



Universidade Federal de Pernambuco  
Centro de Tecnologia e Geociências  
Departamento de Engenharia Mecânica

*Nilson Yecid Bautista Chivata*

Simulação Numérica da Equação de Advecção-Dispersão-Reação para um Traçador em  
Meios Porosos Heterogêneos e Anisotrópicos por um Método de Volumes Finitos,  
Utilizando Malhas Poligonais

Dissertação de Mestrado

Recife

Janeiro 26 de 2016.

Nilson Yecid Bautista Chivata

Simulação Numérica da Equação de  
Advecção-Dispersão-Reação para um Traçador em Meios  
Porosos Heterogêneos e Anisotrópicos por um Método de  
Volumes Finitos, Utilizando Malhas Poligonais

Trabalho apresentado ao Programa de Pós-graduação em Engenharia Mecânica do Centro de Tecnologia e Geociências da Universidade Federal de Pernambuco, como requisito parcial para obtenção do grau de Mestre em Engenharia Mecânica.

Área de concentração: Processos e Sistemas Térmicos  
Orientador: D.Sc. Darlan Karlo Elisiário de Carvalho  
Co-orientador: PhD. Paulo Roberto Maciel Lyra

Recife

Janeiro 26 de 2016.

Catálogo na fonte  
Bibliotecária Valdicéa Alves, CRB-4 / 1260

- C543s Chivata, Nilson Yecid Bautista.  
Simulação numérica da equação de advecção-dispersão-reação para um traçador em meios porosos heterogêneos e anisotrópicos por um método de volumes finitos, utilizando malhas poligonais / Nilson Yecid Bautista Chivata - 2016.  
129folhas, Il.; Nom.; e Tab.
- Orientador: Prof.º D.Sc Darlan Karlo Elisiário de Carvalho.  
Coorientador: Profº PhD Paulo Roberto Maciel Lyra.
- Dissertação (Mestrado) – Universidade Federal de Pernambuco. CTG. Curso de Engenharia Mecânica, 2016.  
Inclui Referências.
1. Engenharia Mecânica. 2. Escoamentos monofásicos. 3. Injeção do traçador. 4. ADRE. 5. Método dos volumes finitos. 6. MPFA-D. I. Carvalho, Darlan Karlo Elisiário de. (Orientador). II. Lyra, Paulo Roberto Maciel. (Coorientador).
- UFPE
- 621 CDD (22. ed.) BCTG/2016-130

26 de janeiro de 2016

“SIMULAÇÃO NUMÉRICA DA EQUAÇÃO DE ADVECCÃO-DISPERSÃO-REAÇÃO PARA UM TRAÇADOR EM MEIOS POROSOS HETEROGÊNEOS E ANISOTROPICOS POR UM MÉTODO DE VOLUMES FINITOS, UTILIZANDO MALHAS POLIGONAIS”

NILSON YECID BAUTISTA CHIVATA

ESTA DISSERTAÇÃO FOI JULGADA ADEQUADA PARA OBTENÇÃO DO TÍTULO DE MESTRE EM ENGENHARIA MECÂNICA

ÁREA DE CONCENTRAÇÃO: PROCESSOS E SISTEMAS TÉRMICOS

APROVADA EM SUA FORMA FINAL PELO  
PROGRAMA DE PÓS-GRADUAÇÃO EM ENGENHARIA  
MECÂNICA/CTG/EEP/UFPE

---

Prof. Dr. DARLAN KARLO ELISIARIO DE CARVALHO  
ORIENTADOR/PRESIDENTE

---

Prof. Dr. PAULO ROBERTO MARICEL LYRA  
CO-ORIENTADOR

---

Prof. Dr. JORGE RECARTE HENRÍQUEZ GUERRERO  
COORDENADOR DO PROGRAMA

BANCA EXAMINADORA:

---

Prof. Dr. DARLAN KARLO ELISIARIO DE CARVALHO (UFPE)

---

Prof. Dr. PAULO ROBERTO MARICEL LYRA (UFPE)

---

Prof<sup>a</sup> Dr<sup>a</sup> RITA DE CASSIA FERNANDES DE LIMA (UFPE)

---

Prof. Dr. ALESSANDRO ROMARIO ECHEVARRIA ANTUNES (UFPE)

# Agradecimentos

Ao Conselho Nacional de Desenvolvimento Científico e Tecnológico (CNPq), à Coordenação de Aperfeiçoamento de Pessoal de Nível Superior (CAPES) e ao projeto SIGER, financiado pelo CENPES-PETROBRAS, pelas bolsas concedidas durante o período de realização do mestrado.

Aos Professores Paulo Lyra, Darlan Karlo Elisiário de Carvalho e Márcio Rodrigo de Araújo Souza, pela orientação e apoio na minha formação acadêmica.

Aos alunos de Doutorado Fernando Licapa Contreras e Gustavo Galindez Ramirez, da UFPE, pela ajuda recebida ao longo de meu mestrado.

Aos colegas do grupo PADMEC e colegas do Labcom pela troca de ideias e o apoio recebido.

A meus familiares e amigos, que me acompanharam desde o início deste caminho.

# Resumo

A modelagem e a simulação numérica do transporte de solutos, como por exemplo traçadores, em meios porosos heterogêneos e anisotrópicos, tais como aquíferos e reservatórios de petróleo constituem-se num grande desafio de natureza matemática e numérica. A modelagem de falhas selantes, canais, poços inclinados, *pinchouts* e outras características complexas demanda o uso de malhas não-estruturadas e não-ortogonais, capazes de se adaptar naturalmente ao domínio em estudo. Os pacotes computacionais utilizados comumente na indústria do petróleo, na sua grande maioria, se baseiam no Método das Diferenças Finitas com Aproximação de Fluxo por Dois Pontos (Two-Point Flux Approximation - TPFA) e no Método de Ponderação à Montante de Primeira Ordem (First Order Upwind Method - FOU), devido a sua facilidade de implementação e sua eficiência computacional. Infelizmente, os métodos TPFA são incapazes de produzir soluções convergentes em malhas não-ortogonais ou para tensores de dispersão ou permeabilidades completos e os métodos FOU produzem soluções com difusão numérica excessiva, exigindo malhas demasiadamente refinadas para obtermos soluções confiáveis. Uma alternativa ao TPFA, e que permite o uso de tensores completos e malhas não-ortogonais, é o Método dos Elementos Finitos de Galerkin (MEF), porém este método não produz soluções localmente conservativas, o que pode ser um problema sério para a modelagem de problemas envolvendo leis de conservação, como no escoamento em meios porosos. Outra alternativa são os Métodos de Volumes Finitos (MVF). Nas suas variantes mais robustas, estes métodos são capazes de lidar com malhas poligonais quaisquer e tensores de dispersão e permeabilidades completos e com razão de anisotropia arbitrária, além de produzir aproximações discretas de alta ordem e localmente conservativas. Neste contexto, no presente trabalho, apresentamos uma formulação MVF centrado na célula para a modelagem do transporte de um traçador não-reativo num escoamento monofásico em meios porosos heterogêneos e anisotrópicos. Para a discretização dos termos elípticos, tanto da equação de pressão quanto da equação de Advecção-Dispersão-Reação (ADRE), utilizou-se um MVF com aproximação de fluxo por múltiplos pontos que faz uso do estêncil diamante (MPFA-D) e para a discretização dos termos hiperbólicos, usamos o método FOU e um MVF do tipo MUSCL (Monotone Upstream Centered Scheme for Conservation Laws). A fim de testar nossa formulação, resolvemos alguns problemas *benchmark* encontrados na literatura.

**Palavras chave:** Escoamentos Monofásicos, Injeção do Traçador, ADRE, Método dos Volumes Finitos, *MPFA-D*.

# Abstract

Modeling and numerical simulation of solutes (e.g. Tracers) in heterogeneous and anisotropic porous media such as aquifers and oil reservoirs, constitute a bigger challenge of mathematics and numerical nature. Modeling sealants faults, channels, inclined wells, pinch outs and other complex features of these geological formations demand the use of unstructured and not orthogonal meshes, able to adapt naturally to the domain under study. The computational packages used commonly in the oil industry, mostly, are based on the Finite Difference Method with Two Point Flow Approximation (TPFA) and the Amount First Order Upwind method (FOU), due to its ease of implementation and its computational efficiency. Unfortunately, TPFA methods are unable to produce convergent solutions in non-orthogonal meshes or in permeability or dispersion full Tensor and FOU methods produce solutions with excessive numerical diffusion, requiring excessively refined mesh to obtain reliable solutions. An interesting alternative to TPFA, which allows the use of full tensor and not orthogonal meshes, is the Galerkin Finite Element Method (FEM), but this method does not produce solutions locally conservative, which can be a serious problem for modeling problems involving conservation laws as the flow in porous media. An interesting alternative is the Finite Volume Methods (MVF). In its most robust embodiments, these methods are able to cope with any polygonal mesh and full permeability or dispersion tensors and with an arbitrary anisotropy ratio, beyond producing discrete approximations of high order and locally conservative. In this context, the present study, we present one MVF formulation cell centered to modeling the transport of a non-reactive tracer in single-phase flow in heterogeneous and anisotropic porous media. For the elliptical discretization terms, both, the pressure equation as the equation advection-dispersion-reaction (ADRE), we used The FVMF multipoint flow approximation that uses the diamond stencil (MPPA-D) and for the discretization of hyperbolic terms, we use the FOU method and an MVF type MUSCL (Monotone Upstream Centered Scheme for Conservation Laws). In order to test our formulation, we solve some benchmark problems in the literature.

**Keywords:** Single-Phase Flows, Tracer injection, ADRE, Finite Volume Method, MPFA-D.

# Lista de Figuras

2.1	Ilustração geométrica da tortuosidade num meio poroso. . . . .	14
2.2	Esboço para definir a concentração de um fluido . . . . .	15
3.1	Balanço de massa num volume de controle infinitesimal. . . . .	18
3.2	Escoamento do traçador num meio poroso. . . . .	21
3.3	Modelo esquemático de um reservatório e a respectiva identificação do domínio 2-D e contornos. . . . .	27
4.1	Diagrama de fluxo para a solução do modelo de Advecção-Dispersão-Reação. . . . .	30
4.2	Discretização do domínio poligonal que representa o reservatório em subdomínios (VC) no caso bidimensional. . . . .	32
4.3	Definição dos triângulos e dos volumes de controle usados na discretização do fluxo pelo método MPFA-D. . . . .	35
4.4	a) Representação da interpolação num vértice em 2-D, com seus volumes de controle vizinhos. b) Região de iteração para um volume de controle de uma malha poligonal em 3-D. . . . .	38
4.5	Notação usada na definição dos pesos ao redor do vértice $I$ . . . . .	42
4.6	Notação usada na definição dos pesos num nó de contorno tipo Neumann. . . . .	43
4.7	(a) Notação usada para a discretização do fluxo advectivo pelo método <i>FOU</i> . (b) Distribuição da concentração na discretização do fluxo advectivo pelo método <i>FOU</i> . . . . .	45
4.8	(a) Notação usada para a discretização do fluxo advectivo pelo método <i>MUSCL</i> . (b) Distribuição da concentração na discretização do fluxo advectivo pelo método <i>MUSCL</i> em 1-D. . . . .	47
5.1	Esquema de um meio isotrópico homogêneo para o problema de transporte unidimensional de um soluto traçador em um meio poroso. . . . .	54
5.2	Cálculo da pressão ao longo do eixo $x$ pelo método <i>MPFA-D</i> para o problema de transporte 1D. . . . .	56
5.3	Contorno de concentração do soluto traçador e isolinhas de concentração obtidas usando os métodos <i>FOU-MPFA-D</i> (preto), <i>MUSCL-MPFA-D</i> (azul) e <i>MUSCL-Woodfield-MPFA-D</i> (vermelho), para o problema de transporte 1D em $t = 30$ dias, e malha com 16 divisões. . . . .	56

5.4	Perfil da concentração obtido na simulação do problema de transporte de solutos num meio poroso 1D, para uma malha de 16 subdivisões ao longo do eixo $x$ e sua respectiva solução analítica. ( $CFL = 0,2$ , $Pe = 0,75$ ). . . . .	57
5.5	Malhas triangulares não estruturadas usadas na discretização espacial para o problema de transporte 1D. a) 16 divisões b) 32 divisões. c) 64 divisões. c) 128 divisões ao longo do eixo $x$ . . . . .	58
5.6	Perfil da concentração obtido na simulação do problema de transporte de solutos num meio poroso 1D, para uma malha de 32 subdivisões ao longo do eixo $x$ e sua respectiva solução analítica. ( $CFL = 0,2$ , $Pe = 0,375$ ). . . . .	58
5.7	Perfil da concentração obtido na simulação do problema de transporte de solutos num meio poroso 1D, para uma malha de 64 subdivisões ao longo do eixo $x$ e sua respectiva solução analítica. ( $CFL = 0,2$ , $Pe = 0,1875$ ). . . . .	59
5.8	Perfil da concentração obtido na simulação do problema de transporte de solutos num meio poroso 1D, para uma malha de 128 subdivisões ao longo do eixo $x$ e sua respectiva solução analítica. ( $CFL = 0,2$ , $Pe = 0,09375$ ). . . . .	59
5.9	Erros obtidos na simulação do problema de transporte 1D para o problema fortemente dispersivo. . . . .	60
5.10	Perfil da concentração obtida na simulação do problema de transporte fortemente advectivo 1D, para uma malha de 16 subdivisões ao longo do eixo $x$ e sua respectiva solução analítica. ( $CFL = 0,2$ , $Pe = 100$ ). . . . .	62
5.11	Comparação dos perfis da concentração para os parâmetros $\lambda = -1$ , $\lambda = 0$ e $\lambda = 1/3$ , obtidos na simulação do problema de transporte fortemente advectivo 1D, para uma malha de 16 subdivisões ao longo do eixo $x$ e sua respectiva solução analítica. ( $CFL = 0,2$ , $Pe = 100$ ). . . . .	62
5.12	Comparação dos perfis da concentração para os parâmetros $\lambda = -1$ , $\lambda = 0$ e $\lambda = 1/3$ , obtidos na simulação do problema de transporte fortemente advectivo 1D, para uma malha de 32 subdivisões ao longo do eixo $x$ e sua respectiva solução analítica, usando os métodos MUSCL-MPFA-D. ( $CFL = 0,2$ , $Pe = 50$ ). . . . .	63
5.13	Perfil da concentração obtido na simulação do problema de transporte fortemente advectivo 1D, para uma malha de 32 subdivisões ao longo do eixo $x$ e sua respectiva solução analítica, usando os métodos MUSCL-MPFA-D. ( $CFL = 0,2$ , $Pe = 50$ ). . . . .	64
5.14	Perfil da concentração obtido na simulação do problema de transporte fortemente advectivo 1D, para uma malha de 64 subdivisões ao longo do eixo $x$ e sua respectiva solução analítica. ( $CFL = 0,2$ , $Pe = 25$ ). . . . .	64
5.15	Perfil da concentração obtido na simulação do problema de transporte fortemente advectivo 1D, para uma malha de 128 subdivisões ao longo do eixo $x$ e sua respectiva solução analítica. ( $CFL = 0,2$ , $Pe = 12,5$ ). . . . .	65
5.16	Erros obtidos na simulação do problema de transporte 1D para o problema fortemente advectivo. . . . .	66

5.17	Perfis de concentração obtidas ao mudar a pressão inicial na simulação do problema de transporte 1-D ( $CFL = 0, 2$ , $Pe = 3, 75$ ). . . . .	67
5.18	Perfis de concentração da equação <i>ADRE</i> , para o problema de transporte de solutos em meios porosos 1-D. Soluções analítica e numéricas para uma malha de 16 divisões ao longo do eixo x. ( $CFL = 0, 2$ , $Pe = 150$ ). . . . .	69
5.19	Perfis de concentração da equação <i>ADRE</i> , para o problema de transporte de solutos em meios porosos 1D. Soluções analítica e numéricas para uma malha de 32 divisões ao longo do eixo x. ( $CFL = 0, 2$ , $Pe = 75$ ). . . . .	70
5.20	Perfis de concentração da equação <i>ADRE</i> , para o problema de transporte de solutos em meios porosos 1D. Soluções analítica e numéricas para uma malha de 64 divisões ao longo do eixo x. ( $CFL = 0, 2$ , $Pe = 37, 5$ ). . . . .	70
5.21	Perfis de concentração da equação <i>ADRE</i> , para o problema de transporte de solutos em meios porosos 1D. Soluções analítica e numéricas para uma malha de 128 divisões ao longo do eixo x. ( $CFL = 0, 2$ , $Pe = 18, 75$ ). . . . .	71
5.22	Erros obtidos na simulação do problema de transporte 1D para o problema de decaimento radioativo. $\gamma = 0, 02 \text{ dia}^{-1}$ . . . . .	72
5.23	Erros obtidos na simulação do problema de transporte 1D para o problema de decaimento radioativo. $\gamma = 0, 05 \text{ dia}^{-1}$ . . . . .	73
5.24	Erros obtidos na simulação do problema de transporte 1D para o problema de decaimento radioativo. $\gamma = 0, 5 \text{ dia}^{-1}$ . . . . .	74
5.25	Esquema de um meio isotrópico homogêneo com uma fonte a montante para o problema de transporte bidimensional de um soluto traçador. . . . .	75
5.26	Malhas triangulares não estruturadas usadas na discretização espacial para o problema de transporte 2D. a) malha 20x10 b) malha 50x25. . . . .	77
5.27	Contorno de concentração do soluto traçador obtido usando os métodos <i>FOU-MPFA-D</i> , para o problema de transporte 2D e malha 20x10. ( $t = 1 \text{ dia}$ , $Pe = 0, 2$ ). . . . .	77
5.28	Contorno de concentração do soluto traçador obtido usando os métodos <i>MUSCL_MPFA-D</i> , para o problema de transporte 2D e malha 20x10. ( $t = 1 \text{ dia}$ , $Pe = 0, 2$ ). . . . .	78
5.29	Contorno de concentração do soluto traçador obtido usando os métodos <i>MUSCL_Woodfield-MPFA-D</i> , para o problema de transporte 2-D e malha 20x10. ( $t = 1 \text{ dia}$ , $Pe = 0, 2$ ). . . . .	78
5.30	Perfil da concentração obtido na simulação do problema de transporte de solutos num meio poroso 2-D, para uma malha 20x10 subdivisões. ( $t = 1 \text{ dia}$ , $Pe = 0, 2$ ). . . . .	79
5.31	Contorno de concentração do soluto traçador obtido usando os métodos <i>FOU-MPFA-D</i> , para o problema de transporte 2D e malha 50x25. ( $t = 1 \text{ dia}$ , $Pe = 0, 05$ ). . . . .	80
5.32	Contorno de concentração do soluto traçador obtido usando os métodos <i>MUSCL-MPFA-D</i> , para o problema de transporte 2D e malha 50x25. ( $t = 1 \text{ dia}$ , $Pe = 0, 05$ ). . . . .	80
5.33	Perfil da concentração obtido na simulação do problema de transporte de solutos num meio poroso 2D, para uma malha 50x25 subdivisões. ( $t = 1 \text{ dia}$ , $Pe = 0, 05$ ). . . . .	81

5.34	Contorno de concentração do soluto traçador obtido usando os métodos <i>FOU-MPFA-D</i> , para o problema de transporte 2D e malha 20x10. ( $t = 4$ dias, $Pe = 0,05$ ). . . . .	82
5.35	Contorno de concentração do soluto traçador obtido usando os métodos <i>MUSCL-MPFA-D</i> , para o problema de transporte 2D e malha 20x10. ( $t = 4$ dias, $Pe = 0,05$ ). . . . .	82
5.36	Contorno de concentração do soluto traçador obtido usando os métodos <i>MUSCL_Woodfield-MPFA-D</i> , para o problema de transporte 2D e malha 20x10. ( $t = 4$ dias, $Pe = 0,05$ ). . . . .	82
5.37	Perfil da concentração obtido na simulação do problema de transporte de solutos num meio poroso 2D, para uma malha 20x10 subdivisões. ( $t = 4$ dias, $Pe = 0,05$ ). . . . .	83
5.38	Contorno de concentração do soluto traçador obtido usando os métodos <i>FOU-MPFA-D</i> , para o problema de transporte 2D e malha 50x25. ( $t = 4$ dias, $Pe = 0,05$ ) . . . . .	83
5.39	Contorno de concentração do soluto traçador obtido usando os métodos <i>MUSCL-MPFA-D</i> , para o problema de transporte 2D e malha 50x25. ( $t = 4$ dias, $Pe = 0,05$ ). . . . .	84
5.40	Perfil da concentração obtido na simulação do problema de transporte de solutos num meio poroso 2D, para uma malha 50x25 subdivisões. ( $t = 4$ dias, $Pe = 0,05$ ). . . . .	84
5.41	Contorno de concentração do soluto traçador obtido usando os métodos <i>FOU-MPFA-D</i> , para o problema de transporte 2D e razão de dispersividade ( $r = 1$ , $t = 2$ dias, $Pe = 0,05$ ). . . . .	86
5.42	Contorno de concentração do soluto traçador obtido usando os métodos <i>MUSCL-MPFA-D</i> , para o problema de transporte 2D e razão de dispersividade ( $r = 1$ , $t = 2$ dias, $Pe = 0,05$ ) . . . . .	86
5.43	Contorno de concentração do soluto traçador obtido usando os métodos <i>FOU-MPFA-D</i> , para o problema de transporte 2D e razão de dispersividade ( $r = 10$ , $t = 2$ dias, $Pe = 0,05$ ) . . . . .	86
5.44	Contorno de concentração do soluto traçador obtido usando os métodos <i>MUSCL-MPFA-D</i> , para o problema de transporte 2D e razão de dispersividade ( $r = 10$ , $t = 2$ dias, $Pe = 0,05$ ). . . . .	87
5.45	Contorno de concentração do soluto traçador obtido usando os métodos <i>FOU-MPFA-D</i> , para o problema de transporte 2D e razão de dispersividade ( $r = 100$ , $t = 2$ dias, $Pe = 0,05$ ). . . . .	87
5.46	Contorno de concentração do soluto traçador obtido usando os métodos <i>MUSCL-MPFA-D</i> , para o problema de transporte 2D e razão de dispersividade ( $r = 100$ , $t = 2$ dias, $Pe = 0,05$ ). . . . .	87
5.47	Perfil da concentração obtido na simulação do problema de transporte de solutos num meio poroso 2D com razão dispersividade não unitária. ( $t = 2$ dias, $Pe = 0,05$ ). . . . .	88
5.48	Contorno de concentração do soluto traçador obtido usando os métodos <i>FOU-MPFA-D</i> , para o problema de transporte 2D e malha 20x10. ( $t = 2$ dias, $Pe = 50$ ). . . . .	90
5.49	Contorno de concentração do soluto traçador obtido usando os métodos <i>MUSCL-MPFA-D</i> , para o problema de transporte 2D e malha 20x10. ( $t = 2$ dias, $Pe = 50$ ). . . . .	90
5.50	Contorno de concentração do soluto traçador obtido usando os métodos <i>FOU-MPFA-D</i> , para o problema de transporte 2D e malha 20x10. ( $t = 4$ dias, $Pe = 50$ ). . . . .	91

5.51	Contorno de concentração do soluto traçador obtido usando os métodos <i>MUSCL-MPFA-D</i> , para o problema de transporte 2D e malha 20x10. ( $t = 4$ dias, $Pe = 50$ ). . . . .	91
5.52	Contorno de concentração do soluto traçador obtido usando os métodos <i>FOU-MPFA-D</i> , para o problema de transporte 2D e malha 20x10. ( $t = 6$ dias, $Pe = 50$ ). . . . .	91
5.53	Contorno de concentração do soluto traçador obtido usando os métodos <i>MUSCL-MPFA-D</i> , para o problema de transporte 2D e malha 50x25. ( $t = 6$ dias, $Pe = 50$ ). . . . .	92
5.54	Perfis de concentração do soluto traçador obtidos usando os métodos <i>FOU-MPFA-D</i> e <i>MUSCL-MPFA-D</i> , para o problema de transporte 2D e malha 20x10. $Pe = 50$ . . . . .	92
5.55	Contorno de concentração do soluto traçador obtido usando os métodos <i>FOU-MPFA-D</i> , para o problema de transporte 2D e malha 50x25 ( $t = 2$ dias, $Pe = 50$ ). . . . .	93
5.56	Contorno de concentração do soluto traçador obtido usando os métodos <i>MUSCL-MPFA-D</i> , para o problema de transporte 2D e malha 50x25 ( $t = 2$ dias, $Pe = 50$ ). . . . .	94
5.57	Contorno de concentração do soluto traçador obtido usando os métodos <i>FOU-MPFA-D</i> , para o problema de transporte 2D e malha 50x25 ( $t = 4$ dias, $Pe = 50$ ). . . . .	94
5.58	Contorno de concentração do soluto traçador obtido usando os métodos <i>MUSCL-MPFA-D</i> , para o problema de transporte 2D e malha 50x25 ( $t = 4$ dias, $Pe = 50$ ). . . . .	94
5.59	Contorno de concentração do soluto traçador obtido usando os métodos <i>FOU-MPFA-D</i> , para o problema de transporte 2D e malha 50x25 ( $t = 6$ dias, $Pe = 50$ ). . . . .	95
5.60	Contorno de concentração do soluto traçador obtido usando os métodos <i>MUSCL-MPFA-D</i> , para o problema de transporte 2D e malha 50x25 ( $t = 6$ dias, $Pe = 50$ ). . . . .	95
5.61	Perfis de concentração do soluto traçador obtidos usando os métodos <i>FOU-MPFA-D</i> e <i>MUSCL-MPFA-D</i> , para o problema de transporte 2D e malha 50x25. . . . .	96
5.62	Esquema de um meio isotrópico heterogêneo com uma fonte a montante para o problema de transporte bidimensional de um soluto traçador. . . . .	97
5.63	Malha triangular nãoestruturada usada na discretização espacial para o problema de transporte em meios heterogêneos 2D. Malha 30x20. . . . .	98
5.64	Perfil de pressão para o problema de escoamento de um soluto traçador num meio poroso heterogêneo. . . . .	99
5.65	Perfil de concentração para o problema de escoamento de um soluto traçador num meio poroso heterogêneo 2D, obtido pelos métodos <i>FOU-MPFA-D</i> , $t = 3$ dias. . . . .	99
5.66	Perfil de concentração para o problema de escoamento de um soluto traçador num meio poroso heterogêneo 2D, obtido pelos métodos <i>MUSCL-MPFA-D</i> , $t = 3$ dias. . . . .	100
5.67	Perfil de concentração para o problema de escoamento de um soluto traçador num meio poroso heterogêneo 2D, obtido pelos métodos <i>MUSCL_Woodfield-MPFA-D</i> , $t = 3$ dias. . . . .	100

## Lista de Tabelas

5.1	Avaliação da acurácia para o problema de transporte 1D, do problema dispersivo dominante. . . . .	60
5.2	Avaliação da acurácia para o problema de transporte 1D, do problema advectivo dominante. . . . .	65
5.3	Avaliação da acurácia para o problema de transporte 1D, do problema de decaimento radioativo. $\gamma = 0,02 \text{ dia}^{-1}$ . . . . .	72
5.4	Avaliação da acurácia para o problema de transporte 1D, do problema de decaimento radioativo. $\gamma = 0,05 \text{ dia}^{-1}$ . . . . .	73
5.5	Avaliação da acurácia para o problema de transporte 1D, do problema de decaimento radioativo . $\gamma = 0,5 \text{ dia}^{-1}$ . . . . .	74
5.6	Erros obtidos para o problema de transporte de um soluto traçador a partir de um pulso transiente localizada a montante. Malha 50x25. . . . .	93
5.7	Erros obtidos para o problema de transporte de um soluto traçador a partir de um pulso transiente localizada a montante. Malha 50x25. . . . .	96

# Nomenclatura

## Acrônimos e siglas

CV	Control Volume
EMPFA	Enriched Multipoint Flux Approximation
EOR	Enhanced Oil Recovery
FCA	Flux Continuous Approximations
MDF	Método das Diferenças Finitas
MEF	Método dos Elementos Finitos
MEFM	Método dos Elementos Finitos Mistos
MPFA	Multi-Point Flux Approximation
MPFA-D	Diamond-Multipoint Flux Approximation
MVF	Método dos Volumes Finitos
REV	Volume elementar representativo
TPFA	Two Point Flux Approximation

## Símbolos Latinos

$\frac{\partial \vec{u}}{\partial y}$	Gradiente de velocidade normal à superfície no eixo y
$\nabla p_i$	gradiente de pressão na fase i
$\nabla Z$	gradiente da coordenada Z na direção de g
$\Delta h$	Diferença da cota do fluido entre as duas extremidades do canal
$\tilde{K}$	Tensor de permeabilidade
$\tilde{T}$	Tensor de transmissibilidade
$\tilde{D}_{dif}$	Tensor de difusão molecular efetivo

---

$\vec{D}_{dis}$	Tensor de dispersão mecânica efetivo
$\vec{D}_{hid}$	Tensor de dispersão hidrodinâmica
$\underline{I}$	Tensor identidade
$\vec{f}_{adv}$	Fluxo advectivo
$\vec{f}_{dif}$	Fluxo difusivo
$\vec{f}_{dis}$	Fluxo de dispersão mecânica
$\vec{f}_{hid}$	Fluxo de dispersão hidrodinâmica
$\vec{n}$	Vetor área unitária
$\vec{v}_i$	Velocidade de Darcy para uma fase $i$
$C_i$	Concentração da solução na fase $i$
$D_0$	Coefficiente de difusão molecular na solução
$D_L$	Coefficiente de dispersão longitudinal
$D_T$	Coefficiente de dispersão transversal
$g$	Magnitude de aceleração da gravidade
$i$	Fase $i$ = óleo (o), água (w) ou soluto (s)
$Q$	Vazão volumétrica específica total
$q_c$	Termos de fonte ou sumidouros
$Q_i$	Vazão volumétrica específica na fase $i$
$q_i$	Termos de fonte e sumidouros para a fase $i$
$R_d$	Fator de retardamento
$Re$	Número de Reynolds
$S_w$	Saturação para fase água
$SG_F$	Gravidade específica
$t$	Instante de tempo
$V_{Pi}$	Volume dos poros interconectados
$V_P$	Volume dos espaços vazios ou poros

---

$V_S$	Volume dos grãos que compõem a matriz sólida
$V_T$	Volume total da matriz sólida
<b>Símbolos Gregos</b>	
$\alpha_L$	Dispersividade longitudinal
$\alpha_T$	Dispersividade transversal
$\beta$	Coefficiente de distribuição do fluido
$\delta_{ij}, \delta_{xy}$	Deltas de Kronecker
$\Gamma$	Contorno ou fronteira
$\gamma$	Constante de proporcionalidade do decaimento radiativo
$\Gamma_D$	Contorno ou fronteira de Dirichlet
$\Gamma_I$	Contorno ou fronteira dos poços injetores
$\Gamma_N$	Contorno ou fronteira de Neumann
$\Gamma_P$	Contorno ou fronteira dos poços produtores
$\mathcal{T}_{xy}$	Tensão cisalhante
$\mu$	Viscosidade do fluido
$\phi$	Porosidade
$\phi_a$	Porosidade absoluta
$\phi_e$	Porosidade efetiva
$\rho$	Massa específica
$\theta_w$	Fração volumétrica da água
$\tau$	Tensor de tortuosidade
$\underline{\alpha}$	Tensor de dispersividade do meio poroso
$\Omega$	Domínio do problema

---

# Sumário

<b>1</b>	<b>Introdução</b>	<b>3</b>
1.1	Motivação e Considerações Iniciais . . . . .	3
1.2	Objetivos . . . . .	9
1.3	Organização Geral da Dissertação . . . . .	9
<b>2</b>	<b>Conceitos Fundamentais</b>	<b>11</b>
2.1	Introdução . . . . .	11
2.2	Propriedades do Meio Poroso e do Fluido . . . . .	11
2.2.1	Porosidade . . . . .	11
2.2.2	Permeabilidade . . . . .	12
2.2.3	Tortuosidade . . . . .	13
2.2.4	Soluto e Solvente . . . . .	14
2.2.5	Massa Específica, Concentração e Viscosidade . . . . .	14
<b>3</b>	<b>Formulação Matemática</b>	<b>16</b>
3.1	Introdução . . . . .	16
3.2	Escoamento Monofásico de Traçadores em Meios Porosos . . . . .	16
3.2.1	Equação de Conservação da Massa . . . . .	16
3.2.2	Lei de Darcy . . . . .	18
3.2.3	Equação da Pressão . . . . .	19
3.2.4	Transporte Advectivo . . . . .	19
3.2.5	Lei de Fick . . . . .	20
3.2.6	Transporte Dispersivo . . . . .	21
3.2.7	Decaimento Radiativo . . . . .	23
3.2.8	Equação de Advecção-Dispersão-Reação ( <i>ADRE</i> ) . . . . .	24
<b>4</b>	<b>Formulação Numérica</b>	<b>29</b>
4.1	Introdução . . . . .	29
4.2	Método dos Volumes Finitos . . . . .	30
4.2.1	Discretização da Equação de Advecção-Dispersão-Reação . . . . .	31
4.2.2	Discretização do Fluxo Dispersivo pelo Método MPFA-D . . . . .	33

---

4.2.3	Tratamento dos Fluxos nas Faces de Contorno . . . . .	39
4.2.4	Discretização do Fluxo Advectivo . . . . .	43
4.2.5	Cálculo Implícito da Pressão . . . . .	48
4.2.6	Formulação Explícita da Equação de Advecção-Dispersão-Reação .	49
4.3	Avaliação de Acurácia dos Métodos Numéricos . . . . .	51
<b>5</b>	<b>Resultados Numéricos</b>	<b>53</b>
5.1	Transporte Unidimensional de Solutos Traçadores em Meios Porosos . . . .	53
5.1.1	Problema Fortemente Dispersivo . . . . .	55
5.1.2	Problema Fortemente Advectivo . . . . .	61
5.1.3	Transporte Unidimensional de Solutos Traçadores em Meios Porosos com Termo de Decaimento Radioativo . . . . .	68
5.2	Transporte Bidimensional de Solutos Traçadores em Meios Porosos . . . .	75
5.2.1	Transporte de Solutos Traçadores num Meio Poroso com uma Fonte Contínua a Montante . . . . .	75
5.2.2	Transporte de Solutos Traçadores num Meio Poroso com Razão de Dispersão Hidrodinâmica Não-Unitária . . . . .	85
5.2.3	Transporte de Solutos Traçadores a Partir de Um Pulso Transiente Localizada a Montante . . . . .	88
5.2.4	Transporte de Solutos Traçadores em Meios Heterogêneos e Disper- são Hidrodinâmica Isotrópica . . . . .	96
<b>6</b>	<b>Conclusões e trabalhos futuros</b>	<b>102</b>
	<b>Referências</b>	<b>104</b>

---

# Capítulo 1

## Introdução

### 1.1 Motivação e Considerações Iniciais

O estudo dos escoamentos em meios porosos como uma ciência remonta a meados do Século XIX, quando Darcy (1856) estabeleceu os fundamentos de fluxo em meios porosos e, assim, abriu o caminho para a análise racional (estudos com quantidades que podem ser medidas). A abordagem utilizada naquela época era praticamente empírica, e foi gradualmente substituída por modelos teóricos dos fenômenos e processos físicos envolvidos. Neste ponto de vista, o desenvolvimento foi caracterizado pelo melhoramento dos métodos e técnicas de laboratório, para assim fornecer uma visão mais detalhada sobre problemas teóricos gerais, cujas descrições estavam disponíveis no momento (Hálek and Švec, 2011).

Com o surgimento e desenvolvimento dos computadores, métodos numéricos passaram a ter uma grande participação no estudo de muitas áreas da engenharia e outras ciências, como por exemplo, na análise de reservatório de petróleo. Assim, os métodos de laboratório abriram espaço às novas ferramentas de pesquisa (Chen, 2007). Obviamente que a maneira mais confiável é a realização de um teste de campo e observar diretamente o estado do reservatório. Infelizmente, isso não é realista porque o teste de campo não pode prever o que vai acontecer no futuro além de precisar de uma grande quantidade de tempo e ser economicamente caro, comparado às abordagens numéricas (Sun, 1996). Segundo Chen (2007), o principal objetivo da simulação do reservatórios é prever o desempenho futuro do reservatório e encontrar técnicas para melhorar a recuperação dos hidrocarbonetos para diferentes condições de operação.

A primeira motivação para a simulação numérica de escoamentos em meios porosos é a obtenção do correto entendimento dos fenômenos físicos e químicos associados ao reservatório, de modo a otimizar a recuperação dos hidrocarbonetos (Ewing, 1984). Modelos matemáticos têm muitas vantagens em comparação com os estudos experimentais, eles podem analisar estruturas físicas complexas e formas geométricas irregulares de um sistema, flexíveis e de fácil uso, e eles podem descrever não só os fenômenos de escoamento

em meios porosos, mas também os transportes de massa e energia (Samper, 1995) e outros fenômenos físico-químico-biológicos complexos em meios porosos, como o transporte de poluentes em águas subterrâneas. Portanto, a modelagem matemática tornou-se a principal ferramenta de estudos nesta área (Bear and Verruijt, 1987; Sun, 1996; Todd and Mays, 2005; Chen, 2007; Konikow and Glynn, 2013).

A análise de deslocamentos miscíveis de traçadores de fluxo é de grande interesse em diferentes áreas da engenharia tais como a produção de óleo e gás, a recuperação melhorada de óleo (*Enhanced-Oil-Recovery EOR*), o estudo da poluição de águas subterrâneas, a evacuação de resíduos nucleares e da recuperação de  $CO_2$  (Stalgorova et al., 2012; Maliska, 1994a; Dugstad et al., 2013). Na engenharia de reservatórios, os traçadores têm sido usados na obtenção de informação qualitativa do meio poroso tais como a presença de barreiras, de escoamento de fluxo preferencial, de caminhos de ligação entre reservatórios, e estudos traçadores em poços internos (*Inter-Well Tracer Test IWTT*), entre outros (Rocamora Jr et al., 2003; Nunez et al., 2012; Huseby et al., 2013).

Em geral, muitos dos reservatórios são anisotrópicos e heterogêneos e o escoamento do fluido vai ter direções preferenciais. Porém, as características do reservatório são em geral complexas, podendo existir falhas selantes, camadas estratificadas inclinadas, fontes de perda de massa, canais, barreiras geológicas, ou a existência de poços inclinados que são cada vez mais utilizados na indústria petrolífera.

Essas falhas geológicas, por exemplo, podem gerar grandes discontinuidades em propriedades físicas como porosidade e permeabilidade (Sabag, 2008; Valdez, 2011; Carvalho, 2005; Ewing, 1984; Koplík et al., 1994), ou incertezas no comportamento do escoamento do fluido. É por isso que são introduzidas substâncias traçadoras na simulação dos reservatórios de petróleo para assim caracterizar adequadamente o sistema de interesse, além de propiciar informação sobre o comportamento de deslocamento do fluido. Outra característica importante é o fato que o traçador não afeta as propriedades do fluido que reside no reservatório (Lie et al., 2015; Gurevich et al., 2013; Viera et al., 2012; Bjornstad et al., 1990; Boving and Grathwohl, 2001; Perez, 2006; Nunez et al., 2012).

Para modelar corretamente a equação de transporte do traçador é necessário ter uma formulação adequada das equações de conservação que descrevem o comportamento do soluto traçador, assim como métodos numéricos apropriados. No estudo de comportamento dos traçadores a precisão numérica é particularmente importante sobretudo quando a injeção deles é apenas efetuada em pulsos curtos, i.e, são injetados, em geral, em pequenos intervalos de tempo e pequenas regiões em comparação com as dimensões utilizadas na simulação do reservatório (Huseby et al., 2013; Maliska, 1994a).

A equação de Advecção-Dispersão-Reação (*Advection-Dispersion-Reaction Equation-ADRE*) é a equação que governa o escoamento de solutos traçadores (Sun, 1996). A modelagem desta equação é tradicionalmente feita pelo método de aproximação de diferenças finitas-MDF (*Finite Difference Method-FDM*) (Peaceman, 1977; Ertekin et al., 2001; Carvalho, 2005) a partir da expansão das equações diferenciais em séries de Tay-

lor com um erro de truncamento adequado. Este tipo de aproximação é muito simples de entender e de fácil implementação computacional e está tradicionalmente associado à resolução de problemas com malhas estruturadas. Além disso, o método é extremamente econômico do ponto de vista computacional (Hirsch, 2007). Porém, MDF tem limitações graves para tratar problemas com geometrias mais complexas além de não ser adequada a utilização de malhas não-estruturadas (Carvalho, 2005; Chen et al., 2006; Ferziger and Perić, 2002), como no método dos elementos finitos-MEF (*Finite Element Method-FEM*) ou no método dos volumes finitos-MVF (*Finite Volume Method-FVM*) (Contreras, 2012; Carvalho, 2005; Maliska, 1994b).

O MVF usa a forma integral das equações de conservação (massa, energia e momento) como seu ponto de partida (Ferziger and Perić, 2002; Maliska, 1994b; Eymard et al., 2000; Contreras, 2012). O domínio é subdividido em um número finito de volumes de controle contíguos VC (*Control Volume-CV*) e as equações de conservação são aplicadas a cada VC. Numa formulação tipo “*Cell Centered*”, associa-se em geral, ao centroide de cada VC nó computacional, os valores médios das variáveis calculadas (Carvalho, 2005). Este método é muito popular na área de engenharia e física computacional pois é fácil de implementar e pode ser usado para malhas não-estruturadas, de modo que é apropriado para geometrias complexas (Contreras, 2012).

Diferentes métodos têm sido desenvolvidos na simulação da Equação de *ADRE*. Alguns dos primeiros modelos propostos para a solução numérica da *ADRE* foram desenvolvidos por Peaceman (1977), Voss (1984), Nofziger et al. (1989), Healy (1990) e Yeh et al. (1993). Rao and Hathaway (1989), apresentam um modelo de transporte utilizando o conceito de célula de mistura, substituindo a dispersão física por uma dispersão artificial. Yeh et al. (1993), desenvolvem um modelo baseado na técnica de elementos finitos de Galerkin, afirmando que, se o problema é advectivo dominante, os métodos numéricos comuns geralmente produzem uma grande dispersão numérica e oscilação perto de gradientes acentuados. Maliska (1994a) propõe um FVM utilizando uma discretização de malhas de tipo Voronoi, fazendo uso de um esquema híbrido na interpolação da concentração nas interfaces do CV. Yu and Singh (1995) modelam um soluto fazendo uso do método de elementos finitos melhorado (“*Improved Finite-Element Method*”) e descrevem que os métodos de Galerkin estão sujeitos à oscilação e a dispersão numéricas devido a um erro na continuidade do fluxo do soluto nas regiões dominadas pela advecção. Li (1996), desenvolveu um modelo unidimensional a partir de uma formulação que denominou “esquema de características de quarta ordem de seis pontos” (*6P4O*), baseado no método das diferenças finitas e no método das linhas características. O modelo tinha uma boa precisão mas, apresentava problemas de oscilação numérica e foi necessário o uso de um limitador de fluxo. Sun (1996) e Kovarik (2000), apresentam a discretização da *ADRE* fazendo uso dos métodos de diferenças finitas e elementos finitos. Hossain and Yonge (1997) estudaram o método dos elementos finitos para um meio saturado, usando o método de Galerkin comum, o método de Petrov-Galerkin e o método de Galerkin característico.

