

### 3

## Análise de fluxo e transporte em meios porosos e fraturados

Quatro principais aspectos devem ser destacados quando se estuda fluxo em meio poroso e fraturado:

- Desenvolvimento conceitual de modelos;
- Desenvolvimento de soluções analíticas e numéricas;
- Descrição das características hidráulicas da fratura;
- Desenvolvimento de técnicas estocásticas para descrever o fluxo em fraturas e distribuições de parâmetros hidrogeológicos (Diodato, 1994).

Neste capítulo são tratados os três primeiros itens citados acima, visto que o último já foi apresentado no Capítulo 2. Também são apresentadas as equações governantes de fluxo e transporte de soluto em meios porosos e fraturados, bem como alguns programas computacionais disponíveis na literatura que implementam essas equações. Descreve-se ainda o programa computacional desenvolvido neste trabalho, denominado FTPF-3D, o método numérico utilizado para solução das equações governantes e o método de trajetória de partículas implementado.

### 3.1.

#### Modelos conceituais de fluxo e transporte em meios porosos e fraturados

Os modelos conceituais que descrevem o fluxo de fluidos em meio poroso e fraturado são:

- Modelo de meio poroso equivalente ou modelo do contínuo único, MPE (*equivalent porous medium or single continuum*);
- Modelo de dupla porosidade, MDP (*double porosity*); e
- Modelo de fraturas discretas, MFD (*discrete fracture*).

Uma distinção adicional pode ser dada em relação a escala de representação do meio poroso e fraturado. Bear e Berkowitz (1987), descrevem quatro escalas: “muito próxima ao campo” (*very near field*), “próximo ao campo” (*near field*), “longe do campo” (*far field*), e “muito longe do campo” (*very far field*), como apresentado na Figura 3.1. Na escala “muito próxima ao campo”, o fluxo e o transporte ocorrem em uma única fratura, podendo haver troca de fluidos entre a fratura e o meio poroso. Na escala “próximo ao campo”, o fluxo e o transporte ocorrem no meio poroso fraturado e cada fratura é descrita em detalhes, ou seja, as maiores fraturas são definidas deterministicamente e as menores fraturas são especificadas estatisticamente. Nessa escala o MFD deve ser usado, e dependendo do tipo de rocha fraturada, é provável que esta escala seja a de maior interesse na área hidrogeológica (Bear, 1993). Na escala “longe do campo”, o fluxo e o transporte ocorrem em contínuos sobrepostos, que podem ser representados, por exemplo, por um contínuo para a rocha não fraturada e outro contínuo para as fraturas. A troca de massa entre os contínuos pode ocorrer através de parâmetros de união. Por fim, na escala “muito longe do campo”, o fluxo e transporte ocorrem em um meio poroso equivalente.

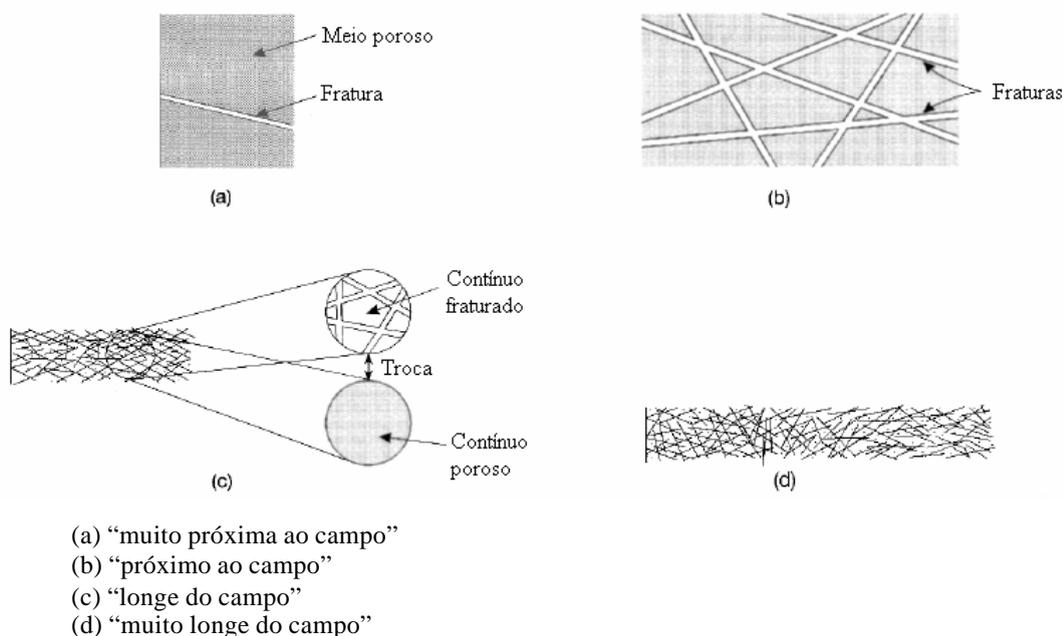


Figura 3.1: Escala de representação do meio poroso e fraturado (adaptado de Bear, 1993).

### 3.1.1.

#### **Modelo de meio poroso equivalente (*equivalent porous medium*)**

O modelo de meio poroso equivalente (MPE) trata o meio rochoso fraturado como um contínuo único, não fraturado. Esse modelo se enquadra na escala “muito longe do campo” de representação do fluxo e transporte em meio poroso e fraturado.

As características hidráulicas do meio são descritas por um único valor de permeabilidade (denominada de permeabilidade equivalente), que corresponde à soma da permeabilidade das fraturas com a permeabilidade do meio poroso (Diodato, 1994).

Apesar deste modelo ser ainda bastante utilizado, principalmente em estudos de reservatórios de petróleo, ele apresenta algumas limitações quanto a sua aplicação. Essas aplicações estão relacionadas às seguintes hipóteses, implícitas do enfoque do contínuo equivalente (Vargas e Barreto, 2003): as fraturas são persistentes no domínio da análise, o que em muitos casos não é observado; e o espaçamento das fraturas de uma mesma família é pequeno em relação às dimensões do problema sendo analisado, o que também, muitas vezes não é observado em problemas práticos.

Este modelo é uma aproximação razoável se o fraturamento é intenso ou se o domínio em estudo é suficientemente grande de forma que fraturas individuais não apresentem influência no fluxo do sistema como um todo (por exemplo, em alguns sistemas regionais de escala quilométrica). Berkowitz *et al.* (1988) e Schwartz e Smith (1988) discutem o uso do modelo de contínuo equivalente para sistemas rochosos fraturados.

### 3.1.2.

#### **Modelo de dupla porosidade (*double porosity*)**

O modelo de dupla porosidade (MDP) foi introduzido por Barenblatt *et al.* (1960) e posteriormente estendido por Warren e Root (1963). Esse modelo se enquadra na escala “longe do campo” de representação do fluxo e transporte em meio poroso e fraturado. A base do modelo é dada pela observação de que a massa de rocha não fraturada pode apresentar uma porosidade (armazenamento) alta, mas uma permeabilidade (fluxo) baixa. Ao contrário, as fraturas podem

apresentar um armazenamento insignificante, mas uma permeabilidade alta. O meio poroso e as fraturas são tratados como dois contínuos separados, mas sobrepostos.

As equações de fluxo e transporte para cada contínuo são ligadas por um termo de transferência de fluido ou soluto, e cada contínuo apresenta propriedades diferentes em relação ao outro. Essa transferência de massa ocorre na interface entre os dois contínuos.

Exemplos de modelos numéricos e semi-analíticos utilizando o modelo de dupla porosidade podem ser encontrados em Huyakorn *et al.* (1983), Rowe e Booker (1990), Sudicky (1990) e Bibby (1981).

### **3.1.3. Modelo de fraturas discretas (*discrete fracture*)**

O modelo de fraturas discretas (MFD) se enquadra na escala “próxima ao campo” de representação do fluxo e transporte em meio poroso e fraturado. Esse modelo representa de forma mais realista os processos de fluxo e transporte no meio poroso fraturado. A vantagem do seu uso está relacionada com a possibilidade de representação explícita do potencial de gradiente do fluido, e do fluxo e do transporte entre as fraturas e o meio poroso. No entanto, ele requer a geração de um sistema de fraturas baseado em estudos estatísticos das características do meio rochoso fraturado, tornando-o algumas vezes, computacionalmente caro quando se tem um número de fraturas elevado.

Este modelo pode ser simplificado quando somente as fraturas são consideradas. Nesse caso, o meio poroso não é representado e o fluxo é restrito somente às fraturas. Esta simplificação é denominada de sistema de fraturas discretas, SFD (*discrete fracture network*).

Neste trabalho o modelo adotado foi o modelo de fraturas discretas.

## **3.2. Equações governantes de fluxo**

Para a descrição do fluxo em meio poroso e fraturado, é necessário descrever as equações governantes da matriz porosa e das fraturas. Para essas equações as seguintes considerações são adotadas: o fluido é incompressível, o

meio poroso e fraturado é indeformável e o sistema está sobre condição isotérmica.

As seções seguintes apresentam uma descrição destas equações que governam o fluxo no meio poroso e nas fraturas.

### 3.2.1.

#### Equação de fluxo do meio poroso

A equação diferencial parcial parabólica que descreve o fluxo em meio poroso não saturado é a equação de Richards. Essa equação é obtida pela combinação da Lei de Darcy com a equação da continuidade (Philip, 1969). A equação de Richards é apresentada abaixo.

$$\frac{\partial}{\partial x_i} \left( K_{ij}(\mathbf{y}) \frac{\partial(\mathbf{y} + z)}{\partial x_j} \right) \pm Q = \frac{\partial \mathbf{q}}{\partial t} \quad (3.1)$$

Com  $i, j = 1, 2, 3$ , para equação tridimensional; e  $i, j = 1, 2$ , para equação bidimensional.

