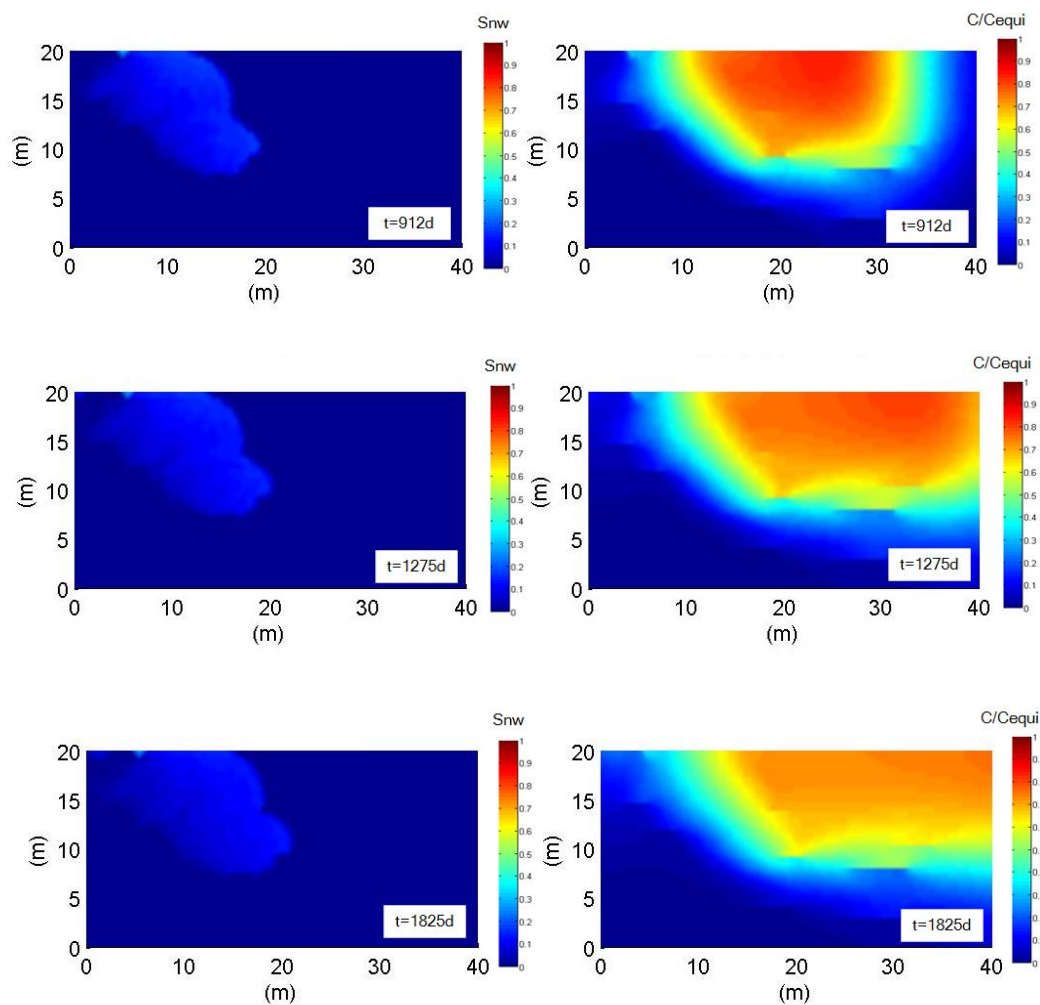


Figura 49: Exemplo 2 - infiltração de DNAPL em meio heterogêneo e transporte de contaminantes. Grau de heterogeneidade média

A continuação serão apresentados os resultados numéricos do exemplo 2, numa sequência de figuras que correspondem aos tempos $t = 87, 120, 179, 545, 912, 1275$, e 1825 dias, respectivamente.

Em cada figura da sequência, na esquerda são mostrados os resultados numéricos da saturação do fluido não molhante no meio poroso, e na direita a concentração do composto TCE na fase molhante.





6.2.5.3.