O método de Petrov-Galerkin apresentou resultados livres de oscilações, mas com maior dispersão numérica. Os métodos de Galerkin comum e característico apresentaram dispersão e oscilação numéricas. Siegel et al. (1997) apresentam uma simulação da equação de Advecção-Difusão usando uma combinação de elementos finitos mistos (*Mixed Finite Element Method-MFEM*) e elementos finitos descontínuos. A mistura de compostos reativos dissolvidos em meios porosos foram estudados por Kapoor et al. (1997), Raje and Kapoor (2000) e Gramling et al. (2002). Viswanathan et al. (1998) usaram o *Finite Element Heat and Mass Transfer Code (FEHM)* para modelar o transporte de um soluto radiativo. Wu and Pruess (2000) modelam um soluto traçador num meio poroso heterogêneo fraturado fazendo uso de uma formulação numérica para fluidos acoplados com fluxos de calor para fluidos multicomponente em meios porosos e meios fraturados. Rocamora Jr et al. (2003) apresentam uma simulação de um traçador escoando num meio heterogêneo, baseado na teoria da decomposição double para fluidos turbulentos em meios porosos proposto por Pedras and de Lemos (2001). Rees et al. (2004) modelaram a *ADRE* baseado num esquema de volumes finitos centrado na face para fluidos saturados e não-saturados, e esse esquema é capaz de lidar com parâmetros de material altamente não-lineares e de forma eficiente. O estudo foi realizado empregando uma discretização tipo estêncil compacto. Lewis et al. (2006) apresentam a simulação de um traçador acoplado e não-acoplado, fazendo uso de um método de volumes finitos clássico, centrado no vértice e um método de volumes finitos de tipo estêncil compacto.

Na simulação de solutos traçadores em meios porosos há ainda o trabalho de Rubio et al. (2008) onde os autores resolvem a equação de transporte de solutos em meios porosos reativos biomoleculares de reação rápida e lenta, fazendo uso do algoritmo de Damköhler (relação entre a influência de convecção na taxa de reação) para duas escalas de passo de tempo de simulação. Sesini et al. (2010) fizeram estudos de simulação utilizando elementos finitos estabilizados (*Stabilized Finite Element*) em problemas de viscosidades lineares e não lineares em escoamentos miscíveis com alta mobilidade e dispersão anisotrópica, discretizando a equação da pressão pelo método de Galerkin. Valocchi and Malmstead (2010) estudaram a acurácia de um operador “*splitting*” para problemas de Advecção-Dispersão-Reação. Operacionalmente, esta abordagem avança a solução através de um único passo de tempo em duas etapas, uma envolvendo a solução da equação advecção-dispersão sem termos de reação e na outra etapa, obtêm a solução das equações dos termos de reação. Huyakorn (2012) apresenta esquemas que são baseados em malhas estruturadas fazendo uso do método dos elementos finitos. Nunez et al. (2012) propõem o método de elementos finitos híbrido misto (*hybrid/mixed finite element method-HMFEM*), onde a modelagem da velocidade de escoamento do soluto traçador (equação da pressão) é feita usando um método estabilizado dual híbrido misto (*Stabilized Dual Hybrid Mixed-SDHM*) e a aproximação espacial na *ADRE* é feita considerando um método de elementos finitos estabilizado (*Stabilized Finite Element Method SUPG*). Finalmente Soltanian et al. (2015) propõem um modelo de transporte de solutos baseado num modelo de transporte

lagrangeano.

Muitos dos métodos anteriormente mencionados na simulação da Equação de Advecção-Dispersão-Reação são aplicados na modelagem de águas subterrâneas, porém, só os modelos mais recentes são aplicados na modelagem de reservatórios de petróleo. Depois de fazer a pesquisa bibliográfica, percebe-se que o estudo de solutos traçadores aplicado à engenharia de reservatórios de petróleo fazendo uso dos MVF são relativamente pouco usados.

Como é mencionado por Yeh et al. (1993) e Nunez et al. (2012), quando a equação de transporte do soluto traçador no meio poroso apresenta um fluxo advectivo dominante, os métodos numéricos clássicos produzem uma grande dispersão numérica e existem muitas dificuldades tais como aproximação da solução em regiões de gradientes elevados e efeitos de orientação de malhas. É por isto que métodos que forneçam uma solução mais acurada sem perda das propriedades físicas no modelo numérico devem ser estudados. Quando são implementadas aproximações de primeira ordem para os termos advectivos na *ADRE* sua robustez e simplicidade de implementação justificam o uso, mas a baixa resolução das soluções pode ser um problema na solução com malhas distorcidas e em meios porosos muito heterogêneos e anisotrópicos (Souza, 2015).

Embora a concentração seja a variável de maior interesse na resolução deste sistema miscível acoplado, a aproximação da concentração depende diretamente do campo de velocidade aproximado, que é responsável pelo deslocamento do soluto (Nunez et al., 2012). Esse fato é outra motivação para buscar um método numérico eficiente e preciso para o cálculo do campo de velocidade, reduzindo assim imprecisões na obtenção da concentração.

Finalmente, existem diferentes famílias e variantes de métodos de volumes finitos cada vez mais robustos e eficientes que ajudam a melhorar a acurácia na simulação numérica de escoamentos em meios porosos. Alguns destes métodos são o *Multi-Point Flux Approximation (MPFA)* também conhecidos como aproximações com fluxo contínuo ou “*Flux Continuous Approximations*” (*FCA*) e as variantes denominadas: *Enriched Multipoint Flux Approximation (EMPFA)* (Poceski, 2012; Azevedo, 2003; Aavatsmark et al., 1998; Aavatsmark, 2002; Carvalho, 2005; Aavatsmark et al., 2008).

Crumpton et al., (1995) propuseram um método para lidar com tensores não-diagonais e coeficientes descontínuos, capaz de reproduzir soluções lineares por partes a partir de uma aproximação de dois pontos (*Two Point Flux Approximation-TPFA*). Este método é simples e robusto mas não é consistente em malhas quaisquer. Aavatsmark et al., (1995) propuseram independentemente de Crumpton uma aproximação de fluxos por múltiplos pontos (*MPFA*), onde é imposta a continuidade destes fluxos nas superfícies de controle. Os métodos *MPFA* implicam em maior flexibilidade para lidar em problemas com tensores e malhas arbitrários, mas nem sempre garantem monotonicidade, sendo eles, uma generalização dos métodos *TPFA*. Depois de serem fundamentados os métodos *MPFA*, apareceram algumas variantes como os métodos *MPFA-O*, *MPFA-U* ou *MPFA-A* clás-

sicos (Aavatsmark et al., 1998; Aavatsmark, 2002), que em princípio podiam produzir resultados violando o princípio do máximo discreto (*Discrete Maximum Principle-DMP*) em malhas fortemente distorcidas, mas foram corrigidos, gerando assim, resultados onde as oscilações espúrias são minimizadas (Souza, 2015). O método *EMPPFA* formulado por Quian-Yong et al., (2008) nasceu como uma alternativa para resolver problemas garantindo monotonicidade em meios fortemente anisotrópicos e heterogêneos.

Gao and Wu (2011) propõem uma formulação de fluxo centrada na célula para equações de difusão anisotrópica e heterogêneas em malhas quaisquer, que é adotada por Contreras (2012) no estudo de escoamentos bifásicos no interior dos reservatórios de petróleo conhecida como “*Multipoint Flux Approximation with a Diamond Stencil-MPFA-D*”). O *MPFA-D* apresenta uma aproximação das vazões na superfície de controle usando múltiplos pontos em uma disposição geométrica similar à geometria de um diamante lapidado, i.e., para derivar as vazões na interface do volume de controle (VC), se constrói um sub-volume de controle especial tipo um diamante em 3-D, chamado *Diamond-Cell* e são usados pesos explícitos que são derivados respeitando o critério de linearidade a partir das interpolações nos vértices. Outra característica é que este método é capaz de reproduzir soluções lineares por partes e não depende do tipo de malha ou da heterogeneidade do meio. Por causa da descrição anterior, foi escolhido este tipo de método na discretização da equação *ADRE*.

Para a discretização do termo advectivo dominante, a fim de eliminar a dispersão numérica produzida em regiões de gradientes elevados, é possível utilizar técnicas de reconstrução de alta ordem como o “*Monotone Upstream Scheme for Conservation Laws*” (*MUSCL*) que podem ser adaptadas em malhas estruturadas e não-estruturadas, em problemas de transporte de fluidos em meios porosos (Carvalho, 2005).

A contribuição do presente trabalho é fazer uso do método *MPFA-D* (Multipoint Flux Approximation with a Diamond Stencil) formulado por Gao and Wu (2011) e adotado por Contreras (2012), a fim de simular a equação de Advecção-Dispersão-Reação-ADRE que descreve o escoamento da concentração de um soluto traçador num meio poroso anisotrópico e heterogêneo. Na discretização dos termos elípticos da equação da pressão e da ADRE, será utilizada a formulação *MPFA-D* e na discretização dos termos hiperbólicos da ADRE é usada uma aproximação de primeira ordem *Upwind* (*First Order Upwind-FOU*) e um esquema de alta ordem tipo *MUSCL* (*Monotone Upstream Centered Scheme for Conservation Laws*), usando malhas poligonais.

A discretização temporal da equação de concentração do soluto traçador foi feita pelo método de Euler Explícito (*Explicit Euler Method-EEM*). A fim de avaliar a convergência do método, são testados alguns problemas apresentados na literatura.

## 1.2 Objetivos

A presente dissertação tem como objetivo geral a simulação numérica da Equação de Advecção-Dispersão-Reação (*ADRE*) que descreve o transporte de um soluto traçador injetado num meio poroso, heterogêneo e anisotrópico, saturado por um fluido, por meio de um Método de Volumes Finitos centrado na célula, utilizando malhas poligonais.

### Objetivos Específicos

- Implementar um programa escrito na linguagem Matlab utilizando um método de volumes finitos centrado na célula em malhas não-estruturadas capaz de simular numericamente o escoamento em meios porosos heterogêneos e anisotrópicos.
- Testar a formulação implementada em exemplos existentes na literatura e verificar sua eficiência e robustez, incluindo problemas com malhas triangulares não estruturadas, meios anisotrópicos e heterogêneos envolvendo termos de fonte ou sumidouros.

## 1.3 Organização Geral da Dissertação

O presente trabalho foi dividido em 6 capítulos, além da bibliografia e de um apêndice. No presente capítulo foi feita uma breve introdução, foram apresentados a motivação para a realização deste trabalho, os objetivos e a contribuição aportada na investigação.

No Capítulo Dois, são apresentados alguns dos conceitos dos parâmetros relacionados com as propriedades da rocha e do fluido.

No Capítulo Três, é apresentada a formulação matemática para o problema físico de interesse, suas respectivas leis e equações fundamentais (Equação da pressão, Equação da concentração).

No Capítulo Quatro é apresentada a formulação numérica da equação de concentração ou equação de transporte de solutos traçadores em meios porosos fazendo uso de um método de volumes finitos centrado na célula. São apresentadas as discretizações do fluxo dispersivo e da velocidade de escoamento do fluido usando o método *MPFA-D*, depois é apresentada a discretização do fluxo advectivo usando uma aproximação de primeira ordem de tipo *upwind* (*FOU*), e um esquema de aproximação de alta ordem tipo *MUSCL* de segunda ordem, e por último, é descrita a equação de concentração explícita no tempo.

No Capítulo Cinco, são resolvidos alguns problemas que envolvem o transporte de solutos traçadores em meios porosos homogêneos, heterogêneos, isotrópicos e anisotrópicos, para problemas de tipo dispersivo dominante, problemas advectivos dominantes, advectivos-dispersivos e com termos de fonte, com o objetivo de validar a formulação proposta.

No Capítulo Seis, são apresentadas as conclusões e contribuições do presente trabalho e algumas recomendações para pesquisas futuras.

Finalmente, é apresentada a bibliografia utilizada durante o desenvolvimento deste trabalho de pesquisa.

## Capítulo 2

# Conceitos Fundamentais

### 2.1 Introdução

Neste capítulo são apresentados alguns dos conceitos relacionados com as propriedades da rocha e do fluido. Todas as variáveis e parâmetros no presente capítulo são assumidos como quantidades macroscópicas. A rocha e os fluidos são isotérmicos, incompressíveis e não reagem entre si. Além disso, os efeitos da gravidade e capilaridade são desprezados.

### 2.2 Propriedades do Meio Poroso e do Fluido

#### 2.2.1 Porosidade

Num meio saturado, a matriz sólida é composta por um conjunto de grãos muito próximos uns dos outros deixando certos espaços vazios interconectados ou não, ocupados por líquidos e gases; o fluido escoar através dos espaços vazios interligados. Estes pequenos espaços vazios e passagens que estão presentes no meio permitem definir a porosidade (Everett and Stone, 1958; Mason, 1988; Sun, 1996; Delleur Jacques, 1999; Dullien, 2012). A porosidade é uma propriedade da matriz porosa relacionada com a capacidade de armazenamento do fluido, i.e., é a relação entre o volume de vazios e o volume total da rocha (Bear, 1972; Kovarik, 2000; Ertekin et al., 2001; Vafai, 2005; Rosa and Carvalho, 2006; Hálek and Švec, 2011; Contreras, 2012), dada por:

$$\phi = \frac{V_P}{V_T} = \frac{V_P}{V_P + V_S} \quad (2.1)$$

sendo  $\phi$  a porosidade,  $V_P$  o volume dos espaços vazios ou poros,  $V_T$  o volume total da matriz sólida e  $V_S$  o volume dos grãos que compõem a matriz sólida. Neste trabalho foi considerado que todos os poros estão interconectados (Fanchi, 2005). Quando considerarmos que o volume dos poros  $V_P$  é igual ao volume dos poros interconectados  $V_{P_i}$  somado

com o volume daqueles que não estão interconectados, a porosidade é chamada de *porosidade total* ou *porosidade absoluta*  $\phi_a = V_P/V_T$ . Quando é considerado apenas o volume dos poros interconectados  $V_{Pi}$ , a porosidade é chamada *porosidade efetiva*  $\phi_e = V_{Pi}/V_T$  (Bear, 1972).

### 2.2.2 Permeabilidade

A permeabilidade  $\tilde{K}$  é uma propriedade que caracteriza a capacidade de, o meio poroso transportar um fluido (Bear, 1972; Wanderley and Hídricos, 2000; Chen et al., 2006; Dullien, 2012). Ela é uma propriedade intrínseca do meio poroso e depende do tamanho dos poros e da intercomunicação entre eles. O seu valor em geral é mais alto para meios de granulometria grossa e mais baixo para meios de granulometria fina (Wanderley and Hídricos, 2000; Batul, 2005; Todd and Mays, 2005). Quando o meio é saturado por uma única fase, a permeabilidade é chamada permeabilidade absoluta (Helmig, 1997; Kovarik, 2000; Carvalho, 2005; Contreras, 2012). Em geral, esta propriedade é representada por um tensor de permeabilidade:

$$\tilde{K} = \begin{bmatrix} k_{xx} & k_{xy} & k_{xz} \\ k_{yx} & k_{yy} & k_{yz} \\ k_{zx} & k_{zy} & k_{zz} \end{bmatrix} \quad (2.2)$$

Para meios ortotrópicos a permeabilidade é reduzida a um tensor diagonal (Bear, 1972), i.e.:

$$\tilde{K} = \begin{bmatrix} k_{xx} & 0 & 0 \\ 0 & k_{yy} & 0 \\ 0 & 0 & k_{zz} \end{bmatrix} \quad (2.3)$$

No caso isotrópico a permeabilidade é representada por um escalar multiplicado pela matriz identidade. As rochas sedimentares têm alta porosidade, ao contrário das rochas cristalinas, mas nem todas possuem alta permeabilidade. Na maioria dos casos, as argilas têm poros tão pequenos que não deixam passar fluido, sendo por isso consideradas praticamente impermeáveis; outras rochas sedimentares, como os arenitos e areias não-consolidadas, possuem tanto porosidade quanto permeabilidade elevadas (Capucci et al., 2001). Diferentes modelos de permeabilidade estão descritos em Dullien (2012).

### 2.2.3 Tortuosidade

A tortuosidade é um dos principais parâmetros que descrevem as propriedades geométricas e de transporte de meios porosos (Bear, 1972; Matyka et al., 2008; Matyka and Koza, 2012; Dullien, 2012). No nível microscópico, o fluido escoar no interior de um meio poroso ao longo das passagens tortuosas tridimensionais nos espaços vazios (Sun, 1996; Boving and Grathwohl, 2001). A noção de tortuosidade foi introduzida por Kozeny (1927) e depois modificada por Carman (1937), que estudou o fluxo através de uma camada de areia, mas a definição da tortuosidade foi publicada por Bear (1972), que observou que os caminhos médios poderiam ser obtidos pela média dos caminhos de todas as partículas do fluido que passam uma determinada seção transversal do meio em um determinado instante de tempo ou durante um determinado período de tempo (Duda et al., 2011).

Um canal é mostrado esquematicamente na Fig. 2.1. A ilustração está colocada de maneira que o eixo do canal está no mesmo plano que a direção do fluxo médio  $x$ . Seu comprimento é  $L_e$  e sua projeção no eixo  $x$  tem um comprimento de  $L$ . Se a magnitude da velocidade do escoamento ao longo do eixo do canal é  $V$ , e a sua projeção sobre o eixo  $x$  é  $u$ , temos:

$$u = V \left( \frac{L}{L_e} \right) \quad (2.4)$$

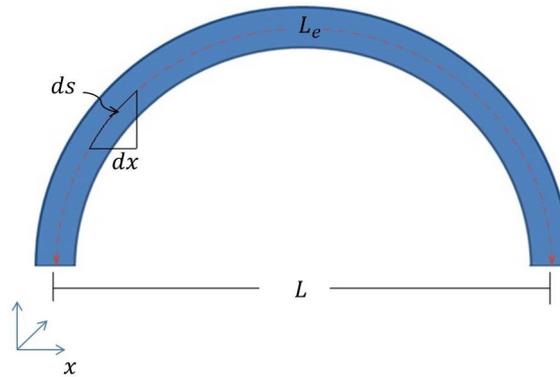
Se  $\Delta h$  é a diferença da cota do fluido entre as duas extremidades do canal, o escoamento médio ao longo do canal vai ser proporcional ao gradiente hidráulico médio, pelo qual  $u$  vai ser definida como:

$$u = -\underset{\sim}{K} \left( \frac{L}{L_e} \right)^2 \frac{\Delta h}{L} = -\underset{\sim}{K} \frac{\Delta h}{L} \underset{\sim}{\tau} \quad (2.5)$$

onde  $\underset{\sim}{K}$  é a permeabilidade e  $\underset{\sim}{\tau}$  é chamada a Tortuosidade do canal. Para um meio poroso isotrópico,  $\underset{\sim}{\tau}$  é um escalar, mas para um meio poroso anisotrópico é um tensor de segunda ordem simétrico, que, para as direções principais (Sun, 1996; Bear, 1972), é dado por:

$$\underset{\sim}{\tau} = \begin{bmatrix} \tau_{xx} & 0 & 0 \\ 0 & \tau_{yy} & 0 \\ 0 & 0 & \tau_{zz} \end{bmatrix} \quad (2.6)$$

Figura 2.1: Ilustração geométrica da tortuosidade num meio poroso.



Fonte: Adaptada de Sun (1996).

### 2.2.4 Soluto e Solvente

Ao adicionar uma substância a outra, se, por exemplo a substância 1 é dissolvida dentro da substância 2, ela é chamada de *soluto* e a substância 2 será conhecida como *solvente* (Raghavan, 1997; Khopkar, 1998; Batul, 2005). Então, quando a quantidade relativa de uma substância numa solução é muito maior do que a quantidade relativa da outra substância, a substância que têm maior quantidade vai ser definida como o solvente e a outra será chamada de soluto. No caso de reservatórios de água subterrânea, a água do reservatório será o solvente e os constituintes inorgânicos e orgânicos dissolvidos serão os solutos. Para um reservatório de petróleo, o óleo será considerado como o solvente e qualquer outra substância injetada no reservatório será o soluto.

### 2.2.5 Massa Específica, Concentração e Viscosidade

A massa específica  $\rho$  ( $M/L^3$ ) é uma propriedade macroscópica definida pela razão entre a quantidade de massa e o volume que ela ocupa. Em geral, ela varia com a pressão  $p$  e a temperatura  $T$ , ou a concentração  $C$  de acordo com as chamadas equações de estado (Bear, 1972). Para sistemas compressíveis simples temos:  $\rho = \rho(p, T)$ ,  $\rho = \rho(p, C)$  ou  $\rho = \rho(C, T)$ .

Batul (2005), define a concentração  $C$  ( $M/L^3$ ) como a massa do soluto dissolvida numa unidade de volume especificado da solução. Ela é convencionalmente expressa por:

$$C = \frac{\Delta m_s}{\phi_e A \Delta x} \quad (2.7)$$

onde  $\Delta m_s$  é massa do soluto que passa através de uma superfície  $A$ , e  $\phi_e$  é porosidade efetiva (Fig. 2.2) (Leij and Toride, 1995; Batul, 2005). Se a densidade da solução é independente da concentração do soluto, é mais conveniente utilizar concentração adimensional

(Sun, 1996; Dunnivant and Anders, 2006).

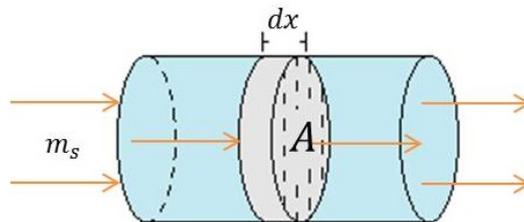
$$c = \frac{C}{\rho} \quad (2.8)$$

A viscosidade do fluido  $\mu$  (M/LT) é uma medida da resistência à deformação contínua do fluido causada pela força de cisalhamento que atua nele. Para fluidos Newtonianos em uma dimensão, obedece à seguinte lei:

$$\mathfrak{T}_{xy} = \mu \frac{\partial \vec{u}}{\partial n}, \quad (2.9)$$

sendo  $\mathfrak{T}_{xy}$  a tensão cisalhante e  $\frac{\partial \vec{u}}{\partial n}$  o gradiente de velocidade normal à superfície. A viscosidade pode ser expressa como função da pressão e da concentração do soluto ( $\mu = \mu(p, C)$ ) (Bear, 1972; Sun, 1996).

Figura 2.2: Esboço para definir a concentração de um fluido .



## Capítulo 3

# Formulação Matemática

### 3.1 Introdução

Neste capítulo são apresentadas as equações fundamentais que regem alguns problemas relacionados com o escoamento monofásico de fluidos em meios porosos saturados considerando condições isotérmicas (Carvalho, 2005; Bear and Cheng, 2010). As equações obtidas estão fundamentadas no princípio de *Conservação da Massa*, na *Lei de Fick* e na *Lei de Darcy*. A formulação matemática é expressa de forma geral e depois é simplificada considerando-se as hipóteses apresentadas anteriormente, para ser resolvida numericamente com as respectivas condições iniciais e de contorno (Cordazzo, 2005; Batul, 2005; Contreras, 2012).

As equações a serem abordadas no presente trabalho podem ser classificadas como equações elípticas, parabólicas ou hiperbólicas de acordo com o conceito de linhas ou superfícies características (Zienkiewicz and Taylor, 1988; Peaceman, 1977; Anderson et al., 1984; Tannehill et al., 1997; Peaceman, 2000; Ferziger and Perić, 2002; Hirsch, 2007; Mönkeberg and Hiptmair, 2012) ou classificadas de acordo com o fenômeno físico que representam, como equações de Difusão, Advecção, Advecção-Dispersão, Advecção-Difusão ou Advecção-Dispersão-Reação, dependendo da relação entre a velocidade e o tipo de fenômeno físico presente (Crank et al., 1975; Lyra, 1994; Fortuna, 2000).

### 3.2 Escoamento Monofásico de Traçadores em Meios Porosos

#### 3.2.1 Equação de Conservação da Massa

Será assumindo um volume elementar cúbico no domínio centrado no ponto  $p(x, y, z)$  de um sistema de coordenadas ortogonal  $x, y, z$ , e cujo volume é  $\Delta x \Delta y \Delta z = \Delta V$  como é mostrado na Fig. 3.1. Considerando o balanço de massa de uma componente  $i$  no volume. A partir do princípio de conservação da massa, a taxa de variação da massa no volume

ao longo do tempo  $\Delta t$  é igual à soma da massa total do fluxo saindo (ou entrando) da componente  $i$  com a produção (ou eliminação) devido às diferentes reações químicas (Sun, 1996).

Fazendo o balanço de massa no limite em que  $\Delta V \rightarrow 0$  e  $\Delta t \rightarrow 0$  temos:

$$\frac{\partial}{\partial x} (\rho_i \vec{v}_{i|x}) dydzdt + \frac{\partial}{\partial y} (\rho_i \vec{v}_{i|y}) dx dzdt + \frac{\partial}{\partial z} (\rho_i \vec{v}_{i|z}) dz dydt - Q_i dV dt = -\frac{\partial (\phi \rho_i)}{\partial t} dV dt \quad (3.1)$$

onde  $\rho_i$  é massa específica do fluido,  $\phi$  é a porosidade,  $\vec{v}_i$  é a velocidade de escoamento do fluido e  $Q_i$  representa os termos de fonte, sumidouros ou outras reações químicas.

Rearranjando os termos tem-se:

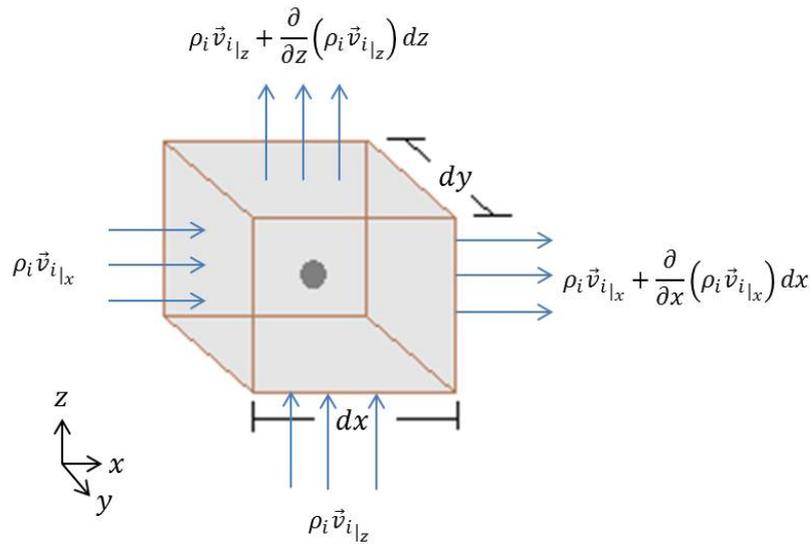
$$\frac{\partial}{\partial t} (\phi \rho_i) = -\nabla \cdot (\rho_i \vec{v}_i) + Q_i \quad (3.2)$$

A Eq. (3.2) é a equação de conservação da massa de uma componente. Fazendo o mesmo procedimento para cada um das componentes no sistema, pode-se obter a equação de conservação da massa para todo o elemento diferencial como:

$$\frac{\partial}{\partial t} (\phi \rho) = -\nabla \cdot (\rho \vec{v}) + Q \quad (3.3)$$

onde  $\rho = \sum_{i=1}^N \rho_i$  e  $\vec{v} = \sum_{i=1}^N \vec{v}_i$  representam a massa específica total e a velocidade de escoamento do fluido de todas as componentes do sistema, respectivamente (Sun, 1996; Chen et al., 2006).

Figura 3.1: Balanço de massa num volume de controle infinitesimal.



Fonte: Adaptada de Sun (1996).

### 3.2.2 Lei de Darcy

A lei de Darcy, proposta em 1856 por Henry Darcy, é uma lei experimental obtida no estudo do escoamento de água em filtros verticais de areia (Bear, 1972; Ewing, 1984; Freeze, 1994; Chen et al., 2006; Bear and Cheng, 2010). Ela também pode ser deduzida a partir das equações de Navier Stokes com diversas considerações físicas simplificadoras (Bear, 1972; Helmig, 1997; Carvalho, 2005). A lei define o conceito de permeabilidade  $\underline{K}$  da rocha (Ewing, 1984; Bear, 1972; Teng and Zhao, 2000; Chen et al., 2006). Desta forma, podemos escrever a velocidade superficial ou velocidade de Darcy  $\vec{v}_i$  para uma fase  $i$  como:

$$\vec{v}_i = -\frac{\underline{K}}{\phi\mu_i} (\nabla p_i - \rho_i g \nabla Z); \quad i = o, s \quad (3.4)$$

onde  $p_i$  é a pressão do fluido,  $\phi$  é a porosidade,  $\mu_i$  é a viscosidade,  $g$  é a magnitude de aceleração da gravidade ( $L/T^2$ ) e  $Z$  é a coordenada na direção de  $\vec{g}$ , ou seja vertical para baixo, e finalmente,  $o, s$  representam o óleo ou solvente e o soluto, respectivamente (Ewing, 1984). A velocidade do fluido seria aquela que um traçador experimenta ao ser transportado pelo fluido através do meio poroso (Bear and Bachmat, 1967).

Experimentos demonstram que a Lei de Darcy só é válida para escoamentos laminares. Neste caso, sua utilização é recomendada para valores de  $Re$  (Reynolds) abaixo de 1, e em casos excepcionais até 10 (Bedient et al., 1994; Cordazzo, 2005; Teng and Zhao, 2000). Qualquer outro tipo de escoamento que não satisfaça esta relação é chamado de *não-*

*Darcyiano* (Irmay, 1958; Ruth and Ma, 1992; Wang et al., 1999).

### 3.2.3 Equação da Pressão

Fazendo uso da equação de conservação da massa e da velocidade de escoamento do fluido para cada componente, temos:

$$\frac{\partial}{\partial t} (\phi \rho_i) = -\nabla \cdot \left[ \rho_i \left( -\frac{\underline{K}}{\phi \mu_i(C)} (\nabla p_i - \rho_i g \nabla Z) \right) \right] + Q_i \quad (3.5)$$

Assumindo-se que a rocha e o fluido são incompressíveis, desprezando os efeitos de capilaridade e gravidade, e tomando a viscosidade e porosidade como constantes e unitárias chegamos a:

$$\nabla \cdot (-\underline{K} \nabla p_i) = Q_T \quad (3.6)$$

definida como a Equação da Pressão, com  $Q_T = Q_i/\rho_i$  representando a vazão volumétrica específica total ( $L^3/T$ ) (Gray, 1975; Ewing, 1984; Sun, 1996; Chen et al., 2006).

### 3.2.4 Transporte Advectivo

O transporte advectivo faz referência ao processo pelo qual um fluido é transportado de uma região para outra numa direção preferencial. Se o transporte tem condições de advecção pura, o soluto e o solvente vão se mover com uma mesma velocidade média, e o fluxo por advecção vai ser:

$$\vec{f}_{A,i} = \vec{v}_i C \quad i = o, s \quad (3.7)$$

sendo  $\vec{f}_{A,i}$  o fluxo advectivo ou a massa transportada por unidade de secção transversal de área ( $M/L^2T$ ),  $\vec{v}_i$  é a velocidade de escoamento do fluido, e  $C$  é a concentração do soluto (Choy and Reible, 1999; LeVeque, 2002; Batul, 2005). Se o escoamento é miscível, isotérmico, incompressível, com viscosidade e porosidade constantes, e os efeitos de capilaridade e gravidade são desprezados, o fluxo advectivo, usando a Eq. (3.4) com viscosidade unitária, é dado por:

$$\vec{f}_{A,i} = -(\underline{K} \nabla p_i) C \quad (3.8)$$

### 3.2.5 Lei de Fick

A difusão molecular é responsável pela distribuição homogênea do soluto num fluido. Crank et al. (1975) definem a difusão como o processo pelo qual a matéria é transportada de uma região de um sistema para outro, como resultado dos movimentos aleatórios moleculares. As moléculas do soluto em alta concentração irão mover-se para as zonas de baixa concentração de modo a formar uma distribuição da concentração uniforme. O gradiente de concentração irá fazer o soluto espalhar-se para uma área maior (Sun, 1996; Moldrup et al., 2001; Hirsch, 2007).

O primeiro estudo quantitativo de difusão foi feito por Adolf Fick (1855), que percebeu uma analogia entre a difusão molecular e a transferência de calor por condução. A lei de Fick diz que a taxa de transferência da concentração de massa de uma substância através de uma unidade de seção de área  $A$ , é proporcional ao gradiente de concentração normal à secção (Crank et al., 1975; Ewing, 1984; Kovarik, 2000; De Boer, 2000)

$$\vec{f}_{dif} = -D_{dif} \nabla C \quad (3.9)$$

onde  $\vec{f}_{dif}$  é o fluxo difusivo ( $M/L^2T$ ),  $D_{dif}$  é o coeficiente de difusão molecular efetivo ( $L^2/T$ ). Na presença da fase sólida, o fluxo difusivo num meio poroso saturado é dado por:

$$\vec{f}_{dif} = -\phi D_{dif} \nabla C \quad (3.10)$$

e o coeficiente  $D_{dif}$

$$D_{dif} = D_0 \tilde{\tau} \quad 0 \leq \tilde{\tau} \leq 1 \quad (3.11)$$

sendo  $D_0$  o coeficiente de difusão molecular na solução e  $\tilde{\tau}$  o tensor de tortuosidade do meio (Bear, 1972). O sinal negativo na Eq. (3.10) indica que a migração do soluto ocorre no sentido da menor concentração (Sun, 1996; Robinson and Stokes, 2002; Batul, 2005). Este fenômeno é chamado de difusão molecular e o mecanismo de transporte é chamado de transporte por difusão. É importante notar que a difusão ocorre mesmo que o fluido esteja em repouso.

Os efeitos da difusão podem ser facilmente observados através de uma experiência simples num laboratório. Se tomamos um copo cheio de água e adicionamos uma pequena quantidade de corante, inicialmente é possível observar uma interface nítida entre a água colorida e o resto da massa de água no copo, depois de um tempo, a interface presente desaparece e todo o copo de água, eventualmente, assume a mesma cor (Fried

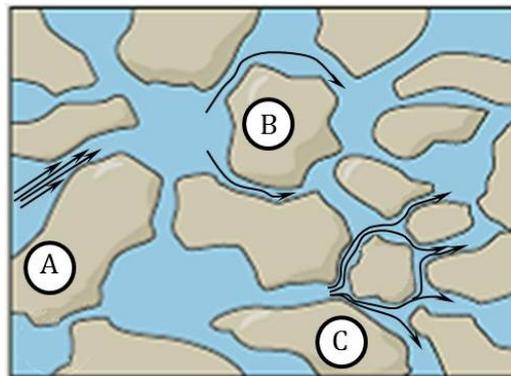
and Combarous, 1971; Batul, 2005).

### 3.2.6 Transporte Dispersivo

Quando um fluido escoar num meio poroso, existem interações muito complexas entre as fases líquida e sólida, tais como adsorção, precipitação, dissolução, troca iônica, reação química e os processos biológicos. A interação principal, no entanto, é de natureza mecânica. Como resultado da microestrutura do meio, a velocidade de fluido varia tanto em grandeza como em direção no interior do meio poroso.

A distribuição do escoamento pode ser dividida em três categorias. Em primeiro lugar, como resultado da viscosidade do fluido, a velocidade num pequeno canal é máxima ao longo dos eixos, e seu valor mínimo perto das paredes do canal, tal como mostrado na Fig. 3.2 (A). Em segundo lugar, devido à variação em tamanho do espaço poroso, as velocidades máximas ao longo dos eixos também variam, como mostrado (Fig. 3.2 (B)). Em terceiro lugar, o movimento real das partículas do fluido é em ziguezague por causa da resistência das matrizes sólidas e das flutuações das linhas de fluxo microscópicas ao longo da direção do fluxo médio. Isto é mostrado na Fig. 3.2 (C). Por causa da natureza estocástica do espaço poroso nos meios porosos e da não-homogeneidade da distribuição da velocidade microscópica, os grupos de partículas do fluido traçador estão sendo separados continuamente durante o processo de fluxo, fluindo em canais mais finos, e ocupando cada vez mais espaço. O resultado é que o fluido se espalha mais do que apenas o que se espera a partir do escoamento médio. Este fenômeno de transporte de massa, resultante da heterogeneidade da distribuição de velocidade microscópica, é chamado de dispersão mecânica (Sun, 1996).

Figura 3.2: Escoamento do traçador num meio poroso.



Fonte: Adaptada de netxplica.com (Acesso 15 Nov).

Estas variações da velocidade fazem com que o soluto seja transportado com diferentes taxas de escoamento, conduzindo assim a um processo de mistura microscópica. Devido à natureza passiva do processo, o fenômeno de dispersão mecânica é frequentemente usado para descrever a mistura causada por variações de velocidade locais (Batul, 2005; Bear,

1972; Fried and Combarous, 1971). Diferentes experimentos de laboratório e de campo mostraram que o fluxo de dispersão mecânica  $\vec{f}_{dis}$  (ou simplesmente fluxo dispersivo), pode ser escrito de maneira similar ao fluxo difusivo, fazendo uso da lei de Fick, como:

$$\vec{f}_{dis} = -\phi \underline{D}_{dis} \nabla C \quad (3.12)$$

onde  $\underline{D}_{dis}$  é o coeficiente de dispersão mecânica efetivo (Sun, 1996; Delleur Jacques, 1999; Batul, 2005). Para maiores detalhes ver (Bear, 1972; Klotz et al., 1980; Ewing, 1984; Sun, 1996; Delleur Jacques, 1999; Batul, 2005)).

### Coeficientes de dispersão longitudinal $D_L$ e dispersão transversal $D_T$

Um vasto número de experiências têm sido feitas para determinar a relação entre o coeficiente de dispersão e a distribuição da velocidade, bem como para determinar o coeficiente de difusão molecular (Klotz et al., 1980; Gelhar et al., 1992). Os primeiros experimentos foram focados principalmente no coeficiente de dispersão longitudinal  $D_L$ . Numa experiência, um fluido com uma concentração constante de traçador foi introduzido numa extremidade de uma coluna de areia. A concentração do efluente foi medida e comparada com a solução analítica do modelo de dispersão. O coeficiente de dispersão longitudinal  $D_L$ , foi então obtido a partir desta comparação (Bear, 1972; Sun, 1996).

Bear and Bachmat (1967) e Bear (1972) propuseram que o coeficiente de dispersão pode ser expresso teoricamente como:

$$\underline{D}_{dis} = \underline{\alpha} \frac{v_m v_n}{|\vec{v}|} f(Pe, \delta); \quad m, n = x, y, z \quad (3.13)$$

onde  $\underline{\alpha}$  é o tensor de quarta ordem chamado de *dispersividade dos meios porosos*,  $v_m$ ,  $v_n$ , são as componentes da velocidade de escoamento no meio poroso e  $f(Pe, \delta)$  é uma função que descreve a forma dos canais no meio poroso, e normalmente tem uma influência muito pequena no fenômeno e pode ser aproximada por um valor unitário,  $Pe$  é conhecido como o número de Peclet (parâmetro adimensional que relaciona as propriedades do fluxo advectivo com as propriedades do fluxo de dispersão hidrodinâmica (ver secção 3.2.8) e,  $\delta$  é o delta de Krönecker.

De acordo com Scheidegger (1961), o tensor de dispersividade  $\underline{\alpha}$  num escoamento tridimensional pode conter 81 componentes, todas relacionadas com a dispersividade longitudinal  $\alpha_L$  e transversal  $\alpha_T$ . Portanto, ele propôs a seguinte expressão:

$$\underline{\alpha} = \alpha_T \delta_{ij} \delta_{mn} + \frac{\alpha_L - \alpha_T}{2} (\delta_{im} \delta_{jn} + \delta_{in} \delta_{jm}) \quad (3.14)$$

sendo  $\delta_{i,j}$ ,  $\delta_{im}$ , ..., são os Deltas de Krönecker (Sun, 1996):

$$\delta_{i,j} = \begin{cases} 0 & \text{quando } i \neq j \\ 1 & \text{quando } i = j \end{cases} \quad (3.15)$$

Finalmente, o coeficiente de dispersão mecânica pode ser expresso como

$$\underline{D}_{dis} = \begin{bmatrix} D_{xx} & D_{xy} & D_{xz} \\ D_{yx} & D_{yy} & D_{yz} \\ D_{zx} & D_{zy} & D_{zz} \end{bmatrix} \quad (3.16)$$

com as componentes definidas como:

$$D_{xx} = \frac{\alpha_T (v_y^2 + v_z^2) + \alpha_L v_x^2}{\phi |\vec{v}|}, \quad D_{xy} = D_{yx} = \frac{(\alpha_L - \alpha_T)}{\phi |\vec{v}|} |v_x v_y|$$

$$D_{yy} = \frac{\alpha_T (v_x^2 + v_z^2) + \alpha_L v_y^2}{\phi |\vec{v}|}, \quad D_{yz} = D_{zy} = \frac{(\alpha_L - \alpha_T)}{\phi |\vec{v}|} |v_y v_z| \quad (3.17)$$

$$D_{zz} = \frac{\alpha_T (v_x^2 + v_y^2) + \alpha_L v_z^2}{\phi |\vec{v}|}, \quad D_{zx} = D_{xz} = \frac{(\alpha_L - \alpha_T)}{\phi |\vec{v}|} |v_x v_z|$$

Para escoamentos ortotrópicos e homogêneos o tensor de dispersão se reduz a:

$$\underline{D}_{dis} = \begin{bmatrix} \frac{\alpha_L}{\phi} |\vec{v}| & 0 & 0 \\ 0 & \frac{\alpha_T}{\phi} |\vec{v}| & 0 \\ 0 & 0 & \frac{\alpha_T}{\phi} |\vec{v}| \end{bmatrix} \quad (3.18)$$

### 3.2.7 Decaimento Radiativo

O termo *substância radioativa* é usado para aquelas substâncias cujas concentrações decaem de acordo com uma lei específica. A matéria do universo é composta por átomos, e quando estes átomos liberam partículas subatômicas ou energia para o seu exterior, são obtidas substâncias com uma menor quantidade de massa e/ou energia. Estas substâncias são chamadas de radioativas (Bear, 1972; Cordazzo, 2005; Heilbron et al., 2004; Batul, 2005; Bauer et al., 2013).

Diferentes experimentos (Holcl and Orlando, 1991; L'Annunziata, 2007; Xavier et al.,

2007) mostraram que, para substâncias radioativas:

$$\Delta C = -\gamma C \Delta t \quad (3.19)$$

onde  $C$  é a concentração de massa do material em decaimento e  $\gamma$  é a constante de proporcionalidade do decaimento. A equação diferencial que descreve o decaimento radioativo é dada por:

$$\frac{\partial C}{\partial t} = -\gamma C \quad (3.20)$$

### 3.2.8 Equação de Advecção-Dispersão-Reação (*ADRE*)

Os principais fenômenos de transporte de solutos são: advecção, difusão e dispersão, caracterizados cada um deles por um fluxo advectivo ( $\vec{f}_A = \vec{v}C$ ), um fluxo difusivo ( $\vec{f}_{dif} = -\underline{D}_{dif}\nabla C$ ) e um fluxo dispersivo mecânico ( $\vec{f}_{dis} = -\underline{D}_{dis}\nabla C$ ) respectivamente. O conjunto de todos estes fenômenos somado às mudanças de massa por causa de poços ou formas de reação (químicas, iônicas, decaimento radioativo) é chamado de *Fenômeno de Advecção-Dispersão-Reação* (Sun, 1996; Hundsdorfer and Verwer, 1996; Batul, 2005).

