



Isabelle de Araujo Telles

**DESENVOLVIMENTO DE UM SISTEMA INTEGRADO
PARA MODELAGEM DE FLUXO E TRANSPORTE
EM MEIOS POROSOS E FRATURADOS**

Tese de Doutorado

Tese apresentada ao Programa de Pós-graduação em Engenharia Civil da PUC-Rio como requisito parcial para obtenção do título de Doutor em Engenharia Civil.

Orientador: Prof. Eurípedes do Amaral Vargas Jr.

Rio de Janeiro, janeiro de 2006

Isabelle de Araujo Telles

**Desenvolvimento de um Sistema Integrado
para Modelagem de Fluxo e Transporte
em Meios Porosos e Fraturados**

Tese apresentada como requisito parcial para obtenção do título de Doutor pelo Programa de Pós-Graduação em Engenharia Civil da PUC-Rio. Aprovada pela Comissão Examinadora abaixo assinada.

Prof. Eurípedes do Amaral Vargas Jr.

Presidente/Orientador
Departamento de Engenharia Civil - PUC-Rio

Prof. Luiz Fernando Martha

Departamento de Engenharia Civil - PUC-Rio

Dr. João Luiz Elias Campos

Tecgraf/PUC-Rio

Prof. Luiz Eloy Vaz

DME - UFRJ

Prof. Roberto Francisco de Azevedo

Departamento de Engenharia Civil - UFV

Prof. Cláudio Amaral

Departamento de Engenharia Civil - PUC-Rio

Prof. José Eugênio Leal

Coordenador Setorial de Pós-graduação
do Centro Técnico Científico - PUC-Rio

Rio de Janeiro, 13 de janeiro de 2006

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

Isabelle de Araujo Telles

Graduou-se em Engenharia Civil na Universidade Federal do Pará (UFPA) em 1999, defendeu sua dissertação de Mestrado em Engenharia Civil (Geotecnia) na Pontifícia Universidade Católica do Rio de Janeiro (PUC-Rio) em 2001 e, atualmente trabalha como pesquisadora no Tecgraf/PUC-Rio.

Ficha Catalográfica

Telles, Isabelle de Araujo

Desenvolvimento de um sistema integrado para modelagem de fluxo e transporte em meios porosos e fraturados / Isabelle de Araujo Telles ; orientador: Eurípedes do Amaral Vargas Jr.. – Rio de Janeiro : PUC, Departamento de Engenharia Civil, 2006.

164 f. : il. ; 30 cm

Tese (doutorado) – Pontifícia Universidade Católica do Rio de Janeiro, Departamento de Engenharia Civil.

Inclui referências bibliográficas.

1. Engenharia civil – Teses. 2. Fluxo não saturado. 3. Transporte de solutos. 4. Transporte de partículas. 5. Meio poroso. 6. Meio fraturado. 7. Geração de fraturas. 8. Método dos elementos finitos. I. Vargas Júnior, Eurípedes do Amaral. II. Pontifícia Universidade Católica do Rio de Janeiro. Departamento de Engenharia Civil. III. Título.

CDD: 624

Aos meus pais.

Agradecimentos

Ao professor Eurípedes Vargas Jr., meu orientador, por ter transmitido ensinamentos que proporcionaram o desenvolvimento desta tese.

Aos meus pais Francisco e Heliana, pelo que sou e onde estou, pelo incentivo, amor e apoio nos momentos mais difíceis de minha vida.

A minha segunda mãe Dica, aos meus irmãos Danielle e Neto, e a minha avó Bemvinda pelo apoio e amor sempre a mim dedicados.

Ao Sam, pelo amor e amizade.

Ao professor Luiz Fernando pela confiança em mim depositada na participação do projeto de pesquisa, que sob sua coordenação tornou-se o tema de minha tese.

Ao William pela ajuda, atenção e apoio durante todos os anos de minha tese.

Ao André Müller pela ajuda em uma das etapas mais difíceis de minha tese.

Aos meus amigos do Rio de Janeiro: Júlio César, Antônio Sérgio, Antônio Miranda, Vitor, Nelly, Ataliba e Ana Júlia.