Exemplo 3: infiltração de DNAPL em meio heterogêneo e transporte de contaminantes. Grau de heterogeneidade alta.

Neste exemplo o grau de heterogeneidade é alta, dado pela presença de diversas lentes impermeáveis agrupadas de maneira homogênea dentro do meio poroso.

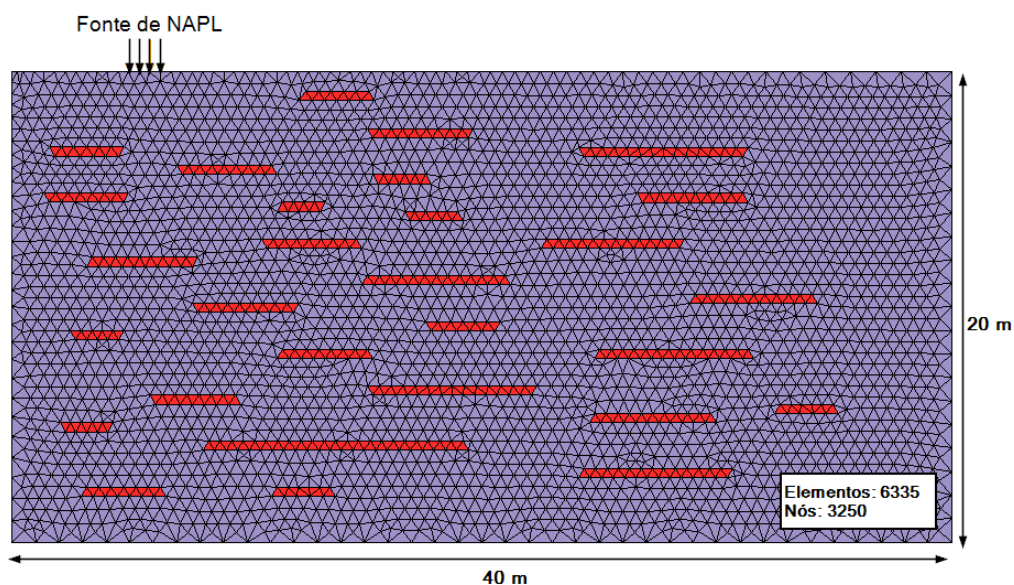
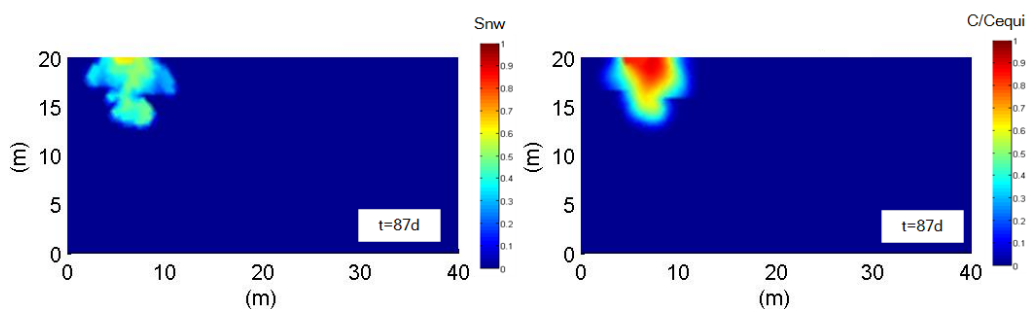
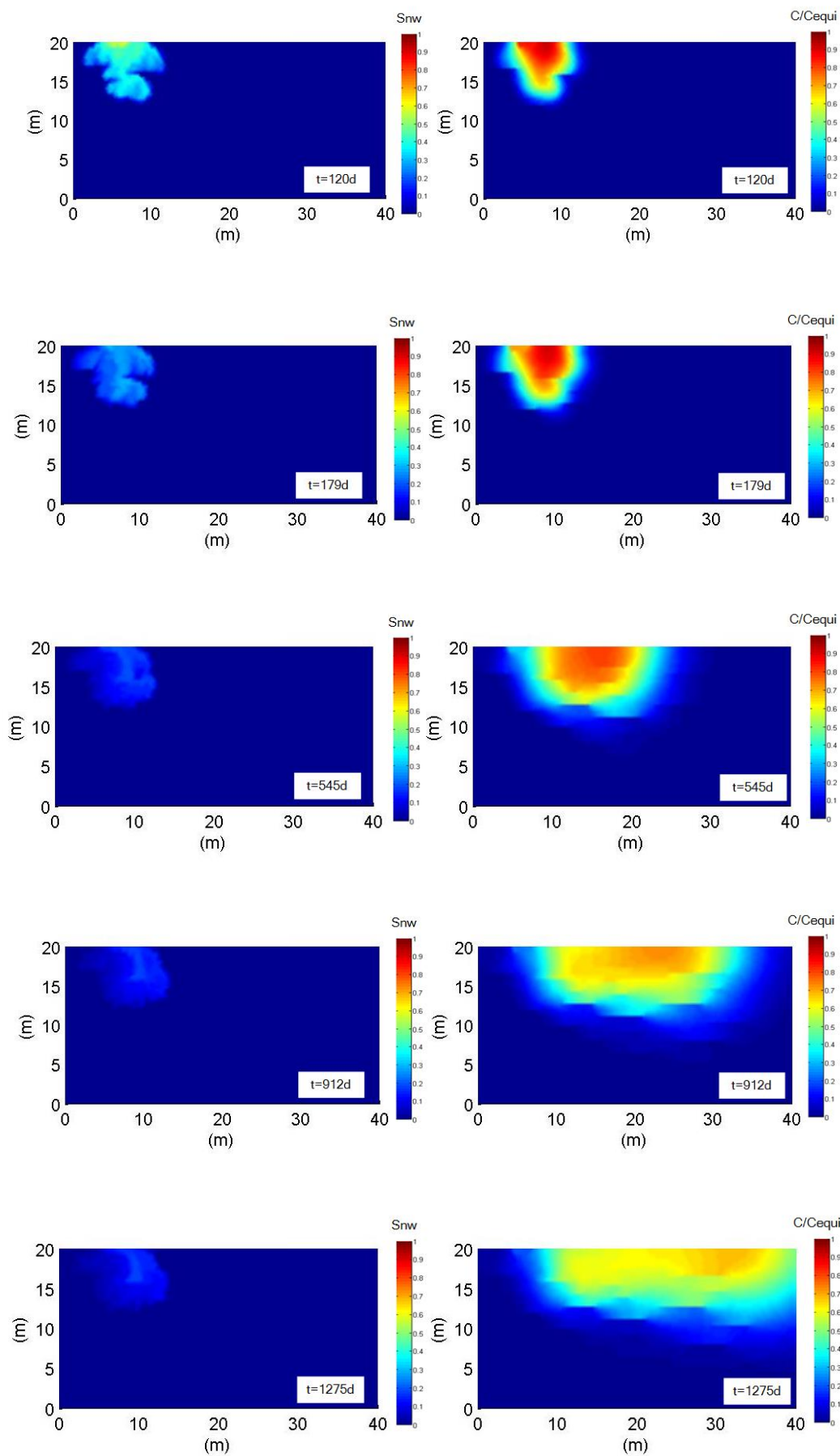