Fazendo uso da equação de conservação da massa e dos fluxos advectivo, dispersivo e difusivo (Eq. (3.3), Eq. (3.7), Eq. (3.9) e Eq. (3.12)), é possível escrever a equação geral da *ADRE*:

$$\frac{\partial C}{\partial t} + \nabla \cdot (\vec{v}C) - \nabla \cdot (\underline{D}_H \nabla C) = Q_c \quad (3.21)$$

onde  $\underline{D}_H$  é o coeficiente de dispersão hidrodinâmica, obtido a partir da soma dos coeficientes de dispersão mecânica e difusão molecular:

$$\underline{D}_H = \underline{D}_{dis} + \underline{D}_{dif} \quad (3.22)$$

e o fluxo de dispersão hidrodinâmica correspondente é

$$\vec{f}_H = -\underline{D}_H \nabla C \quad (3.23)$$

O primeiro termo do lado esquerdo na Eq. (3.21) representa a taxa de variação da concentração de um soluto traçador com o tempo, o segundo termo do lado esquerdo é o termo de advecção de um soluto com concentração  $C$  e velocidade de transporte  $\vec{v}$ , o terceiro é o termo de dispersão obtido dos fluxos de dispersão mecânica e difusão molecular

e o termo  $Q_c$ , faz referência aos termos de fonte, que no no caso pode ser o decaimento radioativo:

$$Q_c = -\gamma C, \quad (3.24)$$

ou um termo de injeção:

$$Q_c = \frac{W}{\phi} C_0, \quad (3.25)$$

ou um termo de extração:

$$Q_c = \frac{Q}{\phi} C_0, \quad (3.26)$$

ou qualquer outro termo de reação química.  $W$  é a quantidade de massa injetada por unidade de tempo e por unidade de volume,  $Q$  é a quantidade de massa por unidade de tempo e por unidade de volume que extraiu-se no reservatório, e  $C_0$  é a concentração inicial do soluto (Sun, 1996; Batul, 2005).

Na análise da *ADRE* é importante definir um número adimensional, o qual relaciona as propriedades do fluxo advectivo e do fluxo de dispersão hidrodinâmica. Esta relação é conhecida como o número de Peclet, que é dada por:

$$Pe = \frac{\vec{v} \Delta l}{\underline{D}_H} \quad (3.27)$$

onde  $\underline{D}_H$  é uma representação geral dos efeitos de dispersão hidrodinâmica, e  $\Delta l$  é um comprimento característico (Helmig, 1997).

Para números de Peclet pequenos ( $Pe \simeq 0$ ), a dispersão hidrodinâmica é responsável pelo processo transporte do soluto no meio poroso. Por outro lado se o número de Peclet é muito grande ( $Pe \rightarrow \infty$ ), o fluxo advectivo é o responsável pelo processo de transporte do soluto no meio poroso (Helmig, 1997; Carvalho, 2005; Sun, 1996).

### Condições Iniciais e de Contorno

A solução da *ADRE* (Eq. 3.21) é a distribuição da concentração de  $C(\vec{x}, t)$ , que é dependente da posição e do tempo. Para obter uma solução particular, precisamos não só da equação *ADRE*, mas também de algumas outras especificações, como descritas abaixo:

1. Deve ser indicado o domínio do espaço ( $\Omega$ ) e o intervalo de tempo  $[t^0, T]$  do problema

considerado.

2. O campo de fluxo no domínio considerado e as distribuições dos parâmetros relevantes da equação, como a velocidade de escoamento  $\vec{v}(\vec{r}, t)$ , as dispersividades longitudinal e transversal  $\alpha_L, \alpha_T$ , a tortuosidade, e a porosidade devem ser fornecidos.
3. Além das equações que representam o fenômeno, é necessário conhecer também a condição inicial  $C(\vec{x}, t^0)$  para  $(\Omega)$  e  $(\Gamma)$ , para completar o modelo matemático (Sun, 1996).

Para a solução de problemas estacionários, são necessárias as condições de contorno. Quando o problema é transiente, também é necessária uma condição inicial (Maliska, 1994b; Anderson et al., 1984; Hirsch, 2007; van den Abeele, 2009). Dependendo das características geológicas das vizinhanças do reservatório, assim como das condições impostas, diferentes configurações podem ser obtidas. Como consequência, é importante impor condições de contorno e iniciais corretamente para obter soluções adequadas e acuradas (Lyra, 1994; Carvalho, 2005; Hirsch, 2007).

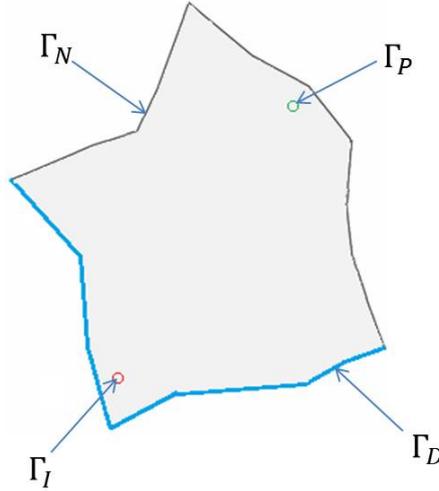
As condições de contorno, por sua vez, são expressões matemáticas que especificam a variável dependente (velocidade ou concentração) ou fluxo (função da derivada da velocidade e/ou da derivada da concentração) nos contornos do domínio em questão (Cordazzo, 2005) ou ainda a combinação destas duas: condições de Dirichlet, condições de Neumann e condições de Cauchy, respectivamente (Bear, 1972; van den Abeele, 2009).

Definimos  $\Omega$  como um domínio poligonal qualquer (Fig. 3.3), limitado por um contorno  $\Gamma$  que satisfaz:

$$\Gamma = \Gamma_D \cup \Gamma_N \cup \Gamma_I \cup \Gamma_P \quad (3.28)$$

onde  $\Gamma_D$ ,  $\Gamma_N$ ,  $\Gamma_I$  e  $\Gamma_P$  representam as fronteiras de Dirichlet, Neumann, os poços injetores e os poços produtores, respectivamente.

Figura 3.3: Modelo esquemático de um reservatório e a respectiva identificação do domínio 2-D e contornos.



Fonte: Adaptada de Souza (2015).

É possível escrever as condições de contorno para a equação da pressão como:

$$\vec{v} \cdot \vec{n} = Q_I \quad \text{ou} \quad p(\vec{x}, t) = p_I \quad \text{em } \Gamma_I X [t^0, T] \quad (3.29)$$

$$\vec{v} \cdot \vec{n} = Q_P \quad \text{ou} \quad p(\vec{x}, t) = p_P \quad \text{em } \Gamma_P X [t^0, T] \quad (3.30)$$

$$\vec{v} \cdot \vec{n} = g_D \quad \text{ou} \quad p(\vec{x}, t) = p_D \quad \text{em } \Gamma_D X [t^0, T] \quad (3.31)$$

$$\vec{v} \cdot \vec{n} = g_N, \quad \text{em } \Gamma_N X [t^0, T] \quad (3.32)$$

onde  $\vec{n}$  é o vetor área normal,  $Q_I$ ,  $Q_P$  são as vazões volumétricas dos poços injetores e produtores,  $g_N$  é o fluxo normal prescrito em  $\Gamma_N$  e  $g_D$  é o fluxo normal prescrito em  $\Gamma_D$  (Carvalho, 2005; Contreras, 2012).

Para o mesmo reservatório, as condições de contorno para a equação da concentração são:

$$C(\vec{x}, t) = C_D \quad \text{em } \Gamma_D X [t^0, T] \quad (3.33)$$

$$-D_H \nabla C \cdot \vec{n} = g_N \quad \text{em } \Gamma_N X [t^0, T] \quad (3.34)$$

onde  $C_D$  é o valor da concentração de tipo Dirichlet. As condições iniciais podem ser escritas como:

$$C(\vec{x}, t^0) = C_0(\vec{x}) \text{ em } \Omega, \quad (3.35)$$

sendo  $C_0(\vec{x})$  o valor da concentração inicial no reservatório (Bear, 1972; Sun, 1996; Carvalho, 2005). Nos problemas resolvidos neste trabalho, a velocidade de escoamento não será dependente do tempo sendo apenas calculada uma única vez e usada para obter os coeficientes da Equação de Advecção-Dispersão-Reação (Eq. (3.17))

---

## Capítulo 4

# Formulação Numérica

### 4.1 Introdução

Uma grande quantidade de fenômenos físicos podem ser descritos por sistemas de equações diferenciais. As soluções analíticas para estes problemas estão disponíveis para apenas para um número reduzido de casos simplificados e, em geral, o domínio e as equações governantes são discretizadas para se obter uma solução aproximada para o problema. Os métodos numéricos mais populares são: o Método das Diferenças Finitas (*Finite Difference Method-FDM*), o Método dos Volumes Finitos (*Finite Volume Method-FVM*) e o Método dos Elementos Finitos (*Finite Element Method-FEM*), (Maliska, 1994b; Carvalho, 2005; Zienkiewicz and Taylor, 1988). No presente trabalho o Método dos Volumes Finitos foi adotado.

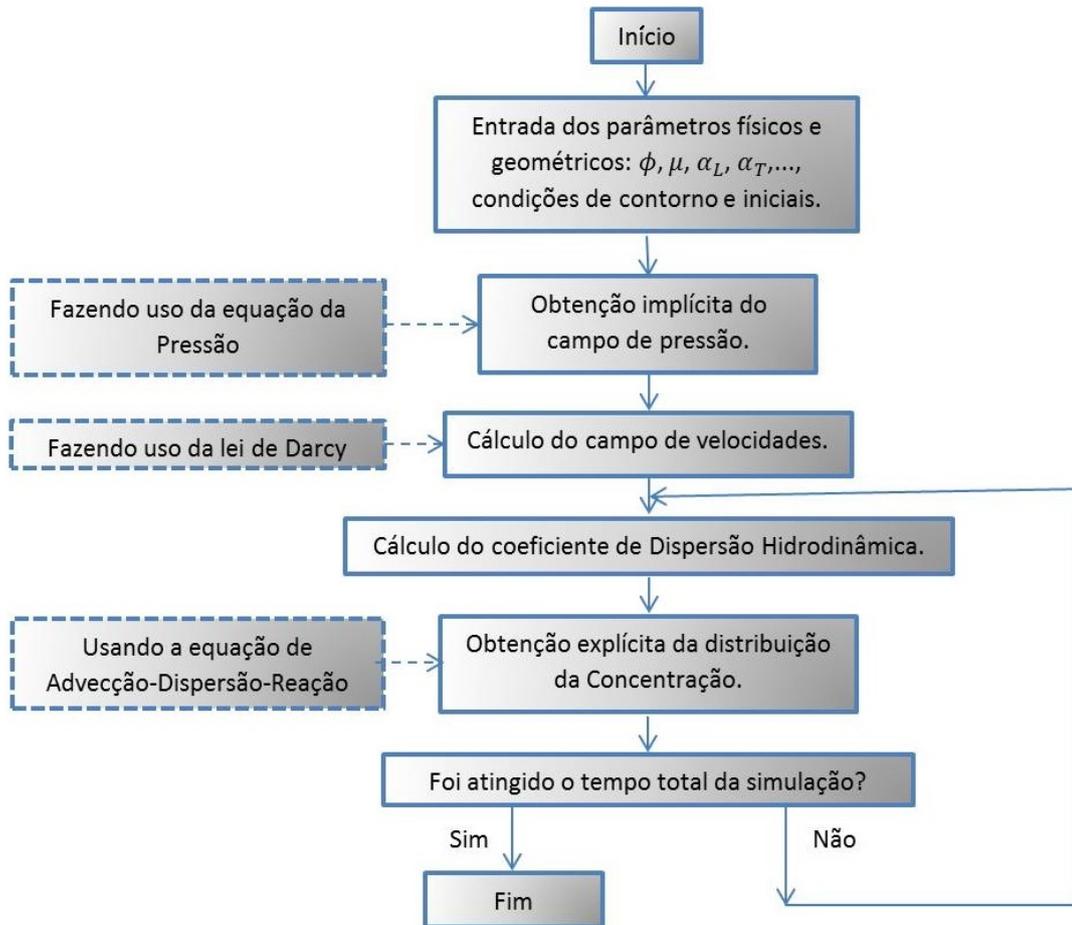
A seguir, apresenta-se uma visão geral da discretização espacial das equações que modelam o problema de um soluto traçador usando o MVF centrado na célula. Inicialmente é apresentada a discretização do termo de dispersão hidrodinâmica e da velocidade de escoamento do fluido para a Equação de Advecção-Dispersão-Reação (*ADRE*), usando um método desenvolvido por Gao and Wu (2011) para o problema de difusão e, posteriormente, adaptado por Contreras (2012). Em seguida, é discretizado o termo de fluxo advectivo da *ADRE* usando um Método de Aproximação de Primeira Ordem (*First Order Approximation-FOU*) e, depois, um método de aproximação de alta ordem (*Monotone Upstream Scheme for Conservation Laws-MUSCL*). Depois é apresentada a discretização da equação da pressão utilizando a metodologia *IMPEC* (*Implicit Pressure, Explicit Concentration*) tradicional (Coats et al., 2001), onde, dada a distribuição inicial de concentração no meio poroso, calcula-se o campo de pressão de forma implícita, o campo de velocidades, o termo de advecção, o termo de dispersão hidrodinâmica e o termo de fonte. Finalmente é apresentada a discretização temporal da concentração usando o Método de Euler explícito.

O método que será descrito a seguir é denominado *MPFA-D* (*Multipoint Flux Approximation with a Diamond Stencil*) (Contreras, 2012). É um método baseado no MVF

centrado na célula, de modo que as variáveis primárias, pressão e concentração são associadas aos volumes de controle (Hundsdoerfer and Verwer, 1996; Contreras, 2012). O método a ser resolvido envolve a solução da conservação da massa, a equação de Darcy e a equação de transporte de solutos.

Na Fig. 4.1, apresenta-se o funcionamento geral do algoritmo utilizado.

Figura 4.1: Diagrama de fluxo para a solução do modelo de Advecção-Dispersão-Reação.



Fonte: Autor.

## 4.2 Método dos Volumes Finitos

O método dos Volumes Finitos é um dos métodos mais utilizados na discretização espacial das equações governantes da dinâmica dos fluidos e na simulação de escoamentos em meios porosos. Esse método foi introduzido por McDonald (1971) e posteriormente usado e estendido por MackCormack e Pauli (1972) no caso bidimensional; e por Rizze e Inouye (1973) para o problema em três dimensões (Hirsch, 2007; Contreras, 2012). Em geral, são considerados MVF todos aqueles métodos de discretização em que, inicialmente, as equações são integradas diretamente no domínio físico (ou mapeado) e, posteriormente, fazendo uso do teorema da divergência de Gauss, as integrais no domínio  $\Omega$  são transfor-

madras em integrais de superfície. Só então, aplica-se algum procedimento de discretização que permita a obtenção da solução numérica do problema (Eymard et al., 2000; Carvalho, 2005; Galindez, 2014).

Uma característica muito importante dos MVF é o fato de serem localmente conservativos, além de serem suficientemente flexíveis para resolver problemas físicos com acurácia em geometrias complexas, produzindo boas aproximações em malhas estruturadas ou em malhas não-estruturadas. Por tudo isso, na indústria, o MVF é muito usado nos softwares comerciais para a simulação de escoamentos (van den Abeele, 2009; Galindez, 2014).

### 4.2.1 Discretização da Equação de Advecção-Dispersão-Reação

Considerando a forma geral da equação de Advecção-Dispersão-Reação de um soluto num meio poroso, (Eq. (3.21)):

$$\frac{\partial C}{\partial t} = \nabla \cdot (\underline{D}_H \nabla C) - \nabla \cdot (C\vec{v}) - \gamma C \quad (4.1)$$

onde  $C$  é a concentração do soluto,  $\underline{D}_H$  é o tensor de dispersão hidrodinâmica,  $\vec{v}$  é a velocidade de escoamento do fluido e  $\gamma$  é uma constante de decaimento no termo de reação. Integrando a Eq. (4.1) no domínio contínuo  $\Omega$ , e, ao particionar o domínio contínuo em um conjunto finito de subdomínios chamados volumes de controle, pode-se expressar a equação para um volume de controle arbitrário  $\hat{k}$ , onde são realizados os balanços discretos (Fig. 4.2), como:

$$\int_{\Omega_{\hat{k}}} \frac{dC}{dt} d\Omega_{\hat{k}} = \int_{\Omega_{\hat{k}}} \nabla \cdot (\underline{D}_H \nabla C) d\Omega_{\hat{k}} - \int_{\Omega_{\hat{k}}} \nabla \cdot (C\vec{v}) d\Omega_{\hat{k}} - \gamma \int_{\Omega_{\hat{k}}} C d\Omega_{\hat{k}} \quad (4.2)$$

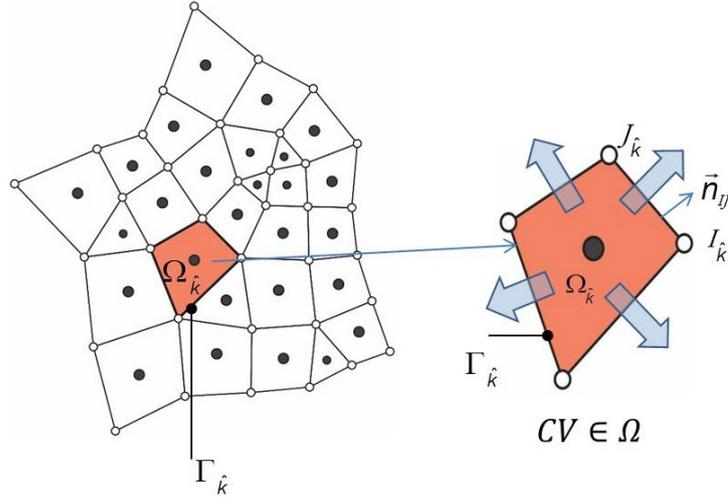
com volume  $\Omega_{\hat{k}}$ . Aplicando o teorema da divergência de Gauss temos:

$$\int_{\Omega_{\hat{k}}} \frac{dC}{dt} d\Omega_{\hat{k}} = \int_{\Gamma_{\hat{k}}} \underline{D}_H \nabla C \cdot \vec{n}_{\hat{k}} d\Gamma_{\hat{k}} - \int_{\Gamma_{\hat{k}}} C\vec{v} \cdot \vec{n}_{\hat{k}} d\Gamma_{\hat{k}} - \gamma \int_{\Omega_{\hat{k}}} C d\Omega_{\hat{k}} \quad (4.3)$$

onde o vetor  $\vec{n}$  é o vetor normal unitário que aponta para fora da superfície de controle do elemento  $\hat{k}$  e  $\Gamma_{\hat{k}}$  são os contornos. A Eq. (4.2) encontra-se escrita na forma integral, Ao fazer uso do teorema da divergência de Gauss, algumas integrais sobre o volume de controle (VC) foram transformadas em integrais sobre a superfície do VC. O termo do lado esquerdo, representa a taxa de variação do soluto com o tempo no VC. O primeiro termo do lado direito mostra o efeito da dispersão hidrodinâmica macroscópica; o segundo termo descreve a advecção macroscópica. O terceiro termo representa termos fontes e sumidouros, os quais fornecem o aumento ou a diminuição do soluto no meio podendo

envolver um decaimento radioativo (Sun, 1996).

Figura 4.2: Discretização do domínio poligonal que representa o reservatório em subdomínios (VC) no caso bidimensional.



Fonte: Adaptada de Souza (2015).

Os termos do lado direito da Eq. (4.3) devem ser aproximados, fazendo uso de alguma formulação numérica para aproximação dos fluxos nas superfícies de controle, a fim de se obter uma boa aproximação. O fluxo total pode ser escrito como a soma do fluxo advectivo ( $\vec{f}_A$ ), (Eq. (3.8)), e do fluxo de dispersão hidrodinâmica  $\vec{f}_H$ , Eq. (3.23), que passa através da superfície de controle  $\Gamma_{\hat{k}}$  e pode ser escrito como:

$$\int_{\Gamma_{\hat{k}}} \vec{f}_T \cdot \vec{n} d\Gamma_{\hat{k}} = \int_{\Gamma_{\hat{k}}} (\vec{f}_A + \vec{f}_H) \cdot \vec{n} d\Gamma_{\hat{k}} \quad (4.4)$$

onde  $\vec{f}_T$  é o fluxo total.

Ao aproximar o fluxo para cada face  $(IJ)_{\hat{k}}$  dos volumes de controle da malha, tem-se:

$$\int_{\Gamma_{\hat{k}}} \vec{f}_T \cdot \vec{n}_{\hat{k}} d\Gamma_{\hat{k}} \cong \sum_{IJ \in \Gamma_{\hat{k}}} (\vec{f}_T \cdot \vec{N})_{(IJ)_{\hat{k}}} = \sum_{IJ \in \Gamma_{\hat{k}}} \left\{ (\vec{f}_A \cdot \vec{N})_{(IJ)_{\hat{k}}} + (\vec{f}_H \cdot \vec{N})_{(IJ)_{\hat{k}}} \right\} \quad (4.5)$$

onde  $\vec{N}_{(IJ)_{\hat{k}}}$  é o vetor área normal à face  $(IJ)_{\hat{k}}$  (Fig. 4.2). Os fluxos reescritos na face  $(IJ)_{\hat{k}}$  são definidos como:

$$(\vec{f}_A)_{(IJ)_{\hat{k}}} = (C\vec{v})_{(IJ)_{\hat{k}}} \quad (4.6)$$

$$\left(\vec{f}_H\right)_{(IJ)_{\hat{k}}} = (-\underline{D}_H \nabla C)_{(IJ)_{\hat{k}}} \quad (4.7)$$

sendo  $C_{(IJ)_{\hat{k}}}$  a concentração na face  $IJ$ .

O termo de reação da *ADRE* (Eq. (4.3)) é aproximado fazendo uso do teorema do valor médio (Sun, 1996; Ben-Israel and Gilbert, 2002; Floater, 2003) e pode ser expresso como:

$$\gamma \int_{\Omega_{\hat{k}}} C d\Omega_{\hat{k}} \cong \bar{\gamma} \bar{C}_{\hat{k}} \mathbb{V}_{\hat{k}} = \gamma C_{\hat{k}} \mathbb{V}_{\hat{k}} \quad (4.8)$$

onde  $\bar{C}_{\hat{k}}$  é a concentração média e  $\mathbb{V}_{\hat{k}}$  é o volume do  $\hat{k}$ -ésimo VC.

As discretizações do fluxo de dispersão hidrodinâmica e da velocidade de escoamento do fluido vão ser efetuadas utilizando o método proposto por Gao and Wu (2011), que é utilizado em Contreras (2012) na simulação de escoamentos bifásicos água-óleo em reservatórios de petróleo. A discretização do fluxo advectivo vai ser feita usando um esquema de aproximação de baixa ordem (*First Order Upwind* FOU), ou uma aproximação de alta ordem de tipo *MUSCL* (*Monotone Upstream Centered Scheme for Conservation Laws*) (Van Leer, 1979). No presente trabalho, apenas modelos bidimensionais serão considerados.

#### 4.2.2 Discretização do Fluxo Dispersivo pelo Método MPFA-D

A aproximação do fluxo proposto por Gao and Wu (2011), pode ser usada para qualquer vetor de fluxo  $\vec{f}$  da forma:

$$\nabla \cdot \vec{f} = \nabla \cdot (-\underline{\mathcal{K}} \nabla u) \quad (4.9)$$

sendo  $u$ , uma função que representa propriedades tais como a pressão ( $p$ ) ou a concentração ( $C$ ) e  $\underline{\mathcal{K}}$  uma propriedade tensorial do meio ou do fluido. No nosso problema,  $\vec{f}$  pode ser o fluxo de dispersão hidrodinâmica (Eq. (3.23)), ou a velocidade de Darcy no fluxo advectivo (Eq. (3.4)).

Neste esquema numérico, o fluxo em cada face do VC da malha poligonal é explicitamente expresso por duas incógnitas centradas nas células  $\hat{R}$  e  $\hat{L}$ , que compartilham a face  $IJ$ , e duas incógnitas nos vértices  $I$  e  $J$ . As incógnitas dos vértices  $I$  e  $J$  são consideradas intermediárias e podem ser reescritos como uma combinação linear dos valores da concentração ou da pressão, nos centróides dos VCs  $\hat{L}$  e  $\hat{R}$ , usando as interpolações apropriadas (Gao and Wu, 2011).

Dada uma face (2D) do VC, foi feito o uso da seguinte notação (Fig. 4.3):

- O volume de controle à esquerda da face  $IJ$  vai ser denotado como  $\hat{L}$  e o volume de controle à direita vai ser denotado como  $\hat{R}$ .

- $u(I) = u_I$  e  $u(J) = u_J$  são, respectivamente, os valores da função  $u$  nos vértices  $I$  e  $J$ .

- $u(\hat{L}) = u_{\hat{L}}$  e  $u(\hat{R}) = u_{\hat{R}}$  são os valores da função  $u$  projetados nos volumes de controle  $\hat{L}$  e  $\hat{R}$ , respectivamente.

- $\vec{N}_{IJ} = \mathcal{R}\vec{IJ}$  e  $\vec{N}_{JI} = \mathcal{R}\vec{JI}$ , onde  $\vec{N}_{IJ} = -\vec{N}_{JI}$  são os vetores áreas, normais às faces  $IJ$  e  $JI$ , que para o problema 2-D tem módulo igual ao comprimento da aresta  $\vec{IJ}$ .

A matriz de rotação é dada por:

$$\mathcal{R} = \begin{bmatrix} \cos(\theta) & \sin(\theta) \\ -\sin(\theta) & \cos(\theta) \end{bmatrix}, \text{ sendo } \theta = \frac{\pi}{2} \quad (4.10)$$

- $h_{IJ}^{\hat{L}}$  e  $h_{IJ}^{\hat{R}}$  são, respectivamente, as alturas dos baricentros  $\hat{L}$  e  $\hat{R}$  em relação com cada face  $IJ$  (Fig. 4.3).

- $D(\hat{L}) = D_{\hat{L}}$  dispersão hidrodinâmica do volume de controle  $\hat{L}$ .

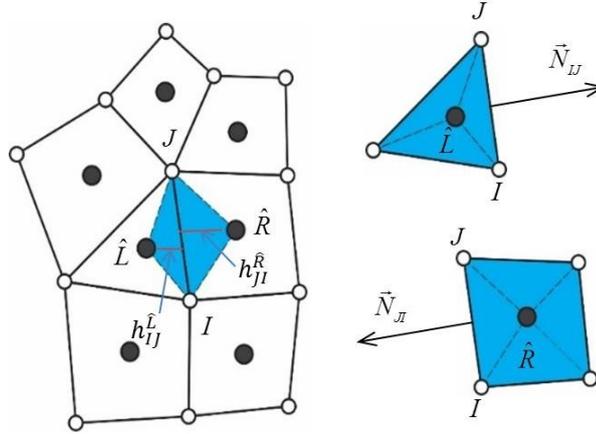
- $K(\hat{L}) = K_{\hat{L}}$  permeabilidade do volume de controle  $\hat{L}$ .

Na Fig. 4.3 são mostrados dois volumes de controle adjacentes que partilham a face  $\vec{IJ}$  (2-D). Dois triângulos auxiliares são definidos pelos nós  $I$  e  $J$  e pelos centroides dos volumes de controle adjacentes. Segundo Gao and Wu (2011), o gradiente aproximado do fluxo para o triângulo  $\triangle \hat{L}IJ$  é definido como:

$$\nabla u \simeq \frac{u_J - u_I}{\|\vec{IJ}\|^2} \vec{IJ} + \frac{\vec{N}_{IJ}}{\|\vec{IJ}\|^2} \left[ (u_I - u_{\hat{L}}) \cot \angle IJ\hat{L} + (u_J - u_{\hat{L}}) \cot \angle \hat{L}IJ \right] \quad (4.11)$$

Maiores detalhes na dedução dessa expressão podem ser encontrados em Contreras (2012).

Figura 4.3: Definição dos triângulos e dos volumes de controle usados na discretização do fluxo pelo método MPFA-D.



Fonte: Adaptada de Contreras (2012).

Considere a identidade apresentada em Gao and Wu (2011):

$$\underline{\mathbf{K}}^T \left( \vec{N}_{IJ} \right) = \mathbf{K}_{IJ}^{(t)} \vec{IJ} + \mathbf{K}_{IJ}^{(n)} \left( \vec{N}_{IJ} \right) \quad (4.12)$$

onde:

$$\mathbf{K}_{IJ}^{(t)} = \frac{\left( \vec{N}_{IJ} \right)^T \mathcal{K}_{\hat{L}} \left( \vec{IJ} \right)}{\left\| \vec{IJ} \right\|^2}; \quad \mathbf{K}_{IJ}^{(n)} = \frac{\left( \vec{N}_{IJ} \right)^T \mathcal{K}_{\hat{L}} \left( \vec{N}_{IJ} \right)}{\left\| \vec{IJ} \right\|^2} \quad (4.13)$$

Ao substituir na Eq. (4.9) na Eq. (4.11), fazendo uso da identidade da Eq. (4.12), multiplicando pelo vetor área normal  $\vec{N}_{IJ}$ , e depois de algumas manipulações algébricas, chega-se a:

$$\vec{f}_{IJ}^{\hat{L}} \cdot \vec{N}_{IJ} \simeq -\mathbf{K}_{IJ}^{(n)} \left( (u_I - u_{\hat{L}}) \cot \angle IJ\hat{L} + (u_J - u_{\hat{L}}) \cot \angle \hat{L}IJ \right) - D_{IJ}^{(t)} (u_J - u_I) \quad (4.14)$$

Além disso, considerando-se as seguintes relações trigonométricas:

$$\cot \angle IJ\hat{L} = \frac{\vec{J\hat{L}} \cdot \vec{J\hat{I}}}{\left\| \vec{J\hat{I}} \right\| h_{IJ}^{\hat{L}}} \quad (4.15)$$

$$\cot \angle \hat{L}IJ = \frac{\overrightarrow{I\hat{L}} \cdot \overrightarrow{I\hat{J}}}{\|\overrightarrow{I\hat{J}}\| h_{IJ}^{\hat{L}}} \quad (4.16)$$

que, substituídas na Eq. (4.14), leva a:

$$\vec{f}_{IJ}^{\hat{L}} \cdot \vec{N}_{IJ} \simeq -\mathbf{K}_{IJ}^{(n)} \left[ (u_I - u_{\hat{L}}) \frac{\overrightarrow{J\hat{L}} \cdot \overrightarrow{J\hat{I}}}{\|\overrightarrow{J\hat{I}}\| h_{IJ}^{\hat{L}}} + (u_J - u_{\hat{L}}) \frac{\overrightarrow{I\hat{L}} \cdot \overrightarrow{I\hat{J}}}{\|\overrightarrow{I\hat{J}}\| h_{IJ}^{\hat{L}}} \right] - \mathbf{K}_{IJ}^{(t)} (u_J - u_I) \quad (4.17)$$

através da qual pode-se escrever:

$$\begin{aligned} \frac{h_{IJ}^{\hat{L}}}{\mathbf{K}_{IJ}^{(n)}} \int_{IJ} \vec{f}_{IJ}^{\hat{L}} \cdot \vec{N}_{IJ} ds &\simeq -\frac{1}{\|\overrightarrow{I\hat{J}}\|} \left[ (u_I - u_{\hat{L}}) \overrightarrow{J\hat{L}} \cdot \overrightarrow{J\hat{I}} + (u_J - u_{\hat{L}}) \overrightarrow{I\hat{L}} \cdot \overrightarrow{I\hat{J}} \right] \\ &- (u_J - u_I) \frac{\mathbf{K}_{IJ}^{(t)}}{\mathbf{K}_{IJ}^{(n)}} h_{IJ}^{\hat{L}} \end{aligned} \quad (4.18)$$

A Eq. (4.18) representa a aproximação da vazão na face  $IJ$  a partir do elemento  $\hat{L}$ . Calcula-se também a vazão para o elemento  $\hat{R}$  de forma semelhante, efetuando as mesmas operações aritméticas agora para o triângulo  $\triangle \hat{R}JI$ , obtendo:

$$\begin{aligned} \frac{h_{JI}^{\hat{R}}}{\mathbf{K}_{JI}^{(n)}} \int_{JI} \vec{f}_{JI}^{\hat{R}} \cdot \vec{N}_{JI} ds &\simeq -\frac{1}{\|\overrightarrow{J\hat{I}}\|} \left[ (u_J - u_{\hat{R}}) \overrightarrow{J\hat{R}} \cdot \overrightarrow{J\hat{I}} + (u_I - u_{\hat{R}}) \overrightarrow{I\hat{R}} \cdot \overrightarrow{I\hat{J}} \right] \\ &- (u_J - u_I) \frac{\mathbf{K}_{JI}^{(t)}}{\mathbf{K}_{JI}^{(n)}} h_{JI}^{\hat{R}} \end{aligned} \quad (4.19)$$

que é a aproximação da vazão na face  $JI$  a partir do elemento  $\hat{R}$ .

Agora, tomando em conta a continuidade dos fluxos para a face  $IJ$  (Contreras, 2012), tem-se:

$$\int_{IJ} \vec{f}_{IJ}^{\hat{L}} \cdot \vec{N}_{IJ} ds + \int_{JI} \vec{f}_{JI}^{\hat{R}} \cdot \vec{N}_{JI} ds = 0 \quad (4.20)$$

Finalmente, é obtida a discretização do fluxo na face  $IJ$  correspondente para seus

respectivos elementos  $\hat{L}$  e  $\hat{R}$ .

$$\vec{f}_{IJ} \cdot \vec{N}_{IJ} \simeq -\sigma_{IJ} \left\| \vec{IJ} \right\| [u_{\hat{R}} - u_{\hat{L}} - \zeta_{IJ} (u_J - u_I)] \quad (4.21)$$

onde,

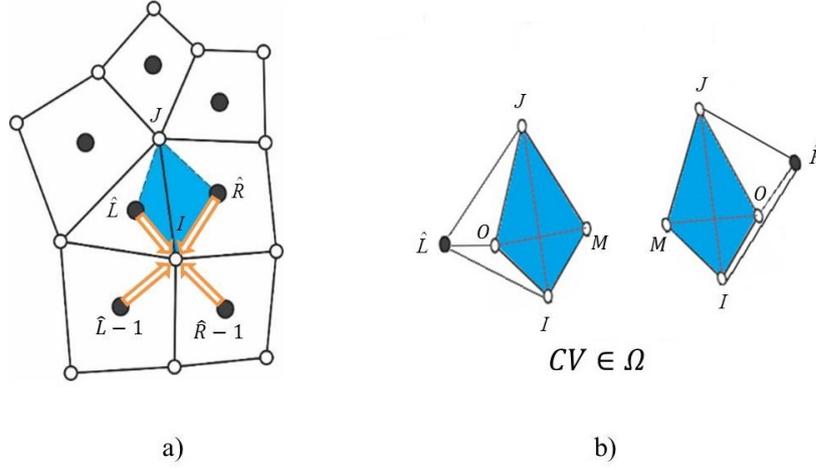
$$\sigma_{IJ} = \frac{\mathbf{K}_{IJ}^{(n)} \mathbf{K}_{JI}^{(n)}}{\mathbf{K}_{IJ}^{(t)} h_{JI}^{\hat{R}} + \mathbf{K}_{JI}^{(t)} h_{IJ}^{\hat{L}}}, \quad (4.22)$$

$$\zeta_{IJ} = \frac{\vec{\hat{L}\hat{R}} \cdot \vec{IJ}}{\left\| \vec{IJ} \right\|^2} - \frac{1}{\left\| \vec{IJ} \right\|} \left( \frac{\mathbf{K}_{IJ}^{(t)}}{\mathbf{K}_{IJ}^{(n)}} h_{IJ}^{\hat{L}} + \frac{\mathbf{K}_{JI}^{(t)}}{\mathbf{K}_{JI}^{(n)}} h_{JI}^{\hat{R}} \right) \quad (4.23)$$

são definidas como as projeções na direção normal ( $\sigma_{IJ}$ ) da propriedade tensorial (permeabilidade ou dispersão hidrodinâmica), e ( $\zeta_{IJ}$ ) é um termo constante que incorpora a componente tangencial da propriedade tensorial. O termo  $-\sigma_{IJ} \left\| \vec{IJ} \right\|$  representa a matriz de transmisibilidade na obtenção da pressão de forma implícita.

Como foi mencionado antes, o fluxo em cada face do VC encontra-se explicitamente expresso pelos valores da pressão ou concentração dos volumes de controle  $\hat{R}$  e  $\hat{L}$  que compartilham a face  $IJ$  e esses valores nos vértices desconhecidos  $I$  e  $J$ , os quais são calculados e logo reescritos como uma combinação linear dos graus de liberdade centrados no VC, usando as interpolações apropriadas. As incógnitas nos vértices  $I$  e  $J$  são reescritas linearmente não apenas pelos valores em  $\hat{R}$  e  $\hat{L}$ , mas também por todos os elementos vizinhos ao respectivo vértice. Desta forma, percebe-se que o método faz aproximações com múltiplos pontos (Fig. 4.4 a)). Quando o fluxo é calculado na região de iteração reconstruída entre dois VC para o problema 3-D (Fig. 4.4 b)), os VC  $\hat{R}$  e  $\hat{L}$  vão compartilhar uma superfície criada pelos respectivos vértices auxiliares que serão usados no cálculo do fluxo, formando uma estrutura semelhante a um diamante (Contreras, 2012). Então, este tipo de formulação é conhecida como *MPFA-D (Multipoint Flux Approximation with a Diamond Stencil)*.

Figura 4.4: a) Representação da interpolação num vértice em 2-D, com seus volumes de controle vizinhos. b) Região de iteração para um volume de controle de uma malha poligonal em 3-D.



Fonte: Adaptada de Contreras (2012).

A expressão dada na Eq. (4.21), é válida para qualquer fluxo que seja da forma apresentada na Eq. (4.9). Desta forma, a velocidade de escoamento do fluido no meio poroso, termo advectivo na Eq. (4.3), pode ser obtido fazendo uso da lei de Darcy simplificada como:

$$\left(\vec{v} \cdot \vec{N}\right)_{IJ} \simeq -\mathcal{K}_{IJ} \left\| \vec{IJ} \right\| [p_{\hat{R}} - p_{\hat{L}} - \Upsilon_{IJ} (p_J - p_I)] \quad (4.24)$$

onde

$$\mathcal{K}_{IJ} = \frac{K_{IJ}^{(n)} K_{JI}^{(n)}}{K_{IJ}^{(t)} h_{JI}^{\hat{R}} + K_{JI}^{(t)} h_{IJ}^{\hat{L}}}, \quad (4.25)$$

$$\Upsilon_{IJ} = \frac{\vec{\hat{L}\hat{R}} \cdot \vec{IJ}}{\left\| \vec{IJ} \right\|^2} - \frac{1}{\left\| \vec{IJ} \right\|} \left( \frac{K_{IJ}^{(t)}}{K_{IJ}^{(n)}} h_{IJ}^{\hat{L}} + \frac{K_{JI}^{(t)}}{K_{JI}^{(n)}} h_{JI}^{\hat{R}} \right) \quad (4.26)$$

são definidas como a projeção na direção normal ( $\mathcal{K}_{IJ}$ ) do tensor de permeabilidade e a respectiva constante ( $\Upsilon_{IJ}$ ).

Da mesma forma, pode-se discretizar o termo dispersivo da Eq. (3.23), fazendo uso da lei de Fick, como:

$$\left(\vec{f}_H \cdot \vec{N}\right)_{IJ} \simeq -\mathcal{D}_{IJ} \left\| \vec{IJ} \right\| [C_{\hat{R}} - C_{\hat{L}} - \varpi_{IJ} (C_J - C_I)] \quad (4.27)$$

onde

$$\mathcal{D}_{IJ} = \frac{D_{IJ}^{(n)} D_{JI}^{(n)}}{D_{IJ}^{(t)} h_{JI}^{\hat{R}} + D_{JI}^{(t)} h_{IJ}^{\hat{L}}}, \quad (4.28)$$

$$\varpi_{IJ} = \frac{\vec{\hat{L}} \cdot \vec{\hat{R}} \cdot \vec{IJ}}{\|\vec{IJ}\|^2} - \frac{1}{\|\vec{IJ}\|} \left( \frac{D_{IJ}^{(t)}}{D_{IJ}^{(n)}} h_{IJ}^{\hat{L}} + \frac{D_{JI}^{(t)}}{D_{JI}^{(n)}} h_{JI}^{\hat{R}} \right) \quad (4.29)$$

*Comentários:*

- Quando trabalhando com fenômenos que apresentam propriedades físicas isotrópicas, *i.e.* as componentes cruzadas do tensor de dispersão hidrodinâmica e do tensor de permeabilidade são nulas ( $D_{xy} = D_{yx} = 0$  ou  $k_{xy} = k_{yx} = 0$ ) e os termos  $\varpi_{IJ}$  ou  $\Upsilon_{IJ}$  desaparecem, e a formulação *MPFA-D* é reduzida para a formulação de diferenças finitas com aproximação de fluxo por dois pontos, *i.e.*, do tipo *TPFA* (*Two Point Flux Approximation*).
- Outra característica importante é que o método descrito anteriormente é desenvolvido de acordo com o critério de preservação de linearidade (Contreras, 2012; Gao and Wu, 2011; Manzini and Putti, 2007). O método garante que as soluções obtidas para o campo de pressão ou campo de concentração, sejam lineares por partes.

### 4.2.3 Tratamento dos Fluxos nas Faces de Contorno

A Eq. (4.21) é usada só para calcular os fluxos no interior do domínio do problema a solucionar, mas também se quer calcular os fluxos para cada uma das faces do contorno do problema. Estes fluxos devem ser calculados de acordo com o tipo de condição prescrita presente para cada um deles. Quando trabalhando com contornos que apresentam condições de Dirichlet, *i.e.*, com concentração ou pressão prescrita, o fluxo é obtido como:

$$\vec{f}_{IJ} \cdot \vec{N}_{IJ} = -\frac{\mathbf{K}_{IJ}^{(n)}}{h_{IJ}^{\hat{L}} \|\vec{IJ}\|} \left[ \left( \vec{J\hat{L}} \cdot \vec{J\hat{I}} \right) g_D(I) + \left( \vec{I\hat{L}} \cdot \vec{I\hat{J}} \right) g_D(J) - \|\vec{IJ}\|^2 u_{\hat{k}} \right] - \mathbf{K}_{IJ}^{(t)} (g_D(J) - g_D(I)) \quad (4.30)$$

sendo  $g_D(I)$  e  $g_D(J)$  os valores da função no contorno de Dirichlet  $g_D(x)$ , para os vértices  $I$  e  $J$  respectivamente (Gao and Wu, 2011; Contreras, 2012).