Na equação 3.1,  $K_{ij}$  é a condutividade hidráulica não saturada,  $\mathbf{y}$  é a carga de pressão,  $z$  é a carga de elevação,  $\mathbf{q}$  é a unidade volumétrica, e  $Q$  é o termo de fonte ou sumidouro.

Expressando a equação 3.1 em termos de carga de pressão como variável dependente, obtém-se a seguinte equação:

$$\frac{\partial}{\partial x_i} \left( K_{ij}(\mathbf{y}) \frac{\partial(\mathbf{y} + z)}{\partial x_j} \right) \pm Q = C(\mathbf{y}) \frac{\partial \mathbf{y}}{\partial t} \quad (3.2)$$

Na equação acima,  $C(\mathbf{y})$  é a capacidade específica de umedecimento do solo dada pela relação:

$$C(\mathbf{y}) = \frac{\partial \mathbf{q}}{\partial \mathbf{y}} \quad (3.3)$$

Para descrever o fluxo na zona saturada e não saturada, o termo do armazenamento deve ser considerado. Assim, a equação 3.3 é modificada para a equação 3.4.

$$\frac{\partial}{\partial x_i} \left( K_{ij}(\mathbf{y}) \frac{\partial(\mathbf{y} + z)}{\partial x_j} \right) \pm Q = \left[ \frac{\mathbf{q}(\mathbf{y})}{\mathbf{q}_s} S_s + C(\mathbf{y}) \right] \frac{\partial \mathbf{y}}{\partial t} \quad (3.4)$$

Na equação,  $S_s$  é o coeficiente de armazenamento específico dado pela equação 3.5, e  $q_s$  é a unidade volumétrica saturada (porosidade).

$$S_s = \mathbf{r}g(c_s + \mathbf{q}_s c_w) \quad (3.5)$$

Na equação 3.5,  $\mathbf{r}$  é a densidade do fluido,  $g$  é a aceleração da gravidade,  $c_s$  é a compressibilidade do solo e  $c_w$  é a compressibilidade do fluido. Alguns desses parâmetros são apresentados na Tabela 3.1.

Tabela 3.1: Valores de algumas propriedades da água e da aceleração da gravidade.

<b>Símbolo</b>	<b>Descrição</b>	<b>Unidade</b>	<b>Valores</b>
$g$	Aceleração da gravidade	$\text{m/s}^2$	9.81
$\mathbf{r}_w$	Densidade	$\text{kg/m}^3$	998.29 (20°C)
$\mathbf{m}_v$	Viscosidade dinâmica	$\text{kg/m.s}$	0.001003 (20°C)
$c_w$	Compressibilidade	$\text{m.s}^2/\text{kg}$	$4.5 \times 10^{-10}$

O termo do armazenamento considera o efeito da compressibilidade do solo e do fluido. Na condição não saturada, assume-se que o efeito da compressibilidade do fluido é desprezível se comparado com o efeito da mudança na saturação (Therrien e Sudicky, 1996).

Considerando,

$$G(\mathbf{y}) = \left[ \frac{\mathbf{q}(\mathbf{y})}{\mathbf{q}_s} S_s + C(\mathbf{y}) \right] \quad (3.6)$$

a equação 3.4 é modificada para:

$$\frac{\partial}{\partial x_i} \left( K_{ij}(\mathbf{y}) \frac{\partial(\mathbf{y} + z)}{\partial x_j} \right) \pm Q = G(\mathbf{y}) \frac{\partial \mathbf{y}}{\partial t} \quad (3.7)$$

Deve-se notar que a equação de Richards é altamente não linear devido aos termos de condutividade hidráulica e a capacidade específica de umedecimento do solo dependerem do valor de carga de pressão.

### Propriedades hidráulicas do meio poroso não saturado

As propriedades hidráulicas do solo não saturado podem ser determinadas pelas relações apresentadas por Van Genuchten (1980), as quais são baseadas no modelo de Mualem (1976).

A relação entre a umidade volumétrica ( $q$ ) e a carga de pressão ( $y$ ) é dada por:

$$q(y) = \begin{cases} q_r + \frac{q_s - q_r}{[1 + |ay|^n]^m} & \text{para } y < 0.0 \\ q_s & \text{para } y > 0.0 \end{cases} \quad (3.8)$$

Na relação acima,  $q_r$  é a umidade volumétrica residual,  $n$  e  $a$  são parâmetros empíricos do modelo de Van Genuchten (1980), e  $m$  é obtido pela equação abaixo.

$$m = 1 - \frac{1}{n} \quad n > 1 \quad (3.9)$$

A relação entre a condutividade hidráulica ( $K$ ) e a carga de pressão ( $y$ ) é obtida pela equação abaixo:

$$K(y) = \begin{cases} K_s K_{rw} & \text{para } y < 0.0 \\ K_s & \text{para } y > 0.0 \end{cases} \quad (3.10)$$

A permeabilidade relativa ( $K_{rw}$ ) é apresentada pela equação 3.11, onde o termo  $S_e$  representa o grau de saturação (equação 3.12).

$$K_{rw} = S_e^{1/2} \left[ 1 - (1 - S_e^{1/m})^m \right]^2 \quad (3.11)$$

$$S_e = \frac{q - q_r}{q_s - q_r} \quad (3.12)$$

As relações apresentadas acima são mostradas esquematicamente na Figura 3.2.

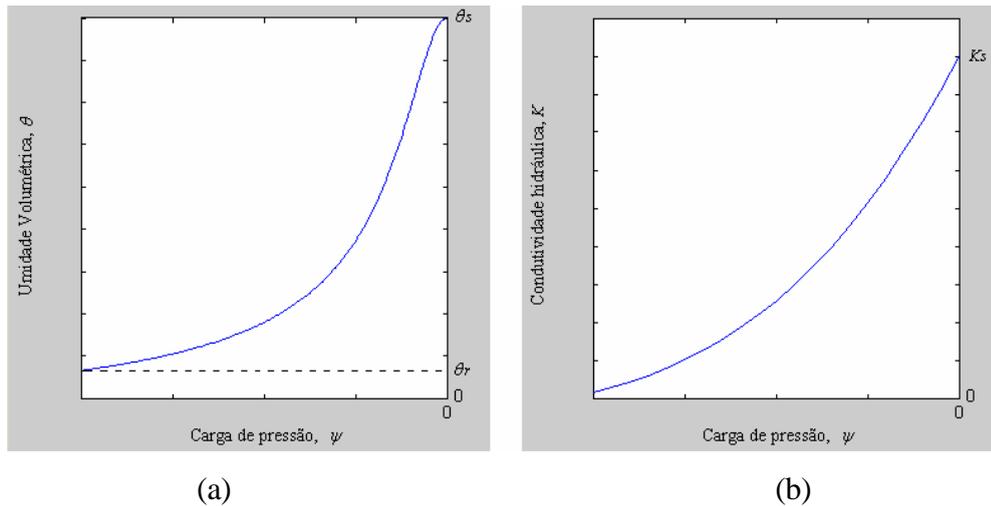


Figura 3.2: Retenção de água no solo.

### 3.2.2. Equação de fluxo do meio fraturado

A equação que descreve o fluxo não saturado em uma fratura com abertura  $2b$  pode ser obtida pela extensão da equação de fluxo saturado em uma fratura (Berkowitz *et al.*, 1988; Sudicky e McLaren, 1992) e pela analogia à equação de Richards (3.1) para meio poroso. A equação para meio fraturado é apresentada abaixo:

$$\frac{\partial}{\partial x_i} (2b) K_{f,ij} (\mathbf{y}_f) \frac{\partial (\mathbf{y}_f + z_f)}{\partial x_j} \pm Q_f = (2b) \frac{\partial S_{wf}}{\partial t} \quad i, j = 1, 2 \quad (3.13)$$

Na equação,  $K_{f,ij}$  é a condutividade hidráulica não saturada da fratura,  $\mathbf{y}_f$  é a carga de pressão da fratura,  $z_f$  é a carga de elevação da fratura,  $2b$  é a abertura da fratura,  $Q_f$  é o termo de fonte ou sumidouro, e  $S_{wf}$  grau de saturação da fratura. Essa equação não considera transferência de fluido entre o meio poroso e as fraturas e vice versa. Neste caso, todo o fluxo se dá somente pelo meio fraturado.

A equação 3.13, assim como a equação 3.1 (equação de fluxo não saturado em meio poroso), é não linear pelos mesmos motivos apresentados anteriormente (ver seção 3.2.1).

A condutividade hidráulica saturada da fratura ( $K_{sf}$ ) é dada por (Bear, 1972):

$$K_{sf} = \frac{rg(2b)^2}{12m} \quad (3.14)$$

Na equação acima,  $\mathbf{r}$  é a densidade do fluido, e  $\mathbf{m}$  é a viscosidade do fluido.