A todos amigos do Tecgraf, em especial ao Ivan pela ajuda e por ter me dado a oportunidade de trabalhar nesse conceituado laboratório de computação gráfica.

A todos colegas da pós-graduação não mencionados aqui, professores e funcionários do Departamento de Engenharia Civil da PUC-Rio, que contribuíram de forma direta ou indireta para realização deste trabalho.

A ANP pelo apoio financeiro.

Em especial, a Deus.

Resumo

Telles, Isabelle de Araujo; Vargas Jr., Eurípedes do Amaral. **Desenvolvimento de um sistema integrado para modelagem de fluxo e transporte em meios porosos e fraturados**. Rio de Janeiro, 2006. 164p. Tese de Doutorado - Departamento de Engenharia Civil, Pontifícia Universidade Católica do Rio de Janeiro.

Este trabalho apresenta o desenvolvimento de um sistema integrado de modelagem, tridimensional, de fluxo e transporte em meios porosos e fraturados. O sistema é composto de seis programas computacionais, que são responsáveis pela geração de superfícies geológicas (Gocad), geração de sistemas de fraturas (FracGen3D), modelagem geométrica (MG), análise numérica de fluxo e transporte (soluto e partículas) (FTPF-3D) e visualização dos resultados (Pos3D e Matlab). Dos programas, dois foram desenvolvidos neste trabalho (FracGen3D e o FTPF-3D) e quatro foram integrados ao sistema (Gocad, MG, Pos3D e Matlab). O sistema é capaz de modelar os meios porosos, fraturados, porosos fraturados (meio poroso e fraturado interposto) e uma combinação entre os meios. Nos meios fraturados ou porosos fraturados, as fraturas geradas podem ser do tipo determinísticas e/ou estatísticas. As características das fraturas estatísticas podem ser geradas segundo distribuições probabilísticas ou com valores constantes. O programa de análise numérica utiliza o Método dos Elementos Finitos para resolver as equações governantes, considerando os regimes permanente e transiente, em condições saturadas e não saturadas. Para a solução da não linearidade da equação de fluxo, é adotado o método de Picard ou o método BFGS. No transporte de solutos, os mecanismos de advecção, dispersão, difusão, sorção e decaimento podem ser considerados. O trabalho apresenta exemplos numéricos utilizados na validação das implementações computacionais realizadas, e apresenta também, outros exemplos utilizados para demonstrar o sistema desenvolvido.

Palavras-chave

Fluxo não saturado, transporte de solutos, transporte de partículas, meio poroso, meio fraturado, geração de fraturas, método dos elementos finitos

Abstract

Telles, Isabelle Araujo; Vargas Jr., Eurípedes do Amaral. **Development of an integrated system for the modelling of flow and transport in porous and fractured media.** Rio de Janeiro, 2006. 164p. D.Sc. Thesis - Department of Civil Engineering, Pontifícia Universidade Católica do Rio de Janeiro.

This work presents the development of an integrated system for the three-dimensional modelling of flow and transport in porous and fractured media. The system is composed of six computational programs, which are responsible for the generation of geologic surface (Gocad), generation of fracture network (FracGen3D), geometric modelling (MG), numerical analysis of flow and transport (solute and particles) (FTPF-3D) and results visualization (Pos3D and Matlab). Of the programs, two had been developed in this work (FracGen3D and the FTPF-3D) and four had been integrated to the system (Gocad, MG, Pos3D and Matlab). The system is able to model the porous, fractured, fractured porous media (porous and fractured medias interposed) and a combination between the media. In the fractured or fractured porous media, the fractures generated can be of the type deterministic and/or statistical. The characteristics of the statistical fractures can be generated according to probabilistic distributions or with constant values. The numerical analysis program uses the Finite Element Method to solve the governance equations, considering steady-state and transient flow, in saturated and unsaturated conditions. For the solution of non linearity of the flow equation, the Picard scheme or the BFGS scheme are adopted. In the solute transport, the advection, dispersion, diffusion, sorption and decay mechanisms can be considered. This work also presents numerical examples used in the validation of the carried through computational implementations and other examples used to demonstrate the system that has been developed.