Do mesmo jeito, para problemas que apresentam condições de contorno de Neumann, i.e. fluxos prescritos, tem-se:

$$\vec{f}_{IJ} \cdot \vec{N}_{IJ} = g_N \left\| \vec{IJ} \right\| \quad (4.31)$$

Resumindo, o cálculo da vazão do fluido para o problema de pressão vai ser dado, por:

$$\left( \vec{v} \cdot \vec{N} \right)_{IJ} = \begin{cases} -\mathcal{K}_{IJ} \left\| \vec{IJ} \right\| \left[ p_{\hat{R}} - p_{\hat{L}} - \Upsilon_{IJ} (p_J - p_I) \right] & em \Omega, \\ -\frac{\mathcal{K}_{IJ}^{(n)}}{h_{IJ}^{\hat{L}} \left\| \vec{IJ} \right\|} \left[ \left( \vec{J\hat{L}} \cdot \vec{J\hat{I}} \right) g_D(I) + \left( \vec{I\hat{L}} \cdot \vec{I\hat{J}} \right) g_D(J) - \left\| \vec{IJ} \right\|^2 p_{\hat{k}} \right] - \\ - (g_D(J) - g_D(I)) \mathcal{K}_{IJ}^{(t)} & em \Gamma_D, \\ g_N \left\| \vec{IJ} \right\| & em \Gamma_N. \end{cases} \quad (4.32)$$

De forma semelhante, o calculo do fluxo hidrodinâmico é dado, por:

$$\left( \vec{f}_H \cdot \vec{N} \right)_{IJ} = \begin{cases} -\mathcal{D}_{IJ} \left\| \vec{IJ} \right\| \left[ C_{\hat{R}} - C_{\hat{L}} - \varpi_{IJ} (C_J - C_I) \right] & em \Omega, \\ -\frac{D_{IJ}^{(n)}}{h_{IJ}^{\hat{L}} \left\| \vec{IJ} \right\|} \left[ \left( \vec{J\hat{L}} \cdot \vec{J\hat{I}} \right) g_D(I) + \left( \vec{I\hat{L}} \cdot \vec{I\hat{J}} \right) g_D(J) - \left\| \vec{IJ} \right\|^2 C_{\hat{k}} \right] - \\ - (g_D(J) - g_D(I)) D_{IJ}^{(t)} & em \Gamma_D, \\ g_N \left\| \vec{IJ} \right\| & em \Gamma_N. \end{cases} \quad (4.33)$$

Assim como foi mostrado anteriormente, o cálculo do fluxo é obtido a partir da Eq. (4.21). As únicas incógnitas que faltam ser obtidas são os valores de  $u_I$  e  $u_J$  nos vértices  $I$  e  $J$ , respectivamente. Existem na literatura diferentes métodos para interpolar estes valores, como por exemplo, usando expansões em séries de Taylor (Huang and Kappen, 1998) ou expansões de ponto finito (Lu et al., 2007). No presente trabalho é usada uma interpolação de pesos explícitos propostos por Gao and Wu (2011) que encontra-se descrita em Contreras (2012) como segue.

Como é mostrado na Fig. 4.5, os pontos dinâmicos  $T_{\hat{k}}$  estão definidos como descrito a

seguir:

$$T_{\bar{k}} = \Theta(I, k)I + [1 - \Theta(I, k)]J \quad k = 1 \dots n(I) \quad (4.34)$$

onde  $\Theta(I, k)$ ,  $0 < \Theta(I, k) < 1$  é um parâmetro dinâmico. O método para este trabalho vai ser desenvolvido para  $\Theta(I, k) = \frac{1}{2}$  sendo assim  $T_{\bar{k}}$  é o ponto médio da face  $IJ$ .

Para simplificar as equações definem-se as seguintes expressões:

$$\eta_k^1 = \frac{\left\| \overrightarrow{IT_{\bar{k}}} \right\|}{h_{I_k}^{\hat{k}}}, \quad \eta_k^2 = \frac{\left\| \overrightarrow{IT_{\bar{k}+1}} \right\|}{h_{I_{k+1}}^{\hat{k}}} \quad (4.35)$$

O valor de um vértice desconhecido  $I$ , pode ser expresso como uma combinação linear, da forma:

$$u_I = \sum_{k=1}^{\mathcal{N}(I)} \omega_k u_{\hat{k}} \quad (4.36)$$

onde  $\mathcal{N}(I)$  é o número de células que estão compartilhando o vértice  $I$  e  $\omega_{\hat{k}}$  é o peso atribuído a  $u_{\hat{k}}$ , que é o valor da função no centro do  $k$ -ésimo VC. O parâmetro  $\omega_{\hat{k}}$  é definido como:

$$\omega_{\hat{k}} = \frac{\Psi_k}{\sum_{k=1}^{\mathcal{N}(I)} \Psi_k} \quad (4.37)$$

onde:

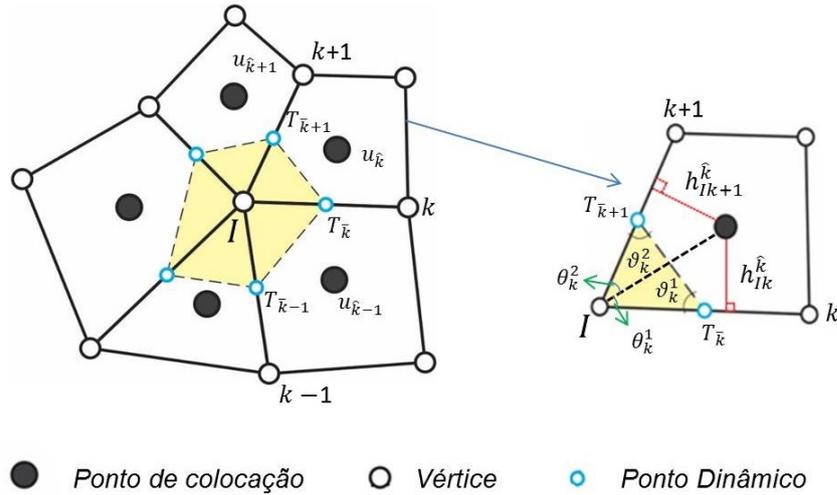
$$\Psi_k = \mathbf{K}_{\hat{k}}^{(n),1} \eta_k^1 \xi_k + \mathbf{K}_{\hat{k}}^{(n),2} \eta_k^2 \xi_{k+1} \quad (4.38)$$

$$\xi_k = \frac{\overset{\sim}{\mathbf{K}}_{\hat{k}-1}^{(n)} \cot v_{k-1}^1 + \mathbf{K}_{\hat{k}}^{(n)} \cot v_k^2 + \overset{\sim}{\mathbf{K}}_{\hat{k}-1}^{(t)} - \overset{\sim}{\mathbf{K}}_{\hat{k}}^{(t)}}{\mathbf{K}_{\hat{k}-1}^{(n),2} \cot \theta_{k-1}^2 + \mathbf{K}_{\hat{k}}^{(n),1} \cot \theta_k^1 - \overset{\sim}{\mathbf{K}}_{\hat{k}-1}^{(t),2} + \overset{\sim}{\mathbf{K}}_{\hat{k}}^{(t),1}} \quad (4.39)$$

$$\overset{\sim}{\mathbf{K}}_{\hat{k}}^{(n)} = \frac{(\overrightarrow{\mathcal{R}T_{\bar{k}}T_{\bar{k}+1}})^T \mathcal{K}_k (\overrightarrow{\mathcal{R}T_{\bar{k}}T_{\bar{k}+1}})}{\left| \overrightarrow{T_{\bar{k}}T_{\bar{k}+1}} \right|^2} \quad (4.40)$$

$$\tilde{K}_k^{(t)} = \frac{(\mathcal{R}\overrightarrow{T_k T_{k+1}})^T \mathcal{K}_k \overrightarrow{T_k T_{k+1}}}{|\overrightarrow{T_k T_{k+1}}|^2} \quad (4.41)$$

Figura 4.5: Notação usada na definição dos pesos ao redor do vértice  $I$ .



Fonte: Adaptada de Contreras (2012).

Finalmente, na obtenção dos pesos nos vértices de contorno quando o VC possui um vértice de contorno tipo Dirichlet, o seu valor é fornecido e utilizado diretamente na aproximação dos fluxos na face ( $u_I = g_D$ ). Quando a condição de contorno é tipo Neumann (Eq. (4.31)), é possível fazer o mesmo tratamento que foi feito para obter os valores de  $u$  nos vértices internos do domínio. Na Fig. 4.6, encontra-se a notação usada para um vértice de contorno tipo Neumann. O cálculo pode ser expresso como:

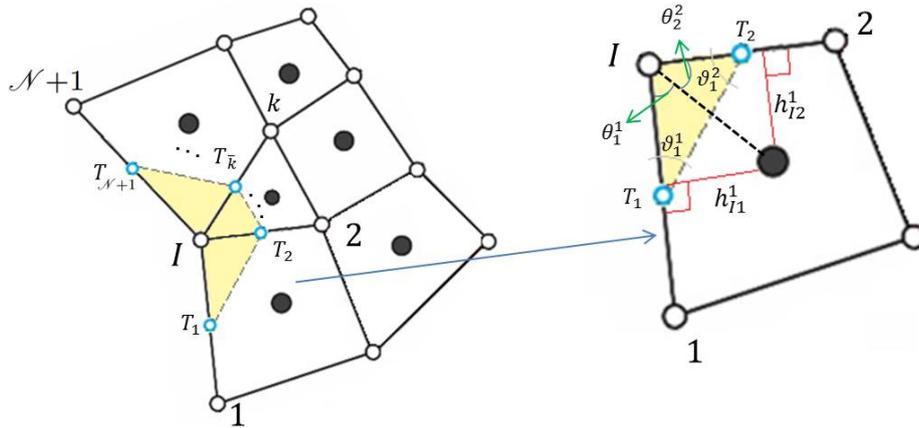
$$u_I = \frac{1}{\sum_{k=1}^{\mathcal{N}(I)} \Psi_k} \left\{ \sum_{k=1}^{\mathcal{N}(I)} \Psi_k u_{\hat{k}} - \sum_{\hat{k}=1, \mathcal{N}+1} \left[ 1 + \xi(\hat{k}) \right] \left| \overrightarrow{IT_{\hat{k}}} \right| g_N \right\} \quad (4.42)$$

onde,

$$\xi_k = \begin{cases} \frac{\tilde{K}_1^{(n)} \cot v_1^2 - \tilde{K}_1^{(t)}}{\tilde{K}_1^{(n)} \cot \theta_1^1 + \tilde{K}_1^{(t)}}, & k = 1; \\ \text{Eq. (4.38)}, & (2 \leq k \leq \mathcal{N}); \\ \frac{\tilde{K}_{\mathcal{N}}^{(n)} \cot v_{\mathcal{N}}^2 - \tilde{K}_{\mathcal{N}}^{(t)}}{\tilde{K}_{\mathcal{N}}^{(n)} \cot \theta_{\mathcal{N}}^1 + \tilde{K}_{\mathcal{N}}^{(t)}}, & k = \mathcal{N} + 1. \end{cases} \quad (4.43)$$

Maiores detalhes da dedução podem ser vistos em Gao and Wu (2011) e em Contreras (2012).

Figura 4.6: Notação usada na definição dos pesos num nó de contorno tipo Neumann.



Fonte: Autor.

#### 4.2.4 Discretização do Fluxo Advectivo

Nas Eq. (4.5) e Eq. (4.6) tem-se o fluxo advectivo, o qual pode ser aproximado como:

$$\int_{\Gamma_{\bar{k}}} \vec{f}_A \cdot \vec{n} d\Gamma_{\bar{k}} \cong \sum_{IJ \in \Gamma_{\bar{k}}} C_{(IJ)_{\bar{k}}} \left( \vec{v} \cdot \vec{N} \right)_{(IJ)_{\bar{k}}} \quad (4.44)$$

onde o termo  $\left( \vec{v} \cdot \vec{N} \right)_{(IJ)_{\bar{k}}}$  pode ser obtida de acordo com a Eq. (4.32). A aproximação da concentração na face pode ser tratada de distintas maneiras, uma das mais simples é fazer uma aproximação à montante e de primeira ordem no espaço (*First Order Upwind-FOU*). Esse método usa um esquema de diferenças finitas para simular numericamente a propagação de informação (Carvalho, 2005; Hirsch, 2007). Historicamente, este método foi proposto por Courant et al. (1952).

A Fig. 4.7 apresenta o fluxo advectivo na face  $IJ$ , o qual pode ser aproximado pelas Eq. (4.18) e Eq. (4.19), que satisfazem a conservação da massa, Eq. (4.20). A concentração para o VC pelo método *FOU* (Patankar, 1980; Versteeg and Malalasekera, 1995) pode ser expressa como:

$$C_{(IJ)\hat{k}} = \begin{cases} C_{\hat{L}} & \text{se } \left(\vec{v} \cdot \vec{N}\right)_{(IJ)\hat{k}}^{\hat{L}} > 0 \\ C_{\hat{R}} & \text{se } \left(\vec{v} \cdot \vec{N}\right)_{(IJ)\hat{k}}^{\hat{L}} < 0 \end{cases} \quad (4.45)$$

De forma mais geral, pode-se escrever o fluxo na face  $IJ$  com respeito ao volume de controle  $\hat{L}$ , como:

$$C_{(IJ)\hat{k}} \left(\vec{v} \cdot \vec{N}\right)_{(IJ)\hat{k}}^{\hat{L}} = C_{\hat{L}} \vec{f}_+^{\hat{L}} + C_{\hat{R}} \vec{f}_-^{\hat{L}}, \quad (4.46)$$

onde,

$$\vec{f}_+^{\hat{L}} = \max \left\{ \left(\vec{v} \cdot \vec{N}\right)_{(IJ)\hat{k}}^{\hat{L}}, 0 \right\}, \quad \vec{f}_-^{\hat{L}} = \min \left\{ \left(\vec{v} \cdot \vec{N}\right)_{(IJ)\hat{k}}^{\hat{L}}, 0 \right\}. \quad (4.47)$$

Do mesmo jeito, podemos definir o fluxo na face com respeito ao elemento  $\hat{R}$ , como:

$$C_{(JI)\hat{k}+1} \left(\vec{v} \cdot \vec{N}\right)_{(JI)\hat{k}+1}^{\hat{R}} = C_{\hat{L}} \vec{f}_+^{\hat{R}} + C_{\hat{R}} \vec{f}_-^{\hat{R}}, \quad (4.48)$$

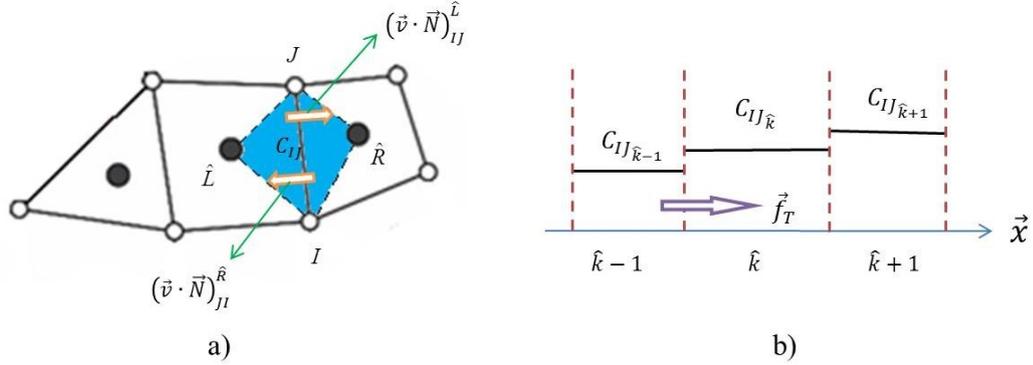
sendo

$$\vec{f}_+^{\hat{R}} = \max \left\{ \left(\vec{v} \cdot \vec{N}\right)_{(JI)\hat{k}+1}^{\hat{R}}, 0 \right\}, \quad \vec{f}_-^{\hat{R}} = \min \left\{ \left(\vec{v} \cdot \vec{N}\right)_{(JI)\hat{k}+1}^{\hat{R}}, 0 \right\}, \quad (4.49)$$

que satisfazem a continuidade do fluxo na face  $IJ$ , Eq. (4.20).

Uma limitação ao aproximar a concentração pelo método *FOU* tem a ver com o fato de que este tipo de método apresenta um excesso de difusão numérica artificial (Carvalho, 2005). A Fig. 4.7 representa esquematicamente os fluxos na face e a aproximação da concentração ao longo do eixo  $x$  pelo método FOU.

Figura 4.7: (a) Notação usada para a discretização do fluxo advectivo pelo método *FOU*. (b) Distribuição da concentração na discretização do fluxo advectivo pelo método *FOU*.



Fonte: Autor.

### Métodos MUSCL (*Monotone Upstream Scheme for Conservation Laws*)

Como foi anteriormente mencionado, aproximações através de métodos de primeira ordem apresentam uma grande difusão numérica, pelo qual, esquemas de alta ordem de aproximação são utilizados na simulação de equações diferenciais parciais onde a alta precisão é necessária, em problemas com presença de choques ou discontinuidades (Hirsch, 2007). Uma das estratégias é usar uma aproximação tipo MUSCL (*Monotonic Upstream-Centered Scheme for Conservation Laws*), proposta por Van Leer (1979). Essa estratégia consiste na reconstrução da variável em cada volume de controle avaliado por um polinômio linear definido por partes, usando apenas as informações das células vizinhas próximas (Fig. 4.8), i.e., uma distribuição linear é definida a partir da média dos valores associados aos volumes de controle da vizinhança próxima (Souza, 2015; Galindez, 2014). Com base nisso, é possível reconstruir os fluxos nas superfícies do VC de maneira a se obter uma melhor aproximação para os fluxos  $\vec{f}_{A_{IJ}}(C_{(IJ)\hat{k}})$  (Eq. (4.6)), nestas interfaces.

É possível escrever os valores reconstruídos da concentração nas interfaces dos volumes de controle utilizando uma expansão modificada e truncada em séries de Taylor da função, sendo expressa como:

$$C_{(IJ)\hat{L}}^+ = C_{\hat{L}} + \frac{1}{2}\delta C_{\hat{L}} + \frac{k}{4}\delta^2 C_{\hat{L}} \quad (4.50)$$

$$C_{(IJ)\hat{L}}^- = C_{\hat{L}} - \frac{1}{2}\delta C_{\hat{L}} + \frac{k}{4}\delta^2 C_{\hat{L}} \quad (4.51)$$

sendo

$$\delta C_{\hat{L}} = C_{\hat{R}} - C_{\hat{L}}; \quad \delta^2 C_{\hat{L}} = C_{\hat{R}} - 2C_{\hat{L}} + C_{\hat{E}} \quad (4.52)$$

As Eq. (4.50) e Eq. (4.51) podem ser reescritas, de acordo com Carvalho (2005) e Hirsch (2007), como:

$$C_{(IJ)\hat{L}}^+ \simeq C_{\hat{L}} + \frac{\ell^{\hat{L}}}{4} \left[ (1 - \lambda) \Delta C_{\hat{L}}^- + (1 + \lambda) (C_{\hat{R}} - C_{\hat{L}}) \right] \quad (4.53)$$

$$C_{(IJ)\hat{L}}^- \simeq C_{\hat{L}} - \frac{\ell^{\hat{R}}}{4} \left[ (1 - \lambda) \Delta C_{\hat{L}}^+ + (1 + \lambda) (C_{\hat{R}} - C_{\hat{L}}) \right] \quad (4.54)$$

onde,

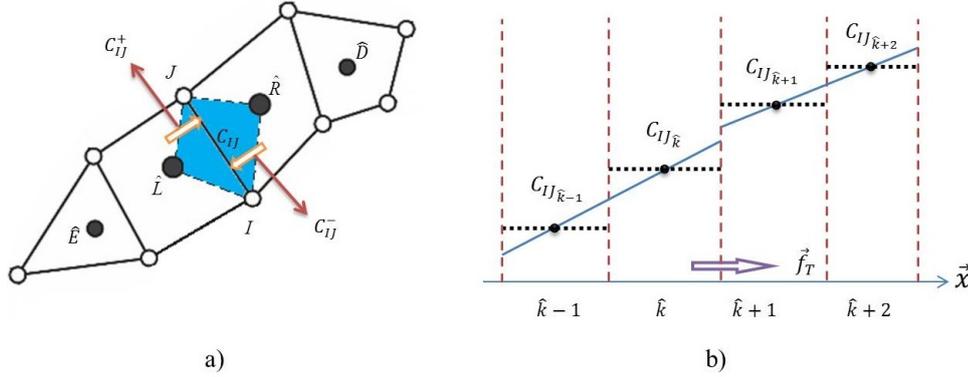
$$\Delta C_{\hat{L}}^- = (C_{\hat{L}} - C_{\hat{E}}) = 2\vec{\hat{L}\hat{R}} \cdot \nabla C_{\hat{L}} - (C_{\hat{R}} - C_{\hat{L}}) \quad (4.55)$$

$$\Delta C_{\hat{L}}^+ = (C_{\hat{D}} - C_{\hat{R}}) = 2\vec{\hat{L}\hat{R}} \cdot \nabla C_{\hat{R}} - (C_{\hat{R}} - C_{\hat{L}}) \quad (4.56)$$

Nas equações acima, os subscritos (+) e (-) são usados para indicar os lados à esquerda e à direita da superfície de controle  $IJ$ ,  $C_{\hat{E}}$  representa a concentração do VC à esquerda de  $C_{\hat{L}}$ ,  $C_{\hat{D}}$  representa a concentração do VC à direita de  $C_{\hat{R}}$ ,  $\ell$  é um termo limitador de inclinação ( $\ell = 0$ , o esquema se reduz ao método de primeira ordem.  $\ell = 1$ , o esquema vai ter uma aproximação de ordem mais alta); e  $\lambda$  é um parâmetro que vai definir a ordem de aproximação do método. Este fator pode ser definido como segue:

$$\left\{ \begin{array}{ll} \lambda = -1 & \text{Método de ponderação a montante de segunda ordem.} \\ \lambda = 0 & \text{Método Fromm.} \\ \lambda = 1/3 & \text{Método de ponderação a montante de terceira ordem.} \\ \lambda = 1 & \text{Método de diferenças centradas com três pontos.} \end{array} \right.$$

Figura 4.8: (a) Notação usada para a discretização do fluxo advectivo pelo método *MUSCL*. (b) Distribuição da concentração na discretização do fluxo advectivo pelo método *MUSCL* em 1-D.



Existem diversos limitadores usados em aproximações de segunda ordem mas neste trabalho foi feito uso do limitador de face de Van Aldaba, que analisa apenas os VC adjacentes à face em questão e que foi usado no trabalho de Carvalho (2005), apresentando bons resultados. O limitador é definido como segue:

$$\ell_{IJ}^{\hat{L}} = \max \left( 0, \frac{2\Delta C_{\hat{L}}^-(C_{\hat{R}} - C_{\hat{L}}) + \varepsilon}{(\Delta C_{\hat{L}}^-)^2 + (C_{\hat{R}} - C_{\hat{L}})^2 + \varepsilon} \right), \quad (4.57)$$

$$\ell_{IJ}^{\hat{R}} = \max \left( 0, \frac{2\Delta C_{\hat{L}}^+(C_{\hat{R}} - C_{\hat{L}}) + \varepsilon}{(\Delta C_{\hat{L}}^+)^2 + (C_{\hat{R}} - C_{\hat{L}})^2 + \varepsilon} \right) \quad (4.58)$$

sendo  $\varepsilon$  um coeficiente de ordem  $\varepsilon \leq \mathcal{O}(\Delta_{IJ})^2$  usado para evitar singularidades no limitador (Carvalho, 2005).

Quando surgem oscilações espúrias na aproximação da variável na face  $IJ$  causadas por descontinuidades no campo de concentração, por exemplo, é possível introduzir outro limitador de nó que garanta aproximar a função evitando oscilações (Souza, 2015). Desta maneira, o novo limitador nas Eq. (4.53) e Eq. (4.54) vai ser definido como:

$$\ell^{\hat{L}} = \ell_{IJ}^{\hat{L}} \ell_{\omega_{\hat{L}}}; \quad \ell^{\hat{R}} = \ell_{IJ}^{\hat{R}} \ell_{\omega_{\hat{R}}} \quad (4.59)$$

onde  $\ell_{\omega_{\hat{L}}}$  e  $\ell_{\omega_{\hat{R}}}$  representam o “limitador de nó” para os VC  $\hat{L}$  e  $\hat{R}$  respectivamente. Este segundo limitador avalia todos os VCs que são vizinhos daqueles dois nós que definem a face em questão Woodfield et al. (2004).

O limitador pode ser escrito para o elemento  $\hat{L}$  como segue:

$$\ell_{\omega_{\hat{L}}} = \begin{cases} 1 & \text{se } (C^{max} - C^{min}) \leq \varepsilon \\ 0 & \text{se } \Phi_{\hat{L}} \geq 1 \text{ ou } \Phi_{\hat{L}} \leq 0 \\ 1 & \text{se } \delta \leq \Phi_{\hat{L}} \leq (1 - \delta) \\ \Phi_{\hat{L}}/\delta & \text{se } 0 < \Phi_{\hat{L}} < \delta \\ (1 - \Phi_{\hat{L}})/\delta & \text{se } (1 - \delta) < \Phi_{\hat{L}} < 1 \end{cases} \quad (4.60)$$

onde  $\delta$  é um coeficiente que ajuda assegurar que a transição de primeira ordem para outra de alta ordem ocorra suavemente em presença de gradientes acentuados. O valor recomendado por Carvalho (2005) é  $\delta = 0,2$ .  $C^{max}$  e  $C^{min}$  são os valores da concentração máxima e mínima, respectivamente, de todos os volumes de controle com vizinhança imediata ao VC  $\hat{L}$ , exceto o valor dele mesmo (Souza, 2015) e  $\Phi_{\hat{L}}$  é um parâmetro que demarca a atuação do limitador de *Woodfield* e é definido como:

$$\Phi_{\hat{L}} = \frac{C_{\hat{L}} - C^{min}}{C^{max} - C^{min}} \quad (4.61)$$

Finalmente o fluxo advectivo para o elemento  $\hat{k}$  pode ser calculado na face  $IJ$  como:

$$\left(\vec{f}^A\right)_{IJ} = C_{(IJ)\hat{L}}^+ \left(\vec{v} \cdot \vec{N}\right)_{IJ}^{\hat{L}} + C_{(IJ)\hat{L}}^- \left(\vec{v} \cdot \vec{N}\right)_{JI}^{\hat{R}} \quad (4.62)$$

## 4.2.5 Cálculo Implícito da Pressão

Considerando a Eq. (3.6), temos:

$$\nabla \cdot (-\underline{K}\nabla p) = Q_T \quad (4.63)$$

onde  $\underline{K}$  é a permeabilidade,  $p$  é a pressão e  $Q_T$  é a vazão volumétrica específica total.

Integrando a equação em cada volume de controle  $\hat{k}$  sobre todo o domínio físico  $\Omega_{\hat{k}}$  e

lembrando que  $\vec{v} = -\underline{K}\nabla p$ , obtemos:

$$\int_{\Omega_{\hat{k}}} \nabla \cdot \vec{v} d\Omega_{\hat{k}} = \int_{\Omega_{\hat{k}}} Q_{T_{\hat{k}}} d\Omega_{\hat{k}} \quad (4.64)$$

Aplicando o teorema da divergência de Gauss, temos:

$$\int_{\Gamma_{\hat{k}}} \vec{v} \cdot \vec{n} d\Gamma_{\hat{k}} = \int_{\Omega_{\hat{k}}} Q_{T_{\hat{k}}} d\Omega_{\hat{k}} \quad (4.65)$$

Ao aproximar o fluxo em cada face  $IJ_{\hat{k}}$  dos VC e fazendo uso do teorema do valor médio (Ben-Israel and Gilbert, 2002; Floater, 2003), a equação pode ser aproximada como:

$$\sum_{IJ \in \Gamma_{\hat{k}}} \left( \vec{v} \cdot \vec{N} \right)_{IJ_{\hat{k}}} \cong Q_{T_{\hat{k}}} \mathbb{V}_{\hat{k}} \quad (4.66)$$

onde  $\vec{N}_{IJ_{\hat{k}}}$  é o vetor área normal à face  $IJ_{\hat{k}}$  e  $\mathbb{V}_{\hat{k}}$  é o volume (área em 2-D) de cada volume de controle (Contreras, 2012). O termo  $\left( \vec{v} \cdot \vec{N} \right)_{IJ_{\hat{k}}}$  é obtido a partir das Eq. (4.32) e Eq. (4.36), com  $u_{\hat{k}} = p_{\hat{k}}$ .

A determinação para o cálculo das pressões foi feita utilizando o método proposto por Gao and Wu (2011) e utilizado em Contreras (2012), de forma implícita baseado no fato que o balanço de fluxo encontra-se determinado para todas as células (Eq. (4.24)), sendo possível criar um sistema linear de equações, cujo número de incógnitas (pressão), nos pontos de colocação das células, e o número de equações são iguais ao número de células. Definindo assim um sistema algébrico, linear de equações como segue:

$$\left[ \underline{T} \right] \left[ p \right] = \left[ \underline{Q} \right] \quad (4.67)$$

onde  $\underline{T}$  é a matriz de transmissibilidade obtida a da Eq. (4.21) ,  $p$  é o campo de pressões e  $\underline{Q}$  é o vetor dos termos independentes (fontes, sumidouros, condições de contorno).

#### 4.2.6 Formulação Explícita da Equação de Advecção-Dispersão-Reação

A Eq. (4.3) representa o movimento de um soluto no interior de um meio poroso saturado com um fluido que se desloca com uma velocidade de escoamento  $\vec{v}$ . Esta equação foi discretizada espacialmente usando um *FVM* centrado na célula. O último termo da equação a ser discretizado é o termo que apresenta a derivada temporal.

Uma das abordagens mais usadas é discretizar o termo temporal pelo método de Euler Explícito. Uma vez discretizados todos os termos do lado direito da Eq. (4.3), temos um sistema de equações diferenciais ordinárias que pode ser escrito como:

$$\int_{\Omega_{\hat{k}}} \frac{dC}{dt} d\Omega_{\hat{k}} = \mathcal{R}(C_{\hat{k}}) \quad (4.68)$$

$$\left. \frac{dC}{dt} \right|_{\hat{k}} \mathbb{V}_{\hat{k}} = \mathcal{R}(C_{\hat{k}}), \quad (4.69)$$

onde  $\mathcal{R}(u)$  representa o resíduo que já foi determinado totalmente pela discretização espacial dos fluxos e os termos de fonte e sumidouros em cada volume de controle e  $\mathbb{V}_{\hat{k}}$  é o volume do  $\hat{k}$ -ésimo VC. (Helmig, 1997; Carvalho, 2005; Hirsch, 2007; Galindez, 2014).

Para um instante inicial  $t^0$  sabemos a solução inicial da equação, mas nós se quer saber a solução para tempos posteriores. Isto é traduzido numericamente assumindo-se que nós avançamos no tempo de um instante  $n$  para um instante de tempo  $n + 1$ . Ao considerar que se conhece a solução no instante  $n$  e se quer saber a evolução no tempo  $n + 1$  é muito lógico usar um esquema de diferenças finitas avançadas, de modo que é possível escrever a equação a Eq. (4.69) para um volume de controle  $\hat{k}$ , como:

$$\frac{C_{\hat{k}}^{n+1} - C_{\hat{k}}^n}{\Delta t} = \frac{1}{\mathbb{V}_{\hat{k}}} \mathcal{R}(C_{\hat{k}}^n), \quad (4.70)$$

ou ainda, rearrumando os termos, tem-se:

$$C_{\hat{k}}^{n+1} = C_{\hat{k}}^n + \frac{\Delta t}{\mathbb{V}_{\hat{k}}} \mathcal{R}(C_{\hat{k}}^n), \quad (4.71)$$

Esta aproximação é de primeira ordem ( $\mathcal{O}(\Delta t)$ ). Existem outros tipos de formulações que envolvem aproximações implícitas de primeira ordem no tempo e aproximações de ordem superiores. Como o método de Euler avançado é um esquema de aproximação explícito e de primeira ordem, a discretização deve satisfazer o critério de estabilidade (*Courant-Friedrichs-Levy CFL*) Courant et al. (1952); Lyra (1994); Helmig (1997); Carvalho (2005); Hirsch (2007).

Fazendo uso da Eq. (4.71) e das Eq. (4.5) a Eq. (4.7), a Eq. (4.3) finalmente pode ser

escrita na forma discreta, como:

$$C_{\hat{k}}^{n+1} = C_{\hat{k}}^n - \frac{\Delta t}{\mathbb{V}_{\hat{k}}} \left[ \sum_{IJ \in \Gamma_{\hat{k}}} \left( \vec{f}_T \cdot \vec{N} \right)_{IJ_{\hat{k}}} \right]^n - \gamma \Delta t C_{\hat{k}}^n \quad (4.72)$$

$$C_{\hat{k}}^{n+1} = C_{\hat{k}}^n - \frac{\Delta t}{\mathbb{V}_{\hat{k}}} \left[ \sum_{IJ \in \Gamma_{\hat{k}}} (\mathcal{D}_H \nabla C)_{IJ_{\hat{k}}} \cdot \vec{N}_{IJ_{\hat{k}}} - \sum_{IJ \in \Gamma_{\hat{k}}} \left( C \vec{v} \cdot \vec{N} \right)_{IJ_{\hat{k}}} + \gamma \Delta t C_{\hat{k}}^n \right]^n \quad (4.73)$$

onde o  $C_{IJ_{\hat{k}}}$  para o fluxo advectivo pode ser aproximado usando a Eq. (4.46) ou a Eq. (4.62).

O critério de estabilidade *CFL* (*Courant et al., 1952; Hirsch, 2007*), pode ser estabelecido de acordo com as expressões descritas por Colella (1990) e Hurtado (2005), e deve ter em conta a influência das aproximações de alta ordem, como é mencionado em Kim (2012) e Souza (2015). Desta forma, o cálculo do passo de tempo pode ser escrito como segue:

$$\Delta t \leq \frac{CFL \Delta h^2}{\left( \|\mathcal{D}_H\| + \max_{IJ \in \Gamma_{\hat{k}}} \left[ \frac{\vec{v} \cdot \vec{N}}{A} \right]_{IJ_{\hat{k}}} \Delta h + \gamma \Delta h \right) (2k + 1)}; \quad 0 \leq CFL \leq 1 \quad (4.74)$$

onde  $\Delta h$  é um comprimento característico da malha computacional e  $A$  é a área de cada face  $IJ$ . No presente trabalho foi usado o comprimento entre os centróides de dois VC adjacentes. O termo  $(2k + 1)$  leva em conta o grau do polinômio reconstrutor  $k$ , utilizado na obtenção de aproximações de alta ordem. Se  $k = 0$  o polinômio reconstrutor é de grau zero (primeira ordem), e se  $k = 1$ , o polinômio reconstrutor é de grau um (segunda ordem) (Souza, 2015).

### 4.3 Avaliação de Acurácia dos Métodos Numéricos

Para avaliar a acurácia dos métodos numéricos no presente capítulo é necessário definir a norma que vai ser usada para avaliar a taxa de convergência do método numérico.

Primeiramente, é definido o erro assintótico de truncamento dado por Hyman et al. (1997) como segue:

$$\|E_h\| \cong Ah^R + \mathcal{O}(h^{R+1}) \quad (4.75)$$

onde  $h$  é o comprimento de cada volume de controle,  $A$  é uma constante que representa a taxa de convergência que é independente de  $h$ , e  $R$  é a ordem do erro.

A taxa de convergência numérica pode ser calculada como:

$$R \cong \frac{\log [\|E\| (h_2) / \|E\| (h_1)]}{\log (h_2/h_1)} \quad (4.76)$$

onde  $h_1$  e  $h_2$  são os comprimentos característicos de cada VC de duas malhas obtidas através de refinamentos sucessivos, e  $\|E\| (h_2)$  e  $\|E\| (h_1)$  são os erros correspondentes de cada malha (Carvalho, 2005; Gao and Wu, 2011; Galindez, 2014; Souza, 2015). No presente trabalho as taxas de convergência foram estimadas utilizando as normas do máximo  $\|E\|_{L_\infty}$  e a norma *RMS* (*Root Mean Square*)  $\|E\|_{RMS}$ , definidas como segue:

$$\|E\|_{L_\infty} = \max \|E_{\hat{k}}\| \quad (4.77)$$

$$\|E\|_{RMS} = \left( \sum_{\hat{k}=1}^{\mathcal{N}(\hat{k})} |E_{\hat{k}}|^2 / \mathcal{N}(\hat{k}) \right)^{1/2}, \quad (4.78)$$

sendo  $E_{\hat{k}} = C_{\text{Numérica}_{\hat{k}}} - C_{\text{Exata}}$  (Carvalho, 2005; Galindez, 2014; Souza, 2015).

## Capítulo 5

# Resultados Numéricos

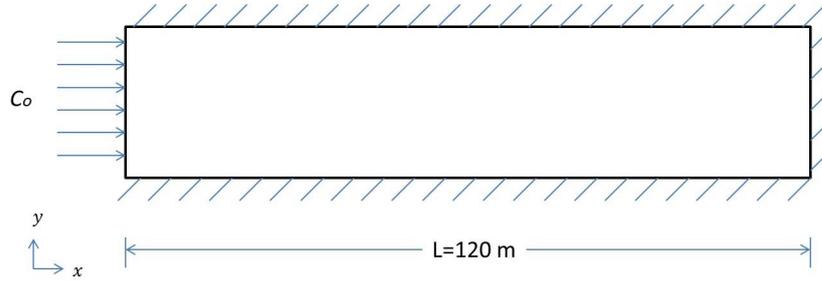
No presente capítulo, são apresentados alguns exemplos de problemas unidimensionais e bidimensionais que foram resolvidos fazendo uso da formulação numérica descrita no capítulo anterior.

Para efeitos de simplificação, a porosidade e viscosidade são consideradas como unitárias. Na aproximação pelo método *MUSCL* serão usados os parâmetros de  $\lambda = 1/3$  (método de ponderação a montante de terceira ordem) e  $\delta = 0,2$  que são recomendados em Carvalho (2005). Em todos os problemas considerados, é inicialmente pré-calculada a velocidade de Darcy a partir da equação da pressão de forma implícita, pelo método *MPFA-D* apresentado no capítulo anterior e usando-se o valor da velocidade, foram obtidos os coeficientes de dispersão longitudinal e transversal. Finalmente, é resolvida a equação da concentração. Serão apresentados os seguintes problemas: o transporte unidimensional de um soluto traçador num meio poroso sem termo de reação, o transporte unidimensional de solutos traçadores em meios porosos com termo de decaimento radioativo, o transporte de solutos traçadores num meio poroso bidimensional com uma fonte contínua a montante, o transporte bidimensional de solutos traçadores num meio poroso com razão de dispersão hidrodinâmica não unitária, o transporte bidimensional de solutos traçadores a partir de um pulso transiente localizado a montante e o transporte bidimensional de solutos traçadores em meios porosos heterogêneos e dispersão hidrodinâmica isotrópica.

### 5.1 Transporte Unidimensional de Solutos Traçadores em Meios Porosos

Os exemplos aqui apresentados são problemas que foram adaptados por Carvalho (2005) do livro de Sun (1996). Neste exemplo, é considerado um soluto contaminante que é injetado num meio isotrópico homogêneo a montante. As dimensões geométricas do problema estão especificadas na Fig. 5.1. O transporte do soluto traçador é considerado de tipo unidimensional e não vamos considerar termos de fonte ou sumidouro.

Figura 5.1: Esquema de um meio isotrópico homogêneo para o problema de transporte unidimensional de um soluto traçador em um meio poroso.



Fonte: Adaptada de Carvalho (2005).

A Eq. (3.21) pode ser reescrita como:

$$\frac{\partial C}{\partial t} = D_L \frac{\partial^2 C}{\partial x^2} - v \frac{\partial C}{\partial x}; \quad 0 < x < 120 \text{ m} \quad (5.1)$$

sendo  $D_{xx} = D_L$ , o coeficiente de dispersão longitudinal.

Do mesmo modo, a Eq. (3.6) pode ser reescrita como:

$$\frac{\partial^2 p}{\partial x^2} = -\frac{Q}{K} \quad 0 < x < 120 \text{ m} \quad (5.2)$$

Foram usadas as seguintes condições iniciais e de contorno:

- Para a equação da pressão:

$$p(0, t) = p_0 \quad t \geq 0 \quad (5.3)$$

$$p(120, t) = 0 \quad t \geq 0 \quad (5.4)$$

- Para a equação da concentração:

$$C(x, 0) = 0 \quad 0 \leq x \leq 120 \text{ m} \quad (5.5)$$

$$C(0, t) = C_0 \quad t \geq 0 \quad (5.6)$$

$$C(120, t) = 0 \quad t \geq 0 \quad (5.7)$$

A solução analítica para este problema é obtida em Sun (1996) sendo:

$$C(x, t) = \frac{C_0}{2} \left\{ \operatorname{erfc} \left[ \frac{x - vt}{2\sqrt{D_L t}} \right] + \exp \left( \frac{vx}{D_L} \right) \operatorname{erfc} \left[ \frac{x + vt}{2\sqrt{D_L t}} \right] \right\} \quad (5.8)$$

onde  $\operatorname{erfc}$  é a função erro complementar de Gauss (Dias, 2003), definida como:

$$\operatorname{erfc}(x) = 1 - \operatorname{erf}(x) = 1 - \frac{2}{\sqrt{\pi}} \int_0^x \exp(-\xi^2) dt; \quad \xi = \frac{x + vt}{2\sqrt{D_L t}} \quad (5.9)$$

### 5.1.1 Problema Fortemente Dispersivo

De acordo com Carvalho (2005) e Batul (2005), os dados fornecidos para este problema são:  $p_0 = 10 \text{ Pa}$ ,  $C_0 = 10 \text{ g/m}^3$ ,  $\alpha_L = 10$ ,  $D_0 = 2 \cdot 10^{-9} \text{ m}^2/\text{dia}$ . Os tensores de permeabilidade e tortuosidade são respectivamente:

$$\underline{K} = \begin{bmatrix} 10 & 0 \\ 0 & 10 \end{bmatrix}, \quad \underline{\tau} = \begin{bmatrix} 0,5 & 0 \\ 0 & 0,5 \end{bmatrix}$$

A malha usada para a discretização espacial foi uma malha não estruturada triangular como mostra a Fig. 5.5 (a), na qual, o espaçamento médio entre os nós adjacentes é  $\Delta x = 7,5 \text{ m}$ , gerando em total 16 divisões ao longo do eixo  $x$  e duas no eixo  $y$ . Finalmente o tempo de simulação foi  $t = 30$  dias com critério de estabilidade de Courant de  $CFL = 0,2$ .

De acordo com estes dados, foram obtidos os seguintes valores para a velocidade média:  $\vec{v} = 1 \text{ m/dia}$  e o coeficiente de dispersão longitudinal:  $D_L = 10 \text{ m}^2/\text{dia}$ .

O número de Peclet local pode ser definido para a direção  $x$  como:

$$Pe = \frac{|\vec{v}_x| \Delta x}{D_L} = 0,75 \quad (5.10)$$

Na Fig. 5.2, é apresentada a pressão do reservatório ao longo do eixo  $x$ , obtida pelo método *MPFA-D*. Pode-se observar que a pressão se comporta de forma linear ao longo do meio poroso.

