



UNIVERSIDADE FEDERAL DE PERNAMBUCO
CENTRO ACADÊMICO DO AGRESTE
PROGRAMA DE PÓS-GRADUAÇÃO EM ENGENHARIA CIVIL E AMBIENTAL

UEWERTON ALLEX DE OLIVEIRA VAZ

**SIMULAÇÃO NUMÉRICA DO TRANSPORTE DE SOLUTOS TRAÇADORES EM
RESERVATÓRIOS DE PETRÓLEO**

Caruaru

2021

UEWERTON ALLEX DE OLIVEIRA VAZ

**SIMULAÇÃO NUMÉRICA DO TRANSPORTE DE SOLUTOS TRAÇADORES EM
RESERVATÓRIOS DE PETRÓLEO**

Dissertação apresentada ao Programa de Pós-Graduação em Engenharia Civil e Ambiental da Universidade Federal de Pernambuco, como requisito parcial para obtenção do título de mestre em Engenharia Civil e Ambiental. Área de concentração: Estruturas e Materiais.

Orientador: Prof. Dr. Alessandro Romário Echevarria Antunes.

Coorientador: Prof. Dr. Fernando Raul Licapa Contreras.

Caruaru

2021

Catálogo na fonte:
Bibliotecária – Paula Silva - CRB/4 - 1223

V393s Vaz, Uewerton Alex de Oliveira.
Simulação numérica do transporte de solutos traçadores em reservatórios de petróleo. / Uewerton Alex de Oliveira Vaz. – 2021.
171 f.; il. e tab.: 30 cm.

Orientador: Alessandro Romário Echevarria Antunes.
Coorientador: Fernando Raul Licapa Contreras.
Dissertação (Mestrado) – Universidade Federal de Pernambuco, CAA, Mestrado em Engenharia Civil e Ambiental, 2021.
Inclui Referências.

1. Metodologia. 2. Engenharia de reservatório de óleo. 3. Métodos de simulação. 4. MATLAB (Programa de computador). 5. Equações - Soluções numéricas. I. Antunes, Alessandro Romário Echevarria (Orientador). II. Contreras, Fernando Raul Licapa (Coorientador). III. Título.

CDD 620 (23. ed.) UFPE (CAA 2021-265)

UEWERTON ALLEX DE OLIVEIRA VAZ

**SIMULAÇÃO NUMÉRICA DO TRANSPORTE DE SOLUTOS TRAÇADORES EM
RESERVATÓRIOS DE PETRÓLEO**

Dissertação apresentada ao Programa de Pós-Graduação em Engenharia Civil e Ambiental da Universidade Federal de Pernambuco, como requisito parcial para obtenção do título de mestre em Engenharia Civil e Ambiental. Área de concentração: Estruturas e Materiais.

Aprovada em: 23/07/2021.

BANCA EXAMINADORA

Prof. Dr. Alessandro Romário Echevarria Antunes (Orientador)
Universidade Federal de Pernambuco

Prof. Dr. Gustavo Bono (Examinador Interno)
Universidade Federal de Pernambuco

Prof. Dr. Márcio Rodrigo de Araújo Souza (Examinador Externo)
Universidade Federal da Paraíba

Dedico este trabalho aos meus pais e avós, que com sacrifícios e esforços mostraram os melhores caminhos e me deram apoio nos momentos mais difíceis da vida, aos meus familiares, que são a essência do meu ser, aos meus amigos, que tive a honra de fazer e me escolheram como seu amigo.

AGRADECIMENTOS

Agradeço primeiramente a Deus, que com sua bondade permitiu a existência do que se conhece, que não rejeitou as minhas orações, nem removeu de mim sua compaixão.

Agradeço a todos que de maneira direta ou indiretamente colaboraram para a realização deste trabalho, mesmo sem citá-los, carregando-os em meu coração.

Agradeço a minha amiga Laysa Cristina A. Costa, que divulgou e me ajudou no ingresso do Programa de Pós-Graduação em Engenharia Civil e Ambiental, talvez sem ela não tivesse iniciado essa jornada, logo após minha aprovação no mesmo.

Agradeço aos amigos que fiz durante o Programa, muitos dos quais colaboraram em certo grau com meu progresso durante o curso. Especificamente, a Mateus Calebe A. D. Cavalcante, a Nicolas Henrique S. de Carvalho e a Rubens Silva Corrêia, que revelaram esclarecimentos sobre determinadas disciplinas cursadas. Nesse sentido, agradeço também aos professores Giuliana Furtado F. Bono e Gustavo Bono, que forneceram seus ensinamentos e incentivaram a continuação com bastante motivação.