Keywords

Unsaturated flow, solute transport, particle transport, porous media, fractured media, fracture generation, finite elements methods

Sumário

1	Introdução	20
1.1.	Contribuição da tese	24
1.2.	Organização da tese	26
2	Geração e modelagem de sistemas porosos e fraturados	28
2.1.	Meios porosos	28
2.2.	Meios porosos fraturados	29
2.2.1.	Fraturas	32
2.2.1.1.	Tipos de fraturas	32
2.2.1.2.	Características das fraturas	33
2.2.2.	Sistemas de fraturas	44
2.3.	Um programa computacional para geração de sistemas de fraturas	45
2.3.1.	Relevância do desenvolvimento de um programa de geração de sistemas de fraturas	46
2.3.2.	Descrição do programa de geração de sistemas de fraturas	47
2.4.	Gerador de malha de elementos finitos de sistemas porosos e fraturados	59
3	Análise de fluxo e transporte em meios porosos e fraturados	62
3.1.	Modelos conceituais de fluxo e transporte em meios porosos e fraturados	62
3.1.1.	Modelo de meio poroso equivalente (<i>equivalent porous medium</i>)	64
3.1.2.	Modelo de dupla porosidade (<i>double porosity</i>)	64
3.1.3.	Modelo de fraturas discretas (<i>discrete fracture</i>)	65
3.2.	Equações governantes de fluxo	65
3.2.1.	Equação de fluxo do meio poroso	66
3.2.2.	Equação de fluxo do meio fraturado	69

3.2.3. Equação de fluxo do meio poroso fraturado	70
3.3. Equações governantes de transporte de soluto	72
3.3.1. Equação de transporte de soluto do meio poroso	72
3.3.2. Equação de transporte de soluto do meio fraturado	73
3.3.3. Equação de transporte de soluto do meio poroso fraturado	74
3.4. Trajetória de partículas	75
3.5. Métodos numéricos	77
3.5.1. Método dos elementos finitos	78
3.5.2. Formulação numérica da equação de fluxo do meio poroso	78
3.5.3. Formulação numérica da equação de fluxo do meio fraturado	81
3.5.4. Formulação numérica da equação de transporte de soluto do meio poroso	82
3.5.5. Formulação numérica da equação de transporte de soluto do meio fraturado	85
3.5.6. Métodos iterativos para problemas não lineares	85
3.6. Um programa numérico para análise de fluxo e transporte em meios porosos e fraturados	90
4 Exemplos	94
4.1. Validação da análise de fluxo e transporte de soluto no meio fraturado	94
4.2. Comparação entre os métodos de Picard e BFGS	99
4.3. Exemplo 1 – Teste de capacitação do gerador de fraturas FracGen3D	103
4.4. Exemplo 2 – Análise de fluxo em meio fraturado	104
4.5. Exemplo 3 – Análise de fluxo em meio poroso e meio fraturado	108
4.6. Exemplo 4 – Análise de fluxo em meio poroso e meio poroso fraturado	113
4.7. Exemplo 5 – Análise de fluxo e transporte de partículas em meio fraturado	118
4.8. Exemplo 6 – Análise de fluxo e transporte de soluto em meio fraturado	123
4.9. Exemplo 7 – Análise de fluxo e transporte de soluto em meio	

fraturado	126
4.10. Exemplo 8 – Análise de fluxo em meio poroso e meio fraturado	131
4.11. Exemplo 9 – Análise de fluxo em meio fraturado	134
5 Conclusões e sugestões	139
Referências bibliográficas	143
APÊNDICE A Distribuições probabilísticas	152
A.1. Distribuição uniforme	152
A.2. Distribuição exponencial	153
A.3. Distribuição normal	154
A.4. Distribuição log-normal	156
A.5. Distribuição de Fisher	157
APÊNDICE B Gocad	160
APÊNDICE C Pos3D	163