Para descrever o fluxo na fratura na zona saturada e não saturada, o termo do armazenamento deve ser considerado. Desta forma, a equação 3.13 é modificada para a equação 3.15.

$$\frac{\partial}{\partial x_i} (2b) K_{f,ij} (\mathbf{y}_f) \frac{\partial (\mathbf{y}_f + z_f)}{\partial x_j} \pm Q_f = (2b) \left( S_{wf} S_{sf} \frac{\partial \mathbf{y}_f}{\partial t} + \frac{\partial S_{wf}}{\partial t} \right) \quad (3.15)$$

Na equação,  $S_{sf}$  é o coeficiente de armazenamento específico da fratura expresso pela equação 3.16.

$$S_{sf} = \mathbf{r} g c_w \quad (3.16)$$

Os valores de  $\mathbf{r}$ ,  $g$  e  $c_w$  estão apresentados na Tabela 3.1.

### Propriedades hidráulicas do meio fraturado não saturado

Na literatura é possível encontrar algumas relações constitutivas usadas para determinação das propriedades hidráulicas das fraturas. Dentre essas relações, poucas são as obtidas experimentalmente (Reitsma e Kueper, 1994). No entanto, vários estudos teóricos têm sido realizados com objetivo de caracterizar a natureza das relações, podendo-se destacar os trabalhos de Wang e Narasimhan (1985), Rasmussen e Evans (1989), Pruess e Tsang (1990), e Mendoza e Sudicky (1991).

Pruess e Tsang (1990) relatam que a aparência geral da curva de pressão capilar é similar a habitualmente usada para o meio poroso tridimensional. Desta forma, neste trabalho, o meio fraturado é representado por um meio poroso. Assim, adota-se as equações do meio poroso bidimensional.

#### 3.2.3. Equação de fluxo do meio poroso fraturado

Existem duas maneiras de representar o fluxo no meio poroso e fraturado. A primeira é inserir na equação de fluxo da fratura (equação 3.13) um termo que represente a taxa de transferência de fluido entre os dois meios. Desta forma, a equação 3.13 passa a ser escrita da seguinte forma:

$$\frac{\partial}{\partial x_i} (2b) K_{f,ij} (\mathbf{y}_f) \frac{\partial (\mathbf{y}_f + z_f)}{\partial x_j} - q_{n|I^-} + q_{n|I^+} \pm Q_f = (2b) \frac{\partial S_{vf}}{\partial t}$$

$$i, j = 1, 2 \quad (3.17)$$

onde  $q_{n|I^-}$  e  $q_{n|I^+}$  são os termos de transferência de fluido entre os dois meios. Essa transferência se dá na superfície de interface ( $I$  e  $I^+$ ) da fratura com o meio poroso, como apresentado na Figura 3.3.

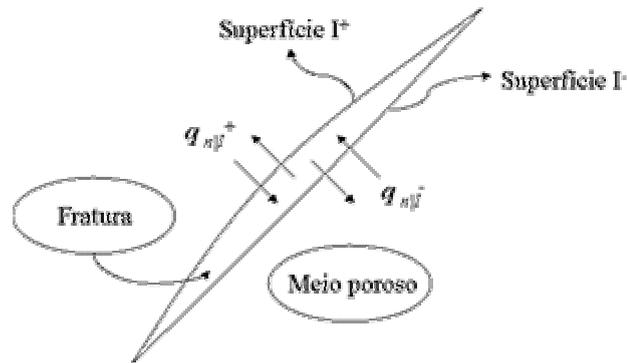


Figura 3.3: Transferência de fluidos entre o meio poroso e a fratura.

A segunda forma de representar o fluxo nos meios poroso e fraturado é gerar uma malha (por exemplo, de elementos finitos) compatível, onde os nós dos elementos representativos das fraturas são coincidentes com os nós dos elementos representativos do meio poroso (ver Figura 3.4). Nesta situação, os elementos apresentam comumente os mesmos nós, resultando numa continuidade da carga hidráulica na interface entre os dois meios. Assim superpondo a contribuição de cada nó para ambos os tipos de elementos, não é necessário o cálculo explícito da transferência de fluidos ( $q_{n|I^-}$  e  $q_{n|I^+}$ ) apresentado na equação 3.17.

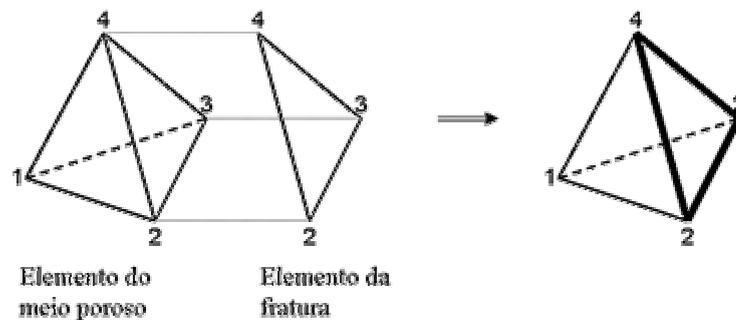


Figura 3.4: Compatibilidade dos nós dos elementos representativos do meio poroso e dos elementos representativos das fraturas.

As soluções das equações de fluxo são obtidas usando o método dos elementos finitos (ver seção 3.5.1). Para resolver a não linearidade das equações, são adotados dois métodos iterativos para problemas não lineares, o método de Picard e o método BFGS (ver seção 3.5.6). Para a solução do sistema de equações lineares, também são adotados dois métodos iterativos, o método do gradiente conjugado preconditionado e o método de eliminação de Gauss (Mendoza *et al.*, 1991).

### 3.3. Equações governantes de transporte de soluto

As seções seguintes apresentam uma descrição das equações que governam o transporte de soluto em meios porosos e fraturados.

#### 3.3.1. Equação de transporte de soluto do meio poroso

A equação que descreve o transporte de soluto em meio poroso não saturado é a apresentada abaixo.

$$\mathbf{q}R \frac{\partial C}{\partial t} + q_i \frac{\partial C}{\partial x_i} - \frac{\partial}{\partial x_i} \left( \mathbf{q} D_{ij} \frac{\partial C}{\partial x_j} \right) + \mathbf{q} R I C = 0 \quad (3.18)$$

Com  $i, j = 1, 2, 3$ , para equação tridimensional e  $i, j = 1, 2$ , para equação bidimensional.

Na equação,  $C$  é a concentração do soluto,  $D_{ij}$  é o coeficiente de dispersão hidrodinâmica,  $I$  é a constante de decaimento de primeira ordem,  $R$  fator de retardamento, e  $q_i$  é o termo do fluxo.

O fator de retardamento é dado pela equação 3.19. Nesta equação,  $r_b$  é a densidade do meio poroso, e  $K_d$  é o coeficiente de partição.

$$R = 1 + \frac{r_b}{\mathbf{q}_s S_w} K_d \quad (3.19)$$

O termo de fluxo é dado pela equação 3.20.

$$q_i = -K_{ij}(\mathbf{y}) \frac{\partial(\mathbf{y} + z)}{\partial x_j} \quad (3.20)$$

A componente da dispersão da equação 3.18 é dada por Bear (1972):

$$\mathbf{q}D_{ij} = D_T |q| \mathbf{d}_{ij} + (\mathbf{a}_L - \mathbf{a}_T) \frac{q_j q_i}{|q|} + \mathbf{q}D_d \mathbf{t} \mathbf{d}_{ij} \quad (3.21)$$

Na equação,  $D_d$  é o coeficiente de difusão molecular,  $\mathbf{t}$  é o fator de totuosidade,  $\mathbf{d}_{ij}$  o delta de Kronecker,  $\mathbf{a}_L$  é dispersividade longitudinal e  $\mathbf{a}_T$  é a dispersividade transversal.

### 3.3.2.

#### Equação de transporte de soluto do meio fraturado

A equação bidimensional que descreve o transporte de soluto em uma fratura não saturada pode ser deduzida a partir da equação que descreve o transporte de soluto em uma fratura saturada (Tang *et al.*, 1981; Sudicky e McLaren, 1992). Dessa forma:

$$(2b) \left[ S_{wf} R_f \frac{\partial C_f}{\partial t} + q_{fi} \frac{\partial C_f}{\partial x_i} - \frac{\partial}{\partial x_i} \left( S_{wf} D_{fij} \frac{\partial C_f}{\partial x_j} \right) + S_{wf} R_f \mathbf{I} C_f \right] = 0$$

$$i, j = 1, 2 \quad (3.22)$$

Na equação,  $C_f$  é a concentração do soluto na fratura,  $D_{fij}$  é o coeficiente de dispersão hidrodinâmica da fratura,  $\mathbf{I}$  é a constante de decaimento de primeira ordem,  $R_f$  fator de retardamento, e  $q_{fi}$  é o termo do fluxo na fratura.

O fator de retardamento é dado pela equação 3.23, onde  $K_d^*$  é o coeficiente de partição na superfície da fratura.

$$R = 1 + 2 \frac{K_d^*}{2b} \quad (3.23)$$

O termo de fluxo é dado pela equação 3.24.

$$q_{fi} = -K_{f,ij}(\mathbf{y}) \frac{\partial(\mathbf{y}_f + z_f)}{\partial x_j} \quad (3.24)$$

A componente da dispersão da equação 3.22 é dada por uma expressão similar à equação 3.21, onde as dispersividades e o fluxo ocorrem no plano da fratura e a porosidade assumida é unitária (Therrien e Sudicky, 1996).

A equação 3.22 não considera transferência de massa de soluto entre o meio poroso e as fraturas e vice versa. Neste caso, todo o transporte de soluto se dá somente pelo meio fraturado.