Finalmente, agradeço aos meus amigos, conselheiros e mentores, Alessandro Romário E. Antunes e Fernando Raul L. Contreras, que passaram toda confiança e me orientaram nos momentos mais árduos na elaboração deste documento. Ambos foram essenciais para a finalização deste trabalho, possibilitaram os ensinamentos, os paradigmas mais acertados, a não desistência e a adequação com minha rotina.

RESUMO

A simulação e modelagem matemática de solutos (e.g.: traçadores e contaminantes) em meios porosos continuam sendo um desafio para os analistas numéricos, devido às características geológicas complexas próprias dos reservatórios de petróleo. Do ponto de vista da simulação de reservatórios, o traçador permite caracterizar hidrodinamicamente os canais percorridos por um certo volume de fluido previamente marcado por essa substância. Assim, a falta de acesso direto aos reservatórios e a inexistência de qualquer outro detector que percorra efetivamente os canais das formações rochosas, fazem com que o uso de traçadores seja atualmente o modo de caracterização mais importante e os tornam imprescindíveis nas avaliações dos métodos de recuperação de petróleo, tanto em laboratório quanto em campo. O modelo matemático que determina a concentração de traçadores em reservatórios de petróleo é dado pela equação de advecção-dispersão-reação (ADR), que é uma equação diferencial de segunda ordem. A solução numérica desta equação é, tradicionalmente, obtida pelo Método das Diferenças Finitas (MDF), desta forma, apresenta-se limitações ao tratar problemas com tensores anisotrópicos e não alinhados com a malha. De outro modo, uma alternativa para tratar estas dificuldades é a utilização do Método dos Elementos Finitos (MEF) de Galerkin, não obstante, este método em sua forma mais clássica não se comporta bem ao lidar com a conservação local de propriedades, o que pode ser um problema sério para a simulação numérica envolvendo leis de conservação da física, como massa, energia e momento. Seguindo este contexto, no presente trabalho, apresenta-se uma formulação fundamentada no Método dos Volumes Finitos (MVF) para discretizar a equação de ADR, em que as discretizações espaciais do termo dispersivo e da velocidade de Darcy são realizadas utilizando-se um MVF não ortodoxo denominado *Multi-Point Flux Approximation Quasi-Local* (MPFA-QL), o qual foi precedentemente utilizado para resolver problemas de difusão em meios heterogêneos e altamente anisotrópicos, sobre malhas não estruturadas e distorcidas. A concentração nas superfícies de controle – associada ao termo advectivo da equação de ADR – é discretizada espacialmente por um método de primeira ordem, denominado *First Order Upwind* (FOU), e também por um método de mais alta ordem denominado *Monotonic Upstream-Centered Schemes for Conservation Laws* (MUSCL). Neste último, também se aplica o limitador de

Woodfield, que é um limitador de volume de controle, a afim de aumentar a estabilidade dos métodos de mais alta ordem. Enfim, a discretização do termo transiente da equação de ADR é realizada por intermédio do método de Euler explícito. Com o intuito de validar a formulação adotada, resolve-se alguns problemas de *benchmark* da literatura e observa-se que a mesma é capaz de representar satisfatoriamente o transporte de solutos traçadores em reservatórios de petróleo.

Palavras-chave: equação de advecção-dispersão-reação (ADR); Método dos Volumes Finitos (MVF); *Multi-Point Flux Approximation Quasi-Local* (MPFA-QL); *First Order Upwind* (FOU); *Monotonic Upstream-Centered Schemes for Conservation Laws* (MUSCL).