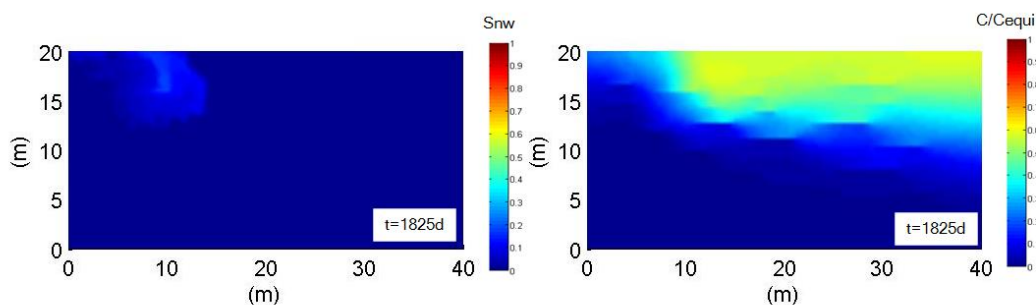
Figura 50: Exemplo 3 - infiltração de DNAPL em meio heterogêneo e transporte de contaminantes. Grau de heterogeneidade alta.

A continuação serão apresentados os resultados numéricos do exemplo 3, numa sequência de figuras que correspondem aos tempos $t = 87, 120, 179, 545, 912, 1275$, e 1825 dias, respectivamente.

Em cada figura da sequência, na esquerda são mostrados os resultados numéricos da saturação do fluido não molhante no meio poroso, e na direita a concentração do composto TCE na fase molhante.







6.2.5.4. Discussão dos resultados

Nos exemplos anteriores observa-se que a frente de saturação é fisicamente coerente com o nível de heterogeneidade de cada exemplo. Quanto mais heterogêneo é o meio analisado, menor resulta a possibilidade do fluido não molhante de ingressar ao sistema subterrâneo. A profundidade contaminada resulta respectivamente menor para os exemplos I, II e III.

Enquanto ao transporte de contaminantes observam-se, para os três exemplos, que a pluma de contaminação resulta compatível e conforme aos respectivos frentes de saturação da fase não molhante. Apresentando no início do análise uma zona de alta concentração que logo se vai diluindo conforme o avanço do tempo. Nos casos avaliados, as lentes impermeáveis geram um efeito de barreira para o contaminante descer para uma profundidade maior.

7

Conclusões e sugestões

Com o objetivo de utilizar a modelação numérica como ferramenta para obter uma solução adequada às equações matemáticas que governam o fluxo bifásico em meios porosos, foram apresentados na primeira parte deste trabalho os conceitos elementares envolvidos na utilização dos modelos matemáticos que descrevem o fluxo bifásico em meios porosos, e detalhados os processos de modelagem de um problema geral da natureza: os modelos conceituais, os matemáticos e os numéricos.

A aplicabilidade dos modelos conceituais conforme a considerações de escala permitiu estabelecer o escopo das soluções oferecidas pelos métodos numéricos utilizados na resolução das equações governantes.

Com o objetivo de analisar diferentes cenários de fluxo bifásico, neste trabalho foram apresentadas e desenvolvidas as equações matemáticas que governam o fluxo bifásico em meios porosos, o transporte de contaminantes em meios porosos, e o processo de dissolução com transferência de massa entre as fases.

As soluções das equações governantes foram estimadas a partir da implementação de técnicas computacionais e esquemas de integração numérica.

As equações do transporte de contaminantes foram resolvidas mediante a técnica dos elementos finitos convencionais (EF). A resposta do algoritmo avaliou-se em problemas de transporte de contaminantes 1D e 2D, e em problemas de transporte de contaminantes com transferência de massa.

O algoritmo numérico implementado para o transporte de contaminantes mediante a técnica dos elementos finitos convencionais (EF) apresentou uma boa concordância com as soluções analíticas disponíveis para casos simples e dentro dos limites dos parâmetros analisados. A validação do algoritmo foi comprovada tanto para o caso 1D quanto para o caso 2D, e tanto para fonte tipo pontual quanto para fonte tipo contínua.

As equações do fluxo bifásico resolveram-se mediante técnicas de elementos finitos mistos hibridizados (EFHM) e elementos finitos descontínuos (GD). A resposta da implementação computacional foi comparada com resultados obtidos mediante um experimento físico de infiltração de

tricloroetileno (TCE) sobre um meio heterogêneo, e com outras metodologias numéricas apresentadas na literatura. Os resultados numéricos obtidos mediante a metodologia EFHM-GD mostraram-se coerentes com os resultados experimentais e também com resultados numéricos apresentados na literatura obtidos com outras técnicas numéricas de solução.

O método mostra-se adequado no que se refere à captura da frente de saturação. Porém, no contato com as heterogeneidades, a frente apresentou um baixo nível de acúmulo da fase não molhante quando esta fase foi injetada.