Lista de Figuras

Figura 1.1: Etapas para modelagem de fluxo e transporte em meios porosos e fraturados	20
Figura 1.2: Algumas combinações dos meios porosos e meios porosos fraturados.	24
Figura 1.3: Programas que compõe o sistema computacional desenvolvido.	25
Figura 2.1: Fluxo na rede de fraturas conectadas.	30
Figura 2.2: Fluxo na rede de fraturas conectadas e troca de fluidos entre a matriz rochosa e as fraturas.	30
Figura 2.3: Contaminação de um aquífero fraturado por um DNAPLE.	31
Figura 2.4: Definição de termos de orientação espacial de estruturas geológicas planares	34
Figura 2.5: Representação esférica dos dados de orientação.	35
Figura 2.6: Volume unitário com três fraturas n seu interior.	36
Figura 2.7: Área unitária com cinco fraturas no seu interior.	37
Figura 2.8: Linha de amostragem interceptando seis fraturas.	38
Figura 2.9: Família de planos de fraturas paralelos interceptados por uma linha de varredura.	38
Figura 2.10: Famílias de planos de fraturas paralelos interceptados por uma linha de varredura.	39
Figura 2.11: Tipos de espaçamentos.	40
Figura 2.12: Espaçamentos representado de forma bidimensional.	41
Figura 2.13: Algumas formas de fraturas.	42
Figura 2.14: Definição da geometria do polígono inscrito ao círculo.	43
Figura 2.15: Abertura de uma fratura.	43
Figura 2.16: Interface gráfica do programa FracGen3D.	48
Figura 2.17: Hierarquia dos elementos representativos do modelo.	48
Figura 2.18: Regiões do domínio.	49
Figura 2.19: Diálogo de criação de regiões.	50
Figura 2.20: Definição de regiões a partir de superfícies.	50

Figura 2.21: Diálogo de geração de família de fraturas.	51
Figura 2.22: Fraturas de uma família de fraturas.	51
Figura 2.23: Diálogo de criação de fraturas determinísticas.	52
Figura 2.24: Diálogo de criação de poços.	52
Figura 2.25: Poços com formas retilínea e curvo.	53
Figura 2.26: Superfícies importadas pelo programa.	53
Figura 2.27: Condição inicial aplicada na região.	54
Figura 2.28: Condição de contorno sendo aplicada em uma face da região.	54
Figura 2.29: Diálogo que define a condição de contorno de um poço.	55
Figura 2.30: Passos para geração de uma família de fraturas segundo a metodologia 1.	56
Figura 2.31: Cálculo do centro inicial da fratura.	58
Figura 2.32: Translação do centro da fratura.	58
Figura 2.33: Passos para geração de uma família de fraturas segundo a metodologia 2.	59
Figura 2.34: Processo de geração da malha de elementos finitos.	61
Figura 3.1: Escala de representação do meio poroso e fraturado (adaptado de Bear, 1993).	63
Figura 3.2: Retenção de água no solo.	69
Figura 3.3: Transferência de fluidos entre o meio poroso e a fratura.	71
Figura 3.4: Compatibilidade dos nós dos elementos representativos do meio poroso e dos elementos representativos das fraturas.	71
Figura 3.5: Elementos da trajetória de uma partícula.	77
Figura 3.6: Exemplo da trajetória de uma partícula.	77
Figura 3.7: Elemento bidimensional posicionado no espaço.	81
Figura 4.1: Posições espaciais da fratura.	95
Figura 4.2: Malha de elementos finitos, posição da fonte de contaminação e posição do nó A onde os resultados serão comparados.	96
Figura 4.3: Comparação dos resultados de carga de pressão da fratura na posição ilustrada pela Figura 4.1a.	97