ABSTRACT

Simulation and mathematical modeling of solutes (e.g.: tracers and contaminants) in porous media continue to be a challenge for numerical analysts, due to the complex geological characteristics of oil reservoirs. From the reservoir simulation point of view, the tracer allows the hydrodynamic characterization of the channels traversed by a certain volume of fluid previously marked by this substance. Thus, the lack of direct access to the reservoirs and the inexistence of any other detector that effectively traverses the channels of rock formations, make the use of tracers currently the most important method of characterization and make them essential in the evaluation of recovery methods both in the laboratory and in the field. The mathematical model that determines the concentration of tracers in oil reservoirs is given by the advection-dispersion-reaction (ADR) equation, which is a second-order differential equation. The numerical solution of this equation is, traditionally, obtained by the Finite Difference Method (FDM), thus, it presents disadvantages when dealing with anisotropic tensors and not aligned with the mesh. Otherwise, an alternative to address these difficulties is the use of Galerkin's Finite Element Method (FEM), however, this method in its most classical form does not behave well when dealing with the local conservation of properties, the which can be a serious problem for numerical simulation involving physical conservation laws such as mass, energy and momentum. Following this context, in the present work, we present a formulation based on the Finite Volume Method (MVF) to discretize the ADR equation, in which the spatial discretizations of the dispersive term and Darcy velocity are performed using a non-orthodox MVF method called Multi-Point Flux Approximation Quasi-Local (MPFA-QL), which was previously used to solve diffusion problems in heterogeneous and highly anisotropic tensors, over unstructured and distorted meshes. The concentration on control surfaces – associated with the advective term of the ADR equation – is spatially discretized by a first-order method, called First Order Upwind (FOU), and also by a higher-order method called Monotonic Upstream-Centered Schemes for Conservation Laws (MUSCL). In the latter, the Woodfield limiter, which is a control volume limiter, is also applied in order to increase the stability of higher order methods. Finally, the discretization of the transient term of the ADR equation is performed using the explicit Euler method. In order to validate the adopted formulation, some benchmark problems

in the literature are solved and it is observed that it is able to satisfactorily represent the transport of tracer solutes in oil reservoirs.

Keywords: advection-dispersion-reaction (ADR) equation; Finite Volume Method (FVM); Multi-Point Flux Approximation Quasi-Local (MPFA-QL); First Order Upwind (FOU); Monotonic Upstream-Centered Schemes for Conservation Laws (MUSCL).

LISTA DE FIGURAS

Figura 1 –	Esquema da aplicação de teste com traçadores entre poços produtor e injetor para recuperação de óleo melhorada (IOR – <i>Improved Oil Recovery</i>) na indústria de petróleo	38
Figura 2 –	Balço de massa de um componente num volume elementar	51
Figura 3 –	Identificação do domínio 2D e condições de contorno de um modelo esquemático de reservatório	62
Figura 4 –	Identificação de alguns componentes presentes na discretização espacial do método dos volumes finitos centrado em volumes de controle	65
Figura 5 –	Representação de polígonos: (a) polígono <i>star-shaped</i> ; (b) polígono não <i>star-shaped</i>	66
Figura 6 –	<i>Kernel</i> de um polígono <i>star-shaped</i>	67
Figura 7 –	Parâmetros físicos-geométricos e triângulos auxiliares (regiões hachuradas) – do método dos volumes finitos MPFA-QL – utilizados para obter o fluxo hidrodinâmico no meio poroso	72
Figura 8 –	Representação dos fluxos unilaterais, do fluxo único e das concentrações auxiliares	74
Figura 9 –	À esquerda: entidades geométricas para construir a interpolação LPEW; à direita: representação da primeira etapa (setas verdes) e da segunda etapa (setas azuis) para calcular os fluxos no meio das superfícies de controle $I\bar{M}_i$ e nas SC $\bar{M}_i\bar{M}_{i+1}$	77
Figura 10 –	Parâmetros físicos-geométricos e triângulos auxiliares (regiões hachuradas) – do método dos volumes finitos MPFA-QL – utilizados para obter as velocidades de Darcy no meio poroso	80
Figura 11 –	Esquema dos fluxos advectivos unilaterais calculados numericamente pelo MPFA-QL, e concentração determinada na face IJ	82