- Neste ponto, sugere-se estudar o fenômeno de acúmulo da fase não molhante sobre zonas heterogêneas mediante a reformulação da técnica EFHM-GD para diferentes combinações das variáveis principais: $S_w - P_w$, $S_{nw} - P_{nw}$, $S_w - P_{nw}$, $S_{nw} - P_w$.

Por fim, com o objetivo de considerar cenários representativos da natureza do subsolo, foram avaliados problemas teóricos acoplando fluxo bifásico em 2D com efeitos de gravidade e pressão capilar (EFHM-GD), e transporte de contaminantes com transferência de massa entre as fases (EF).

Os resultados obtidos foram qualitativamente aceitáveis enquanto à captura da frente de saturação e à distribuição das concentrações do contaminante dentro do meio poroso.

As frentes de saturação obtidas numericamente resultaram coerentes e conformes com a distribuição das heterogeneidades presentes em cada problema analisado.

A solução numérica do transporte de contaminantes resultou compatível e conforme as respectivas frentes de saturação da fase não molhante. A resposta reproduziu zonas de altas concentrações próximas ao ponto de injeção que foram diluídas conforme o avanço do tempo pelo fluxo de águas subterrâneas.

- Para o problema acoplado sugere-se a implementação de fraturas discretas mediante a técnica de elementos finitos colapsados, e assim avaliar a resposta numérica ao simular o fenômeno de infiltração em estratos profundos.
- Sugere-se relacionar a implementação acoplada incluindo fraturas discretas mediante elementos finitos colapsados com diferentes formulações da técnica EFHM-GD baseada nas diferentes possibilidades da escolha da variável principal do problema.

Conclui-se que o trabalho realizado atendeu os objetivos fundamentais propostos. Ficou evidente a pertinência da técnica EFHM-GD para os casos analisados. Portanto seria desejável aprofundar a aplicação desta técnica para desenvolver seu potencial no campos da engenharia.

Referências Bibliográficas

ALLEN, M. (1985). Numerical modelling of multiphase flow in porous media. Adv. Water Resources, 8(December).

BASTIAN, P. (1999). Numerical Computation of Multiphase Flows in Porous Media. Habilitationsschrift vorgelegt an der Technischen Fakultät der Christian–Albrechts–Universität Kiel zur Erlangung der Venia legendi im Fachgebiet Informatik (Wissenschaftliches Rechnen). Heidelber.

BEAR, J. (1972). Dynamics of Fluids In Porous Media. New York: American Elsevier Publishing Company, INC.

BEAR, J., & VERRUIJT, A. (1987). Modelling Groundwater Flow and Pollution. Kluwer Boston, Inc.

BEAR, J., TANG, C.-F., DE MARSILY, G. (1993). Flow and Contaminant Transport. California: Academic Press, Inc.

BIRD, B., STEWART, W., LIGHTFOOT, E. (2006). Transport Phenomena - 2nd edition. John Wiley & Sons, Inc.

BLESSENT, D., JØRGENSEN, P., THERRIEN, R. (2014). Comparing Discrete Fracture and Continuum Models to Predict Contaminant Transport in Fractured Porous Media. Groundwater, 52(Nº 1).

BORGES, A. (2002). Modelagem numérica de fluxo bifásico e transporte em meios porosos com transferência de massa e co-solvência. Tese de Doutorado. Rio de Janeiro.

BRADFORD, S., LEIJ, F. (1997). Estimating interfacial areas for multi-fluid soil systems. Journal of Contaminant Hydrology, 27(83-105).

BREZZI, F., FORTIN, M. (1991). Mixed and hybrid finite element methods, environmental engineering.

BROOKS, R., COREY, A. (1964). Hydraulic Properties of Porous Media. Hydrology Papers(N.3).

CHAVENT, G., JAFFRE, J. (1986). Mathematical models and finite elements for reservoir simulation. Studies in mathematics and its applications. North-Holland: Elsevier.