A Fig. 5.3 mostra o campo de concentração do soluto traçador. As isolinhas que estão presentes em preto representam os valores da concentração obtidas pelos métodos *FOU-MPFA-D*, as azuis, representam os valores da concentração pelos métodos *MUSCL-MPFA-D*, e as vermelhas, representam os valores das isolinhas da concentração obtidas pelos métodos *MUSCL-Woodfield-MPFA-D*. O instante de tempo de simulação foi de  $t = 30$  dias.

Para uma melhor compreensão dos resultados, na Fig. 5.4 apresentam-se soluções da concentração do soluto ao longo do eixo  $x$ , obtidas pelo método *MPFA-D* no fluxo de dispersão hidrodinâmica e pelos métodos *FOU*, *MUSCL* e *MUSCL-Woodfield* para o fluxo advectivo, usando o mesmo instante de tempo de simulação de  $t = 30$  dias. Em todas estas figuras utilizou-se a malha com 16 divisões.

Figura 5.2: Cálculo da pressão ao longo do eixo  $x$  pelo método *MPFA-D* para o problema de transporte 1D.

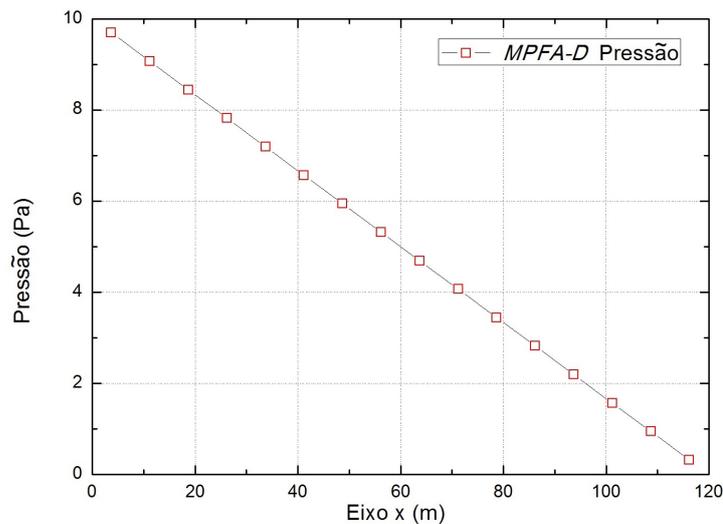


Figura 5.3: Contorno de concentração do soluto traçador e isolinhas de concentração obtidas usando os métodos *FOU-MPFA-D* (preto), *MUSCL-MPFA-D* (azul) e *MUSCL-Woodfield-MPFA-D* (vermelho), para o problema de transporte 1D em  $t = 30$  dias, e malha com 16 divisões.

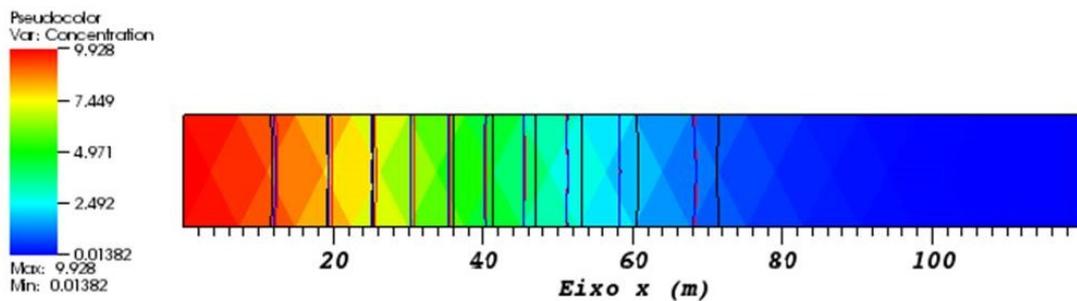
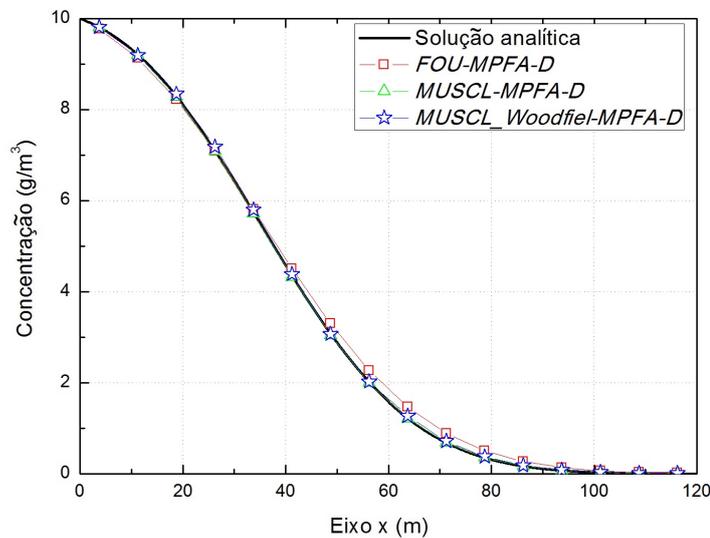


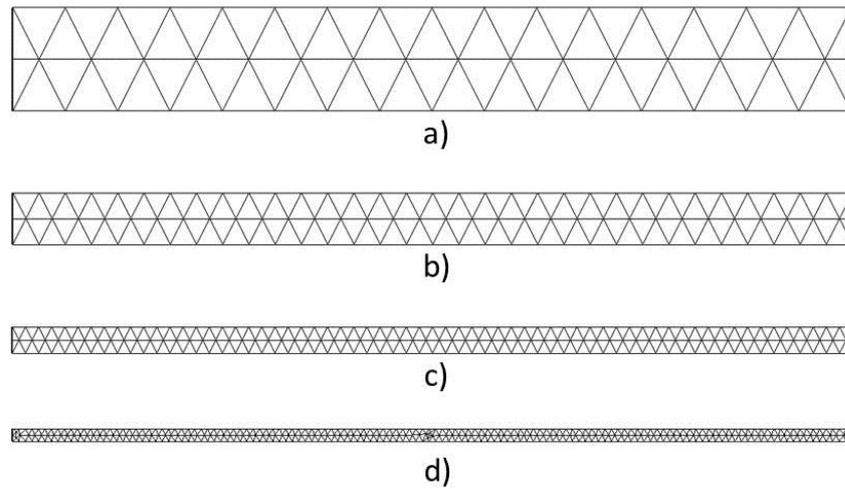
Figura 5.4: Perfil da concentração obtido na simulação do problema de transporte de solutos num meio poroso 1D, para uma malha de 16 subdivisões ao longo do eixo  $x$  e sua respectiva solução analítica. ( $CFL = 0,2$ ,  $Pe = 0,75$ ).



Neste primeiro problema, como número de Peclet é  $Pe = 0,75$ , o termo que dominou na equação de transporte foi o termo de dispersão hidrodinâmica (Sun, 1996). A solução numérica se comportou bem com relação à solução analítica. O *FOU* apresenta uma solução menos acurada quando comparada com as aproximações *MUSCL* e *MUSCL-Woodfield* mas, ainda é uma boa aproximação. Como foi mencionado para este problema, o fluxo de dispersão hidrodinâmica dominou sobre o fluxo advectivo, além do fato de ser obtido pelo *MPFA-D*. Ao observar os valores obtidos pelas aproximações de alta ordem, pode se verificar qualitativamente que a diferença entre o *MUSCL* e *MUSCL-Woodfield* foi insignificante. O fato foi devido ao domínio do fluxo difusivo no fenômeno físico, que faz com que o aporte do fluxo advectivo fosse quase nulo, onde foram usados os ditos métodos.

Foi feito um refinamento da malha computacional a fim de observar o comportamento da solução aproximada obtida com os diferentes métodos. Para tanto, foram geradas malhas de 32, 64 e 128 subdivisões ao longo do eixo  $x$ , como apresentado na Fig. 5.5 (b), (c) e (d). A fim de manter a simulação para casos em uma dimensão, manteve-se um número de duas subdivisões ao longo do eixo  $y$ , como é mostrado na Fig. 5.5.

Figura 5.5: Malhas triangulares não estruturadas usadas na discretização espacial para o problema de transporte 1D. a) 16 divisões b) 32 divisões. c) 64 divisões. c) 128 divisões ao longo do eixo  $x$ .



### Estudo para Diferentes Números de Peclet

Neste caso foram usados os mesmos valores dos parâmetros aplicados ao problema anterior, mas alterando o espaçamento entre os nós adjacentes ( $\Delta x$ ). Ao serem mantidos os mesmos dados de entrada, nota-se que ocorre apenas uma mudança no número de Peclet, como é visto na Eq. (5.10). Os novos valores para o número de Peclet são  $Pe = 0,375$ ,  $Pe = 0,1875$  e  $Pe = 0,09375$ , para as respectivas subdivisões de 32, 64 e 128 ao longo do eixo  $x$ . Os perfis de concentração para os diferentes métodos de aproximação são apresentados nas Fig. 5.6 , Fig. 5.7 e Fig. 5.8.

Figura 5.6: Perfil da concentração obtido na simulação do problema de transporte de solutos num meio poroso 1D, para uma malha de 32 subdivisões ao longo do eixo  $x$  e sua respectiva solução analítica. ( $CFL = 0,2$ ,  $Pe = 0,375$ ).

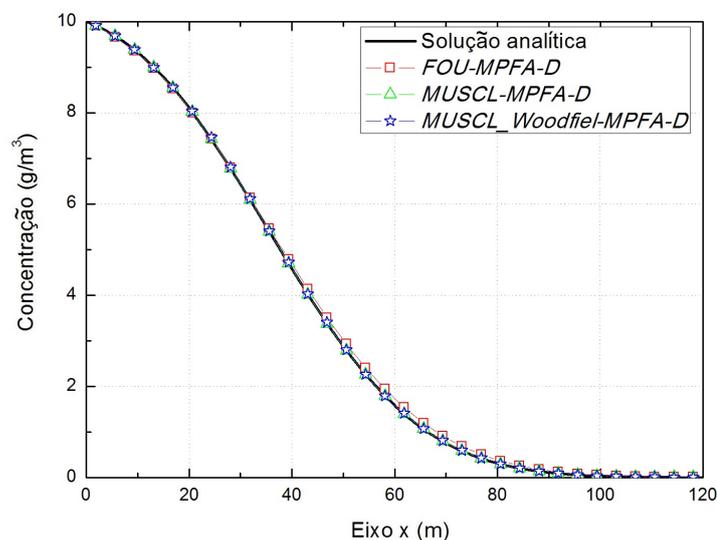


Figura 5.7: Perfil da concentração obtido na simulação do problema de transporte de solutos num meio poroso 1D, para uma malha de 64 subdivisões ao longo do eixo  $x$  e sua respectiva solução analítica. ( $CFL = 0,2$ ,  $Pe = 0,1875$ ).

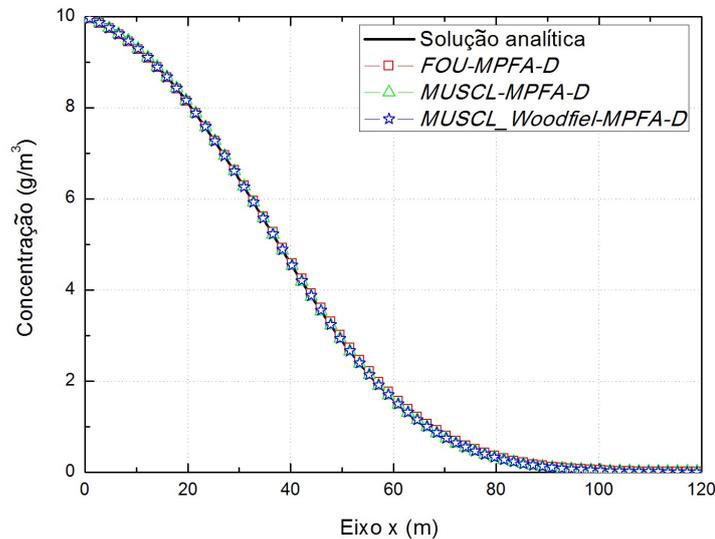
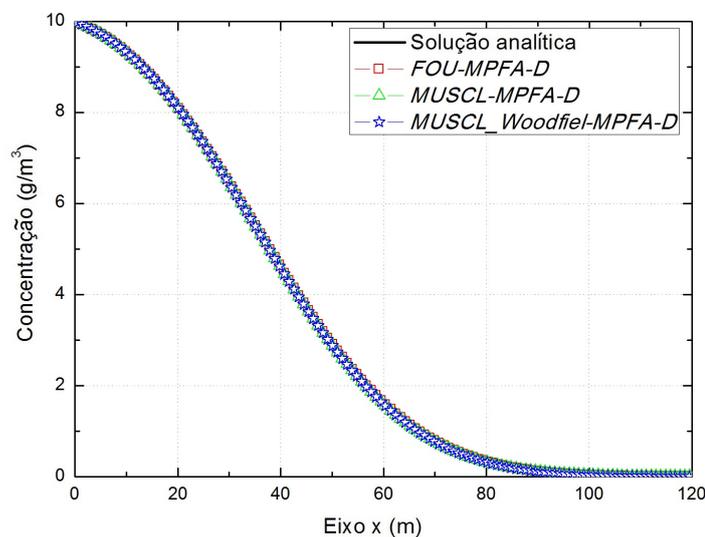


Figura 5.8: Perfil da concentração obtido na simulação do problema de transporte de solutos num meio poroso 1D, para uma malha de 128 subdivisões ao longo do eixo  $x$  e sua respectiva solução analítica. ( $CFL = 0,2$ ,  $Pe = 0,09375$ ).



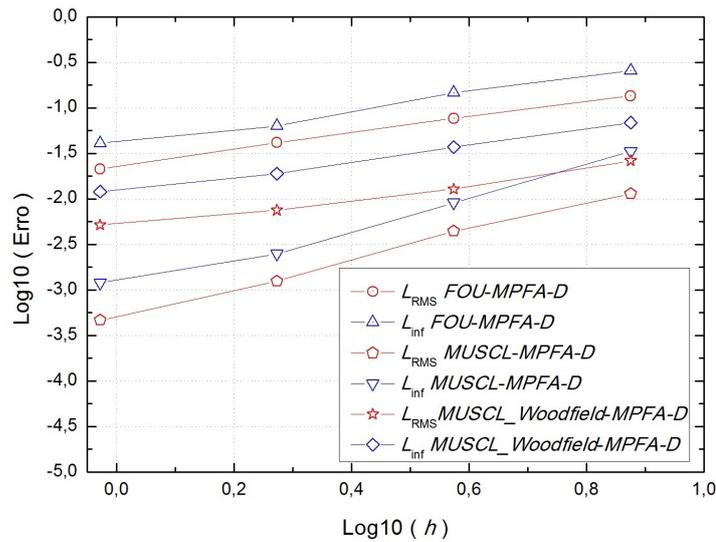
Aqui, observou-se que à medida em que a malha computacional é refinada, a solução numérica se aproximou mais da solução analítica para todos os métodos, apresentando soluções cada vez mais acuradas. Para garantir a estabilidade do método, o número de Courant usado em todos os casos foi de  $CFL = 0,2$ .

Na Tab. 5.1, são apresentadas as normas dos erros e na e Fig. 5.9 as taxas de convergência das normas  $L_{RMS}$ , e  $L_{\infty}$ , obtidas pelos métodos *FOU-MPFA-D*, *MUSCL-MPFA-D* e *MUSCL-Woodfield-MPFA-D*.

Tabela 5.1: Avaliação da acurácia para o problema de transporte 1D, do problema dispersivo dominante.

$h$	$Divisões$	$\ E\ _{RMS}$	$\ E\ _{L_\infty}$
<i>FOU-MPFA-D</i>			
7,5000	16	0,1350	0,2525
3,7500	32	0,0756	0,1403
1,8750	64	0,0415	0,0785
0,9375	128	0,0216	0,0417
<i>MUSCL-MPFA-D</i>			
7,5000	16	0,0159	0,0331
3,7500	32	0,0032	0,0045
1,8750	64	0,0009	0,0027
0,9375	128	0,0004	0,0012
<i>MUSCL_ Woodfield-MPFA-D</i>			
7,5000	16	0,0263	0,0688
3,7500	32	0,0128	0,0371
1,8750	64	0,0075	0,0189
0,9375	128	0,0052	0,0120

Figura 5.9: Erros obtidos na simulação do problema de transporte 1D para o problema fortemente dispersivo.



Como pode ser visto na Tab. 5.1, as aproximações de ordem superior usadas no fluxo advetivo fizeram com que os erros obtidos sejam menores ao serem comparados com a apro-

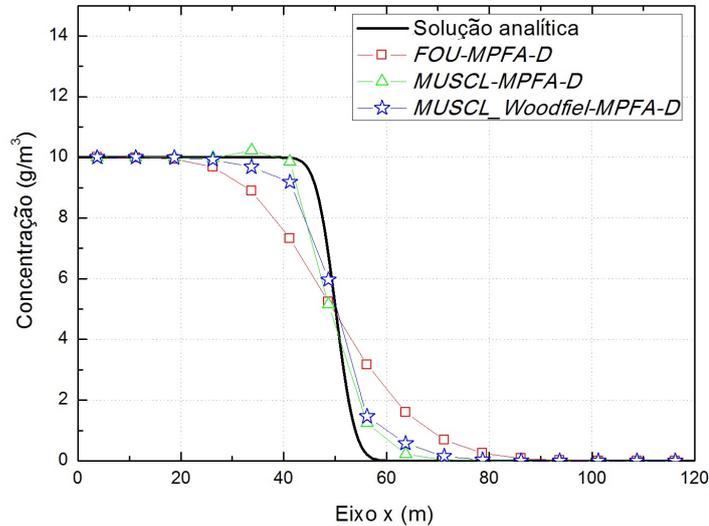
ximação de primeira ordem. Ainda observou-se que, à medida que a malha foi refinada, observados os diferentes métodos, os erros diminuíram consideravelmente, aproximando-se do zero. Na Fig. 5.9 as taxas de convergência das normas  $L_{RMS}$ , e  $L_{\infty}$ , para os diferentes métodos de aproximação, comportaram-se de forma linear. Os métodos que apresentam melhores resultados são os métodos *MUSCL-MPFA-D*. Tendo em vista que os resultados obtidos pelos métodos *MUSCL-MPFA-D* e *MUSCL\_Woodfield-MPFA-D* foram praticamente os mesmos, não há razão para introduzir uma difusão numérica a mais na solução deste tipo de problemas. Pelo qual, para os problemas propostos a continuação onde o número de Peclet seja baixo, só vão ser considerados os resultados usando os métodos *FOU-MPFA-D* e *MUSCL-MPFA-D*.

### 5.1.2 Problema Fortemente Advectivo

Na simulação do problema fortemente advectivo foram fornecidos os mesmos dados do problema anterior com exceção do coeficiente de dispersividade longitudinal, que foi:  $\alpha_L = 0,075$ . A malha usada para a discretização espacial foi inicialmente a mesma malha não estruturada de tipo triangular com 16 subdivisões ao longo do eixo x, usada no problema anterior, Fig. 5.5 (a). Finalmente o instante de tempo de simulação foi  $t = 50$  dias.

Como foram usados os mesmos dados do problema anterior, a velocidade de escoamento do fluido foi a mesma mas o número de Peclet: passou a ser  $Pe = 100$  e o coeficiente de dispersão longitudinal:  $D_L = 0,075 \text{ m}^2/\text{dia}$ . Na Fig. 5.10 é apresentado o perfil da concentração para um tempo de  $t = 50$  dias para os métodos *FOU-MPFA-D* e *MUSCL\_Woodfield-MPFA-D* juntamente com a solução analítica. O critério de estabilidade de Courant foi de  $CFL = 0,2$ . Neste caso, podemos observar com clareza que o termo de advecção foi quem governou o transporte do traçador no meio poroso e o fluxo de dispersão hidrodinâmica foi menor que o fluxo advectivo, ao contrário do exemplo anterior. Na solução obtida usando aproximações de ordem superior para o fluxo advectivo, verificou-se que o método *MUSCL*, usando o parâmetro de  $\lambda = 1/3$  (método de ponderação a montante de terceira ordem), oscilou, gerando erros de  $L_{RMS} = 6,2721$  e  $L_{\infty} = 10,2229$ . Neste caso, a solução usando só o limitador de face não foi muito eficiente. Uma forma de encontrar uma solução acurada mantendo o mesmo método de aproximação, é introduzindo além do limitador de face um limitador de nó como é apresentado na Fig. 5.10. A inclusão de um limitador de face fez com que o fluxo advectivo não oscilasse, apresentando melhores resultados. Os erros obtidos foram  $L_{RMS} = 0,5020$  e  $L_{\infty} = 1,4598$ . Outra forma de obter uma solução numérica aceitável é mudando o parâmetro  $\lambda = 1/3$  por outro e, assim, mudar de método de aproximação sem a necessidade de introduzir um limitador de nó. Finalmente, é possível dizer que a aproximação *FOU* leva a uma solução numérica com difusão maior comparada a aproximação *MUSCL\_Woodfield*. Devido ao refinamento da malha (muito grossa) a aproximação não é muito acurada Tab. 5.1.

Figura 5.10: Perfil da concentração obtida na simulação do problema de transporte fortemente advectivo 1D, para uma malha de 16 subdivisões ao longo do eixo  $x$  e sua respectiva solução analítica. ( $CFL = 0,2$ ,  $Pe = 100$ ).



A seguir, apresenta-se de forma muito geral o comportamento dos diferentes parâmetros  $\lambda$ , usados na solução da equação ADRE em problemas com fluxo advectivo dominante com aproximações de ordem superior. Os valores do parâmetro que podem ser usados são  $\lambda = -1$ ,  $\lambda = 0$  e  $\lambda = 1/3$  como foi visto nas Eq. (4.53) e Eq. (4.54). Nas Fig. 5.11 e Fig. 5.12 apresentam-se os resultados obtidos pelos métodos MUSCL-MPFA-D para os diferentes parâmetros anteriormente mencionados, usando as malhas da Fig. 5.5 (a) e (b) com 16 e 32 subdivisões ao longo do eixo  $x$ .

Figura 5.11: Comparação dos perfis da concentração para os parâmetros  $\lambda = -1$ ,  $\lambda = 0$  e  $\lambda = 1/3$ , obtidos na simulação do problema de transporte fortemente advectivo 1D, para uma malha de 16 subdivisões ao longo do eixo  $x$  e sua respectiva solução analítica. ( $CFL = 0,2$ ,  $Pe = 100$ ).

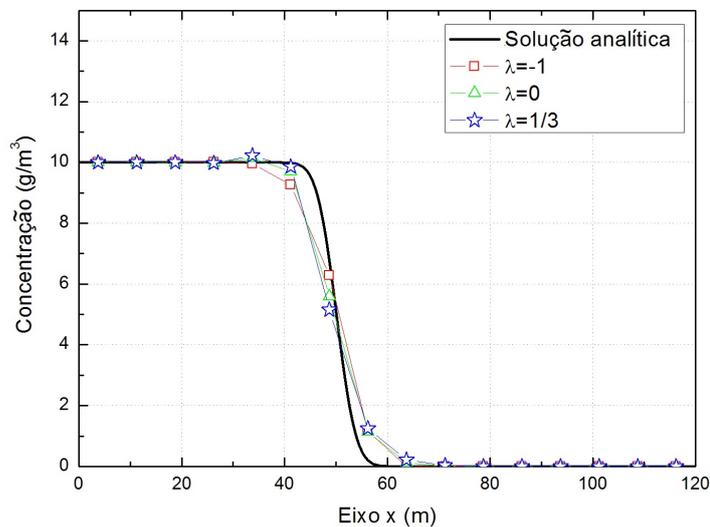
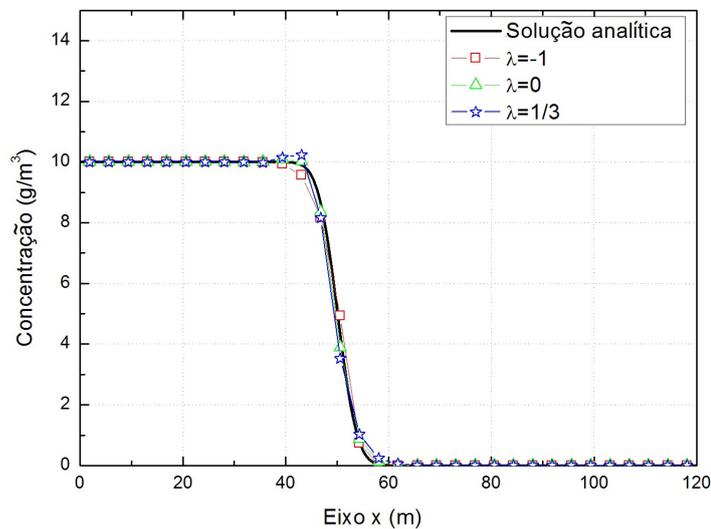


Figura 5.12: Comparação dos perfis da concentração para os parâmetros  $\lambda = -1$ ,  $\lambda = 0$  e  $\lambda = 1/3$ , obtidos na simulação do problema de transporte fortemente advectivo 1D, para uma malha de 32 subdivisões ao longo do eixo x e sua respectiva solução analítica, usando os métodos MUSCL-MPFA-D. ( $CFL = 0,2$ ,  $Pe = 50$ ).



De acordo com as Fig. 5.11 e Fig. 5.12 para  $CFL = 0,2$ , quando é usado o parâmetro  $\lambda = 0$  (Método Fromm) e  $\lambda = 1/3$  (Método de ponderação a montante de terceira ordem), a solução da equação *ADRE* usando os métodos *MUSCL-MPFA-D*, apresentaram uma pequena oscilação, mas, quando utilizado o parâmetro  $\lambda = -1$  (Método de ponderação a montante de segunda ordem) não existe mais oscilação. Cabe ressaltar que neste método de aproximação, além de o método não oscilar, ele é um pouco mais dispersivo quando comparado com os outros dois métodos. Até agora, os problemas estudados são muito simples, e, se estudados problemas mais complexos é muito importante ter em conta a convergência do método, sendo necessário escolher de forma correcta o tipo de aproximação de alta ordem, adequado com cada problema estudado. Nas simulações aqui estudadas, serão mantidos o mesmo parâmetro  $\lambda = 1/3$  do primeiro exemplo analisado, e, as soluções obtidas para os métodos *MUSCL-MPFA-D* não serão consideradas neste tipo de problemas, devido à presença de oscilações na obtenção da concentração do traçador. Mas, o leitor pode se interessar nas soluções obtidas quando  $\lambda = -1$ , para o qual a concentração do traçador não vai apresentar oscilações espúrias.

### Estudo para Diferentes Números de Peclet

Do mesmo jeito que no problema de fluxo dispersivo dominante, a malha computacional foi refinada usando as malhas de 32, 64 e 128 subdivisões ao longo do eixo x. (Fig. 5.5 (b), (c) e (d)). Foram utilizados os mesmos dados do referido problema com exceção do coeficiente de dispersividade longitudinal, o qual é:  $\alpha_L = 0,075$ . O instante de tempo de simulação foi  $t = 50$  dias e o critério de estabilidade de Courante foi de  $CFL = 0,2$ . As

Fig. 5.13, Fig. 5.14 e Fig. 5.15 apresentam, respectivamente, as soluções numéricas obtidas com os métodos *FOU-MPFA-D* e *MUSCL-Woodfield-MPFA-D*. Os número de Peclet de cada malha (32, 64 e 128 subdivisões) são respectivamente:  $Pe = 50$ ,  $Pe = 25$  e  $Pe = 12,5$  e o tempo total de simulação foi  $t = 50$  dias.

Na Tab. 5.2, são apresentadas as normas dos erros e na Fig. 5.16 as taxas de convergência das normas  $L_1$ ,  $L_{RMS}$ , e  $L_\infty$ , obtidas pelos métodos *FOU-MPFA-D* e *MUSCL-Woodfield-MPFA-D*.

Figura 5.13: Perfil da concentração obtido na simulação do problema de transporte fortemente advectivo 1D, para uma malha de 32 subdivisões ao longo do eixo  $x$  e sua respectiva solução analítica, usando os métodos *MUSCL-MPFA-D*. ( $CFL = 0,2$ ,  $Pe = 50$ ).

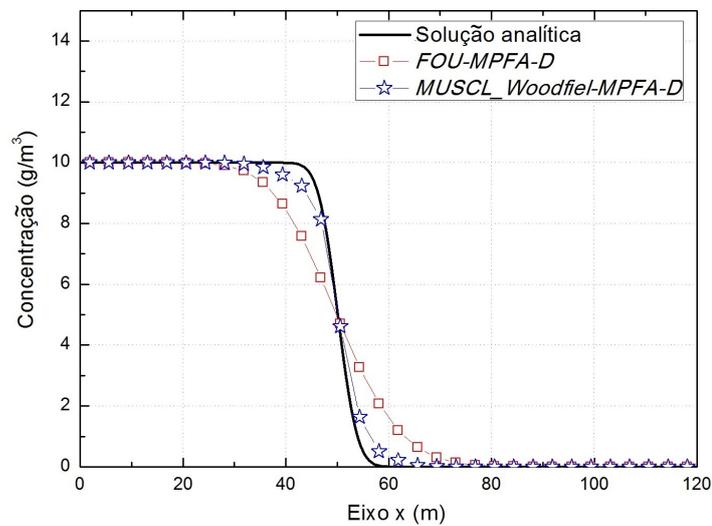


Figura 5.14: Perfil da concentração obtido na simulação do problema de transporte fortemente advectivo 1D, para uma malha de 64 subdivisões ao longo do eixo  $x$  e sua respectiva solução analítica. ( $CFL = 0,2$ ,  $Pe = 25$ ).

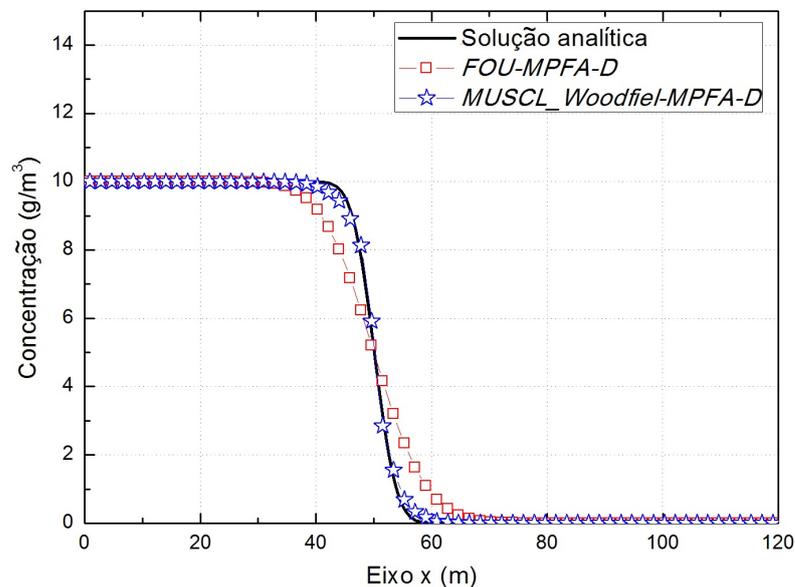


Figura 5.15: Perfil da concentração obtido na simulação do problema de transporte fortemente advectivo 1D, para uma malha de 128 subdivisões ao longo do eixo  $x$  e sua respectiva solução analítica. ( $CFL = 0,2$ ,  $Pe = 12,5$ ).

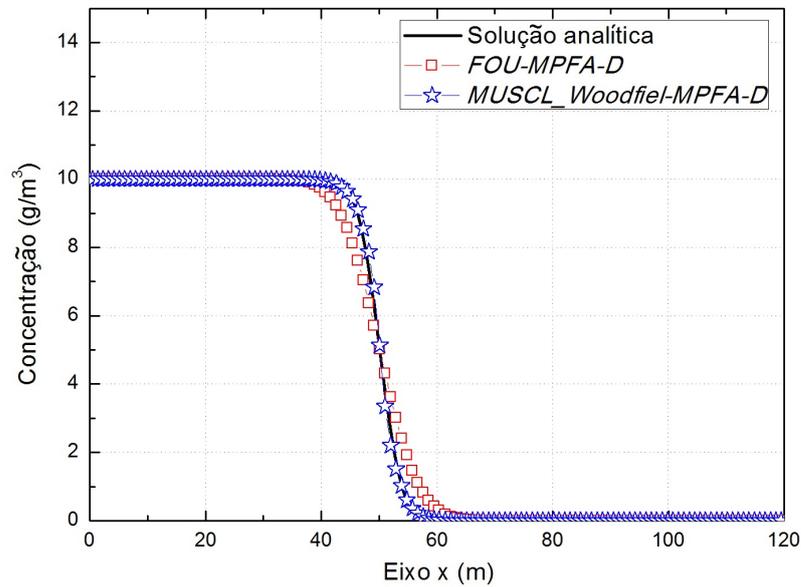
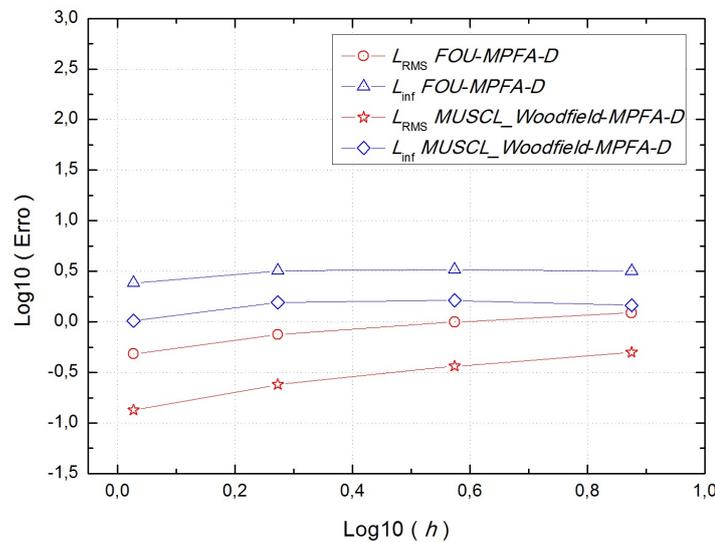


Tabela 5.2: Avaliação da acurácia para o problema de transporte 1D, do problema advectivo dominante.

$h$	<i>Divisões</i>	$\ E\ _{RMS}$	$\ E\ _{L_\infty}$
<i>FOU-MPFA-D</i>			
7,5000	16	1,2285	3,1618
3,7500	32	0,9966	3,2658
1,8750	64	0,7471	3,1934
0,9375	128	0,4875	2,4122
<i>MUSCL_Woodfield-MPFA-D</i>			
7,5000	16	0,5020	1,4598
3,7500	32	0,3647	1,6327
1,8750	64	0,2394	1,5549
0,9375	128	0,1338	1,0232

Figura 5.16: Erros obtidos na simulação do problema de transporte 1D para o problema fortemente advectivo.



Ao refinar a malha tem-se diferentes problemas com advecção dominante onde nota-se que as duas soluções vão se aproximando da solução analítica, mas, a aproximação *FOU-MPFA-D* ainda é muito difusiva e os resultados não são muito acurados ao serem comparados com os resultados obtidos com os métodos *MUSCL\_Woodfield-MPFA-D*. Na medida que a malha é refinada (com isto problemas mais difusivos), vemos que aproximação *MUSCL\_Woodfield-MPFA-D* é muito boa. Este tipo de aproximação de alta ordem com limitador na face e limitador de nó é muito eficiente para problemas onde o comportamento advectivo predomina sobre outros fenômenos físicos envolvidos e onde as aproximações de primeira ordem são pouco acuradas.

Como pode ser visto na Tab. 5.16, os erros obtidos pelos métodos *MUSCL\_Woodfield-MPFA-D* são menores ao ser comparados com os erros dos métodos *FOU-MPFA-D*. Além disso, os erros da norma  $L_{RMS}$  são melhores do que os erros da norma  $L_{\infty}$ , tanto na aproximação de primeira ordem quanto na aproximação de ordem superior. Na Fig. 5.9 observa-se que as taxas de convergência das normas se comportam forma linear.

### Variação da pressão

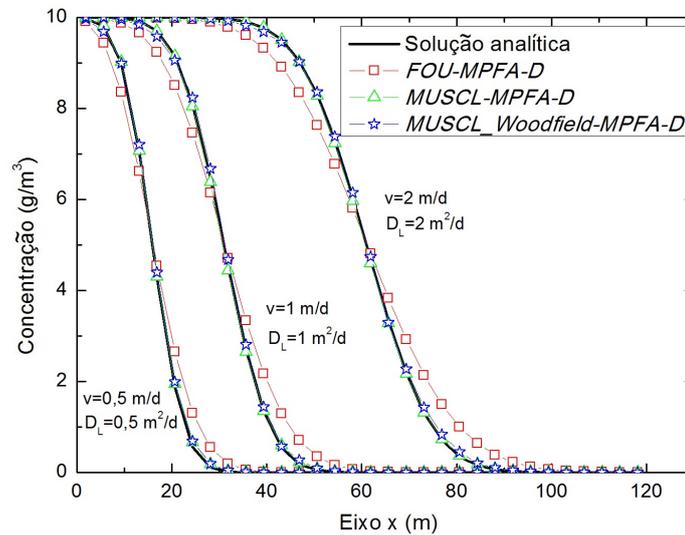
A fim de observar o comportamento do soluto traçador e do coeficiente de dispersão hidrodinâmica, foi escolhida a malha de 32 subdivisões ao longo do eixo  $x$  (Fig. 5.5 (b)) e usando os mesmos parâmetros do primeiro exemplo, com exceção da pressão inicial e do coeficiente de dispersão longitudinal. Os novos parâmetros são  $p_0 = 5\text{Pa}$ ,  $p_0 = 10\text{ Pa}$  e  $p_0 = 20\text{Pa}$  (para as pressões iniciais) e  $\alpha_L = 1$ .

A partir dos novos dados, as novas velocidades de escoamento são  $\vec{v} = 0,5\text{ m/dia}$ ,  $\vec{v} = 1\text{ m/dia}$  e  $\vec{v} = 2\text{ m/dia}$  respectivamente. Os coeficientes de dispersão hidrodinâmica

por serem dependentes da velocidade de escoamento, também vão mudar sendo eles  $D_L = 0,5 \text{ m}^2/\text{dia}$ ,  $D_L = 1 \text{ m}^2/\text{dia}$  e  $D_L = 2 \text{ m}^2/\text{dia}$  respectivamente. O número de Peclet, por causa do fenômeno, foi mantido constante e seu valor foi  $Pe = 3,75$ . O instante de tempo de simulação foi de  $t = 30$  dias e coeficiente de Courant usado foi  $CFL = 0,2$ .

A Fig. 5.17 apresenta as soluções da concentração do soluto ao longo do eixo  $x$  obtidas pelo método *MPFA-D* no fluxo de dispersão hidrodinâmica e pelos métodos *FOU*, *MUSCL* e *MUSCL-Woodfield* para o fluxo advectivo, usando o mesmo instante de tempo de simulação de  $t = 30$  dias.

Figura 5.17: Perfis de concentração obtidas ao mudar a pressão inicial na simulação do problema de transporte 1-D ( $CFL = 0,2$ ,  $Pe = 3,75$ ).



De acordo com os resultados obtidos anteriormente, quando a pressão inicial é mudada na simulação, o problema também muda de condições de contorno na equação da pressão. Devido ao fato de que a velocidade de escoamento do fluido ser diretamente relacionada com a pressão, ela também toma um novo valor. Além disso, o coeficiente de dispersão hidrodinâmica se encontra diretamente relacionado à velocidade de escoamento, e, mantendo-se constante a dispersividade do meio, o coeficiente de dispersão, é recalculado. Isto faz com que o número de Peclet para cada uma das novas velocidades e dispersões seja constante.

Na Fig. 5.17 pode-se observar como evoluiu a concentração do traçador ao longo do reservatório para cada uma das velocidades. Como esperado, as soluções com aproximação de ordem superior são mais acuradas. A solução para os métodos *MUSCL-MPFA-D* não oscila devido à presença do fluxo de dispersão hidrodinâmica, que é tão dominante quanto o fluxo advectivo.

### 5.1.3 Transporte Unidimensional de Solutos Traçadores em Meios Porosos com Termo de Decaimento Radioativo

Na solução do problema Advectivo-Dispersivo-Reativo, foi usado o mesmo tipo de malhas utilizadas até então. Agora vão-se analisar o efeito de introduzir um termo que vai gerar uma perda de concentração (perda de massa) ao longo do tempo como o descrito na Eq. (3.20). A Eq. (3.21) pode ser reescrita agora como:

$$\frac{\partial C}{\partial t} = D_L \frac{\partial^2 C}{\partial x^2} - v \frac{\partial C}{\partial x} - \gamma C; \quad 0 < x < 120 \text{ m} \quad (5.11)$$

sendo  $D_{xx} = D_L$ , o coeficiente de dispersão longitudinal e  $\gamma$  é a constante de proporcionalidade do decaimento. A solução analítica deste problema pode ser encontrada em (Carvalho, 2005; Sun, 1996) e é dada por:

$$C(x, t) = \frac{C_0}{2} \exp\left(\frac{vx}{2D_L}\right) \left\{ \exp\left(-\frac{x}{2D_L} \sqrt{v^2 + 4\gamma D_L}\right) \operatorname{erfc}\left[\frac{x - t\sqrt{v^2 + 4\gamma D_L}}{2\sqrt{D_L t}}\right] - \right. \\ \left. - \exp\left(-\frac{x}{2D_L} \sqrt{v^2 + 4\gamma D_L}\right) \operatorname{erfc}\left[\frac{x + t\sqrt{v^2 + 4\gamma D_L}}{2\sqrt{D_L t}}\right] \right\} \quad (5.12)$$

O problema foi calculado baseado nas mesmas condições de contorno e nos parâmetros físicos usados anteriormente, com exceção do coeficiente de dispersividade longitudinal  $\alpha_L = 0,05$ . A partir deste coeficiente obtém-se  $D_L = 0,05 \text{ m}^2/\text{dia}$ . As mesmas malhas do problema precedente foram usadas a fim de observar o comportamento com o termo de fonte para os valores do coeficiente de decaimento radioativo de:  $\gamma = 0,5 \text{ dias}^{-1}$ ,  $\gamma = 0,05 \text{ dias}^{-1}$  e  $\gamma = 0,02 \text{ dias}^{-1}$ . O tempo total da simulação foi de  $t = 50 \text{ dias}$  e o coeficiente de Courant usado foi de  $CFL = 0,2$ . Os valores obtidos do número de Peclet para as diferentes malhas (16, 32, 64 e 128 subdivisões ao longo do eixo  $x$ ) foram respectivamente:  $Pe = 150$ ,  $Pe = 75$ ,  $Pe = 37,5$  e  $Pe = 18,75$ . De acordo com o número de Peclet, o problema é considerado como advectivo dominante e pelo uso do parâmetro  $\lambda = 1/3$ , foram desconsideradas as soluções obtidas pelos métodos MUSCL-MPFA-D devido ao carácter oscilatório, que é apresentado nestas condições.

Nas Fig. 5.18, Fig. 5.19, Fig. 5.20 e Fig. 5.21 apresentamos as soluções obtidas para a equação de Advecção-Dispersão-Reação para cada problema com as malhas de 16, 32, 64 e 128 subdivisões ao longo do eixo  $x$  e a solução analítica obtida em cada caso de acordo com a Eq. (5.12). As soluções numéricas foram obtidas para as aproximações *FOU* e *MUSCL-Woodfield*. Como pode ser visto, o fato de incluir o termo de decaimento radioativo faz

com que o problema se torne mais difusivo à medida que o termo de decaimento da concentração aumenta. Desta forma, o fluxo advectivo não vai ser dominante como foi visto no problema anterior. Por outro lado, pode-se observar que a aproximação *MUSCL-Woodfiel-MPFA-D* é mais acurada quando comparada com a aproximação *FOU-MPFA-D*, como esperado.