- Figura 12 – Estratégia utilizada para aproximar a concentração do soluto traçador pelo método MUSCL: (a) fragmentação de malha e construção de um estêncil com os pontos L' , \hat{L} , \hat{R} e R' , utilizados na reconstrução da concentração; (b) indicação do vetor posição $\vec{d}_{\hat{L}\hat{R}}$ 86
- Figura 13 – À esquerda: limitador de face (IJ) utilizado entre dois volumes de controle adjacentes (\hat{L} e \hat{R}); à direita: limitador de volume de controle, considerando-se os volumes de controle (\hat{M}_i) circunvizinhos ao \hat{L} 87
- Figura 14 – Domínio e condições de contorno utilizados para o estudo de transporte unidimensional de soluto traçador num reservatório isotrópico e homogêneo 93
- Figura 15 – Malhas triangulares utilizadas na discretização espacial do problema de transporte unidimensional: (a) malha M1, com 66 VC; (b) malha M2, com 130 VC; (c) malha M3, com 258 VC; (d) malha M4, com 518 VC; e (e) malha M5, com 1030 VC 95
- Figura 16 – Malhas quadrangulares utilizadas na discretização espacial do problema de transporte unidimensional: (a) malha M6, com 64 VC; (b) malha 7, 128 VC; (c) malha M8, com 256 VC; (d) malha M9, com 512 VC; e (e) malha M10, com 1024 VC 95
- Figura 17 – Campo de concentração do traçador obtido pelo MUSCL-MPFA-QL e isolinhas de concentração obtidas pelos métodos: FOU-MPFA-QL (azuis), MUSCL-MPFA-QL (vermelhas), MUSCL-Woodfield-MPFA-QL (verdes). O tempo de transporte unidimensional é $t = 30$ d, com 66 VC triangulares 97
- Figura 18 – Campo de concentração do traçador obtido pelo MUSCL-MPFA-QL e isolinhas de concentração obtidas pelos métodos: FOU-MPFA-QL (azuis), MUSCL-MPFA-QL (vermelhas), MUSCL-Woodfield-MPFA-QL (verdes). O tempo de transporte unidimensional é $t = 30$ d, com 64 VC quadrangulares 97
- Figura 19 – Domínio e condições de contorno utilizados para o estudo de transporte bidimensional, com uma fonte a montante de soluto traçador, em um reservatório isotrópico e homogêneo 130

Figura 20 –	Malhas não estruturadas usadas na discretização espacial para o problema de transporte bidimensional: (a) malha M11, com 484 VC triangulares; e (b) malha M12, com 2932 VC triangulares	131
Figura 21 –	Campo de concentração do traçador e suas isolinhas obtidos pelo FOU-MPFA-QL para o transporte bidimensional com uma fonte contínua a montante e malha M11. Dados os seguintes valores: $t = 1$ d, $CFL = 0,2$, $Pe = 0,05$	132
Figura 22 –	Campo de concentração do traçador e suas isolinhas obtidos pelo MUSCL-MPFA-QL para o transporte bidimensional com uma fonte contínua a montante e malha M11. Dados os seguintes valores: $t = 1$ d, $CFL = 0,2$, $Pe = 0,05$	133
Figura 23 –	Campo de concentração do traçador e suas isolinhas obtidos pelo MUSCL-Woodfield-MPFA-QL para o transporte bidimensional com uma fonte contínua a montante e malha M11. Dados os seguintes valores: $t = 1$ d, $CFL = 0,2$, $Pe = 0,05$	133
Figura 24 –	Campo de concentração do traçador e suas isolinhas obtidos pelo FOU-MPFA-QL para o transporte bidimensional com uma fonte contínua a montante e malha M12. Dados os seguintes valores: $t = 1$ d, $CFL = 0,2$, $Pe = 0,05$	135
Figura 25 –	Campo de concentração do traçador e suas isolinhas obtidos pelo MUSCL-MPFA-QL para o transporte bidimensional com uma fonte contínua a montante e malha M12. Dados os seguintes valores: $t = 1$ d, $CFL = 0,2$, $Pe = 0,05$	135
Figura 26 –	Campo de concentração do traçador e suas isolinhas obtidos pelo MUSCL-Woodfield-MPFA-QL para o transporte bidimensional com uma fonte contínua a montante e malha M12. Dados os seguintes valores: $t = 1$ d, $CFL = 0,2$, $Pe = 0,05$	136
Figura 27 –	Campo de concentração do traçador e suas isolinhas obtidos pelo FOU-MPFA-QL para o transporte bidimensional com uma fonte contínua a montante e malha M11. Dados os seguintes valores: $t = 4$ d, $CFL = 0,2$, $Pe = 0,05$	138