### 3.3.3.

#### Equação de transporte de soluto do meio poroso fraturado

A representação do transporte de soluto nos meios porosos e fraturados interpostos pode ser feita de duas maneiras, semelhante às apresentadas para o fluxo. A primeira é inserir na equação de transporte soluto das fraturas (equação 3.22) um termo que represente a taxa de transferência de fluido entre os dois meios. Desta maneira, a equação 3.22 passa a ser escrita da seguinte forma:

$$(2b) \left[ S_{wf} R_f \frac{\partial C_f}{\partial t} + q_{fi} \frac{\partial C_f}{\partial x_i} - \frac{\partial}{\partial x_i} \left( S_{wf} D_{fij} \frac{\partial C_f}{\partial x_j} \right) + S_{wf} R_f I C_f \right] - \Omega_{n|I^-} - \Omega_{n|I^+} = 0$$

$$i, j = 1, 2 \quad (3.25)$$

onde  $\Omega_{n|I^-}$  e  $\Omega_{n|I^+}$  representam os termos de transferência de massa do soluto pela superfície de interface entre os dois meios ( $I$  e  $I^+$ ).

A segunda forma de representar o transporte nos meios poroso e fraturado é gerar uma malha compatível, como apresentado na Figura 3.4. Como os elementos apresentam comumente os mesmos nós, existe uma continuidade nas concentrações do soluto na interface entre os dois meios. Assim superpondo a contribuição de cada nó para ambos os tipos de elementos, não é necessário o cálculo explícito da transferência de massa ( $\Omega_{n|I^-}$  e  $\Omega_{n|I^+}$ ) apresentado na equação 3.25.

As soluções das equações de transporte de soluto são obtidas usando o método dos elementos finitos (ver seção 3.5.1). Para solução do sistema de equações lineares é adotado o método do gradiente conjugado preconditionado (Mendoza *et al.*, 1991).

### 3.4. Trajetória de partículas

A trajetória de partículas, neste trabalho, representa o caminho que uma partícula percorre no meio em que está inserida. O meio aqui considerado é o meio fraturado. A trajetória dessa partícula está relacionada somente ao regime de fluxo do sistema.

Zheng e Bennett (2002) descrevem três métodos que podem ser utilizados para o cálculo de trajetória de partículas: o método semi-analítico, o método de Euler e o método de Runge-Kutta. Neste trabalho foi utilizado o método de Euler para simular a trajetória de partículas no meio fraturado.

O método de Euler é um método cuja integração numérica é simples. Ele representa o método de Runge-Kutta de primeira ordem. Sua formulação é a apresentada abaixo.

$$\begin{aligned}x_{n+1} &= x_n + v_x(x_n, y_n, z_n)\Delta t \\y_{n+1} &= y_n + v_y(x_n, y_n, z_n)\Delta t \\z_{n+1} &= z_n + v_z(x_n, y_n, z_n)\Delta t\end{aligned}\quad (3.26)$$

Nas equações acima,  $(x_{n+1}, y_{n+1}, z_{n+1})$  é a posição da partícula no tempo  $(n+1)$ ,  $(x_n, y_n, z_n)$  é a posição da partícula no tempo  $n$ , e  $\Delta t$  é o tamanho do passo de tempo.

Para que se alcance bons resultados usando o método de Euler, o tamanho do passo de tempo deve ser suficientemente pequeno. Isso porque esse método utiliza somente a velocidade do início do passo de tempo para representar todo o intervalo de tempo (Bennet e Zheng, 2002).

Para explicar como é feito o cálculo dos pontos que compõem a trajetória de uma partícula no meio fraturado, é apresentado um exemplo onde são considerados quatro elementos posicionados no espaço, como mostrado na Figura 3.5. Algumas considerações são feitas. A velocidade dentro dos elementos é constante para cada passo de tempo e as partículas movem-se sempre sobre os planos dos elementos, com velocidade igual a velocidade dos elementos em que estão inseridas. Para auxiliar no entendimento do exemplo, alguns símbolos são usados:  $e_i$  é o elemento  $i$ ,  $i = 1, 2, 3$ ;  $t_j$  é o passo de tempo,  $j = 1, 2, 3$ ;  $v_{ij}$  é a

velocidade do elemento  $i$  no passo  $j$ ;  $p_j$  é a posição da partícula no final do passo  $j$ ; e  $p_j'$  é a posição da partícula no ponto de interseção no passo  $j$ .

Considerando que uma partícula é lançada sobre o elemento  $e_1$ , na posição  $p_0$ , e no tempo  $t_0$  (ver Figura 3.6a), no final do primeiro passo de tempo ( $t_1$ ), a partícula estará em  $p_1$  (Figura 3.6b). Esta posição foi calculada pela expressão  $p_1 = v_{1,1} \cdot t_1$ . Deve-se notar que os valores de  $v_{1,1}$  e  $dt_1$  não foram grandes o suficiente para levar a partícula para fora do  $e_1$ .

No segundo passo de tempo ( $t_2$ ), a partícula ultrapassa os limites do elemento na aresta formada pelos nós 2 e 4, como apresentado na Figura 3.6c. Neste caso, calcula-se o ponto de interseção da reta da trajetória da partícula com a reta da aresta do elemento. Na seqüência, é calculado o tempo que a partícula levou para alcançar o ponto de interseção. Isto é feito utilizando a expressão  $t_{2a} = (p_2' - p_1) / v_{1,2}$ .

A partir desse ponto a partícula deve seguir sua trajetória sobre um outro elemento. A busca por este elemento é feita percorrendo os elementos que apresentem os nós 2 e 4 como nós de incidência. Todos os elementos selecionados são armazenados em uma lista e são realizados, para cada elemento, dois testes. O primeiro teste é determinar se o vetor de velocidade naquele elemento é contrário ao vetor de velocidade do elemento em que a partícula acabou de sair. Caso exista algum elemento que não passe nesse teste, o mesmo será eliminado da lista. O segundo teste é determinar qual dos elementos da lista apresentam a maior velocidade. Então, o elemento de maior velocidade é o escolhido para dar continuidade na trajetória da partícula. No exemplo apresentado o elemento escolhido foi  $e_2$ . A posição do próximo ponto da trajetória é calculada pela expressão  $p_2 = v_{2,2} \cdot t_{2b}$ , onde  $t_{2b} = t_2 - t_{2a}$ .

No terceiro e último passo, a partícula também ultrapassa os limites do elemento na aresta formada pelos nós 5 e 6 (Figura 3.6d). Então, calcula-se o ponto de interseção e o tempo que a partícula levou para alcançar esse ponto. Isto é feito pela expressão  $t_{3a} = (p_3' - p_2) / v_{2,3}$ . A busca por um novo elemento que permita a continuidade da trajetória da partícula é realizada. Neste caso, não existem elementos que apresentem os nós 5 e 6 como nós de incidência. Assim, a trajetória é interrompida.

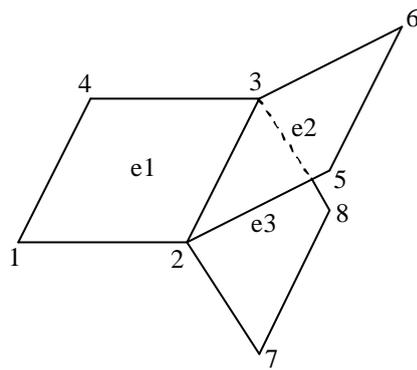


Figura 3.5: Elementos da trajetória de uma partícula.

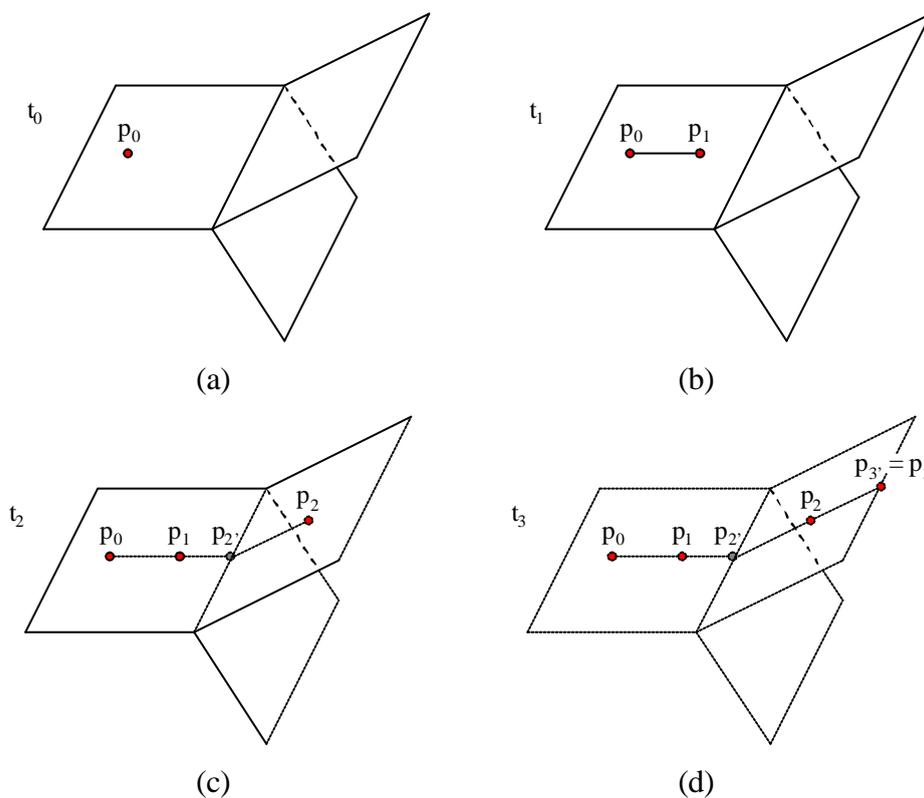


Figura 3.6: Exemplo da trajetória de uma partícula.