Figura 4.4: Comparação dos resultados de carga de pressão da fratura nas posições ilustradas pela Figura 4.1b e Figura 4.1c.	97
Figura 4.5: Comparação dos resultados de concentração de soluto da fratura nas posições ilustradas pela Figura 4.1a, Figura 4.1b e Figura 4.1c.	99
Figura 4.6: Primeiro teste – Malha de elementos finitos e posição do nó A onde os resultados são comparados.	100
Figura 4.7: Primeiro teste – Comparação dos resultados de carga de pressão utilizando os métodos de Picard e BFGS.	100
Figura 4.8: Segundo teste – Malha de elementos finitos e posição do nó A onde os resultados são comparados	101
Figura 4.9: Segundo teste – Comparação dos resultados de carga de pressão utilizando os métodos de Picard e BFGS.	102
Figura 4.10: Distribuição espacial com 2738 fraturas geradas aleatoriamente.	103
Figura 4.11: Exemplo 2 – superfícies de topo e base da região modelada.	104
Figura 4.12: Exemplo 2 – malha de elementos finitos.	106
Figura 4.13: Exemplo 2 – resultados de carga de pressão no tempo de 200.0 seg.	107
Figura 4.14: Exemplo 2 – resultados de carga total no tempo de 200.0 seg.	107
Figura 4.15: Exemplo 3 – superfícies que delimitam as regiões representativas dos meios poroso e fraturado, posição do poço de bombeamento.	108
Figura 4.16: Exemplo 3 – famílias de fraturas da região 2.	110
Figura 4.17: Exemplo 3 – malha de elementos finitos.	110
Figura 4.18: Exemplo 3 – Primeira etapa: resultados de carga total.	111
Figura 4.19: Exemplo 3 – Segunda etapa: resultados de carga de pressão no tempo de 60.0 min.	112
Figura 4.20: Exemplo 3 – Segunda etapa: resultados de carga total no tempo de 60.0 min.	113

Figura 4.21: Exemplo 4 – superfícies que delimitam as regiões representativas do meio poroso e meio poroso fraturado.	114
Figura 4.22: Exemplo 4 – fraturas geradas na região 2.	115
Figura 4.23: Exemplo 4 – malha de elementos finitos.	115
Figura 4.24: Exemplo 4 – resultados de carga de pressão no tempo de 40.0 dias.	116
Figura 4.25: Exemplo 4 – resultados de carga total no tempo de 40.0 dias.	116
Figura 4.26: Exemplo 4 – resultados de carga total no regime permanente.	117
Figura 4.27: Exemplo 4 – resultados do campo de velocidade no regime permanente.	118
Figura 4.28: Exemplo 5 – malha de elementos finitos e posição dos poços de bombeamento.	119
Figura 4.29: Exemplo 5 – Primeira etapa: resultados de carga total.	120
Figura 4.30: Exemplo 5 – Primeira etapa: resultados do campo de velocidade.	121
Figura 4.31: Exemplo 5 – Segunda etapa: posição das partículas lançadas sobre a fratura 2.	122
Figura 4.32: Exemplo 5 – Segunda etapa: resultados das trajetórias de partículas no tempo de 200.0 seg.	123
Figura 4.33: Exemplo 6 – malha de elementos finitos e posição da fonte de contaminação.	124
Figura 4.34: Exemplo 6 – Primeira etapa: resultados de carga total.	125
Figura 4.35: Exemplo 6 – Segunda etapa: resultados de concentração no tempo de 1500 seg.	126
Figura 4.36: Exemplo 7 – malha de elementos finitos e posição da fonte de contaminação.	128
Figura 4.37: Exemplo 7 – Primeira etapa: resultados de carga total.	129
Figura 4.38: Exemplo 7 – Primeira etapa: resultados de campo de velocidade.	129
Figura 4.39: Exemplo 7 – Segunda etapa: resultados de concentração no tempo de 5000 seg.	131

Figura 4.40: Exemplo 8 – superfícies que delimitam as regiões representativas dos meios poroso e fraturado.	132
Figura 4.41: Exemplo 8 – fraturas geradas na região 2.	133
Figura 4.42: Exemplo 8 – malha de elementos finitos.	133
Figura 4.43: Exemplo 8 – resultados de carga total.	134
Figura 4.44: Exemplo 9 – superfícies que delimitam a região representativa do meio fraturado e as que compõem a família de juntas.	135
Figura 4.45: Exemplo 9 – fraturas geradas na região.	136
Figura 4.46: Exemplo 9 – malha de elementos finitos.	137
Figura 4.47: Exemplo 9 – resultados de carga total.	138
Figura A.1: Distribuição uniforme no intervalo $[a, b]$.	153
Figura A.2: Distribuição exponencial com $\lambda = 1.0$.	154
Figura A.3: Distribuição normal com $\mu = 0.0$ e $\sigma = 1.0$.	155
Figura A.4: Distribuição log-normal com $\mu = 0.0$ e $\sigma = 1.0$.	156
Figura A.5: Representação da orientação verdadeira e de um vetor selecionado aleatoriamente.	157
Figura A.6: Rotação no vetor resultante normal.	159
Figura A.7: Geração do ângulo τ e determinação do vetor R' .	159
Figura B.1: Exemplos da utilização do Gocad (adaptado de Gocad, 2005).	162
Figura C.1: Diálogo principal do programa Pos3D.	164