- Figura 28 – Campo de concentração do traçador e suas isolinhas obtidos pelo MUSCL-MPFA-QL para o transporte bidimensional com uma fonte contínua a montante e malha M11. Dados os seguintes valores: $t = 4$ d, $CFL = 0,2$, $Pe = 0,05$ 138
- Figura 29 – Campo de concentração do traçador e suas isolinhas obtidos pelo MUSCL-Woodfield-MPFA-QL para o transporte bidimensional com uma fonte contínua a montante e malha M11. Dados os seguintes valores: $t = 4$ d, $CFL = 0,2$, $Pe = 0,05$ 139
- Figura 30 – Campo de concentração do traçador e suas isolinhas obtidos pelo FOU-MPFA-QL para o transporte bidimensional com uma fonte contínua a montante e malha M12. Dados os seguintes valores: $t = 4$ d, $CFL = 0,2$, $Pe = 0,05$ 140
- Figura 31 – Campo de concentração do traçador e suas isolinhas obtidos pelo MUSCL-MPFA-QL para o transporte bidimensional com uma fonte contínua a montante e malha M12. Dados os seguintes valores: $t = 4$ d, $CFL = 0,2$, $Pe = 0,05$ 140
- Figura 32 – Campo de concentração do traçador e suas isolinhas obtidos pelo MUSCL-Woodfield-MPFA-QL para o transporte bidimensional com uma fonte contínua a montante e malha M12. Dados os seguintes valores: $t = 4$ d, $CFL = 0,2$, $Pe = 0,05$ 141
- Figura 33 – Campo de concentração do traçador e suas isolinhas obtidos pelo FOU-MPFA-QL para o transporte bidimensional com uma fonte contínua a montante, malha M12 e razão de anisotropia $r = 1$. Dados os seguintes valores: $t = 2$ d, $CFL = 0,2$, $Pe = 0,05$ 143
- Figura 34 – Campo de concentração do traçador e suas isolinhas obtidos pelo MUSCL-MPFA-QL para o transporte bidimensional com uma fonte contínua a montante, malha M12 e razão de anisotropia $r = 1$. Dados os seguintes valores: $t = 2$ d, $CFL = 0,2$, $Pe = 0,05$ 143
- Figura 35 – Campo de concentração do traçador e suas isolinhas obtidos pelo FOU-MPFA-QL para o transporte bidimensional com uma fonte contínua a montante, malha M12 e razão de anisotropia

	$r = 10$. Dados os seguintes valores: $t = 2$ d, $CFL = 0,2$, $Pe = 0,05$	144
Figura 36 –	Campo de concentração do traçador e suas isolinhas obtidos pelo MUSCL-MPFA-QL para o transporte bidimensional com uma fonte contínua a montante, malha M12 e razão de anisotropia $r = 10$. Dados os seguintes valores: $t = 2$ d, $CFL = 0,2$, $Pe = 0,05$	144
Figura 37 –	Campo de concentração do traçador e suas isolinhas obtidos pelo FOU-MPFA-QL para o transporte bidimensional com uma fonte contínua a montante, malha M12 e razão de anisotropia $r = 100$. Dados os seguintes valores: $t = 2$ d, $CFL = 0,2$, $Pe = 0,05$	145
Figura 38 –	Campo de concentração do traçador e suas isolinhas obtidos pelo MUSCL-MPFA-QL para o transporte bidimensional com uma fonte contínua a montante, malha M12 e razão de anisotropia $r = 100$. Dados os seguintes valores: $t = 2$ d, $CFL = 0,2$, $Pe = 0,05$	145
Figura 39 –	Domínio e condições de contorno utilizados para o estudo de transporte bidimensional, com uma fonte contínua a montante de soluto traçador, em um reservatório isotrópico e heterogêneo	148
Figura 40 –	Malhas não estruturadas usadas na discretização espacial para o problema de transporte bidimensional em um reservatório isotrópico e heterogêneo: (a) malha M13, com 1424 VC triangulares; e (b) malha M14, com 5584 VC triangulares	149
Figura 41 –	Campo de pressão e suas isolinhas obtidos pelo MPFA-QL para o transporte bidimensional de soluto traçador em um reservatório isotrópico e heterogêneo, com a malha M13	150
Figura 42 –	Campo de pressão e suas isolinhas obtidos pelo MPFA-QL para o transporte bidimensional de soluto traçador em um reservatório isotrópico e heterogêneo, com a malha M14	150