### 3.5. Métodos numéricos

O fluxo e transporte (soluto e partículas) são expressos através de equações diferenciais parciais cuja solução pode ser obtida usando-se métodos analíticos e métodos numéricos. Os métodos analíticos adotam uma simplificação da equação diferencial e apresentam uma solução que geralmente é possível somente quando se tem geometria e condições de contorno simples (Telles, 2001). Os métodos

numéricos, por sua vez, apresentam uma solução que pode considerar qualquer tipo de variação no espaço e no tempo dos parâmetros dentro do domínio do problema. Dentre os métodos numéricos mais utilizados para simular problemas de fluxo e transporte, destacam-se o Método dos Elementos Finitos (Desai, 1979; e Bathe, 1996) e o Método das Diferenças Finitas (Wang e Anderson, 1982).

Neste trabalho o método dos elementos finitos é utilizado na solução das equações de fluxo e transporte.

### 3.5.1. Método dos elementos finitos

As soluções das equações de fluxo não saturado e transporte de solutos (equações 3.4 e 3.15, respectivamente) são obtidas usando o método dos elementos finitos de Galerkin. O método de Galerkin é apresentado em detalhes em Neuman (1975); Zienkiewicz (1977); e Pinder e Gray (1977). Neste trabalho são apresentados somente alguns passos do processo de solução.

Resumidamente, pode-se dizer que no método dos elementos finitos o domínio espacial é dividido em elementos discretos e pontos nodais, e a solução é obtida pela marcha através do tempo em passos discretos, iniciando com uma solução no tempo zero.

### 3.5.2. Formulação numérica da equação de fluxo do meio poroso

Para solução da equação 3.4 o método dos elementos finitos é usado para discretização do espaço e o método das diferenças finitas é usado para discretização do tempo.

#### Discretização do espaço

A variável dependente, função carga de pressão  $y(x, y, z, t)$ , é aproximada por uma função  $\hat{y}(x, y, z, t)$ , apresentada na equação 3.27.

$$\hat{y}(x, y, z, t) = \sum_{n=1}^M N_n(x, y, z) y_n(t) \quad (3.27)$$

Na equação,  $N_n$  é a função de interpolação linear,  $y_n$  é o valor desconhecido da carga de pressão nodal, e  $M$  é o número total de nós.

O método de Galerkin (Huyakorn e Pinder, 1983) é usado para discretizar a equação de fluxo equação 3.7 sobre um domínio  $W$ . Desta forma:

$$\int_{\Omega} \left[ G(\hat{y}) \frac{\partial \hat{y}}{\partial t} - \frac{\partial}{\partial x_i} \left( K_{ij}(\hat{y}) \frac{\partial (\hat{y} + z)}{\partial x_j} \right) + Q \right] N_n d\Omega = 0 \quad (3.28)$$

Separando os termos da integral, tem-se:

$$\int_{\Omega} G(\hat{y}) \frac{\partial \hat{y}}{\partial t} N_n d\Omega - \int_{\Omega} \left[ \frac{\partial}{\partial x_i} \left( K_{ij}(\hat{y}) \frac{\partial (\hat{y} + z)}{\partial x_j} \right) \right] N_n d\Omega + \int_{\Omega} Q N_n d\Omega = 0 \quad (3.29)$$

Integrando por partes segundo termo da equação 3.29, tem-se:

$$\int_{\Omega} \left[ \frac{\partial}{\partial x_i} \left( K_{ij}(\hat{y}) \frac{\partial (\hat{y} + z)}{\partial x_j} \right) \right] N_n d\Omega = - \int_{\Omega} K_{ij}(\hat{y}) \frac{\partial (\hat{y} + z)}{\partial x_j} \frac{\partial N_n}{\partial x_i} d\Omega + \int_{\Gamma} q^* N_n d\Gamma \quad (3.30)$$

Na equação acima, o último termo do lado direito representa o fluxo de fluido normal ao contorno,  $\Gamma$ , do domínio  $\Omega$  (face, para problemas tridimensionais e aresta, para problemas bidimensionais), e o termo  $q^*$  é dado por:

$$q^* = K_{ij}(\hat{y}) \frac{\partial \hat{y}}{\partial x_j} \quad (3.31)$$

Considerando que para o meio poroso tridimensional  $\frac{\partial z}{\partial x} = 0$ ,  $\frac{\partial z}{\partial y} = 0$  e

$\frac{\partial z}{\partial z} = 1$ , a equação 3.30 torna-se:

$$\int_{\Omega} \left[ \frac{\partial}{\partial x_i} \left( K_{ij}(\hat{y}) \frac{\partial (\hat{y} + z)}{\partial x_j} \right) \right] N_n d\Omega = - \int_{\Omega} K_{ij}(\hat{y}) \frac{\partial \hat{y}}{\partial x_j} \frac{\partial N_n}{\partial x_i} d\Omega - \int_{\Omega} K_{iz}(\hat{y}) \frac{\partial N_n}{\partial x_i} d\Omega + \int_{\Gamma} q^* N_n d\Gamma \quad (3.32)$$

Então, a equação 3.29 pode ser escrita da seguinte forma:

$$\int_{\Omega} G(\hat{\mathbf{y}}) \frac{\partial \hat{\mathbf{y}}}{\partial t} N_n d\Omega + \int_{\Omega} K_{ij}(\hat{\mathbf{y}}) \frac{\partial \hat{\mathbf{y}}}{\partial x_j} \frac{\partial N_n}{\partial x_i} d\Omega + \int_{\Omega} K_{iz}(\hat{\mathbf{y}}) \frac{\partial N_n}{\partial x_i} d\Omega - \int_{\Gamma} q^* N_n d\Gamma + \int_{\Omega} Q N_n d\Omega = 0 \quad (3.33)$$

Aplicando a equação 3.27 na equação 3.33:

$$\left[ \sum_e \int_{\Omega_e} G(\mathbf{y}) N_n d\Omega_e \right] \frac{\partial \mathbf{y}}{\partial t} + \left[ \sum_e \int_{\Omega_e} K_{ij}(\mathbf{y}) \frac{\partial N_n}{\partial x_j} \frac{\partial N_n}{\partial x_i} d\Omega_e \right] \mathbf{y} + \sum_e \int_{\Omega_e} K_{iz}(\mathbf{y}) \frac{\partial N_n}{\partial x_i} d\Omega_e - \sum_e q^* \int_{\Gamma_e} N_n d\Gamma_e + \sum_e Q \int_{\Omega_e} N_n d\Omega_e = 0 \quad (3.34)$$

onde  $\Omega_e$  representa o domínio no elemento, e  $\Gamma_e$  é o contorno do elemento.

Na forma matricial a equação 3.34 é dada por:

$$A(\mathbf{y}) \mathbf{y} + F(\mathbf{y}) \frac{d\mathbf{y}}{dt} + b(\mathbf{y}) - q + d = 0 \quad (3.35)$$

onde,

$$F(\mathbf{y}) = \sum_e \int_{\Omega_e} G(\mathbf{y}) N_n d\Omega_e \quad (3.36)$$

$$A(\mathbf{y}) = \sum_e \int_{\Omega_e} K_{ij}(\mathbf{y}) \frac{\partial N_n}{\partial x_j} \frac{\partial N_n}{\partial x_i} d\Omega_e \quad (3.37)$$

$$b(\mathbf{y}) = \sum_e \int_{\Omega_e} K_{iz}(\mathbf{y}) \frac{\partial N_n}{\partial x_i} d\Omega_e \quad (3.38)$$

$$q = \sum_e q^* \int_{\Gamma_e} N_n d\Gamma_e \quad (3.39)$$

$$d = \sum_e Q \int_{\Omega_e} N_n d\Omega_e \quad (3.40)$$

e  $\mathbf{y}$  é o vetor de carga de pressão nodal.

## Discretização do tempo

Como foi dito anteriormente, para a discretização do tempo é usado o método das diferenças finitas. Desta maneira, a equação 3.35 é reescrita da seguinte forma:

$$A(\mathbf{y}^{k+1})\mathbf{y}^{k+1} + F(\mathbf{y}^{k+1})\frac{\mathbf{y}^{k+1} - \mathbf{y}^k}{\Delta t} + b(\mathbf{y}^{k+1}) - q(t^{k+1}) + d(t^{k+1}) = 0 \quad (3.41)$$

onde

$$\mathbf{y}^{k+1} = I\mathbf{y}^{k+1} + (1-I)\mathbf{y}^k \quad (3.42)$$

com  $0 \leq I \leq 1$ .

Na equação 3.41, o sobrescrito  $k$  representa o passo de tempo,  $\Delta t$  o tamanho do passo de tempo e  $I$  varia de 0 a 1.

### 3.5.3.

#### Formulação numérica da equação de fluxo do meio fraturado

O meio fraturado é representado por um meio poroso bidimensional. As fraturas, no entanto, estão posicionadas no espaço. Assim, algumas mudanças devem ser consideradas às equações apresentadas na seção anterior. Tais mudanças estão relacionadas, basicamente, a uma transformação do sistema de coordenadas. Ou seja, transformação das coordenadas locais das fraturas em coordenadas do sistema global. Essa transformação é realizada para permitir a união do meio fraturado ao meio poroso.

Para o cálculo de  $b(\mathbf{y})$  (equação 3.38), deve-se considerar que  $\frac{\partial z}{\partial x} \neq 0$  e

$\frac{\partial z}{\partial y} \neq 0$ . Estes termos são diferentes de zero, pois os elementos bidimensionais

estão posicionados no espaço, como apresentado na Figura 3.7.