Figura 5.18: Perfis de concentração da equação *ADRE*, para o problema de transporte de solutos em meios porosos 1-D. Soluções analítica e numéricas para uma malha de 16 divisões ao longo do eixo *x*. ( $CFL = 0,2$ ,  $Pe = 150$ ).

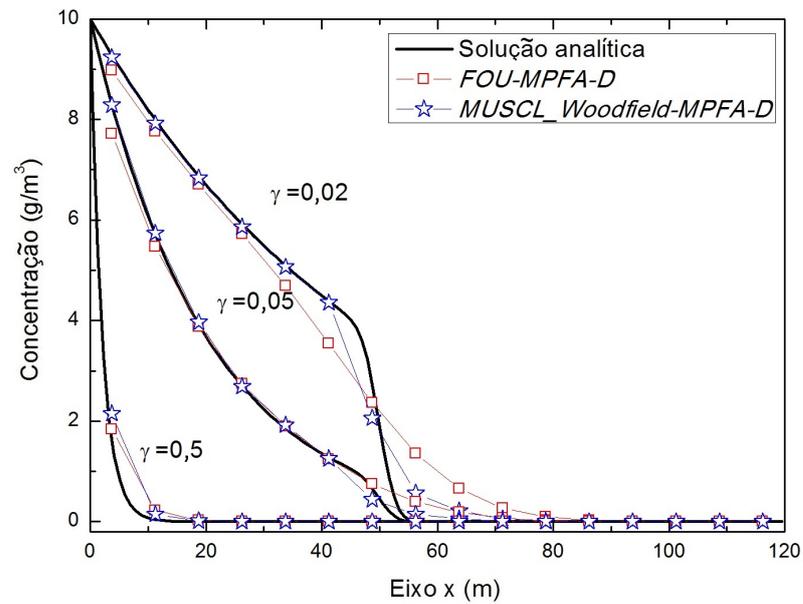


Figura 5.19: Perfis de concentração da equação *ADRE*, para o problema de transporte de solutos em meios porosos 1D. Soluções analítica e numéricas para uma malha de 32 divisões ao longo do eixo *x*. ( $CFL = 0,2$ ,  $Pe = 75$ ).

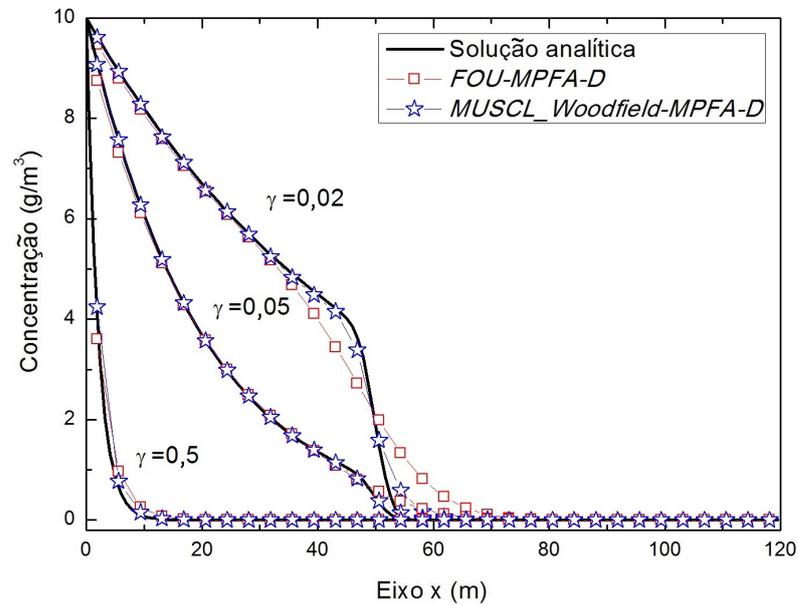


Figura 5.20: Perfis de concentração da equação *ADRE*, para o problema de transporte de solutos em meios porosos 1D. Soluções analítica e numéricas para uma malha de 64 divisões ao longo do eixo *x*. ( $CFL = 0,2$ ,  $Pe = 37,5$ ).

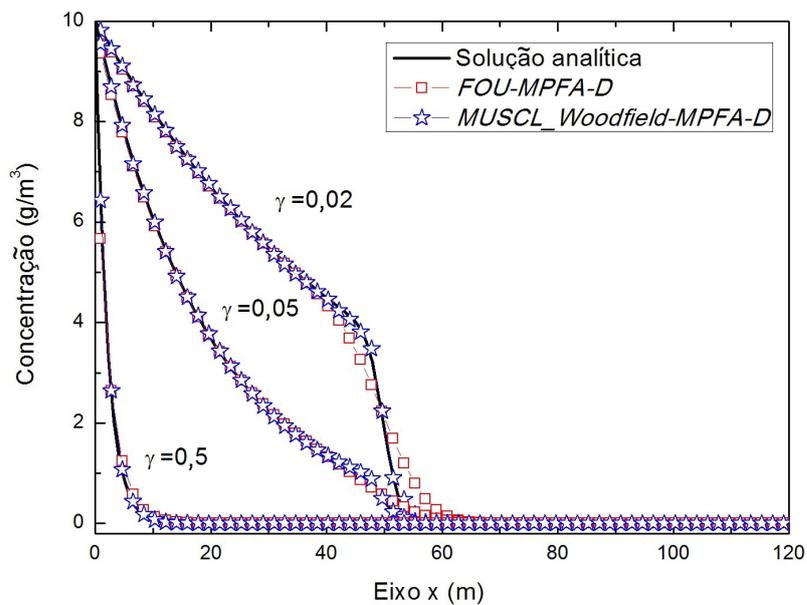
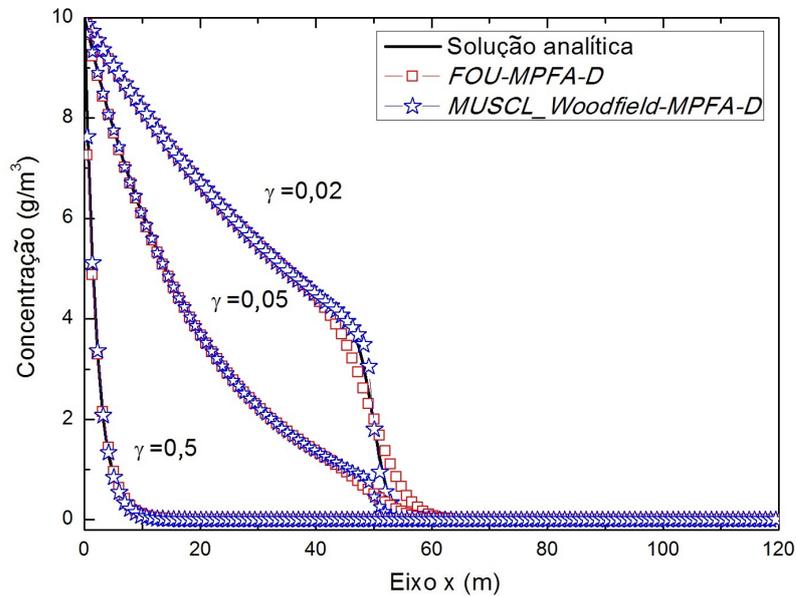


Figura 5.21: Perfis de concentração da equação *ADRE*, para o problema de transporte de solutos em meios porosos 1D. Soluções analítica e numéricas para uma malha de 128 divisões ao longo do eixo *x*. ( $CFL = 0,2$ ,  $Pe = 18,75$ ).



De acordo com os resultados obtidos anteriormente, na medida que a constante de decaimento radioativo  $\gamma$  vai crescendo, a informação obtida da concentração do soluto traçador vai ser afetada significativamente. Quando  $\gamma = 0,5 \text{ dias}^{-1}$  o soluto praticamente tem perdido a maior parte de sua massa nos primeiros 10 m de comprimento, não sendo capaz de caracterizar o reservatório. O fluxo advectivo dominante não é mais dominante e o efeito de deslocamento do traçador dentro do meio poroso por causa da velocidade de escoamento é quase nulo. Para  $\gamma = 0,05 \text{ dias}^{-1}$ , a maior perda de massa do soluto encontra-se perto dos 50 m de comprimento. Quando  $\gamma = 0,02 \text{ dias}^{-1}$ , o fluxo advectivo ainda é dominante no transporte do soluto no meio poroso, mas a concentração dele é menor que a metade quando avançados 50 m de comprimento no reservatório. Neste acaso, ainda que sua concentração seja inferior à metade, o soluto traçador pode ser usado para caracterizar o reservatório fornecendo resultados confiáveis. Este problema é interessante pois demonstra a capacidade dos métodos numéricos para tratar termos de fonte não lineares.

O termo de decaimento radioativo introduz uma maior difusão física no problema fazendo com que a frente de concentração se disperse mais rapidamente que no exemplo anterior.

Quando a malha é refinada pode-se observar que a solução numérica vai se aproximando à solução analítica, e os resultados são mais acurados. Nas Tab. 5.3, Tab. 5.4 e Tab. 5.5, são apresentadas as normas dos erros, e nas Fig. 5.22, Fig. 5.23 e Fig. 5.24, as taxas de convergência das normas  $L_{RMS}$ , e  $L_{\infty}$ , obtidas pelos métodos *FOU-MPFA-D* e *MUSCL-Woodfield-MPFA-D*, para os diferentes coeficientes de decaimento radioativo.

Tabela 5.3: Avaliação da acurácia para o problema de transporte 1D, do problema de decaimento radioativo.  $\gamma = 0,02 \text{ dia}^{-1}$ .

$h$	<i>Divisões</i>	$\ E\ _{RMS}$	$\ E\ _{L_\infty}$
<i>FOU-MPFA-D</i>			
7,5000	16	0,4720	1,3478
3,7500	32	0,3764	1,2420
1,8750	64	0,2308	0,9644
0,9375	128	0,1748	0,7495
<i>MUSCL_Woodfield-MPFA-D</i>			
7,5000	16	0,2300	0,6885
3,7500	32	0,1076	0,4900
1,8750	64	0,0524	0,2458
0,9375	128	0,0732	0,5816

Figura 5.22: Erros obtidos na simulação do problema de transporte 1D para o problema de decaimento radioativo.  $\gamma = 0,02 \text{ dia}^{-1}$ .

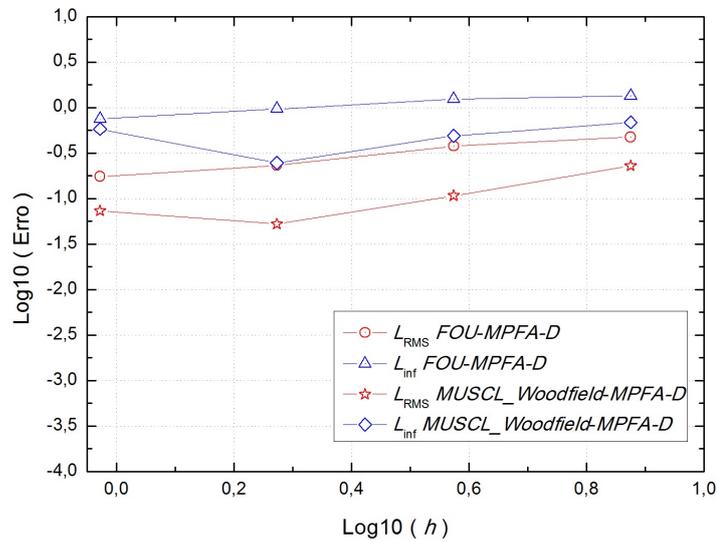


Tabela 5.4: Avaliação da acurácia para o problema de transporte 1D, do problema de decaimento radioativo.  $\gamma = 0,05 \text{ dia}^{-1}$ .

$h$	<i>Divisões</i>	$\ E\ _{RMS}$	$\ E\ _{L_\infty}$
<i>FOU-MPFA-D</i>			
7,5000	16	0,1942	0,5805
3,7500	32	0,1211	0,3898
1,8750	64	0,0746	0,2707
0,9375	128	0,0450	0,1969
<i>MUSCL_ Woodfield-MPFA-D</i>			
7,5000	16	0,0711	0,2235
3,7500	32	0,0290	0,1220
1,8750	64	0,0199	0,0893
0,9375	128	0,0228	0,1516

Figura 5.23: Erros obtidos na simulação do problema de transporte 1D para o problema de decaimento radioativo.  $\gamma = 0,05 \text{ dia}^{-1}$ .

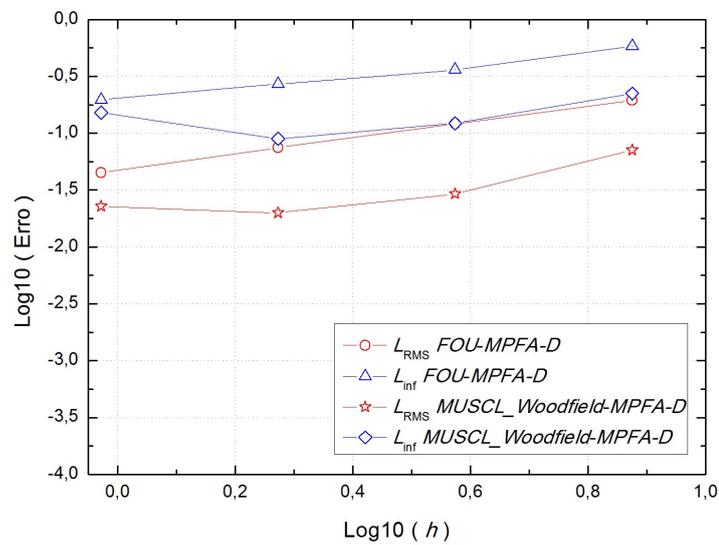
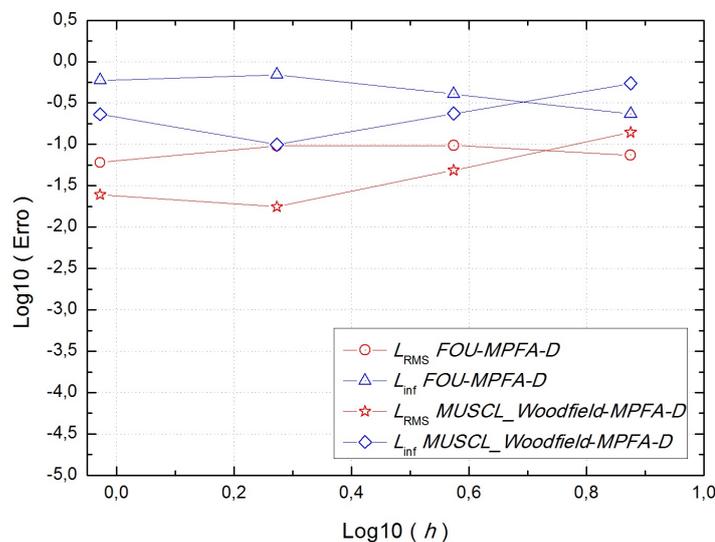


Tabela 5.5: Avaliação da acurácia para o problema de transporte 1D, do problema de decaimento radioativo .  $\gamma = 0,5 \text{ dia}^{-1}$ .

$h$	<i>Divisões</i>	$\ E\ _{RMS}$	$\ E\ _{L_\infty}$
<i>FOU-MPFA-D</i>			
7,5000	16	0,0743	0,2322
3,7500	32	0,0970	0,4054
1,8750	64	0,0957	0,6927
0,9375	128	0,0603	0,5927
<i>MUSCL_ Woodfield-MPFA-D</i>			
7,5000	16	0,1391	0,5464
3,7500	32	0,0486	0,2361
1,8750	64	0,0177	0,0992
0,9375	128	0,0248	0,2309

Figura 5.24: Erros obtidos na simulação do problema de transporte 1D para o problema de decaimento radioativo.  $\gamma = 0,5 \text{ dia}^{-1}$ .



De acordo com as Tab. 5.3 até Tab. 5.5, os erros das normas  $L_{RMS}$  e  $L_\infty$  obtidos pelos métodos *MUSCL\_ Woolfield-MPFA-D* são menores quando comparados com os erros obtidos com os métodos *FOU-MPFA-D*, e, a norma  $L_{RMS}$  apresenta os melhores resultados do que a norma  $L_\infty$ . Isto pode ser visto também, são comparadas as taxas de convergência dos erros para cada um dos valores de  $\gamma$ . A melhor taxa de convergência é da norma  $L_{RMS}$  na aproximação de alta ordem.

## 5.2 Transporte Bidimensional de Solutos Traçadores em Meios Porosos

### 5.2.1 Transporte de Solutos Traçadores num Meio Poroso com uma Fonte Contínua a Montante

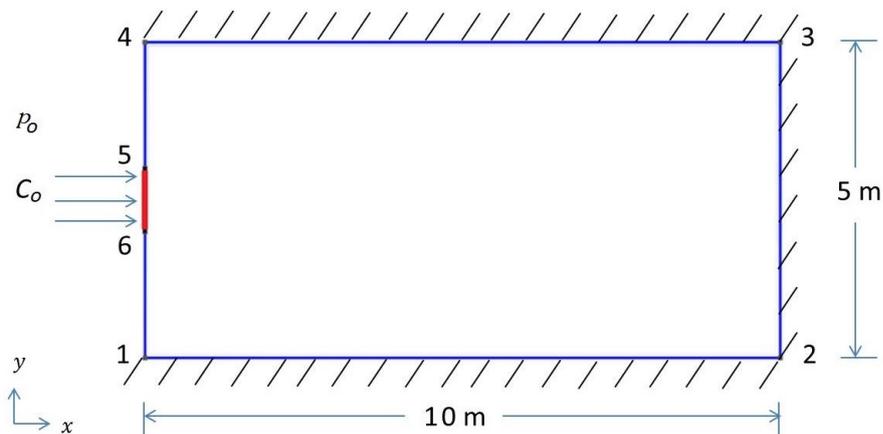
O exemplo aqui apresentado é adaptado por Carvalho (2005) do artigo de Lewis et al. (2006). Neste problema foi considerado um soluto traçador injetado a uma taxa constante num meio isotrópico homogêneo á montante, numa região dos contornos do meio poroso. Neste caso o gradiente de pressão é aplicado na direção  $x$ . As dimensões geométricas do problema estão especificadas na Fig. 5.25. O transporte do soluto traçador foi considerado de tipo bidimensional e não foram considerados os termos de fonte ou sumidouro.

A Eq. (3.21) pode ser reescrita como:

$$\frac{\partial C}{\partial t} = \frac{\partial}{\partial x} \left( D_{xx} \frac{\partial C}{\partial x} \right) + \frac{\partial}{\partial y} \left( D_{yy} \frac{\partial C}{\partial y} \right) - v \frac{\partial C}{\partial x}; \quad 0 < x < 10 \text{ m}, 0 < y < 5 \text{ m} \quad (5.13)$$

onde  $D_{xx}$  e  $D_{yy}$  estão definidos pela Eq. (3.17).

Figura 5.25: Esquema de um meio isotrópico homogêneo com uma fonte a montante para o problema de transporte bidimensional de um soluto traçador.



Fonte: Adaptado de Carvalho (2005).

Foram usadas as seguintes condições de contorno e inicial:

- Para a equação da pressão:

$$p = p_0 \quad t \geq 0 \quad \text{nos lados 4-5, e 5-6 e 6-1}$$

$$p = 0 \quad t \geq 0 \quad \text{no lado 2-3}$$

$$\frac{\partial p}{\partial y} = 0 \quad t \geq 0 \quad \text{nos lados 1-2 e 3-4}$$

- Para a equação da concentração:

$$\begin{aligned}
 C(x, y, 0) &= 0 & 0 \leq x \leq 10 \text{ m} & \quad 0 \leq y \leq 5 \text{ m} \\
 C &= C_0 & t \geq 0 & \quad \text{no lado 5-6} \\
 C &= 0 & t \geq 0 & \quad \text{nos lados 4-5 e 6-1} \\
 \frac{\partial C}{\partial x} &= 0 & t \geq 0 & \quad \text{no lado 2-3} \\
 \frac{\partial C}{\partial y} &= 0 & t \geq 0 & \quad \text{nos lados 1-2 e 3-4}
 \end{aligned}$$

De acordo com Carvalho (2005), os dados fornecidos para este problema são:  $p_0 = 1 \text{ Pa}$ ,  $C_0 = 1 \text{ g/m}^3$ ,  $\alpha_L = 10$ ,  $\alpha_T = 10$ ,  $D_0 = 2 \cdot 10^{-9} \text{ m}^2/\text{dia}$ , e o tensor de permeabilidade e tortuosidade são respectivamente:

$$\underline{K} = \begin{bmatrix} 10 & 0 \\ 0 & 10 \end{bmatrix}, \quad \underline{\tau} = \begin{bmatrix} 0,5 & 0 \\ 0 & 0,5 \end{bmatrix}$$

A malha usada para a discretização espacial foi uma malha não estruturada triangular como é mostrada na Fig. 5.26 (a), na qual o espaçamento médio entre os nós adjacentes é  $\Delta x = 0,5 \text{ m}$ , gerando um total de 20 divisões ao longo do eixo  $x$  e de 10 divisões ao longo do eixo  $y$  (malha 20x10). A malha da Fig. 5.26 (b) também é não estruturada triangular porém com  $\Delta x = 0,2 \text{ m}$ , com 50 divisões ao longo do eixo  $x$  e 25 divisões ao longo do eixo  $y$  (malha 50x25). Finalmente, o tempo de simulação foi  $t = 1 \text{ d}$  onde foi usado o critério de Courant  $CFL = 0,2$ .

De acordo com estes dados, foram obtidos os seguintes valores para a velocidade média  $v = 1 \text{ m}/\text{dia}$  e o coeficiente de dispersão hidrodinâmica ( $\text{m}^2/\text{dia}$ ):

$$\underline{D}_H = \begin{bmatrix} 10 & 0 \\ 0 & 10 \end{bmatrix}$$

O número de Peclet local pode ser definido para a direção  $x$  como:

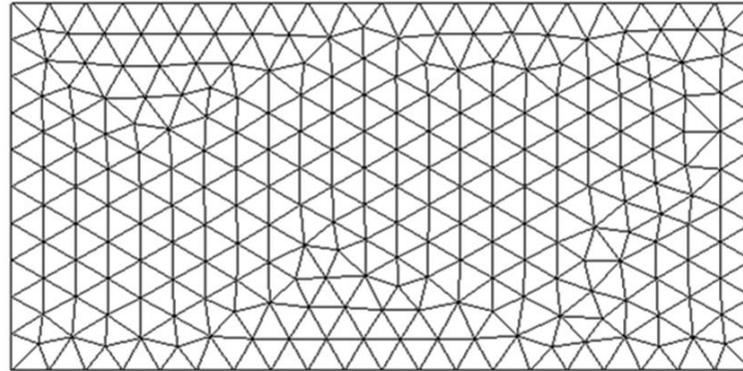
$$Pe = \frac{|\vec{v}|_x \Delta x}{D_L} = 0,05 \tag{5.14}$$

As Fig. 5.27, Fig. 5.28 e Fig. 5.29, mostram o campo de concentração do soluto traçador obtido pelos métodos *FOU-MPFA-D*, *MUSCL-MPFA-D* e *MUSCL\_Woodfield-MPFA-D* respectivamente, para uma malha 20x10 e o instante de tempo de simulação de  $t = 1 \text{ dia}$ .

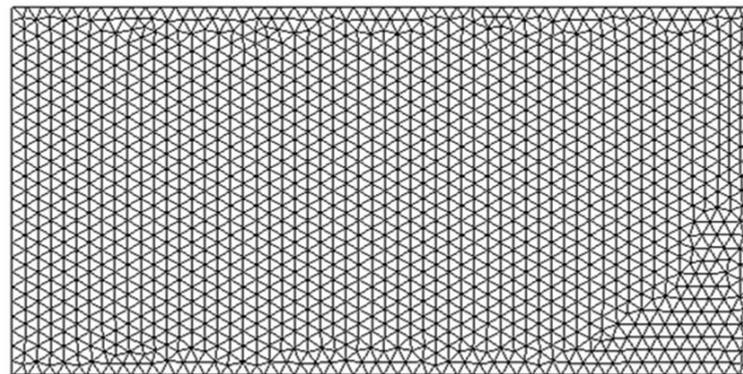
Para uma melhor compreensão dos resultados, na Fig. 5.30 apresentam-se as soluções da concentração do soluto ao longo do eixo  $x$  ( $y = 2,5 \text{ m}$ ) obtidas pelos métodos *MPFA-D*

no fluxo de dispersão hidrodinâmica e pelos métodos *FOU*, *MUSCL* e *MUSCL\_ Woodfield* para o fluxo advectivo, e, a solução extraída de Carvalho (2005). O instante de tempo de simulação foi  $t = 1$  dias.

Figura 5.26: Malhas triangulares não estruturadas usadas na discretização espacial para o problema de transporte 2D. a) malha 20x10 b) malha 50x25.



a)



b)

Figura 5.27: Contorno de concentração do soluto traçador obtido usando os métodos *FOU-MPFA-D*, para o problema de transporte 2D e malha 20x10. ( $t = 1$  dia,  $Pe = 0, 2$ ).

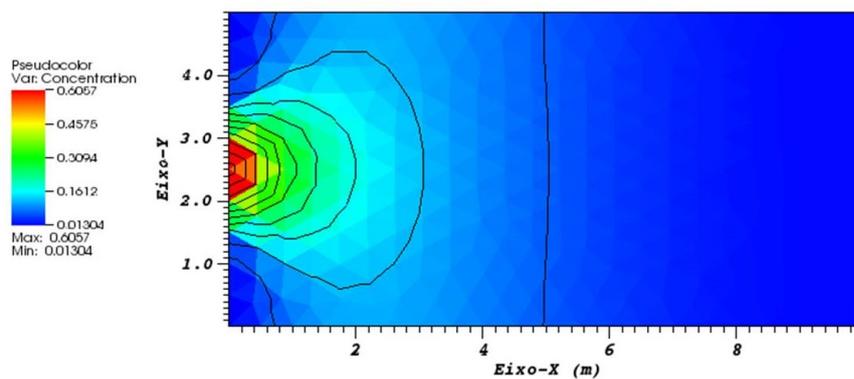


Figura 5.28: Contorno de concentração do soluto traçador obtido usando os métodos *MUSCL\_MPFA-D*, para o problema de transporte 2D e malha 20x10. ( $t = 1$  dia,  $Pe = 0, 2$ ).

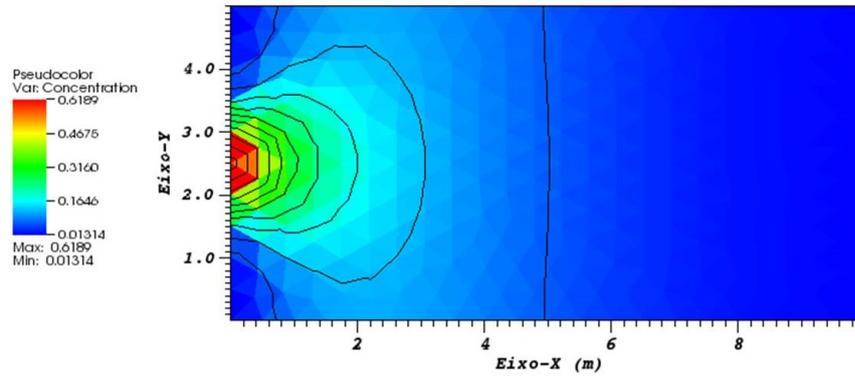


Figura 5.29: Contorno de concentração do soluto traçador obtido usando os métodos *MUSCL\_Woodfield-MPFA-D*, para o problema de transporte 2-D e malha 20x10. ( $t = 1$  dia,  $Pe = 0, 2$ ).

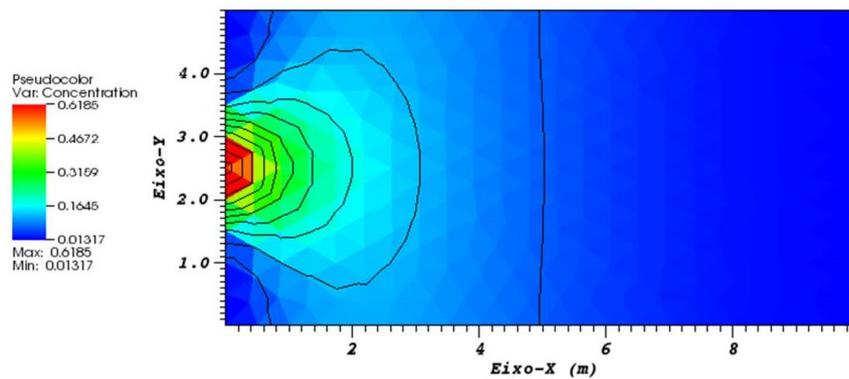
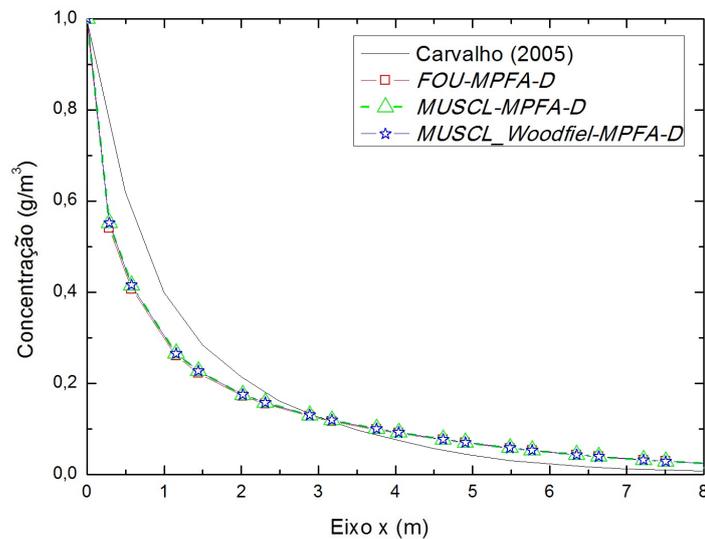


Figura 5.30: Perfil da concentração obtido na simulação do problema de transporte de solutos num meio poroso 2-D, para uma malha 20x10 subdivisões. ( $t = 1$  dia,  $Pe = 0, 2$ ).



Como esperado, os resultados neste problema para os diferentes métodos são muito similares. Isto se deve ao pouco aporte na solução do fluxo advectivo, porém, a concentração do soluto traçador é governada pelo fluxo de dispersão hidrodinâmica. Assim como foi mencionado anteriormente, para esses tipos de problemas não cabe usar um limitador de face e limitador de nó na aproximação de alta ordem do fluxo advectivo. Ao comparar as concentrações obtidas com a concentração apresentada em Carvalho (2005), pode-se observar que os resultados aqui apresentados mostraram maior dispersão. No caso da solução obtida por Carvalho, foi usada uma malha nãoestruturada triangular com as mesmas subdivisões ao longo do eixo  $x$ . O método usado em Carvalho (2005) é um método de volumes finitos com estrutura de dados por aresta, onde, os valores da concentração foram fornecidos nos nós dos volumes de controle, de maneira diferente do feito aqui, onde os valores da concentração são calculados no centro de cada VC, implicando que nosso método tem mais graus de liberdade para a mesma malha computacional.

A fim de estudar a convergência, o mesmo problema foi estudado usando a malha mais fina da Fig. 5.26 (b), na qual o espaçamento médio entre os nós adjacentes é  $\Delta x = 0, 2$  m. Neste exemplo foi mantendo o mesmo número de Peclet  $Pe = 0, 05$ .

Foram usadas as mesmas condições de contorno e os parâmetros físicos do exemplo anterior, exceto os coeficientes  $\alpha_L = 4$  e  $\alpha_T = 4$ . Finalmente, o tempo de simulação foi  $t = 1$  dia, com critério de Courant de  $CFL = 0.2$ .

De acordo com esses dados, o coeficiente de dispersão hidrodinâmica ( $m^2/dias$ ) foi:

$$\tilde{D}_H = \begin{bmatrix} 4 & 0 \\ 0 & 4 \end{bmatrix}$$

As Fig. 5.31 e Fig. 5.32 mostram o campo de concentração do soluto traçador obtido pelos métodos *FOU-MPFA-D* e *MUSCL-MPFA-D* respectivamente, para uma malha  $50 \times 25$ , para o instante de tempo de simulação de  $t = 1$  dia.

Na Fig. 5.33 apresenta-se a solução da concentração do soluto ao longo do eixo  $x$  ( $y = 2,5$  m) para os mesmos métodos anteriormente mencionados e a solução extraída de Carvalho (2005). O critério de estabilidade foi  $CFL = 0,2$ .

Figura 5.31: Contorno de concentração do soluto traçador obtido usando os métodos *FOU-MPFA-D*, para o problema de transporte 2D e malha  $50 \times 25$ . ( $t = 1$  dia,  $Pe = 0,05$ ).

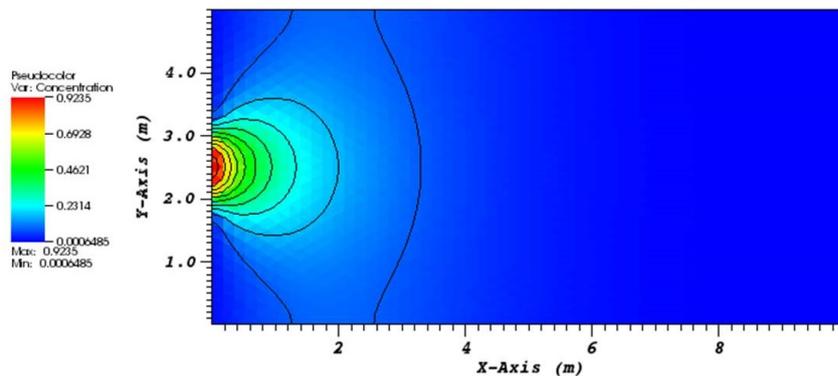


Figura 5.32: Contorno de concentração do soluto traçador obtido usando os métodos *MUSCL-MPFA-D*, para o problema de transporte 2D e malha  $50 \times 25$ . ( $t = 1$  dia,  $Pe = 0,05$ ).

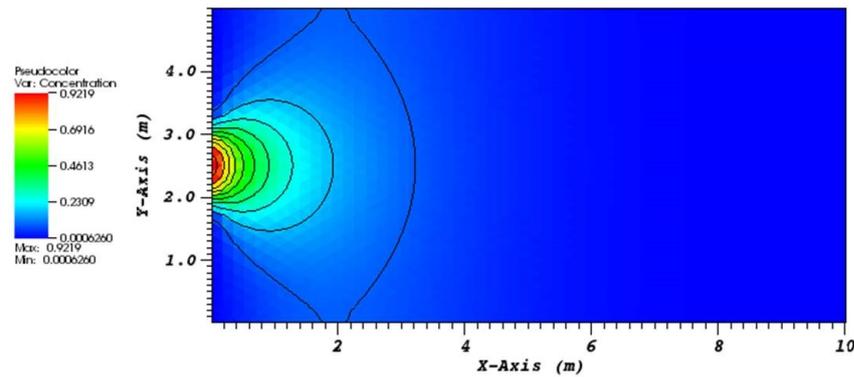
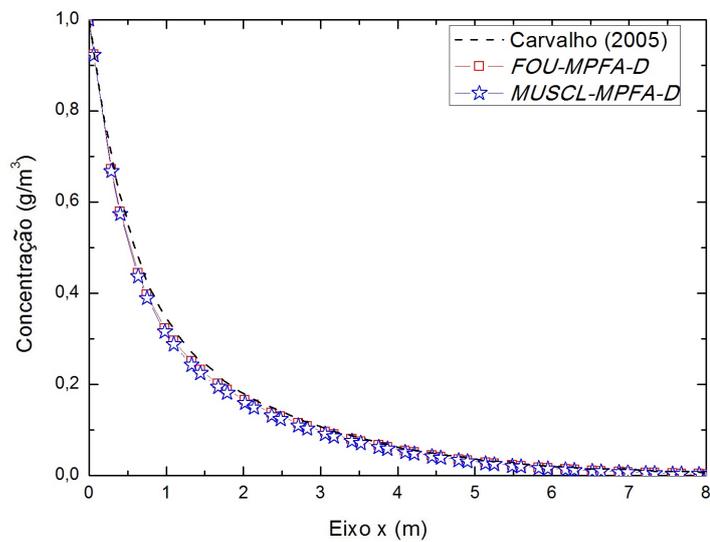


Figura 5.33: Perfil da concentração obtido na simulação do problema de transporte de solutos num meio poroso 2D, para uma malha 50x25 subdivisões. ( $t = 1$  dia,  $Pe = 0,05$ ).



Como esperado, os campos de concentração do soluto traçador foram praticamente os mesmos, devido ao domínio do fluxo de dispersão hidrodinâmica na solução da equação ADRE.

De acordo com a Fig. 5.33, podemos observar que os métodos usados se aproximaram da solução obtida por Carvalho (2005). Então, ao se refinar a malha e se manter o mesmo número de Peclet, os métodos apresentaram resultados muito mais acurados comparados aos resultados obtidos na malha 20x10.

Finalmente, foram comparados os resultados para o mesmo problema descrito anteriormente com a solução analítica extraída de Lewis et al. (2006) e a solução extraída de Carvalho (2005). Foram usados os mesmos parâmetros e malhas nas mesmas condições de estabilidade, mas o tempo de simulação neste caso foi de  $t = 4$  dias com  $CFL = 0,2$ .

As Fig. 5.34 até a Fig. 5.36, mostram o campo de concentração do soluto traçador obtido pelos métodos *FOU-MPFA-D*, *MUSCL-MPFA-D* e *MUSCL\_Woodfield-MPFA-D* respectivamente, para uma malha 20x10. A Fig. 5.37 apresenta a solução da concentração do soluto ao longo do eixo  $x$  ( $y = 2,5$  m) para os mesmos métodos e malha anteriormente mencionados e, a solução extraída de Carvalho (2005) e Lewis et al. (2006). O instante de tempo de simulação foi  $t = 4$  d.

Figura 5.34: Contorno de concentração do soluto traçador obtido usando os métodos *FOU-MPFA-D*, para o problema de transporte 2D e malha 20x10. ( $t = 4$  dias,  $Pe = 0,05$ ).

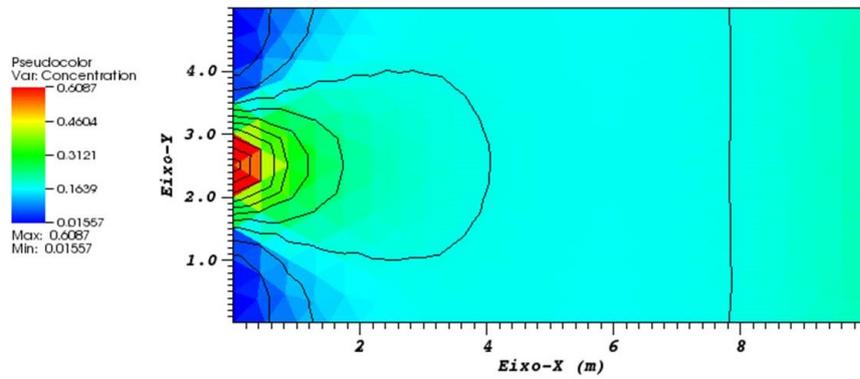


Figura 5.35: Contorno de concentração do soluto traçador obtido usando os métodos *MUSCL-MPFA-D*, para o problema de transporte 2D e malha 20x10. ( $t = 4$  dias,  $Pe = 0,05$ ).

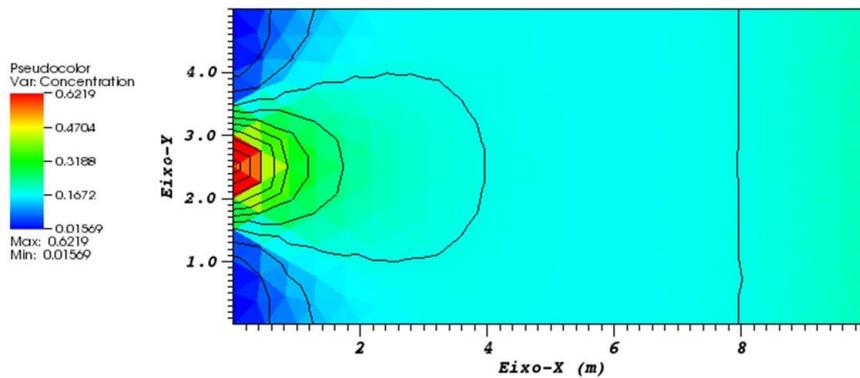


Figura 5.36: Contorno de concentração do soluto traçador obtido usando os métodos *MUSCL\_Woodfield-MPFA-D*, para o problema de transporte 2D e malha 20x10. ( $t = 4$  dias,  $Pe = 0,05$ ).

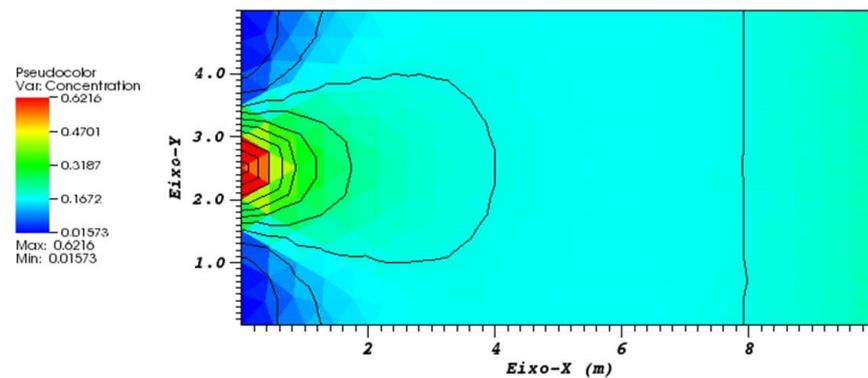
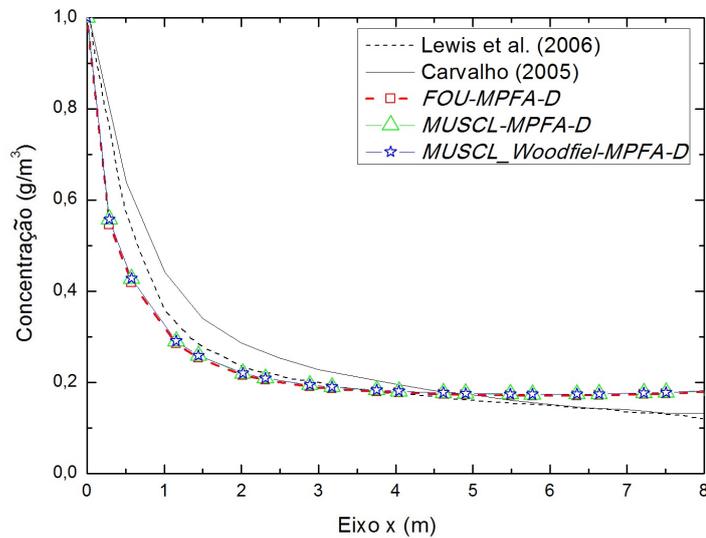


Figura 5.37: Perfil da concentração obtido na simulação do problema de transporte de solutos num meio poroso 2D, para uma malha 20x10 subdivisões. ( $t = 4$  dias,  $Pe = 0,05$ ).