COCKBURN, B., KARNIADAKIS, G., SHU, C.-W. (2000). The Development of Discontinuous Galerkin Methods. Lecture Notes in Computational Science and Engineering, Volume 11(pp 3-50).

COOK, P. (2003). A guide to regional groundwater flow in fractured rock aquifers. Australia: CSIRO.

DE JOSSELIN DE JONG, G. (1958). Longitudinal and transverse diffusion in granular deposits. Transactions, American Geophysical Union.

FRIND, E. (1995). Lecture Notes in Groundwater Modelling. EARTH (456/656). Waterloo, Ontario, Canada. : University of Waterloo.

Gleick, P. H. (1993). Water in Crisis: A Guide to the World's Fresh Water Resources. New York: Oxford University Press .

HE, J., CHEN, S.-h. (2012). Revised Solution of Equivalent Permeability Tensor for Discontinuous Fractures. Journal of Hydrodynamics(24(5), p.711 -717.).

HELMIG, R. (1997). Multiphase Flow and Transport Processes in the Subsurface. Germany: Springer.

HOTEIT, H., FIROOZABADI, A. (2008). Numerical Modelling of two-phase flow in heterogeneous permeable media with different capillarity pressures. Advances in Water Resources(31,56–73.).

HOTEIT, H., ACKERER, P., MOSÉ, R. (2004). Nuclear waste disposal simulations: complex test cases. *Comput Geosci*.

JING, L., STEPHANSSON, O. (2007). Fundamentals of Discrete Element Methods for Rock Engineering — Theory and Applications. *Developments in Geotechnical Engineering*, 85(Pages 365-398).

JONG, D. J. (1958). Longitudinal and transverse diffusion in granular deposits. *Transactions, American Geophysical Union*.

KUEPER, B. H., & MCWHORTER, D. B. (1991). The Behavior of Dense, Nonaqueous Phase Liquids in Fractured Clay and Rock. *Ground Water*(29(5)), pp. 716-728.

LI, B. Q. (2006). *Discontinuous finite elements in fluid dynamics and heat*. Germany: Springer.

ODA, M. (1985). Permeability tensor for discontinuous rock masses[J]. *Geotechnique*.

OGATA, A., BANKS, R. (1961). A Solution of the Differential Equation of Longitudinal Dispersion in Porous Media. WASHINGTON: U.S. Geological Survey Professional Paper.

PEACEMAN, D. (1977). *Fundamentals of Numerical Reservoir Simulation*. Elsevier.

SAHIMI, M. (2011). *Flow and Transport in Porous Media*. Germany: WILEY-VCH Verlag GmbH & Co. KGaA.

SAYRE, W. (1973). Natural mixing processes in rivers.

SEAGREN, E., RITTMANN, B., VALOCCHI, A. (1999). A critical evaluation of the local-equilibrium assumption in Modelling NAPL-pool dissolution. *Journal of Contaminant Hydrology*, 39(109–135).

SELVADURAI, A. (2014). Mechanics of Groundwater Flow. Course Outline. Rio de Janeiro: PUC-Rio.

SUN, N.-Z. (1989). Applications of Numerical Methods to Simulate the Movement of Contaminants in Groundwater. Environmental Health Perspectives, Vol. 83(pp. 97-115,).

USEPA. (1994). DNAPL Site Characterization. Washington, DC: EPA540/F-94/049.

VAN GENUCHTEN, M., LEIJ, F., SKAGGS, T., TORIDE, N., BRADFORD, S., PONTEDEIRO, E. (2013). Exact Analytical Solutions for Contaminant Transport in Rivers. Journal of Hydrology and Hydromechanics, 61(3).

ZHENG, C., BENNETT , G. (2002). Applied Contaminant Transport Modelling (Vol. 2nd Edition). New York: John Wiley and Sons, Inc.

ZIENKIEWICZ, O. C., TAYLOR, R., SHERWIN, S., PEIRÓ, J. (2003). On discontinuous Galerkin methods. INTERNATIONAL JOURNAL FOR NUMERICAL METHODS IN ENGINEERING, pp. 58:1119–1148 (DOI: 10.1002/nme.884).