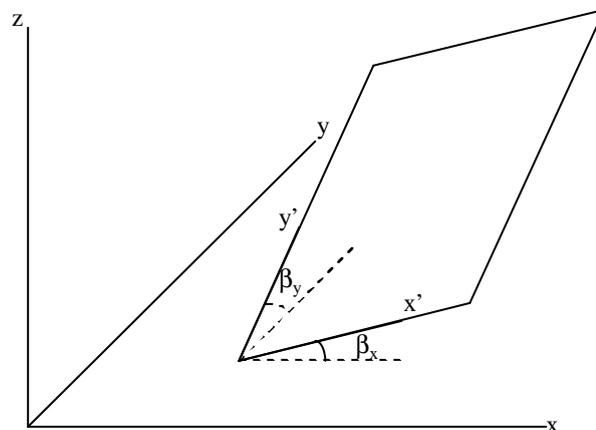


Figura 3.7: Elemento bidimensional posicionado no espaço.

Para transformar o plano  $(x', y')$  para o plano  $(x, y)$ , deve-se multiplicar as parcelas  $x$  e  $y$  dos termos de  $b(\mathbf{y})$ , pelos cossenos dos ângulos  $\mathbf{b}_x$  e  $\mathbf{b}_y$ . Assim,  $b(\mathbf{y})$ , estará escrita em coordenadas globais  $(x, y, z)$ .

Para o cálculo de  $A(\mathbf{y})$  (equação 3.37), pode-se realizar mudança de base das coordenadas dos nós do elemento e com estes valores determinar  $A(\mathbf{y})$ .

Para o cálculo de  $F(\mathbf{y})$  e  $d$  (equações 3.36 e 3.40, respectivamente), é necessário basicamente determinar o valor da área do elemento, que pode ser calculada diretamente em coordenadas globais (equação 3.43).

$$R_i = (y_3 - y_1)(z_2 - z_1) - (z_3 - z_1)(y_2 - y_1)$$

$$R_j = (z_3 - z_1)(x_2 - x_1) - (x_3 - x_1)(z_2 - z_1)$$

$$R_k = (x_3 - x_1)(y_2 - y_1) - (y_3 - y_1)(x_2 - x_1)$$

$$Area = \frac{\sqrt{R_i^2 + R_j^2 + R_k^2}}{2.0} \quad (3.43)$$

Por fim, para o cálculo de  $q$  (equação 3.39), é necessário determinar a distância entre os nós da aresta do elemento onde é aplicada a vazão  $q^*$ . A distância entre dois pontos  $(p_1$  e  $p_2)$  no espaço é calculada pela equação 3.44.

$$d = \sqrt{(x_2 - x_1)^2 + (y_2 - y_1)^2 + (z_2 - z_1)^2} \quad (3.44)$$

#### 3.5.4.

#### Formulação numérica da equação de transporte de soluto do meio poroso

O procedimento de solução da equação de transporte de solutos, apresentado abaixo, é semelhante ao apresentado para equação de fluxo.

#### Discretização do espaço

A variável dependente, função concentração  $C(x, y, z, t)$ , é aproximada por uma série finita  $\hat{C}(x, y, z, t)$  na forma:

$$\hat{C}(x, y, z, t) = \sum_{n=1}^M N_n(x, y, z) C_n(t) \quad (3.45)$$

Na equação,  $N_n$  é a função de interpolação linear,  $C_n$  é o valor desconhecido de concentração nodal, e  $M$  é o número total de nós. Aplicando o método de Galerkin na equação de transporte de soluto (equação 3.18) sobre um domínio  $W$ , tem-se:

$$\int_{\Omega} \left[ \mathbf{qR} \frac{\partial \hat{C}}{\partial t} + q_i \frac{\partial \hat{C}}{\partial x_i} - \frac{\partial}{\partial x_i} \left( \mathbf{qD}_{ij} \frac{\partial \hat{C}}{\partial x_j} \right) + \mathbf{qRI} \hat{C} \right] N_n d\Omega = 0 \quad (3.46)$$

Separando os termos da integral:

$$\begin{aligned} & \int_{\Omega} \left[ \mathbf{qR} \frac{\partial \hat{C}}{\partial t} \right] N_n d\Omega + \int_{\Omega} \left[ q_i \frac{\partial \hat{C}}{\partial x_i} \right] N_n d\Omega - \int_{\Omega} \left[ \frac{\partial}{\partial x_i} \left( \mathbf{qD}_{ij} \frac{\partial \hat{C}}{\partial x_j} \right) \right] N_n d\Omega + \\ & + \int_{\Omega} \left[ \mathbf{qRI} \hat{C} \right] N_n d\Omega = 0 \end{aligned} \quad (3.47)$$

Integrando por partes o terceiro termo da equação 3.47, tem-se:

$$\int_{\Omega} \left[ \frac{\partial}{\partial x_i} \left( \mathbf{qD}_{ij} \frac{\partial \hat{C}}{\partial x_j} \right) \right] N_n d\Omega = - \int_{\Omega} \mathbf{qD}_{ij} \frac{\partial \hat{C}}{\partial x_j} \frac{\partial N_n}{\partial x_i} d\Omega + \int_{\Gamma} \left( \mathbf{qD}_{ij} \frac{\partial \hat{C}}{\partial x_j} \right) N_n d\Gamma \quad (3.48)$$

Então, a equação 3.48 é reescrita da seguinte forma:

$$\begin{aligned} & \int_{\Omega} \left[ \mathbf{qR} \frac{\partial \hat{C}}{\partial t} \right] N_n d\Omega + \int_{\Omega} \left[ q_i \frac{\partial \hat{C}}{\partial x_i} \right] N_n d\Omega + \int_{\Omega} \mathbf{qD}_{ij} \frac{\partial \hat{C}}{\partial x_j} \frac{\partial N_n}{\partial x_i} d\Omega - \\ & - \int_{\Gamma} \left( \mathbf{qD}_{ij} \frac{\partial \hat{C}}{\partial x_j} \right) N_n d\Gamma + \int_{\Omega} \left[ \mathbf{qRI} \hat{C} \right] N_n d\Omega = 0 \end{aligned} \quad (3.49)$$

Na equação 3.48, o segundo termo do lado direito representa o fluxo dispersivo normal ao contorno. Esse termo é dado por:

$$\mathbf{qD}_{ij} \frac{\partial \hat{C}}{\partial x_j} = q_i (\hat{C} - C_0) \quad (3.50)$$

onde  $C_0$  é a concentração do fluido de chegada (Simunek *et al.*, 1995).

Aplicando a equação 3.45 na equação 3.49, obtém-se:

$$\begin{aligned}
& \frac{\partial C}{\partial t} \left[ \sum_e \mathbf{qR} \int_{\Omega_e} N_n N_n d\Omega_e \right] + \left[ \sum_e q_i \int_{\Omega_e} N_n \frac{\partial N_n}{\partial x_i} d\Omega_e \right] C + \\
& + \left[ \sum_e \mathbf{qD}_{ij} \int_{\Omega_e} \frac{\partial N_n}{\partial x_j} \frac{\partial N_n}{\partial x_i} d\Omega_e \right] C - \left[ \sum_e q_i \int_{\Gamma_e} N_n N_n d\Gamma_e \right] C + \\
& + \sum_e q_i C_0 \int_{\Gamma_e} N_n d\Gamma_e + \left[ \sum_e \mathbf{qRI} \int_{\Omega_e} N_n N_n d\Omega_e \right] C = 0
\end{aligned} \quad (3.51)$$

Na forma matricial a equação 3.51 é dada por:

$$Q \frac{dC}{dt} + S.C + f = 0 \quad (3.52)$$

onde,

$$Q = \sum_e \mathbf{qR} \int_{\Omega_e} N_n N_n d\Omega_e \quad (3.53)$$

$$\begin{aligned}
S = & \sum_e q_i \int_{\Omega_e} N_n \frac{\partial N_n}{\partial x_i} d\Omega_e + \sum_e \mathbf{qD}_{ij} \int_{\Omega_e} \frac{\partial N_n}{\partial x_j} \frac{\partial N_n}{\partial x_i} d\Omega_e - \\
& - \sum_e q_i \int_{\Gamma_e} N_n N_n d\Gamma_e + \sum_e \mathbf{qRI} \int_{\Omega_e} N_n N_n d\Omega_e
\end{aligned} \quad (3.54)$$

$$f = \sum_e q_i C_0 \int_{\Gamma_e} N_n d\Gamma_e \quad (3.55)$$

e  $C$  é o vetor de concentrações nodal.

### Discretização do tempo

Para discretização do tempo é usado o método das diferenças finitas. Assim, a equação 3.52 é reescrita da seguinte forma:

$$Q_{j+e} \frac{C_{j+1} - C_j}{\Delta t} + \mathbf{e}.S_{j+1}.C_{j+1} + (1-\mathbf{e}).S_j.C_j + \mathbf{e}.f_{j+1} + (1-\mathbf{e})f_j = 0 \quad (3.56)$$

com  $0 \leq \mathbf{e} \leq 1$ .

### 3.5.5. Formulação numérica da equação de transporte de soluto do meio fraturado

Semelhante ao fluxo no meio fraturado, o transporte de soluto é representado pela equação de transporte do meio poroso bidimensional. Desta forma, algumas mudanças também devem ser consideradas às equações apresentadas na seção anterior. Essas mudanças estão relacionadas, basicamente, à transformação do sistema de coordenadas locais, das fraturas, para o sistema de coordenadas globais.