As Fig. 5.38 e Fig. 5.39, mostram o campo de concentração do soluto traçador obtido pelos métodos *FOU-MPFA-D* e *MUSCL-MPFA-D* respectivamente, para uma malha 50x25, e, a Fig. 5.40 apresenta a solução da concentração do soluto ao longo do eixo  $x$  ( $y = 2,5$  m) para os mesmos métodos e malha anteriormente mencionados e a solução extraída de Lewis et al. (2006). O instante de tempo de simulação foi  $t = 4$  d.

Figura 5.38: Contorno de concentração do soluto traçador obtido usando os métodos *FOU-MPFA-D*, para o problema de transporte 2D e malha 50x25. ( $t = 4$  dias,  $Pe = 0,05$ )

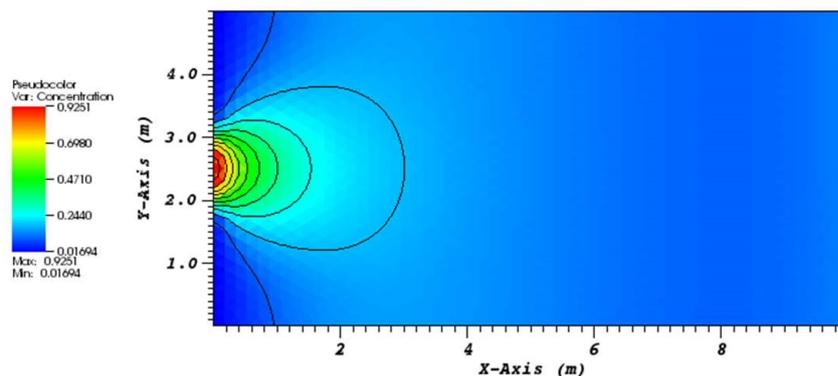


Figura 5.39: Contorno de concentração do soluto traçador obtido usando os métodos *MUSCL-MPFA-D*, para o problema de transporte 2D e malha 50x25. ( $t = 4$  dias,  $Pe = 0,05$ ).

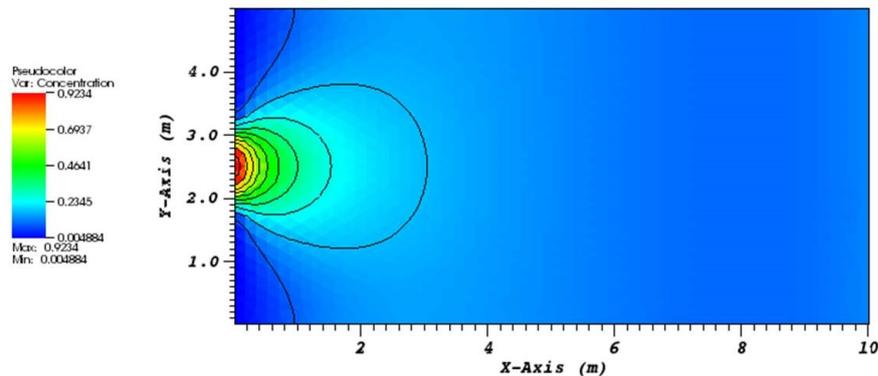
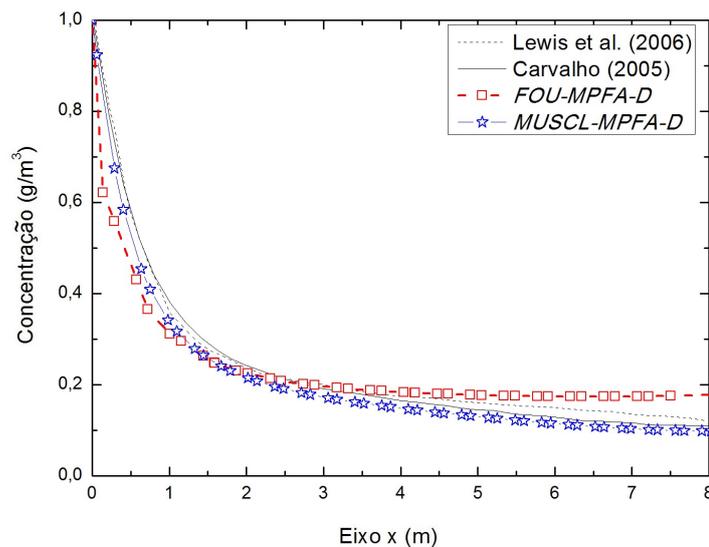


Figura 5.40: Perfil da concentração obtido na simulação do problema de transporte de solutos num meio poroso 2D, para uma malha 50x25 subdivisões. ( $t = 4$  dias,  $Pe = 0,05$ ).



Conforme pode-se observar nas figuras anteriores, devido ao valor muito baixo para o número de Peclet da malha, tanto na malha mais grossa quanto na malha mais fina o soluto traçador rapidamente se espalha na direção transversal bem como na direção do escoamento. Além disso, na malha mais grossa as soluções obtidas pelos métodos de baixa ordem e alta ordem no fluxo advectivo não são muito acuradas comparadas com a solução analítica de Lewis. Quando a malha é refinada se apresenta maior acurácia na aproximação *MUSCL-MPFA-D*, e, os resultados obtidos ficaram em excelente concordância com respeito à solução analítica.

### 5.2.2 Transporte de Solutos Traçadores num Meio Poroso com Razão de Dispersão Hidrodinâmica Não-Unitária

Neste exemplo, apresentam-se exemplos em que o tensor de permeabilidade é anisotrópico. Como os coeficientes de dispersão hidrodinâmica estão diretamente relacionados com a velocidade de escoamento (Eq. (3.17)), e esta, a sua vês com a permeabilidade (Eq. (3.4)), é possível resolver problemas com coeficientes de dispersão hidrodinâmica anisotrópicos. Nos exemplos aqui apresentados utilizou-se a mesma geometria e condições de contorno do exemplo 5.2.1. Porém, neste caso, foi avaliado o que ocorre quando os coeficientes de dispersão longitudinal e transversal são diferentes ( $D_{xx} \neq D_{yy}$ ), i.e., quando o tensor de permeabilidade é anisotrópico ( $k_{xx} \neq k_{yy}$ ). Em todos os casos analisados, a malha utilizada na discretização espacial foi a malha mais refinada apresentada na Fig. 5.26 (b), com espaçamento  $\Delta x = 0,2$  m. Para efeito de ilustração, foi definida a razão entre os coeficientes de dispersão hidrodinâmica como  $r = D_{xx}/D_{yy}$ , e são apresentados os exemplos para  $r = 1$ ,  $r = 10$  e  $r = 100$  respectivamente. De acordo com as razões definidas anteriormente, os tensores de permeabilidade respectivos foram:

$$\underline{\underline{K}} = \begin{bmatrix} 10 & 0 \\ 0 & 10 \end{bmatrix}, \quad \underline{\underline{K}} = \begin{bmatrix} 10 & 0 \\ 0 & 0,1 \end{bmatrix}, \quad \underline{\underline{K}} = \begin{bmatrix} 10 & 0 \\ 0 & 0,01 \end{bmatrix}$$

E os tensores de dispersão hidrodinâmica foram respectivamente:

$$\underline{\underline{D}} = \begin{bmatrix} 4 & 0 \\ 0 & 4 \end{bmatrix}, \quad \underline{\underline{D}} = \begin{bmatrix} 4 & 0 \\ 0 & 0,4 \end{bmatrix}, \quad \underline{\underline{D}} = \begin{bmatrix} 4 & 0 \\ 0 & 0,04 \end{bmatrix}$$

,

A velocidade média ao longo do eixo  $x$  foi  $v = 1$  m/dia e o número de Peclet  $Pe = 0,05$ . Nas Fig. 5.41 até Fig. 5.43 observa-se os diferentes perfis de concentração obtidos do soluto traçador escoando no reservatório. Para os três casos de razão de dispersão hidrodinâmica, os métodos *FOU-MPFA-D* e *MUSCL-MPFA-D* foram . O instante de tempo de simulação foi  $t = 2$  dias e o número de Courant,  $CFL = 0,2$ .

Figura 5.41: Contorno de concentração do soluto traçador obtido usando os métodos *FOU-MPFA-D*, para o problema de transporte 2D e razão de dispersividade ( $r = 1$ ,  $t = 2$  dias,  $Pe = 0,05$ ).

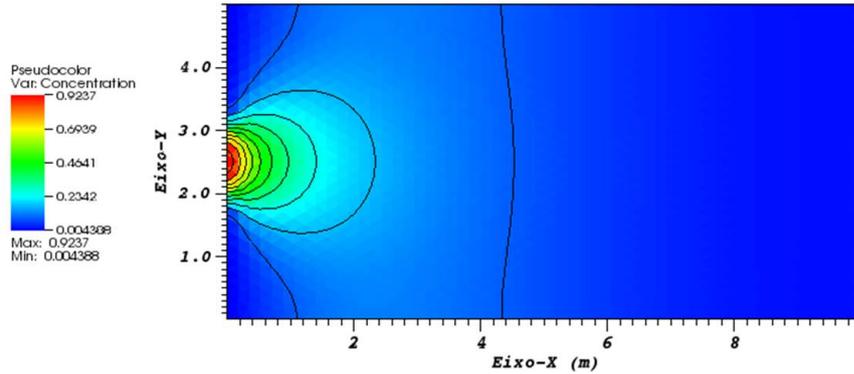


Figura 5.42: Contorno de concentração do soluto traçador obtido usando os métodos *MUSCL-MPFA-D*, para o problema de transporte 2D e razão de dispersividade ( $r = 1$ ,  $t = 2$  dias,  $Pe = 0,05$ ).

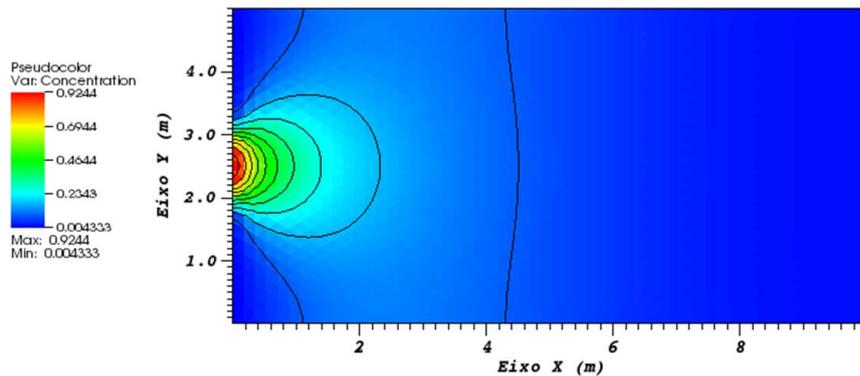


Figura 5.43: Contorno de concentração do soluto traçador obtido usando os métodos *FOU-MPFA-D*, para o problema de transporte 2D e razão de dispersividade ( $r = 10$ ,  $t = 2$  dias,  $Pe = 0,05$ ).

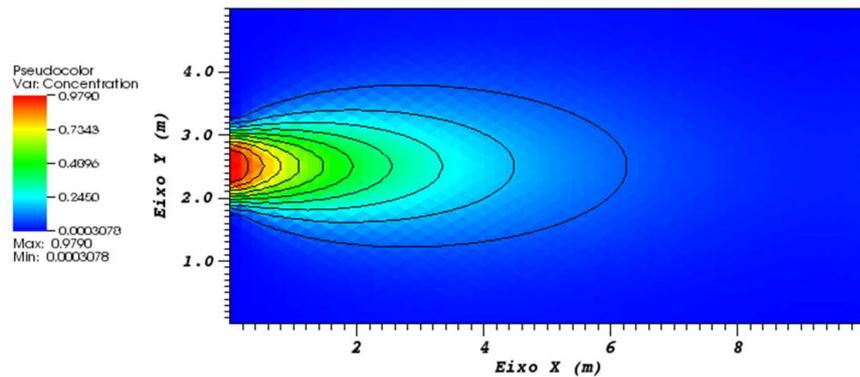


Figura 5.44: Contorno de concentração do soluto traçador obtido usando os métodos *MUSCL-MPFA-D*, para o problema de transporte 2D e razão de dispersividade ( $r = 10$ ,  $t = 2$  dias,  $Pe = 0,05$ ).

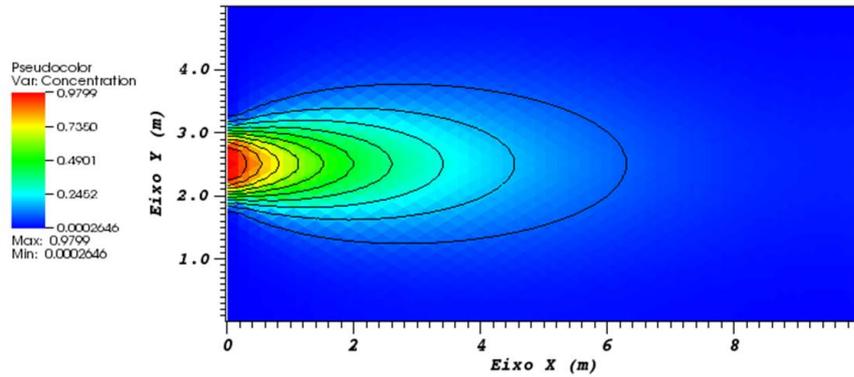


Figura 5.45: Contorno de concentração do soluto traçador obtido usando os métodos *FOU-MPFA-D*, para o problema de transporte 2D e razão de dispersividade ( $r = 100$ ,  $t = 2$  dias,  $Pe = 0,05$ ).

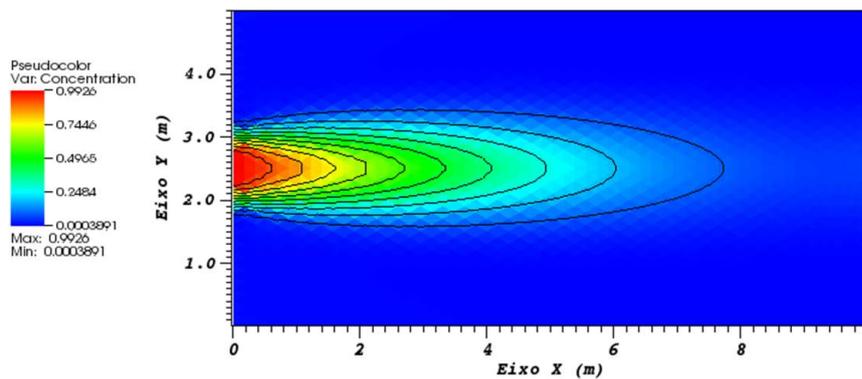
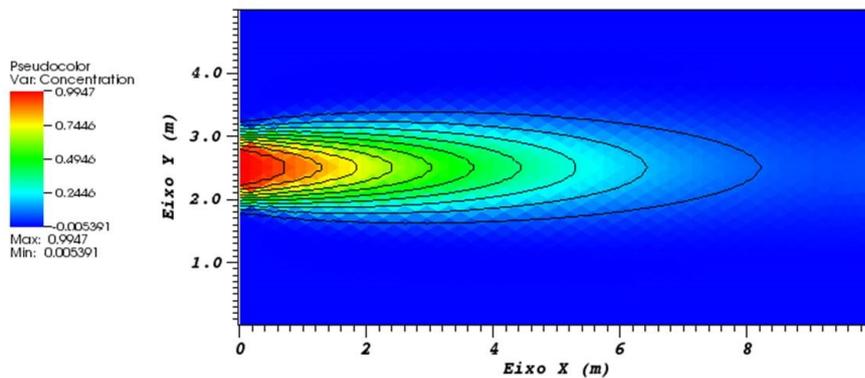
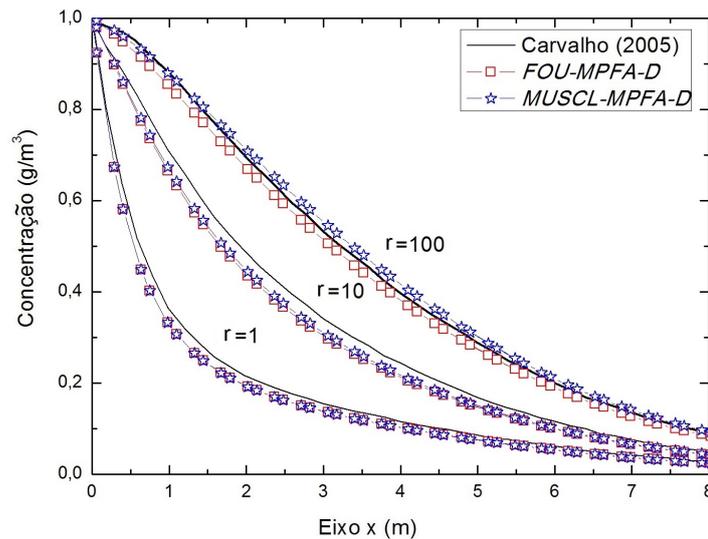


Figura 5.46: Contorno de concentração do soluto traçador obtido usando os métodos *MUSCL-MPFA-D*, para o problema de transporte 2D e razão de dispersividade ( $r = 100$ ,  $t = 2$  dias,  $Pe = 0,05$ ).



Na Fig. 5.41 tem-se a solução da concentração do soluto ao longo do eixo  $x$  ( $y = 2,5\text{m}$ ) para os mesmos métodos anteriormente mencionados no instante de tempo de simulação  $t = 4$  dias e as soluções obtidas em Carvalho (2005).

Figura 5.47: Perfil da concentração obtido na simulação do problema de transporte de solutos num meio poroso 2D com razão dispersividade não unitária. ( $t = 2$  dias,  $Pe = 0,05$ ).



De acordo com os resultados obtidos, quando o coeficiente de dispersividade transversal é pequeno comparado ao coeficiente de dispersividade longitudinal ( $D_{xx} < D_{yy}$ ). A concentração tende a se espalhar de forma preferencial ao longo do eixo dos  $x$  gerando um efeito de “pluma”. Como mencionado anteriormente, o número de Peclet  $Pe = 0,05$  obtido foi pequeno, o que demonstra que a equação ADRE apresenta um fluxo de dispersão hidrodinâmica dominante, e a aproximação com os métodos *MUSCL\_Woodfield-MPFA-D* vai ser muito similar com a aproximação *MUSCL-MPFA-D*, que, neste exemplo não foi considerada. Os perfis de concentração dos métodos em primeira ordem e alta ordem para a razão  $r = 1$  e  $r = 10$  foram praticamente os mesmos. Quando a razão é  $r = 100$ , o método de alta ordem difere um pouco do método de baixa ordem. Em todos os casos, os resultados se comportam de acordo com as soluções obtidas por Carvalho (2005).

### 5.2.3 Transporte de Solutos Traçadores a Partir de Um Pulso Transiente Localizada a Montante

Este exemplo foi adaptado de Carvalho (2005) e Lewis et al. (2006). Neste caso vão-se considerar a mesma geometria usada no Problema 5.2.1, mas o soluto traçador não vai ser injetado de maneira contínua, como proposto anteriormente. O soluto traçador age durante um lapso temporal de  $t_0 = 1$  dia e, após este tempo, o soluto não é mais injetado.

Foram consideradas as mesmas condições de contorno do problema anterior para o campo de pressão. As condições de contorno para o campo de concentração são descritas como segue:

$$C(x, y, 0) = 0 \quad 0 \leq x \leq 10 \text{ m} \quad 0 \leq y \leq 5 \text{ m}$$

$$C = \begin{cases} C_0 & 0 \leq t \leq t_0 \\ & \text{no lado 5-6} \\ 0 & t > t_0 \end{cases}$$

$$C = 0 \quad t \geq 0 \quad \text{nos lados 4-5 e 6-1}$$

$$\frac{\partial C}{\partial x} = 0 \quad t \geq 0 \quad \text{no lado 2-3}$$

$$\frac{\partial C}{\partial y} = 0 \quad t \geq 0 \quad \text{nos lados 1-2 e 3-4}$$

A solução analítica para este problema é obtida em Van Genuchten et al. (1982) sendo:

$$C(x, t) = \begin{cases} C_0 A(x, t) & 0 \leq t \leq t_0 \\ C_0 A(x, t) - C_0 A(x, t - t_0) & t > t_0 \end{cases} \quad (5.15)$$

sendo

$$A(x, t) = \frac{1}{2} \left\{ \operatorname{erfc} \left[ \frac{x - vt}{2\sqrt{D_L t}} \right] + \exp \left( \frac{vx}{D_L} \right) \operatorname{erfc} \left[ \frac{x + vt}{2\sqrt{D_L t}} \right] \right\} \quad (5.16)$$

De acordo com Carvalho (2005), os dados fornecidos para este problema são:  $p_0 = 1 \text{ Pa}$ ,  $C_0 = 1 \text{ g/m}^3$ ,  $\alpha_L = 0,01$ ,  $\alpha_T = 0,01$ ,  $D_0 = 2 \cdot 10^{-9} \text{ m}^2/\text{dia}$ . O tensor de permeabilidade e tortuosidade são os mesmos que foram usados desde o início.

De acordo com estes dados, o coeficiente de dispersão hidrodinâmica ( $\text{m}^2/\text{dia}$ ) vai ser dado por:

$$D_H = \begin{bmatrix} 0,01 & 0 \\ 0 & 0,01 \end{bmatrix}$$

O número de Peclet para este problema é  $Pe = 50$ . As Fig. 5.48 até aFig. 5.53, mostram os perfis de concentração do soluto traçador obtido pelos métodos *FOU-MPFA-D* e

*MUSCL-MPFA-D* para os instantes de tempo de  $t = 2$  dias,  $t = 4$  dias e  $t = 6$  dias respectivamente. A Fig. 5.54 apresenta os perfis de concentração do soluto traçador obtidos pelos métodos *FOU-MPFA-D* e *MUSCL-MPFA-D* e a solução analítica, ao longo do eixo  $x$  ( $y = 2,5$  m), para uma malha  $20 \times 10$  (Fig. 5.5 (a)). Os instantes de tempo de simulação foram  $t = 2$  d,  $t = 4$  d e  $t = 6$  d. O número de Courant usado foi  $CFL = 0.2$ .

Figura 5.48: Contorno de concentração do soluto traçador obtido usando os métodos *FOU-MPFA-D*, para o problema de transporte 2D e malha  $20 \times 10$ . ( $t = 2$  dias,  $Pe = 50$ ).

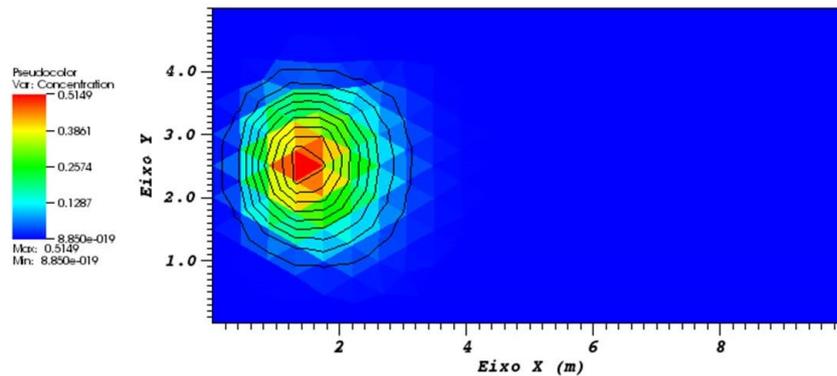


Figura 5.49: Contorno de concentração do soluto traçador obtido usando os métodos *MUSCL-MPFA-D*, para o problema de transporte 2D e malha  $20 \times 10$ . ( $t = 2$  dias,  $Pe = 50$ ).

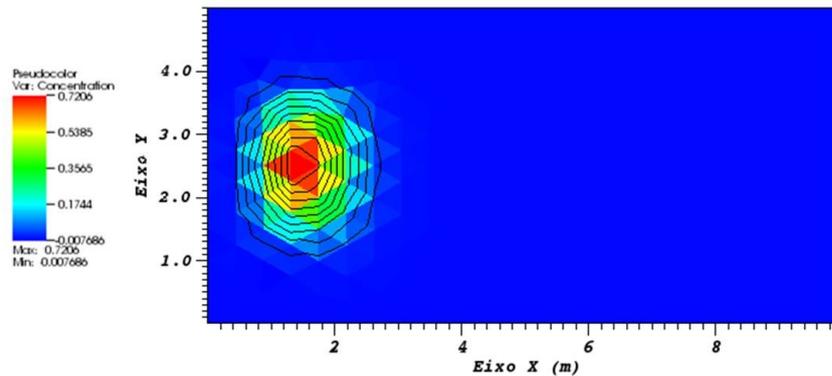


Figura 5.50: Contorno de concentração do soluto traçador obtido usando os métodos *FOU-MPFA-D*, para o problema de transporte 2D e malha 20x10. ( $t = 4$  dias,  $Pe = 50$ ).

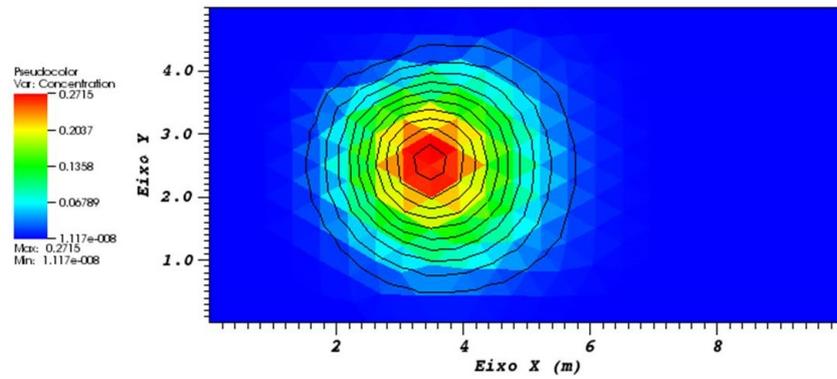


Figura 5.51: Contorno de concentração do soluto traçador obtido usando os métodos *MUSCL-MPFA-D*, para o problema de transporte 2D e malha 20x10. ( $t = 4$  dias,  $Pe = 50$ ).

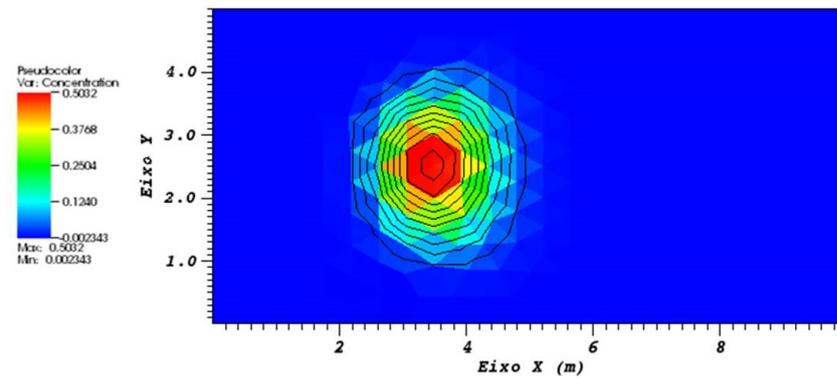


Figura 5.52: Contorno de concentração do soluto traçador obtido usando os métodos *FOU-MPFA-D*, para o problema de transporte 2D e malha 20x10. ( $t = 6$  dias,  $Pe = 50$ ).

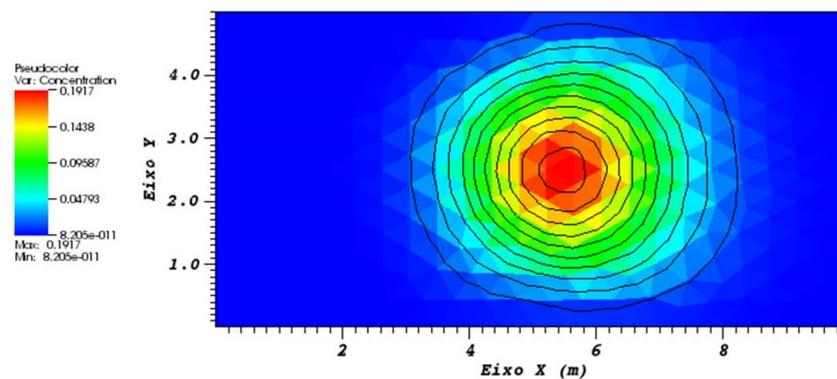


Figura 5.53: Contorno de concentração do soluto traçador obtido usando os métodos *MUSCL-MPFA-D*, para o problema de transporte 2D e malha 50x25. ( $t = 6$  dias,  $Pe = 50$ ).

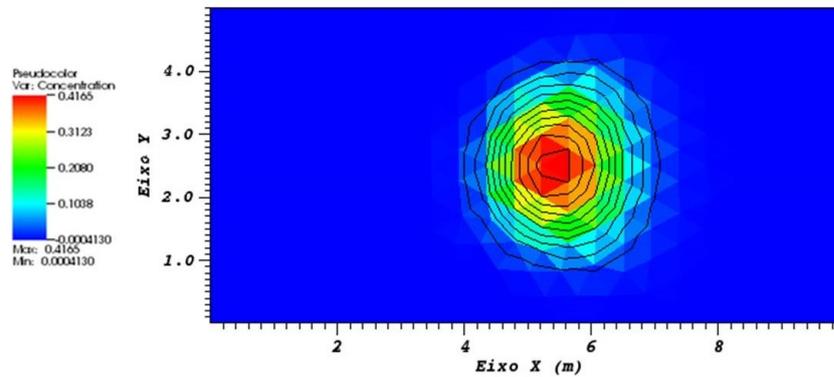
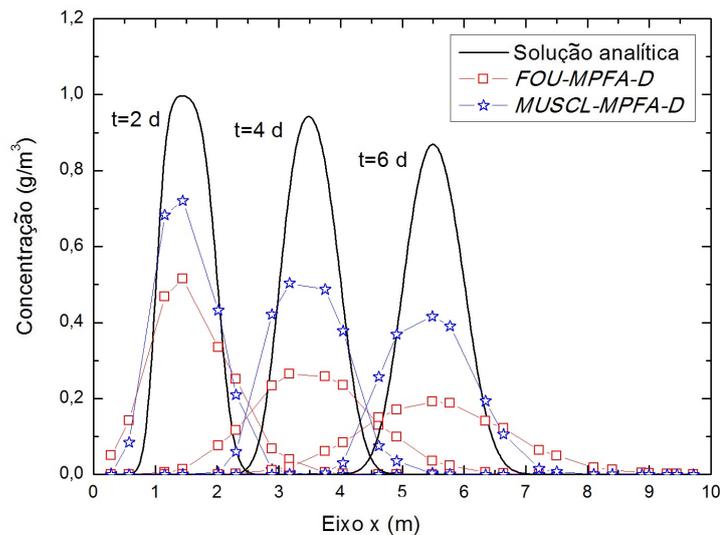


Figura 5.54: Perfis de concentração do soluto traçador obtidos usando os métodos *FOU-MPFA-D* e *MUSCL-MPFA-D*, para o problema de transporte 2D e malha 20x10.  $Pe = 50$ .



De acordo com os resultados obtidos, a aproximação de primeira e segunda ordem apresentaram resultados não muito acurados ao serem comparados com a solução analítica. Neste caso, o problema é dominado por um fluxo fortemente advectivo. Podemos notar nesta malha, que a aproximação *FOU-MPFA-D* apresenta maior difusão numérica artificial do que a aproximação *MUSCL-MPFA-D*. O método com aproximação de alta ordem é mais acurado, quando comparado com a aproximação de baixa ordem. Na Tab. 5.6 são apresentados os erros das normas  $L_{RMS}$  e  $L_{\infty}$  para os diferentes instantes de tempo de simulação  $t = 2$  dias,  $t = 4$  dias e  $t = 6$  dias, usando os métodos *FOU-MPFA-D* e *MUSCL-MPFA-D*. Pode-se observar que os erros obtidos com os métodos *MUSCL-MPFA-D* são menores quando comparados com os erros dos métodos *FOU-MPFA-D*. A norma  $\|E\|_{RMS}$  para a aproximação de alta ordem foi a que apresentou menor erro.

Tabela 5.6: Erros obtidos para o problema de transporte de um soluto traçador a partir de um pulso transiente localizada a montante. Malha 50x25.

<i>Tempo</i> (d)	<i>FOU-MPFA-D</i>		<i>MUSCL-MPFA-D</i>	
	$\ E\ _{RMS}$	$\ E\ _{L\infty}$	$\ E\ _{RMS}$	$\ E\ _{L\infty}$
2	0,1356	0,4819	0,0730	0,2761
4	0,1609	0,5591	0,0889	0,3305
6	0,1831	0,6774	0,1200	0,4527

A fim de estudar a convergência, o mesmo problema foi estudado usando a malha mais fina da Fig. 5.26 (b). Nesse exemplo foi mantido o mesmo número de Peclet  $Pe = 50$ . Foram usadas as mesmas condições de contorno e os parâmetros físicos da malha anterior, exceto os coeficientes  $\alpha_L = 0,004$  e  $\alpha_T = 0,004$ . Finalmente os instantes de tempo de simulação foram  $t = 2$  dias,  $t = 4$  dias e  $t = 6$  dias respectivamente. O número de Courant usado foi  $CFL = 0,2$ .

O coeficiente de dispersão hidrodinâmica ( $m^2/d$ ) é dado por:

$$\underline{D}_H = \begin{bmatrix} 0,004 & 0 \\ 0 & 0,004 \end{bmatrix}$$

Da Fig. 5.55 até a Fig. 5.60, mostram-se os perfis de concentração do soluto traçador obtido pelos métodos *FOU-MPFA-D* e *MUSCL-MPFA-D* para os instantes de tempo de  $t = 2$  dias,  $t = 4$  dias e  $t = 6$  dias, respectivamente. A Fig. 5.61 apresenta os perfis de concentração do soluto traçador obtido pelos métodos *FOU-MPFA-D* e *MUSCL-MPFA-D* e a solução analítica, ao longo do eixo  $x$  ( $y = 2,5 m$ ), para uma malha 50x25 (Fig. 5.5 (b)).

Figura 5.55: Contorno de concentração do soluto traçador obtido usando os métodos *FOU-MPFA-D*, para o problema de transporte 2D e malha 50x25 ( $t = 2$  dias,  $Pe = 50$ ).

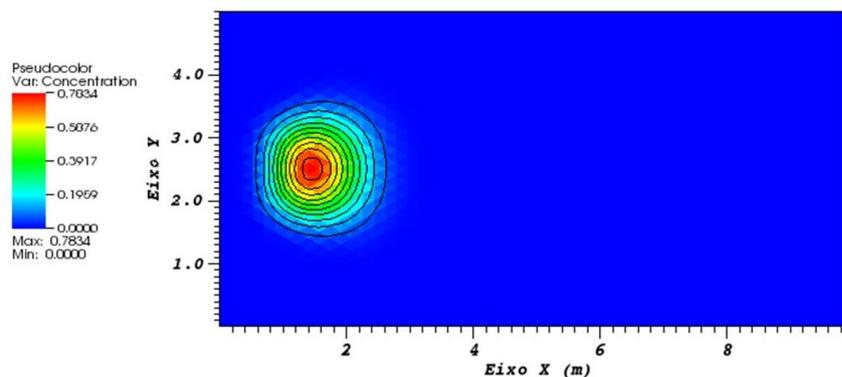


Figura 5.56: Contorno de concentração do soluto traçador obtido usando os métodos *MUSCL-MPFA-D*, para o problema de transporte 2D e malha 50x25 ( $t = 2$  dias,  $Pe = 50$ ).

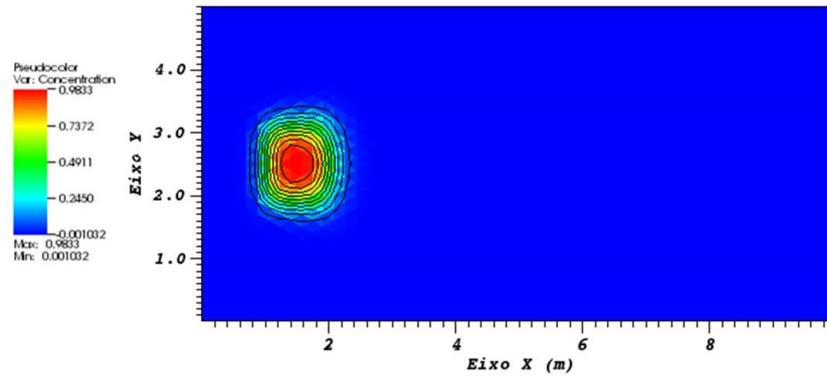


Figura 5.57: Contorno de concentração do soluto traçador obtido usando os métodos *FOU-MPFA-D*, para o problema de transporte 2D e malha 50x25 ( $t = 4$  dias,  $Pe = 50$ ).

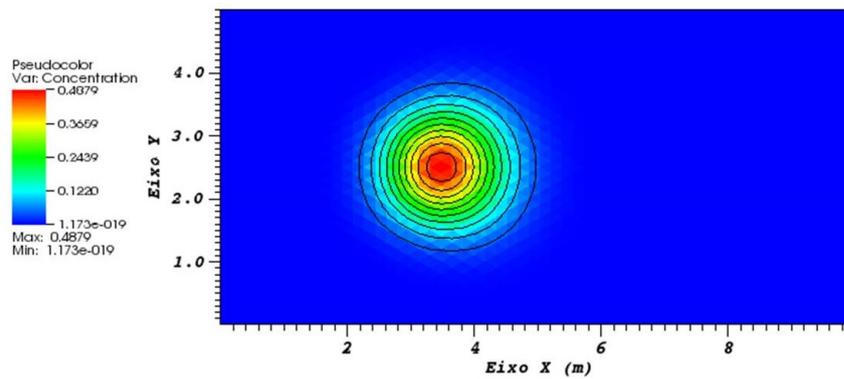


Figura 5.58: Contorno de concentração do soluto traçador obtido usando os métodos *MUSCL-MPFA-D*, para o problema de transporte 2D e malha 50x25 ( $t = 4$  dias,  $Pe = 50$ ).

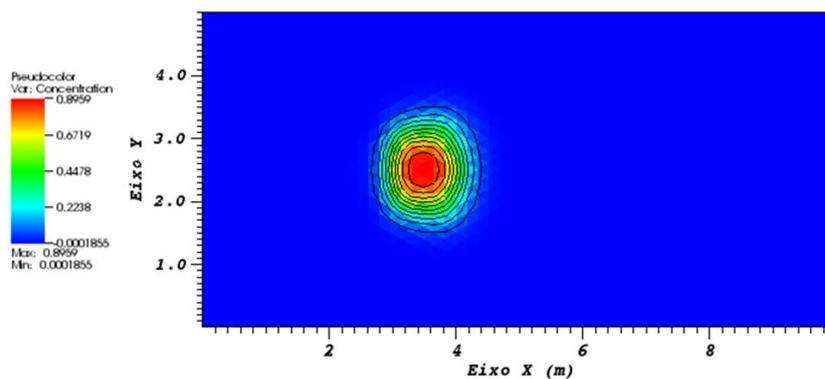


Figura 5.59: Contorno de concentração do soluto traçador obtido usando os métodos *FOU-MPFA-D*, para o problema de transporte 2D e malha 50x25 ( $t = 6$  dias,  $Pe = 50$ ).

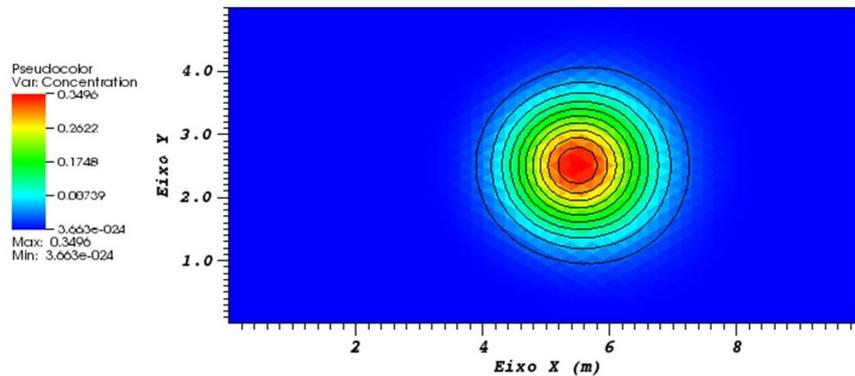
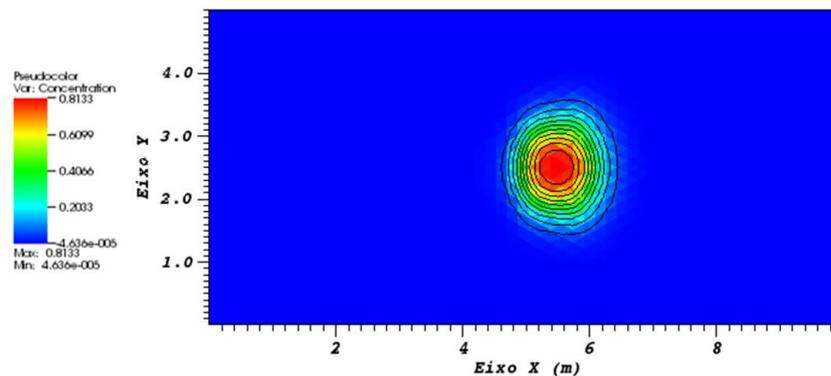


Figura 5.60: Contorno de concentração do soluto traçador obtido usando os métodos *MUSCL-MPFA-D*, para o problema de transporte 2D e malha 50x25 ( $t = 6$  dias,  $Pe = 50$ ).



Como esperado, os campos de concentração do soluto traçador foram mais acurados quando comparados com a malha menos refinada. A aproximação, *MUSCL-MPFA-D* se comportou muito bem quando comparada com a solução analítica e apresentou menor difusão numérica quando comparada com a aproximação *FOU-MPFA-D*. Os erros das normas  $L_{RMS}$  e  $L_{\infty}$ , dos diferentes instantes de tempo de simulação  $t = 2$  dias,  $t = 4$  dias e  $t = 6$  dias, para os diferentes métodos de aproximação são apresentados na Tab. 5.7. Pode-se observar, que os erros obtidos com os métodos *MUSCL-MPFA-D* são menores quando comparados com os erros dos métodos *FOU-MPFA-D*. Com o passar do tempo, a dispersão numérica é maior e os erros dos métodos também aumentaram. Ainda assim, a aproximação de alta ordem foi bem melhor quando comparada com a aproximação de primeira ordem.

Figura 5.61: Perfis de concentração do soluto traçador obtidos usando os métodos *FOU-MPFA-D* e *MUSCL-MPFA-D*, para o problema de transporte 2D e malha 50x25.