Lista de Tabelas

Tabela 3.1: Valores de algumas propriedades da água e da aceleração da gravidade.	67
Tabela 3.2: Programas tridimensionais de fluxo e transporte em meios porosos e fraturados.	92
Tabela 3.3: Programas tridimensionais de fluxo e transporte em meios porosos e fraturados.	93

Lista de Símbolos

C	- concentração do soluto
C_n	- concentração nodal
C_f	- concentração do soluto na fratura
c_s	- compressibilidade dos grãos sólidos do solo
c_w	- compressibilidade do fluido
$C(\mathbf{y})$	- capacidade específica de umedecimento do solo
D_{fij}	- coeficiente de dispersão hidrodinâmica da fratura
D_{ij}	- coeficiente de dispersão hidrodinâmica
DNAPLE	- <i>Dense Non-Aqueous Phase Liquid</i>
e	- abertura
EF	- Elementos Finitos
FracGen3D	- <i>Three-dimensional Fracture Generator</i>
FTPF-3D	- <i>Simulating Flow and Solute Transport in Porous and Fractured Media - Three-dimensional</i>
g	- aceleração da gravidade
K_d	- coeficiente de partição
K_d^*	- coeficiente de partição na superfície da fratura
$K_{f,ij}$	- condutividade hidráulica não saturada da fratura
K_{ij}	- condutividade hidráulica não saturada
K_{rw}	- permeabilidade relativa
K_{sf}	- condutividade hidráulica saturada da fratura
MDF	- Método das Diferenças Finitas
MDP	- Modelo de dupla porosidade (<i>double porosity</i>)
MEF	- Método dos Elementos Finitos
MF	- fraturas estatísticas (<i>multi-fracture</i>)
MFD	- Modelo de fraturas discretas (<i>discrete fracture</i>)
MN	- Método de Newton
MP	- Método de Picard
MPE	- Modelo de meio poroso equivalente ou modelo do contínuo único (<i>equivalente porous medium or single continuum</i>)

MPM	- Método de Picard modificado
MQN	- Método Quase Newton
N_n	- função de interpolação linear
P	- poroso
Q	- termo de fonte ou sumidouro da equação de fluxo do meio poroso
Q_f	- termo de fonte ou sumidouro da equação de fluxo do meio fraturado
q_i	- termo do fluxo da equação de transporte de solutos
q_{fi}	- termo do fluxo na fratura
$q_{n l^-}$ e $q_{n l^+}$	- termos de transferência de fluido entre os meios porosos e fraturados
R	- fator de retardamento
R_f	- fator de retardamento do meio fraturado
S_s	- coeficiente de armazenamento específico
S_{sf}	- coeficiente de armazenamento específico da fratura
S_{wf}	- grau de saturação da fratura
SF	- fraturas determinísticas (<i>single fracture</i>)
SFD	- Sistema de Fraturas Discretas
\bar{X}	- média dos espaçamentos
X_D	- espaçamento de uma família de fraturas
X_N	- espaçamento ao longo da normal da família de fraturas
X_T	- espaçamento total
z	- carga de elevação
z_f	- carga de elevação da fratura
$2b$	- abertura da fratura
a	- direção de mergulho
Δt	- tamanho do passo de tempo
β	- mergulho
Γ	- contorno do modelo
Γ_e	- contorno do elemento
l	- constante de decaimento de primeira ordem

m	- viscosidade do fluido
W	- domínio do modelo
Ω_e	- domínio no elemento
$\Omega_{n I^-}$ e $\Omega_{n I^+}$	- termos de transferência de massa do soluto entre os meios porosos e fraturados
y	- carga de pressão
y_n	- carga de pressão nodal
y_f	- carga de pressão da fratura
r	- densidade do fluido
r_b	- densidade do meio poroso
q	- umidade volumétrica
q_r	- umidade volumétrica residual
q_s	- umidade volumétrica saturada (porosidade)