Para o cálculo de  $S$  (equação 3.54) deve-se realizar mudança de base das coordenadas dos nós dos elementos, das dispersividades e das velocidades. Desta forma,  $S$  estará escrita em coordenadas globais.

Para o cálculo de  $Q$  e  $f$  (equações 3.52 e 3.54, respectivamente), é necessário determinar o valor da área do elemento, que pode ser calculada diretamente em coordenadas globais usando a equação 3.43.

### 3.5.6. Métodos iterativos para problemas não lineares

Os métodos iterativos tratados nessa seção referem-se aos métodos usados para solução da não linearidade da equação de fluxo não saturado (equação 3.4). Na literatura, é possível encontrar alguns desses métodos, em especial nos trabalhos de Paniconi *et al.* (1991) e Celia *et al.* (1987).

Os métodos iterativos mais usados são os métodos de Newton (também conhecido como Newton-Raphson) e método de Picard. No entanto, esses métodos são considerados muito robustos e caros computacionalmente, pois para cada passo de tempo é necessário avaliar repetidamente o sistema de equações. Diante desta desvantagem, alguns métodos não iterativos foram desenvolvidos, como por exemplo, os métodos de Newton e de Picard linearizados. Neste trabalho são apresentados somente os métodos iterativos. Maiores detalhes sobre os métodos não iterativos podem ser encontrados em Paniconi *et al.* (1991).

## Considerações gerais

Todos os métodos descritos nesta seção serão apresentados a partir da equação 3.41 (equação de fluxo não saturado na forma matricial). Nessa equação, considerando  $I \geq 1/2$ , o esquema de discretização é sempre estável e considerando  $I < 1/2$  a estabilidade é condicional, dependente da discretização do espaço e do tempo (Hughes, 1977).

O sistema de equações 3.41 é sempre não linear em  $\mathbf{y}^{k+1}$ , exceto quando  $I = 0$ , onde se tem o caso explícito. Para os casos implícitos ( $I > 0$ ), é necessária a utilização de métodos iterativos para resolver o sistema de equações. Neste trabalho é adotado o esquema implícito de discretização ( $I = 1$ ). Então, escrevendo a equação 3.41 para  $I = 1$  e desprezando o termo  $d$ , tem-se:

$$A(\mathbf{y}^{k+1})\mathbf{y}^{k+1} + F(\mathbf{y}^{k+1})\frac{\mathbf{y}^{k+1} - \mathbf{y}^k}{\Delta t} - q(t^{k+1}) + b(\mathbf{y}^{k+1}) = 0 \quad (3.57)$$

ou,

$$f(\mathbf{y}^{k+1}) \equiv A(\mathbf{y}^{k+1})\mathbf{y}^{k+1} + F(\mathbf{y}^{k+1})\frac{\mathbf{y}^{k+1} - \mathbf{y}^k}{\Delta t} - q(t^{k+1}) + b(\mathbf{y}^{k+1}) \quad (3.58)$$

O sistema 3.40 é simétrico. No entanto, essa simetria sobre o sistema global é perdida para alguns métodos iterativos como será visto posteriormente.

Nas equações dos itens seguintes o sobrescrito  $m$  representa o nível de iterações.

## Método de Newton

O método de Newton (MN) é dado por (Paniconi *et al.*, 1991):

$$f'(\mathbf{y}^{k+1,(m)})\left(\mathbf{y}^{k+1,(m+1)} - \mathbf{y}^{k+1,(m)}\right) = -f(\mathbf{y}^{k+1,(m)}) \quad (3.59)$$

onde a derivada do sistema  $f'(\mathbf{y}^{k+1,(m)})$  é:

$$f'(\mathbf{y}^{k+1,(m)}) = A(\mathbf{y}^{k+1,(m)}) + \frac{\partial A(\mathbf{y}^{k+1,(m)})}{\partial \mathbf{y}^{k+1,(m)}}\mathbf{y}^{k+1,(m)} + \frac{1}{\Delta t^{k+1}}F(\mathbf{y}^{k+1,(m)}) + \frac{1}{\Delta t^{k+1}}\frac{\partial F(\mathbf{y}^{k+1,(m)})}{\partial \mathbf{y}^{k+1,(m)}}\left(\mathbf{y}^{k+1,(m)} - \mathbf{y}^k\right) + \frac{\partial b(\mathbf{y}^{k+1,(m)})}{\partial \mathbf{y}^{k+1,(m)}} \quad (3.60)$$

sendo a derivada atualizada para cada iteração.

O MN apresenta uma não simetria na matriz do sistema devido a presença de termos de derivadas  $\frac{\partial A(\mathbf{y}^{k+1,(m)})}{\partial \mathbf{y}^{k+1,(m)}}$ ,  $\frac{\partial F(\mathbf{y}^{k+1,(m)})}{\partial \mathbf{y}^{k+1,(m)}}$  e  $\frac{\partial b(\mathbf{y}^{k+1,(m)})}{\partial \mathbf{y}^{k+1,(m)}}$ . Esse método, apesar de apresentar uma convergência quadrática, requer a derivada das matrizes  $A$  e  $B$  e do vetor  $F$ , tornando o desempenho do método mais lento.

Algumas discussões sobre o MN são apresentadas por Ortega e Rheinboldt (1970) e Conte e de Boor (1980).

### Método Quase-Newton

A construção da derivada do sistema  $f'$  (hessiana) e a obtenção da sua inversa em cada iteração é um processo custoso. A ideia básica do método quase Newton (MQN) é usar uma aproximação da inversa da hessiana no lugar da verdadeira hessiana.

O método BFGS (*Broyden-Fletcher-Goldfarb-Shanno*) (Arora, 1989) representa um MQN. Esse método foi implementado no programa de análise numérica desenvolvido. Sua formulação é apresentada abaixo.

No método,

$$S_0 = [f'(\mathbf{y}^{k+1,(0)})]^{-1} \quad (3.61)$$

onde  $S_0$  é inversa da hessiana inicial, representada pela matriz identidade ( $I$ ).

O valor de  $S_{m+1}$  é determinado pela seguinte expressão:

$$S_{m+1} = -[I + w_m \cdot v_m^t] \cdot S_m \cdot [I + v_m \cdot w_m^t] \quad (3.62)$$

que pode ser escrita da forma,

$$d_{m+1} = -[I + w_m \cdot v_m^t] \cdot S_m \cdot [I + v_m \cdot w_m^t] g_{m+1} \quad (3.63)$$

onde,

$$v_m = g_m \left\{ 1 + \mathbf{a}_m \left[ \frac{d_m^t \cdot q_m}{d_m^t \cdot g_m} \right]^{1/2} \right\} - g_{m+1} \quad (3.64)$$

$$w_m = \frac{d_m}{d_m^t \cdot q_m} \quad (3.65)$$

$$q_m = g_{m+1} - g_m \quad (3.66)$$

$$\mathbf{d}_m = \mathbf{a}_m \cdot d_m \quad (3.67)$$

Na equação 3.64,  $\mathbf{a}_m$  é o valor da busca linear (valor adotado igual a um).

Nas outras equações,  $g_m = f(\mathbf{y}^{k+1,(m)})$ ,  $g_{m+1} = f(\mathbf{y}^{k+1,(m+1)})$  e  $d_m = \mathbf{y}^{k+1,(m+1)} - \mathbf{y}^{k+1,(m)}$ .

### Método de Picard

A formulação do método de Picard (MP) pode ser obtida diretamente da equação 3.57. Assim, tem-se:

$$\left( A(\mathbf{y}^{k+1,(m)}) + \frac{1}{\Delta t} F(\mathbf{y}^{k+1,(m)}) \right) \mathbf{y}^{k+1,(m+1)} = q(t^{k+1}) - b(\mathbf{y}^{k+1,(m)}) - A(\mathbf{y}^{k+1,(m)}) \mathbf{y}^k + \frac{1}{\Delta t} F(\mathbf{y}^{k+1,(m)}) \mathbf{y}^k \quad (3.68)$$

Reescrevendo a equação 3.68, obtém-se:

$$\left( A(\mathbf{y}^{k+1,(m)}) + \frac{1}{\Delta t} F(\mathbf{y}^{k+1,(m)}) \right) \mathbf{y}^{k+1,(m+1)} - \mathbf{y}^{k+1,(m)} = -f(\mathbf{y}^{k+1,(m)}) \quad (3.69)$$

Comparando a equação 3.59 com a equação 3.69 verifica-se que o MP pode ser visto como uma simplificação do MN. O MP apresenta uma simetria na matriz do sistema e apresenta convergência linear.

Na literatura é possível encontrar alguns trabalhos que apresentam comparações entre o MN e MP. No trabalho de Paniconi *et al.* (1991) relata-se que, apesar do MN requerer as derivadas de alguns termos de sua equação, o método não é menos eficiente computacionalmente que o MP. Isto se dá pelo fato de que o custo computacional para resolver os termos de derivadas é compensado pela rápida convergência do método (número pequeno de iterações). No mesmo trabalho os autores relatam que para certos problemas de alta não linearidade o MN é mais eficiente que o MP.

Em um outro trabalho apresentado por Paniconi e Putti (1994), é realizado um estudo comparativo mais profundo entre o MN e MP, onde são analisados problemas 1D, 2D e 3D, em regime permanente e transiente. Segundo os autores, fatores como o tamanho do problema, a discretização espacial e temporal, a estimativa da solução inicial, as características da condutividade hidráulica e a umidade volumétrica podem afetar na convergência dos dois métodos. Para evitar

a não convergência do problema, os autores apresentam algumas estratégias. Uma delas é adotar uma mistura do NP e MN.