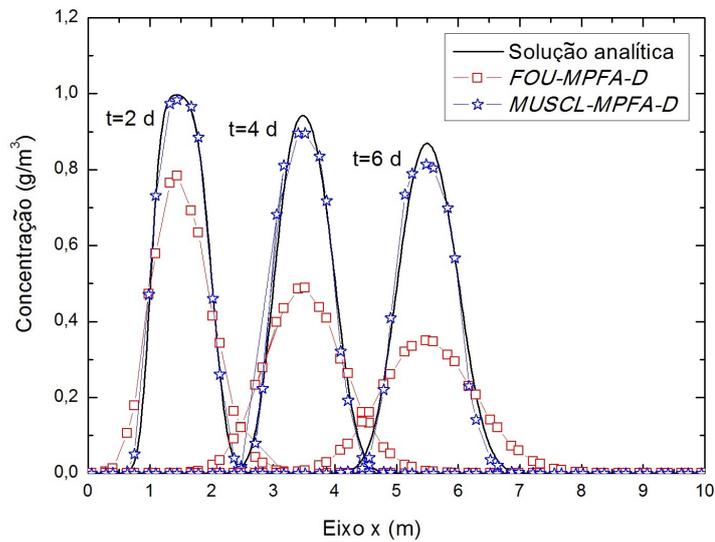


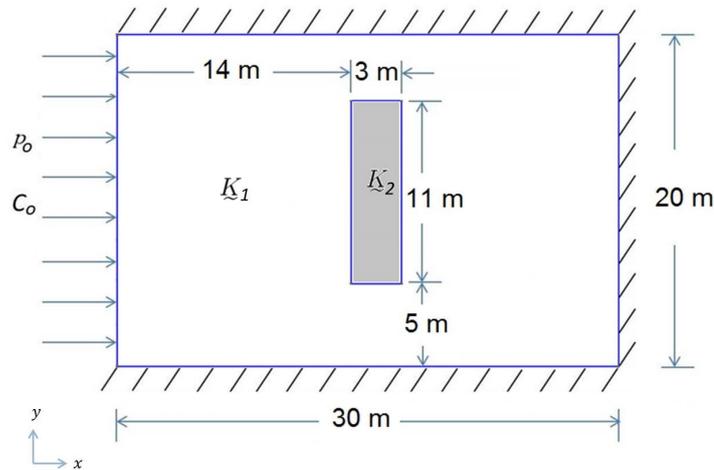
Tabela 5.7: Erros obtidos para o problema de transporte de um soluto traçador a partir de um pulso transiente localizada a montante. Malha 50x25.

<i>Tempo</i> (d)	<i>FOU-MPFA-D</i>		<i>MUSCL-MPFA-D</i>	
	$\ E\ _{RMS}$	$\ E\ _{L^\infty}$	$\ E\ _{RMS}$	$\ E\ _{L^\infty}$
2	0,0740	0,2617	0,0086	0,0509
4	0,1198	0,2617	0,0206	0,1010
6	0,1383	0,5196	0,0224	0,0842

### 5.2.4 Transporte de Solutos Traçadores em Meios Heterogêneos e Dispersão Hidrodinâmica Isotrópica

Neste exemplo foi introduzida uma heterogeneidade no meio poroso, tal que o campo de pressões,  $e$ , em geral a solução da ADRE é afetada. As dimensões geométricas do problema estão especificadas na Fig. 5.62. O transporte do soluto traçador foi considerado de tipo bidimensional e não foram considerados termos de fonte ou sumidouro.

Figura 5.62: Esquema de um meio isotrópico heterogêneo com uma fonte a montante para o problema de transporte bidimensional de um soluto traçador.



Foram usadas as seguintes condições de contorno e inicial:

- Para a equação da pressão:

$$p(0, y, t) = p_0 \quad t \geq 0$$

$$p(30, y, t) = 0 \quad t \geq 0$$

$$\frac{\partial p(x, 0, t)}{\partial y} = 0 \quad t \geq 0$$

$$\frac{\partial p(x, 20, t)}{\partial y} = 0 \quad t \geq 0$$

- Para a equação da concentração:

$$C(x, y, 0) = 0 \quad 0 \leq x \leq 30 \text{ m} \quad 0 \leq y \leq 20 \text{ m}$$

$$C(0, y, t) = C_0 \quad t \geq 0$$

$$\frac{\partial C(30, y, t)}{\partial x} = 0 \quad t \geq 0$$

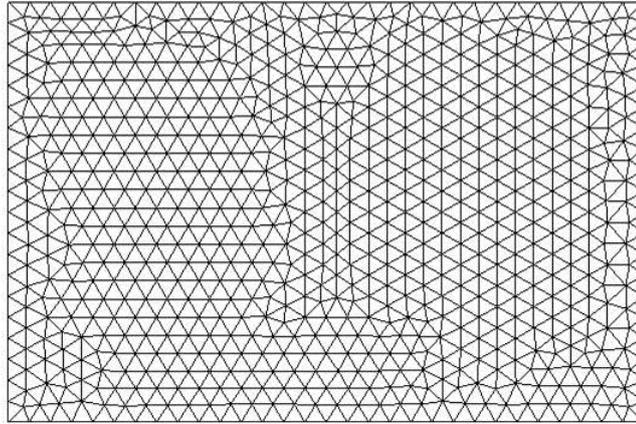
$$\frac{\partial C(x, 0, t)}{\partial y} = 0 \quad t \geq 0$$

$$\frac{\partial C(x, 20, t)}{\partial y} = 0 \quad t \geq 0$$

A malha usada para a discretização espacial é mostrada na Fig. 5.63, onde o espaçamento médio entre os nós adjacentes é  $\Delta x = 1,0 \text{ m}$ , gerando em total 30 divisões ao longo do eixo  $x$  e 20 no eixo  $y$ . Finalmente o tempo de simulação foi  $t = 3 \text{ d}$  com número de Courant,  $CFL = 0,2$ .

Os dados fornecidos para este problema são:  $p_0 = 2 \text{ Pa}$ ,  $C_0 = 1 \text{ g/m}^3$ ,  $\alpha_L = 4$ ,  $\alpha_T = 4$ ,  $D_0 = 2 \cdot 10^{-9} \text{ m}^2/\text{d}$ . O tensor de tortuosidade é o mesmo do Problema 5.2.1. Os tensores de permeabilidade são respectivamente:

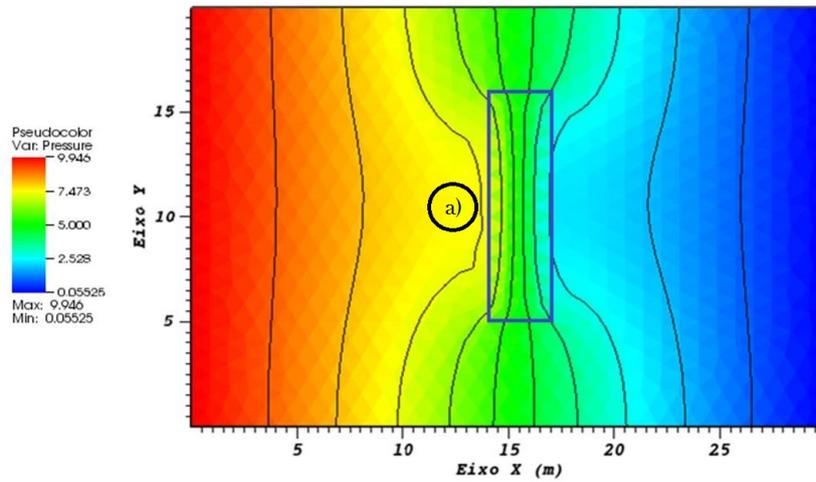
Figura 5.63: Malha triangular nãoestruturada usada na discretização espacial para o problema de transporte em meios heterogêneos 2D. Malha 30x20.



$$\underline{K}_1 = \begin{bmatrix} 10 & 0 \\ 0 & 10 \end{bmatrix}, \quad \underline{K}_2 = \begin{bmatrix} 1 \cdot 10^{-6} & 0 \\ 0 & 1 \cdot 10^{-6} \end{bmatrix}$$

Em função dos dois tensores de permeabilidade, a equação da pressão resolvida vai ter uma velocidade de escoamento que não foi mais linear como nos exemplos descritos anteriormente. Para o tensor com permeabilidade alta, os valores da velocidade foram máximos e, para o tensor com permeabilidades baixa, a velocidade foi quase nula. Como o tensor de dispersão hidrodinâmica encontra-se diretamente relacionado com a velocidade de escoamento, ele também mudou em cada VC, e, do mesmo jeito que a velocidade de escoamento, têm-se maior dispersão hidrodinâmica nas regiões onde a velocidade foi máxima e menor dispersão hidrodinâmica nas regiões onde a velocidade foi mínima. A Fig. 5.64 apresenta o perfil de pressão para o problema de transporte de um soluto num meio poroso heterogêneo, obtida pelo método *MPFA-D*. Na região onde a permeabilidade muda de um valor alto (por exemplo  $k_{xx} = 10$ ) para um valor bem baixo (por exemplo  $k_{xx} = 1 \cdot 10^{-6}$ ), as linhas de contorno mostraram que, nessa região, a baixa permeabilidade se comportou como uma barreira natural e a pressão aumentou seu valor na fronteira de transição entre as duas permeabilidades (ao longo do eixo  $x$  com  $y = 2,5 m$ ), tal como mostrado na Fig. 5.64 (a).

Figura 5.64: Perfil de pressão para o problema de escoamento de um soluto traçador num meio poroso heterogêneo.



As Fig. (5.65), Fig. (5.66) e Fig. (5.67), mostram o campo de concentração do soluto traçador obtido pelos métodos *FOU-MPFA-D*, *MUSCL-MPFA-D* e *MUSCL\_Woodfield-MPFA-D* respectivamente, para uma malha 30x20 e o instante de tempo de simulação foi  $t = 3$  d. O número de Courant usado foi  $CFL = 0,2$ .

Figura 5.65: Perfil de concentração para o problema de escoamento de um soluto traçador num meio poroso heterogêneo 2D, obtido pelos métodos *FOU-MPFA-D*,  $t = 3$  dias.

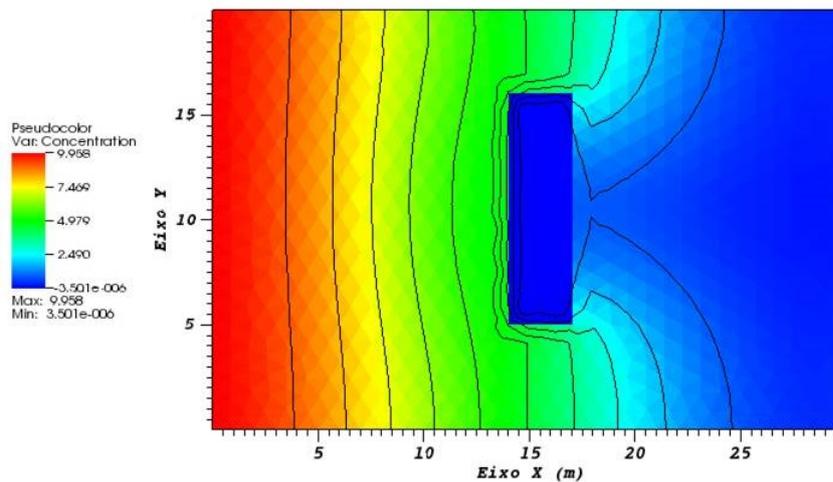


Figura 5.66: Perfil de concentração para o problema de escoamento de um soluto traçador num meio poroso heterogêneo 2D, obtido pelos métodos *MUSCL-MPFA-D*,  $t = 3$  dias.

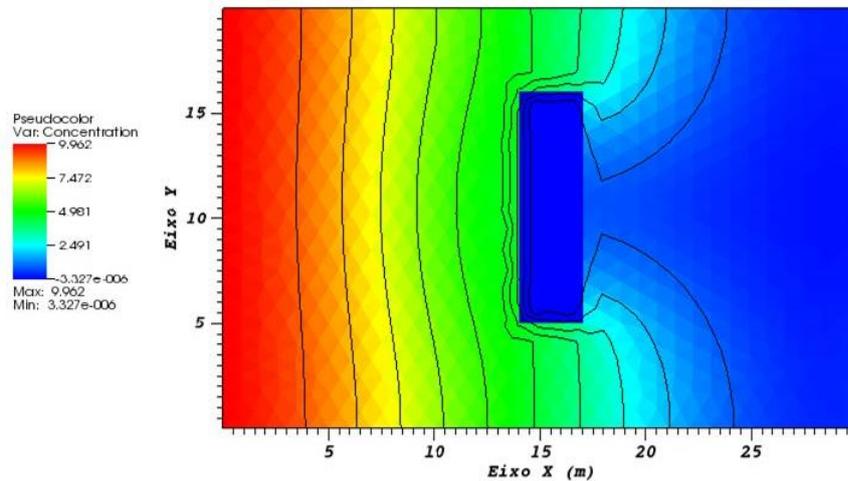
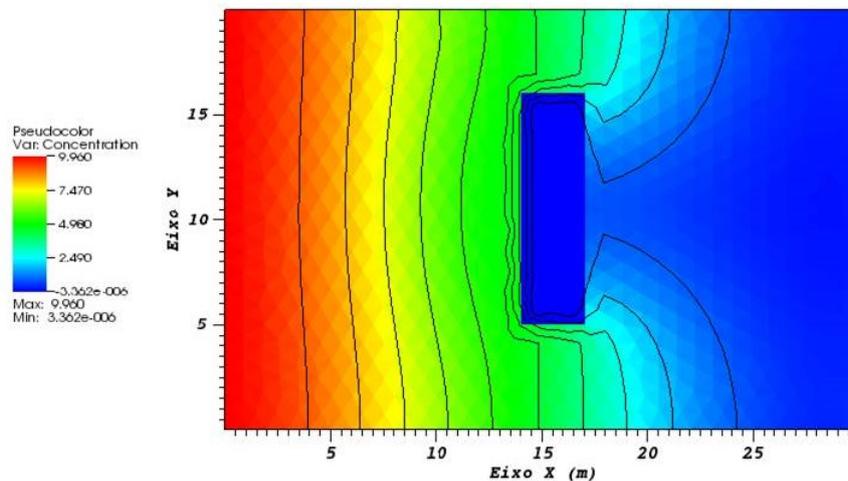


Figura 5.67: Perfil de concentração para o problema de escoamento de um soluto traçador num meio poroso heterogêneo 2D, obtido pelos métodos *MUSCL\_Woodfield-MPFA-D*,  $t = 3$  dias.



De acordo com os resultados obtidos nas Fig. 5.65, Fig. 5.66 e Fig. 5.67, pode-se observar o comportamento da concentração no interior de um meio poroso heterogêneo. Como foi mencionado, o coeficiente de dispersão hidrodinâmica encontra-se diretamente relacionado com a velocidade de escoamento do fluido. Dito isso, na região com permeabilidade muito baixa a velocidade vai ser também baixa, porém, o coeficiente de dispersão vai mudar de acordo com a velocidade e, nessa região, ele foi muito pequeno comparado com a região de alta permeabilidade. A concentração praticamente evoluiu no tempo ocupando a maior parte de zonas onde a permeabilidade foi alta. e, na região de transição, onde a

velocidade muda por causa da permeabilidade baixa, têm-se que a concentração foi muito pequena, fazendo com que o soluto traçador não se espalhe no interior do reservatório onde a permeabilidade é baixa.

Outra coisa importante a observar é que o aporte do fluxo dispersivo no transporte do soluto foi mínimo, mas, ainda contribuiu na solução. O termo dispersivo na ADRE foi o responsável por fazer com que a concentração do soluto se espalhe na região com baixa permeabilidade, porém, têm-se contornos de concentração que estão mostrando como o soluto pouco a pouco escoar na região de transição do meio poroso. Finalmente, observamos que os perfis obtidos pelos métodos FOU-MPFA-D, MUSCL-MPFA-D e MUSCL\_Woodfield-MPFA-D apresentam soluções similares.

## Capítulo 6

### Conclusões e trabalhos futuros

No presente trabalho, foi apresentado, em detalhes, uma formulação unificada do método dos volumes finitos centrado na célula para a solução de problemas do transporte de solutos traçadores dissolvido num escoamento monofásico incompressível, em meios porosos rígidos, heterogêneos e anisotrópicos.

Para a discretização dos termos elípticos, tanto da equação de pressão, como da equação do traçador, foi utilizada a técnica MPFA-D. Esta formulação foi proposta por Gao and Wu (2011) e, depois estudada por Contreras (2012) no estudo de escoamentos bifásicos imiscíveis de óleo-água em reservatórios de petróleo. Para a discretização dos termos de transporte advectivo, foram utilizadas as técnicas de ponderação à montante de primeira ordem (First Order Upwind) e o método MUSCL (Monotone Upstream Centered Scheme for Conservation Laws) de segunda ordem fazendo uso de alternativas diferentes de limitação de gradientes.

A fim de testar nossa formulação, foram resolvidos alguns problemas *benchmark* encontrados na literatura, em que foram comparados os resultados obtidos com o MVF e outras formulações, na solução de problemas elípticos e parabólicos em meios heterogêneos e anisotrópicos, e algumas vezes com a solução analítica de cada problema.

No estudo do transporte de solutos traçadores, a equação de Advecção-Dispersão-Reação foi resolvida fazendo uso de uma metodologia *IMPEC* (Pressão implícita-Concentração explícita).

O estudo foi feito em problemas uni e bidimensionais em meios porosos homogêneos e heterogêneos. Foram consideradas diversas situações, incluindo problemas fortemente difusivos ou fortemente advectivos. Também foi considerada a existência de termos fonte ou sumidouro, que estão associados ao decaimento radioativo do traçador escoando no reservatório de petróleo.

Foram considerados problemas que envolvem coeficientes de permeabilidade anisotrópicos, e observou-se o efeito da permeabilidade nos coeficientes de dispersão longitudinal e transversal e no transporte do soluto contaminante. Outros problemas estudados foram o transporte de solutos traçadores a partir de um pulso transiente localizado a montante

e, finalmente, o transporte de traçadores em meios porosos heterogêneos com coeficiente de dispersão hidrodinâmica isotrópico.

No estudo de problemas unidimensionais, foram comparados os resultados obtidos com a solução analítica correspondente, e, fazendo refinamento de malha foi realizado um estudo para diferentes números de Peclet e obtida a acurácia dos métodos em primeira ordem e em alta ordem. Conforme esperado, a aproximação da metodologia de alta ordem implementada para a discretização dos termos advectivos com e sem limitador de volume de controle (MUSCL e MUSCL\_Woodfield) apresentaram resultados com melhor acurácia quando comparados com a aproximação de primeira ordem. Em particular, tais métodos foram superiores em exemplos onde o fluxo advectivo é dominante na ADRE.

No estudo de problemas bidimensionais, os resultados obtidos apresentaram um bom comportamento quando comparados com problemas resolvidos da literatura. No problema de transporte de solutos traçadores a partir de um pulso transiente localizado a montante, os métodos de alta ordem foram bastante superiores ao método de ponderação à montante de 1<sup>a</sup> ordem, que ainda hoje é bastante utilizado na simulação do transporte de traçadores em meios porosos.

Através de dois exemplos bidimensionais, verificou-se a capacidade da metodologia proposta para tratar de maneira unificada, problemas de escoamento monofásico em meios porosos heterogêneos. A partir de um problema bastante simples, foi mostrado o potencial da metodologia para simulação de escoamentos em geometrias com malhas não estruturadas e problemas heterogêneos. Finalmente, é importante salientar que, dada a sua generalidade, é perfeitamente possível ainda estender a formulação em problemas que envolvam o escoamento multifásico em meios heterogêneos e anisotrópicos com características geométricas complexas. É possível aperfeiçoar o modelo físico, introduzindo os termos de gravidade e de capilaridade. Finalmente, é possível estudar a ADRE fazendo uso de metodologias sequenciais implícitas ou totalmente implícitas.

## Referências

- Aavatsmark, I. (2002). An introduction to multipoint flux approximations for quadrilateral grids. *Computational Geosciences*, 6(3-4):405–432. 7, 8
- Aavatsmark, I., Barkve, T., Bøe, O., and Mannseth, T. (1998). Discretization on unstructured grids for inhomogeneous, anisotropic media. part i: Derivation of the methods. *SIAM Journal on Scientific Computing*, 19(5):1700–1716. 7, 8
- Aavatsmark, I., Eigestad, G., Mallison, B., and Nordbotten, J. (2008). A compact multipoint flux approximation method with improved robustness. *Numerical Methods for Partial Differential Equations*, 24(5):1329–1360. 7
- Anderson, D. A., Tannehill, J. C., and Pletcher, R. H. (1984). Computational fluid mechanics and heat transfer. 16, 26
- Azevedo, Á. F. (2003). Método dos elementos finitos. *Faculdade de Engenharia da Universidade do Porto*, 1. 7
- Batul, V. (2005). *Applied flow and solute transport modeling in aquifers: fundamental principles and analytical and numerical methods*. CRC Press. 12, 14, 16, 19, 20, 21, 22, 23, 24, 25, 55
- Bauer, W., Westfall, G. D., and Dias, H. (2013). *Física para Universitários: Óptica e Física Moderna*. Bookman. 23
- Bear, J. (1972). *Dynamics of fluids in porous media*. Dover publications. 11, 12, 13, 14, 15, 18, 20, 21, 22, 23, 26, 28
- Bear, J. and Bachmat, Y. (1967). A generalized theory on hydrodynamic dispersion in porous media. In *IASH Symposium on Artificial Recharge and Management of Aquifers*, volume 72, pages 7–16. 18, 22
- Bear, J. and Cheng, A.-D. (2010). *Modeling groundwater flow and contaminant transport*, volume 23. Springer Science & Business Media. 16, 18
- Bear, J. and Verruijt, A. (1987). *Modeling groundwater flow and pollution*, volume 2. Springer Science & Business Media. 4

- Bedient, P. B., Rifai, H. S., and Newell, C. J. (1994). Ground water contamination: transport and remediation. 18
- Ben-Israel, A. and Gilbert, R. (2002). Mean value theorem. In *Computer-Supported Calculus*, pages 224–278. Springer. 33, 49
- Bjornstad, T., Garder, K., Hundere, I., and Michelsen, O. (1990). Tracer tests in oil appraisal and reservoir evaluation: State of the art. In *North Sea Oil and Gas Reservoirs II*. Springer. 4
- Boving, T. B. and Grathwohl, P. (2001). Tracer diffusion coefficients in sedimentary rocks: correlation to porosity and hydraulic conductivity. *Journal of Contaminant Hydrology*, 53(1):85–100. 4, 13
- Capucci, E., Martins, A. M., Mansur, K. L., and Monsores, A. L. M. (2001). *Poços tubulares e outras captações de águas subterrâneas: orientação aos usuários*. Secretaria de Estado de Meio Ambiente e Desenvolvimento Sustentável-SEMADS. 12
- Carman, P. (1937). Fluid flow through porous rock. *Trans. Inst. Chem. Eng. London*, 15:150–157. 13
- Carvalho, D. K. d. (2005). *Uma Formulação do Método dos Volumes Finitos com Estrutura de Dados por Aresta para a Simulação de Escoamentos em Meios Porosos*. PhD thesis, Tese de Doutorado, Universidade Federal de Pernambuco (UFPE), Recife. 4, 5, 7, 8, 12, 16, 18, 25, 26, 27, 28, 29, 31, 43, 44, 46, 47, 48, 50, 52, 53, 54, 55, 68, 75, 76, 77, 79, 80, 81, 88, 89
- Chen, Z. (2007). *Reservoir simulation: mathematical techniques in oil recovery*, volume 77. SIAM. 3, 4
- Chen, Z., Huan, G., and Ma, Y. (2006). *Computational methods for multiphase flows in porous media*, volume 2. SIAM. 5, 12, 17, 18, 19
- Choy, B. and Reible, D. D. (1999). *Diffusion models of environmental transport*. CRC Press. 19
- Coats, K. et al. (2001). Impes stability: The stable step. In *SPE Reservoir Simulation Symposium*. Society of Petroleum Engineers. 29
- Contreras, F. R. (2012). *Um Método dos Volumes Finitos Centrado na Célula para a Simulação de Escoamentos bifásicos em Reservatórios de Petróleo Heteroêneos e Anisotrópicos*. PhD thesis, Tese de Mestrado, Universidade Federal de Pernambuco (UFPE), Recife. 5, 8, 11, 12, 16, 27, 29, 30, 33, 34, 35, 36, 37, 38, 39, 40, 42, 43, 49, 102

- Cordazzo, J. (2005). *Modelagem e Simulação Numéricado derramamento de Gasolina Acrecida deÁ lcol em Águas Subterrâneas*. PhD thesis, Tese de Mestrado, Universidade Federal de Santa Catarina (UFSC), Florianópolis. 16, 18, 23, 26
- Courant, R., Isaacson, E., and Rees, M. (1952). On the solution of nonlinear hyperbolic differential equations by finite differences. *Communications on Pure and Applied Mathematics*, 5(3):243–255. 43, 50, 51
- Crank, J. et al. (1975). *The mathematics of diffusion*, volume 2. Clarendon press Oxford. 16, 20
- Darcy, H. (1856). *Les fontaines publiques de la ville de Dijon: exposition et application...* Victor Dalmont. 3
- De Boer, R. (2000). Theory of porous media: Highlights in historical development and current statespringer. *Berlin, Heidelberg, New York*. 20
- Delleur Jacques, W. (1999). The handbook of groundwater engineering. 11, 22
- Dias, N. L. (2003). Obtenção de uma solução analítica da equação de difusão-advecção com decaimento de 1<sup>a</sup> ordem pelo método da transformação de similaridade generalizada. *Revista brasileira de Recursos Hídricos*, 8(1):181–188. 55
- Duda, A., Koza, Z., and Matyka, M. (2011). Hydraulic tortuosity in arbitrary porous media flow. *Physical Review E*, 84(3):036319. 13
- Dugstad, Ø., Viig, S., Krognes, B., Kleven, R., and Huseby, O. (2013). Tracer monitoring of enhanced oil recovery projects. In *EPJ Web of Conferences*, volume 50, page 02002. EDP Sciences. 4
- Dullien, F. A. (2012). *Porous media: fluid transport and pore structure*. Academic press. 11, 12, 13
- Dunnivant, F. M. and Anders, E. (2006). *A basic introduction to pollutant fate and transport: an integrated approach with chemistry, modeling, risk assessment, and environmental legislation*. John Wiley & Sons. 15
- Ertekin, T., Abou-Kassem, J. H., and King, G. R. (2001). *Basic applied reservoir simulation*. Richardson, TX: Society of Petroleum Engineers. 4, 11
- Everett, D. H. and Stone, F. S. (1958). *The structure and properties of porous materials*, volume 10. Butterworths. 11
- Ewing, R. E. (1984). *The mathematics of reservoir simulation*, volume 1. Society for Industrial Mathematics. 3, 4, 18, 19, 20, 22

- Eymard, R., Gallouët, T., and Herbin, R. (2000). Finite volume methods. *Handbook of numerical analysis*, 7:713–1018. 5, 31
- Fanchi, J. R. (2005). *Principles of applied reservoir simulation*. Gulf Professional Publishing. 11
- Ferziger, J. H. and Perić, M. (2002). *Computational methods for fluid dynamics*, volume 3. Springer Berlin. 5, 16
- Floater, M. S. (2003). Mean value coordinates. *Computer aided geometric design*, 20(1):19–27. 33, 49
- Fortuna, A. d. O. (2000). *Técnicas computacionais para dinâmica dos fluidos: conceitos básicos e aplicações*. EDUSP. 16
- Freeze, R. A. (1994). Henry darcy and the fountains of dijon. *Groundwater*, 32(1):23–30. 18
- Fried, J. and Combarous, M. (1971). Dispersion in porous media. *Adv. Hydrosci*, 7(169). 20, 22
- Galindez, G. (2014). *Método Espectral dos Volumes Finitos para a Simulação 1-D de Escoamentos bifásicos em Reservatórios de Petróleo*. PhD thesis, Tese de Mestrado, Universidade Federal de Pernambuco (UFPE), Recife. 31, 45, 50, 52
- Gao, Z. and Wu, J. (2011). A linearity-preserving cell-centered scheme for the heterogeneous and anisotropic diffusion equations on general meshes. *International Journal for Numerical Methods in Fluids*, 67(12):2157–2183. 8, 29, 33, 34, 35, 39, 40, 43, 49, 52, 102
- Gelhar, L. W., Welty, C., and Rehfeldt, K. R. (1992). A critical review of data on field-scale dispersion in aquifers. *Water resources research*, 28(7):1955–1974. 22
- Gramling, C. M., Harvey, C. F., and Meigs, L. C. (2002). Reactive transport in porous media: A comparison of model prediction with laboratory visualization. *Environmental science & technology*, 36(11):2508–2514. 6
- Gray, W. G. (1975). A derivation of the equations for multi-phase transport. *Chemical Engineering Science*, 30(2):229–233. 19
- Gurevich, S., Nerone, N., Drazer, G., Chertcoff, R., and Rosen, M. (2013). Estudio de la dispersión hidrodinámica en un medio poroso adsorbente. In *ANALES AFA*, volume 10. 4
- Hálek, V. and Švec, J. (2011). *Groundwater hydraulics*. Elsevier. 3, 11

- Healy, R. (1990). *Simulation of solute transport in variably saturated porous media with supplemental information on modifications to the US Geological Survey's computer program VS2D*. Department of the Interior, US Geological Survey. 5
- Heilbron, P., Xavier, A., Pontedeiro, E., and Ferreira, R. (2004). Segurança nuclear e proteção do meio ambiente. *Brazil, Editora E-Papers, Rio de Janeiro*. 23
- Helmig, R. (1997). *Multiphase flow and transport processes in the subsurface*, volume 6. Springer Berlin. 12, 18, 25, 50
- Hirsch, C. (2007). *Numerical Computation of Internal and External Flows: The Fundamentals of Computational Fluid Dynamics: The Fundamentals of Computational Fluid Dynamics*, volume 1. Butterworth-Heinemann. 5, 16, 20, 26, 30, 43, 45, 46, 50, 51
- Holcl, S. P. and Orlando, F. (1991). Radiation protection and dosimetry. 23
- Hossain, M. A. and Yonge, D. R. (1997). Linear finite-element modeling of contaminant transport in ground water. *Journal of environmental engineering*, 123(11):1126–1135. 5
- Huang, W. and Kappen, A. M. (1998). A study of cell-center finite volume methods for diffusion equations. Technical report, Mathematics Research Report 98-10-01, Department of Mathematics, University of Kansas, Lawrence, KS. 40
- Hundsdofer, W. and Verwer, J. (1996). Numerical solution of advection-diffusion-reaction equations. *CWI Report NMN9603, Centrum voor Wiskunde en Informatica, Amsterdam*. 24, 30
- Huseby, O., Sagen, J., Viig, S., and Dugstad, Ø. (2013). Simulation and interpretation of inter-well tracer tests. In *EPJ Web of Conferences*, volume 50, page 03003. EDP Sciences. 4
- Huyakorn, P. S. (2012). *Computational methods in subsurface flow*. Academic Press. 6
- Hyman, J., Shashkov, M., and Steinberg, S. (1997). The numerical solution of diffusion problems in strongly heterogeneous non-isotropic materials. *Journal of Computational Physics*, 132(1):130–148. 51
- Irmay, S. (1958). On the theoretical derivation of darcy and forchheimer formulas. *Eos, Transactions American Geophysical Union*, 39(4):702–707. 19
- Kapoor, V., Gelhar, L. W., and Miralles-Wilhelm, F. (1997). Bimolecular second-order reactions in spatially varying flows: Segregation induced scale-dependent transformation rates. *Water Resources Research*, 33(4):527–536. 6

- Khopkar, S. M. (1998). *Basic concepts of analytical chemistry*. New Age International. 14
- Klotz, D., Seiler, K.-P., Moser, H., and Neumaier, F. (1980). Dispersivity and velocity relationship from laboratory and field experiments. *Journal of Hydrology*, 45(3):169–184. 22
- Konikow, L. F. and Glynn, P. D. (2013). Modeling groundwater flow and quality. In *Essentials of Medical Geology*, pages 727–753. Springer. 4
- Koplik, J., Redner, S., and Hinch, E. (1994). Tracer dispersion in planar multipole flows. *Physical Review E*, 50(6):4650. 4
- Kovarik, K. (2000). *Numerical models in groundwater pollution*. Springer Science & Business Media. 5, 11, 12, 20
- Kozeny, J. (1927). *Über kapillare Leitung des Wassers im Boden:(Aufstieg, Versickerung und Anwendung auf die Bewässerung)*. Hölder-Pichler-Tempsky. 13
- L’Annunziata, M. F. (2007). *Radioactivity: Introduction and History: Introduction and History*. Elsevier. 23
- Leij, F. J. and Toride, N. (1995). Discrete time-and length-averaged solutions of the advection-dispersion equation. *Water Resources Research*, 31(7):1713–1724. 14
- LeVeque, R. J. (2002). *Finite volume methods for hyperbolic problems*, volume 31. Cambridge university press. 19
- Lewis, R., Masters, I., and Rees, I. (2006). Coupled and uncoupled contaminant transport using advanced finite volume methods. *Computational Mechanics*, 37(4):292–310. 6, 75, 81, 83, 88
- Li, C. (1996). Modelling variably saturated flow and solute transport into sandy soil. *Journal of hydrology*, 186(1):315–325. 5
- Lie, Knut, A., Møyner, O., Krogstad, S., et al. (2015). Application of flow diagnostics and multiscale methods for reservoir management. In *SPE Reservoir Simulation Symposium*. Society of Petroleum Engineers. 4
- Lu, G., Shen, L., and Shen, Z. (2007). Numerical methods for energy flux of temperature diffusion equation on unstructured grids. *Chinese Journal of Computational Physics*, 24(4):379. 40
- Lyra, P. R. M. (1994). *Unstructured grid adaptive algorithms for fluid dynamics and heat conduction*. PhD thesis, University of Wales Swansea. 16, 26, 50

- Maliska, C. R. (1994a). A finite volume method using voronoi grids for the solution of miscible displacement in. 4, 5
- Maliska, C. R. (1994b). *Transferência de calor e mecânica dos fluidos computacional: fundamentos e coordenadas generalizadas*. Livros Técnicos e Científicos. 5, 26, 29
- Manzini, G. and Putti, M. (2007). Mesh locking effects in the finite volume solution of 2-d anisotropic diffusion equations. *Journal of Computational Physics*, 220(2):751–771. 39
- Mason, G. (1988). Determination of the pore-size distributions and pore-space interconnectivity of vycor porous glass from adsorption-desorption hysteresis capillary condensation isotherms. *Proceedings of the Royal Society of London. Series A, Mathematical and Physical Sciences*, pages 453–486. 11
- Matyka, M., Khalili, A., and Koza, Z. (2008). Tortuosity-porosity relation in porous media flow. *Physical Review E*, 78(2):026306. 13
- Matyka, M. and Koza, Z. (2012). How to calculate tortuosity easily? *arXiv preprint arXiv:1203.5646*. 13
- Moldrup, P., Olesen, T., Komatsu, T., Schjønning, P., and Rolston, D. (2001). Tortuosity, diffusivity, and permeability in the soil liquid and gaseous phases. *Soil Science Society of America Journal*, 65(3):613–623. 20
- Mönkeberg, F. and Hiptmair, R. (2012). Finite volume methods for fluid flow in porous media. 16
- Nofziger, D., Rajender, K., Nayudu, S. K., Su, P.-Y., and Williams, J. (1989). One-dimensional water and chemical movement in unsaturated soils. 5
- Nunez, Y. R., Faria, C. O., Loula, A. F., and Malta, S. M. (2012). A mixed-hybrid finite element method applied to tracer injection processes. *International Journal of Modeling and Simulation for the Petroleum Industry*, 6(1). 4, 6, 7
- Patankar, S. (1980). *Numerical heat transfer and fluid flow*. CRC Press. 44
- Peaceman, D. W. (1977). *Fundamentals of numerical reservoir simulation*, volume 6. Elsevier. 4, 5, 16
- Peaceman, D. W. (2000). *Fundamentals of numerical reservoir simulation*. Elsevier. 16
- Pedras, M. H. and de Lemos, M. J. (2001). Macroscopic turbulence modeling for incompressible flow through undeformable porous media. *International Journal of Heat and Mass Transfer*, 44(6):1081–1093. 6

- Perez, G. (2006). *Metodología para el disenho y evaluación de pruebas de trazadores entre pozos como herramienta complementaria en la caracterización de yacimientos: Estado del arte*. PhD thesis, Tesis de Profesional, Universidad Industrial de Santander (UIS), Bucaramanga. 4
- Poceski, A. (2012). *Mixed finite element method*, volume 72. Springer Science & Business Media. 7
- Raghavan, P. (1997). *Concepts and problems in physical chemistry*. Discovery Publishing House. 14
- Raje, D. S. and Kapoor, V. (2000). Experimental study of bimolecular reaction kinetics in porous media. *Environmental science & technology*, 34(7):1234–1239. 6
- Rao, B. K. and Hathaway, D. L. (1989). A three-dimensional mixing cell solute transport model and its application. *Groundwater*, 27(4):509–516. 5
- Rees, I., Masters, I., Malan, A., and Lewis, R. (2004). An edge-based finite volume scheme for saturated–unsaturated groundwater flow. *Computer methods in applied mechanics and engineering*, 193(42):4741–4759. 6
- Robinson, R. A. and Stokes, R. H. (2002). *Electrolyte solutions*. Courier Corporation. 20
- Rocamora Jr, F. D., Pedras, M., and De-Lemos, M. (2003). Numerical simulation of tracer displacement in oil reservoirs. In *Proc. 17th Int. Congress of Mechanical Engineering*, number 1507. 4, 6
- Rosa, A. and Carvalho, R. E. X. (2006). Jad engenharia de reservatórios de petróleo. *Rio de Janeiro. Editora Interciência*. 11
- Rubio, A., Zalts, A., and El Hasi, C. (2008). Numerical solution of the advection–reaction–diffusion equation at different scales. *Environmental Modelling & Software*, 23(1):90–95. 6
- Ruth, D. and Ma, H. (1992). On the derivation of the forchheimer equation by means of the averaging theorem. *Transport in Porous Media*, 7(3):255–264. 19
- Sabag, J. R. (2008). Pruebas de trazadores en la recuperación de hidrocarburos. 4
- Samper, F. J. (1995). Modelos de transporte de masa en medios no saturados. 4
- Scheidegger, A. (1961). General theory of dispersion in porous media. *Journal of Geophysical Research*, 66(10):3273–3278. 22
- Sesini, P. A., de Souza, D. A., and Coutinho, A. L. (2010). Finite element simulation of viscous fingering in miscible displacements at high mobility-ratios. *Journal of the Brazilian Society of Mechanical Sciences and Engineering*, 32(3):292–299. 6

- Siegel, P., Mosé, R., Ackerer, P., and Jaffré, J. (1997). Solution of the advection–diffusion equation using a combination of discontinuous and mixed finite elements. *International Journal for Numerical Methods in Fluids*, 24(6):595–613. 6
- Soltanian, M. R., Ritzi, R. W., Huang, C. C., and Dai, Z. (2015). Relating reactive solute transport to hierarchical and multiscale sedimentary architecture in a lagrangian-based transport model: 2. particle displacement variance. *Water Resources Research*, 51(3):1601–1618. 6
- Souza, M. R. d. A. (2015). *Simulação Numérica de Escoamento Bifásico em Reservatórios de Petróleo Heterogêneos e Anisotrópicos Utilizando um Método de Volumes Finitos "Verdadeiramente Multidimensional" com Aproximação de Alta Ordem*. PhD thesis, Tese de Doutorado, Universidade Federal de Pernambuco (UFPE), Recife. 7, 8, 27, 32, 45, 47, 48, 51, 52
- Stalgorova, E., Babadagli, T., et al. (2012). Field-scale modeling of tracer injection in naturally fractured reservoirs using the random-walk particle-tracking simulation. *SPE Journal*, 17(02):580–592. 4
- Sun, N.-Z. (1996). *Mathematical modeling of groundwater pollution*. Springer. 3, 4, 5, 11, 13, 14, 15, 17, 18, 19, 20, 21, 22, 23, 24, 25, 26, 28, 32, 33, 53, 55, 57, 68
- Tannehill, J., Anderson, D., and Pletcher, R. (1997). Computational fluid mechanics and heat transfer. *Hemisphere, New York*. 16
- Teng, H. and Zhao, T. (2000). An extension of darcy’s law to non-stokes flow in porous media. *Chemical Engineering Science*, 55(14):2727–2735. 18
- Todd, D. K. and Mays, L. W. (2005). *Groundwater hydrology edition*. Wiley, New Jersey. 4, 12
- Vafai, K. (2005). *Handbook of porous media*. Crc Press. 11
- Valdez, D. (2011). *Aplicación de trazadores en yacimientos de petróleo*. PhD thesis, Tesis de Profesional, Universidad Nacional autónoma de México (UNAM), Mexico D.F. 4
- Valocchi, A. J. and Malmstead, M. (2010). Accuracy of operator splitting for advection–dispersion–reaction problems. *Water Resources Research*, 28(5):1471–1476. 6
- van den Abeele, K. (2009). *Development of high-order accurate schemes for unstructured grids*. PhD thesis, Vrije Universiteit Brussel. 26, 31
- Van Genuchten, M. T., Alves, W., et al. (1982). Analytical solutions of the one-dimensional convective-dispersive solute transport equation. Technical report, United States Department of Agriculture, Economic Research Service. 89

- Van Leer, B. (1979). Towards the ultimate conservative difference scheme. v. a second-order sequel to godunov's method. *Journal of computational Physics*, 32(1):101–136. 33, 45
- Versteeg, H. and Malalasekera, W. (1995). An introduction to computational fluid dynamics—the finite volume method. 44
- Viera, M. A. D., Sahay, P., Coronado, M., and Tapia, A. O. (2012). *Mathematical and Numerical Modeling in Porous Media: Applications in Geosciences*. CRC Press. 4
- Viswanathan, H. S., Robinson, B. A., Valocchi, A. J., and Triay, I. R. (1998). A reactive transport model of neptunium migration from the potential repository at yucca mountain. *Journal of Hydrology*, 209(1):251–280. 6
- Voss, C. I. (1984). A finite-element simulation model for saturated-unsaturated, fluid-density-dependent ground-water flow with energy transport or chemically-reactive single-species solute transport. Technical report, US Geological Survey,. 5
- Wanderley, R. M. and Hídricos, A. e. R. (2000). Modelo advectivo-dispersivo de transporte de solutos em solo não-saturado utilizando os métodos das características e dos elementos finitos. 12
- Wang, X., Thauvin, F., and Mohanty, K. (1999). Non-darcy flow through anisotropic porous media. *Chemical Engineering Science*, 54(12):1859–1869. 19
- Woodfield, P. L., Suzuki, K., and Nakabe, K. (2004). A simple strategy for constructing bounded convection schemes for unstructured grids. *International journal for numerical methods in fluids*, 46(10):1007–1024. 47
- Wu, Y.-S. and Pruess, K. (2000). Numerical simulation of non-isothermal multiphase tracer transport in heterogeneous fractured porous media. *Advances in Water Resources*, 23(7):699–723. 6
- Xavier, A. M., de Lima, A. G., Vigna, C. R. M., Verbi, F. M., Bortoleto, G. G., Goraieb, K., Collins, C. H., and Bueno, M. (2007). Marcos da história da radioatividade e tendências atuais. *Química Nova*, 30(1):83. 23
- Yeh, T.-C. J., Srivastava, R., Guzman, A., and Harter, T. (1993). A numerical model for water flow and chemical transport in variably saturated porous media. *Groundwater*, 31(4):634–644. 5, 7
- Yu, F. X. and Singh, V. P. (1995). Improved finite-element method for solute transport. *Journal of Hydraulic Engineering*, 121(2):145–158. 5
- Zienkiewicz, O. C. and Taylor, R. L. (1988). *The finite element method*. McGraw-hill. 16, 29