### Método de Picard modificado

O método de Picard modificado (MPM) foi assim denominado por Celia (1987) e Zarba (1988). Esse método considera a forma mista (equação de fluxo não saturado escrita em termos de carga de pressão e umidade volumétrica, como apresentado na equação 3.1) de representação da equação de Richards. Segundo Celia e Bouloutas (1990) a solução numérica da equação de Richards, baseada na carga de pressão, geralmente produz resultados pobres caracterizados por um grande erro no balanço de massa. Por outro lado, a solução numérica baseada na forma mista fornece excelentes resultados, pois minimiza o erro do balanço de massa. Entretanto uma boa conservação de massa não garante uma boa solução numérica (Celia e Bouloutas, 1990).

Discretizando no espaço e no tempo a equação 3.1 (considerando o termo de armazenamento) da mesma forma como foi feito na seção 3.52, obtém-se a seguinte equação (com  $I = 1$  e desprezando o termo  $d$ ):

$$A(\mathbf{y}^{k+1})\mathbf{y}^{k+1} + F_q(\mathbf{q}^{k+1})\frac{\mathbf{q}^{k+1} - \mathbf{q}^k}{\Delta t} - q(t^{k+1}) + b(\mathbf{y}^{k+1}) = 0 \quad (3.70)$$

sendo,

$$F_q(\mathbf{q}) = \sum_e G_q \int_{\Omega_e} N_n d\Omega_e \quad (3.71)$$

e

$$G_q = \left[ \frac{\mathbf{q}}{\mathbf{q}_s} \frac{S_s}{C(\mathbf{y})} + 1 \right] \quad (3.72)$$

No MPM o segundo termo da equação 3.70 é expandido em duas partes.

$$F_q(\mathbf{q}^{k+1})\frac{\mathbf{q}^{k+1} - \mathbf{q}^k}{\Delta t} = F_q(\mathbf{q}^{k+1})\frac{\mathbf{q}^{k+1,(m+1)} - \mathbf{q}^{k+1,(m)}}{\Delta t} + F_q(\mathbf{q}^{k+1})\frac{\mathbf{q}^{k+1,(m)} - \mathbf{q}^k}{\Delta t} \quad (3.73)$$

O segundo termo do lado direito da equação acima é conhecido na iteração corrente e o primeiro termo do lado direito pode ser expresso em termos de carga de pressão.

$$F_q(\mathbf{q}^{k+1}) \frac{\mathbf{q}^{k+1} - \mathbf{q}^k}{\Delta t} = F(\mathbf{y}^{k+1}) \frac{\mathbf{y}^{k+1,(m+1)} - \mathbf{y}^{k+1,(m)}}{\Delta t} + F_q(\mathbf{q}^{k+1}) \frac{\mathbf{q}^{k+1,(m)} - \mathbf{q}^k}{\Delta t} \quad (3.74)$$

Se a solução numérica converge, o primeiro termo do lado direito da equação 3.74 desaparecerá no final do processo de iteração. Esta característica particular garante um erro relativamente pequeno no balanço de massa da solução (Simunek *et al.*, 1995).

A formulação do MPM é a apresentada abaixo.

$$\left( A(\mathbf{y}^{k+1,(m)}) + \frac{1}{\Delta t} F(\mathbf{y}^{k+1,(m)}) \right) \mathbf{y}^{k+1,(m+1)} = q(t^{k+1}) - b(\mathbf{y}^{k+1,(m)}) + \frac{1}{\Delta t} F(\mathbf{y}^{k+1,(m)}) \mathbf{y}^k - F_q(\mathbf{q}^{k+1}) \frac{\mathbf{q}^{k+1,(m)} - \mathbf{q}^k}{\Delta t} \quad (3.75)$$

### 3.6.

#### Um programa numérico para análise de fluxo e transporte em meios porosos e fraturados

Na literatura, é possível encontrar alguns programas computacionais para a análise de fluxo e transporte em meios porosos e fraturados. Alguns desses programas são descritos no trabalho de Diodato (1994). A Tabela 3.2 e a Tabela 3.3 apresentam um resumo de programas para análise tridimensional de fluxo e transporte em meios porosos e fraturados.

Neste trabalho, foi desenvolvido o programa FTPF-3D (*Simulating Flow and Solute Transport in Porous and Fractured Media - Three-dimensional*). O FTPF-3D é um programa tridimensional para análise de fluxo, transporte de soluto e trajetória de partículas em meios porosos e fraturados. Ele foi criado a partir do código fonte do programa SWMS3D (Simunek *et al.*, 1995) que simula fluxo e transporte de soluto em meio poroso.

O método numérico utilizado para resolver as equações governantes é o Método dos Elementos Finitos. A análise numérica pode ser realizada em regime permanente ou transiente, e em condições saturadas ou não saturadas. Os mecanismos de transporte considerados são: advecção, dispersão, difusão, sorção e decaimento.

O programa utiliza os métodos de Picard modificado (Huyakorn e Pinder, 1983) e BFGS (*Broyden-Fletcher-Goldfarb-Shanno*) (Arora, 1989) para resolver a

não linearidade da equação de fluxo não saturado. Para a solução do sistema de equações lineares de fluxo utiliza-se o método de eliminação de Gauss com armazenamento da matriz global em banda (Arora, 1989) ou o método do gradiente conjugado preconditionado com matriz simétrica (Mendoza *et al.*, 1991). A escolha de um dos dois métodos é definida pelo tamanho do problema. O método de eliminação de Gauss é usado quando a largura de banda é menor que vinte ou quando o número total de nós é menor que 500.

Para a solução do sistema de equações linear de transporte de soluto, o pacote ORTHOMIN (método do gradiente conjugado preconditionado) é adotado. Maiores detalhes sobre esse método podem ser encontrados em Mendoza *et al.* (1991).

No FTFPF-3D foram implementadas as seguintes funcionalidades:

- As equações de fluxo e transporte de soluto, bidimensionais, do meio poroso para representar as fraturas;
- Um módulo de trajetória de partículas para o meio fraturado, que utiliza o método de Euler;
- O método iterativo BFGS para resolver a não linearidade da equação de fluxo não saturada.

O programa desenvolvido é capaz de simular fluxo e transporte de soluto em meio poroso, meio fraturado e meio poroso e fraturado (meio poroso e meio fraturado interposto). É possível também combinar os três meios, como é apresentado na Figura 1.2.

Tabela 3.2: Programas tridimensionais de fluxo e transporte em meios porosos e fraturados.

	Frac3DVS	FracMan/ MAFIC	PORFLO-3	PORFLOW	STAFF3D	SWIFT/486
Modelo conceitual	P, SFD	SFD, MPE	MFD, MPE	MFD, MPE	MDP, MFD	MDP, MFD
Método numérico	MEF	MEF	MDF	MDF	MEF	MDF
<b>Fluxo</b>						
Transiente	S	S	S	S	S	S
Heterogêneo	S	S	S	S	ND	S
Anisotrópico	ND	ND	S	S	ND	S
Não saturado	S	N	S	S	ND	ND
Multifásico	N	N	S	S	N	N
<b>Transporte</b>						
Advecção	S	S	S	S	S	S
Dispersão	S	S	S	S	S	S
Difusão	ND	S	S	S	S	ND
Sorção	ND	S	S	S	ND	S
Decaimento	ND	S	S	S	S	S
<b>Referências</b>						
	Frac3DVS, 2005	FracMan, 2005	Runchal <i>et al.</i> , 1992	PorFlow, 2005	Staff3D, 2005	Swift/486, 2005
<b>Legenda</b>						
MPE	Modelo de Meio Poroso Equivalente					
MDP	Modelo de Dupla Porosidade					
MFD	Modelo de Fraturas Discretas					
SFD	Sistema de Fraturas Discretas					
P	Poroso					
S	Sim					
N	Não					
ND	Não determinado					
MEF	Método dos Elementos Finitos					
MDF	Método das Diferenças Finitas					

Tabela 3.3: Programas tridimensionais de fluxo e transporte em meios porosos e fraturados.

	TOUGH2	BIM3D/ FRACGEN	Napsac	Connectflow	FTPF-3D
Modelo conceitual	MDP	MDP	SFD, MPE	P, SFD, MFD, MPE	P, SFD, MFD
Método numérico	MDF	ND	MEF	MEF	MEF
<b>Fluxo</b>					
Transiente	S	ND	S	S	S
Heterogêneo	ND	ND	S	S	S
Anisotrópico	ND	ND	S	S	N
Não saturado	S	S	S	S	S
Multifásico	S	ND	N	N	N
<b>Transporte</b>					
Advecção	S	S	S	S	S
Dispersão	ND	ND	S	S	S
Difusão	ND	ND	N	N	S
Sorção	ND	S	N	S	S
Decaimento	ND	S	N	N	S
<b>Referências</b>					
	Tough2, 2005	BIM3D/ FRACGEN, 2005	Hartley et al., 2002	Hartley e Holton, 2003	
<b>Legenda</b>					
MPE	Modelo de Meio Poroso Equivalente				
MDP	Modelo de Dupla Porosidade				
MFD	Modelo de Fraturas Discretas				
SFD	Sistema de Fraturas Discretas				
P	Poroso				
S	Sim				
N	Não				
ND	Não determinado				
MEF	Método dos Elementos Finitos				
MDF	Método das Diferenças Finitas				