Figura 43 –	Campo de concentração obtido pelo FOU-MPFA-QL para o transporte bidimensional de soluto traçador em um reservatório isotrópico e heterogêneo. Dados os seguintes valores: $t = 12$ d, $CFL = 0,2$, $Pe = 0,25$, malha M13	151
Figura 44 –	Campo de concentração obtido pelo MUSCL-MPFA-QL para o transporte bidimensional de soluto traçador em um reservatório isotrópico e heterogêneo. Dados os seguintes valores: $t = 12$ d, $CFL = 0,2$, $Pe = 0,25$, malha M13	152
Figura 45 –	Campo de concentração obtido pelo MUSCL-Woodfield-MPFA-QL para o transporte bidimensional de soluto traçador em um reservatório isotrópico e heterogêneo. Dados os seguintes valores: $t = 12$ d, $CFL = 0,2$, $Pe = 0,25$, malha M13	152
Figura 46 –	Campo de concentração obtido pelo FOU-MPFA-QL para o transporte bidimensional de soluto traçador em um reservatório isotrópico e heterogêneo. Dados os seguintes valores: $t = 12$ d, $CFL = 0,2$, $Pe = 0,25$, malha M14	153
Figura 47 –	Campo de concentração obtido pelo MUSCL-MPFA-QL para o transporte bidimensional de soluto traçador em um reservatório isotrópico e heterogêneo. Dados os seguintes valores: $t = 12$ d, $CFL = 0,2$, $Pe = 0,25$, malha M14	154
Figura 48 –	Campo de concentração obtido pelo MUSCL-Woodfield-MPFA-QL para o transporte bidimensional de soluto traçador em um reservatório isotrópico e heterogêneo. Dados os seguintes valores: $t = 12$ d, $CFL = 0,2$, $Pe = 0,25$, malha M14	154

LISTA DE GRÁFICOS

Gráfico 1 –	Interpretação geométrica do teorema do valor médio para integral	69
Gráfico 2 –	Pressão ao longo da direção x no domínio, utilizando-se o MPFA-QL com 16 VC triangulares e valores de contorno, para o transporte unidimensional de soluto traçador com difusão dominante	96
Gráfico 3 –	Pressão ao longo da direção x no domínio, utilizando-se o MPFA-QL com 16 VC quadrangulares e valores de contorno, para o transporte unidimensional de soluto traçador com difusão dominante	96
Gráfico 4 –	Perfis de concentração obtidos numericamente pelos métodos FOU-MPFA-QL, MUSCL-MPFA-QL, MUSCL-Woodfield-MPFA-QL e solução analítica, considerando-se 16 VC triangulares e valores de contorno na direção x , para o transporte unidimensional de soluto traçador com difusão dominante. Conforme os seguintes valores: $t = 30$ d, CFL = 0,2, $Pe = 0,750000$	98
Gráfico 5 –	Perfis de concentração obtidos numericamente pelos métodos FOU-MPFA-QL, MUSCL-MPFA-QL, MUSCL-Woodfield-MPFA-QL e solução analítica, considerando-se 16 VC quadrangulares e valores de contorno na direção x , para o transporte unidimensional de soluto traçador com difusão dominante. Conforme os seguintes valores: $t = 30$ d, CFL = 0,2, $Pe = 0,750000$	99
Gráfico 6 –	Perfis de concentração obtidos numericamente pelos métodos FOU-MPFA-QL, MUSCL-MPFA-QL, MUSCL-Woodfield-MPFA-QL e solução analítica, considerando-se 32 VC triangulares e valores de contorno na direção x , para o transporte unidimensional de soluto traçador com difusão dominante. Conforme os seguintes valores: $t = 30$ d, CFL = 0,2, $Pe = 0,375000$	100

- Gráfico 7 – Perfis de concentração obtidos numericamente pelos métodos FOU-MPFA-QL, MUSCL-MPFA-QL, MUSCL-Woodfield-MPFA-QL e solução analítica, considerando-se 32 VC quadrangulares e valores de contorno na direção x , para o transporte unidimensional de soluto traçador com difusão dominante. Conforme os seguintes valores: $t = 30$ d, $CFL = 0,2$, $Pe = 0,37500$ 100
- Gráfico 8 – Perfis de concentração obtidos numericamente pelos métodos FOU-MPFA-QL, MUSCL-MPFA-QL, MUSCL-Woodfield-MPFA-QL e solução analítica, considerando-se 64 VC triangulares e valores de contorno na direção x , para o transporte unidimensional de soluto traçador com difusão dominante. Conforme os seguintes valores: $t = 30$ d, $CFL = 0,2$, $Pe = 0,187500$ 101
- Gráfico 9 – Perfis de concentração obtidos numericamente pelos métodos FOU-MPFA-QL, MUSCL-MPFA-QL, MUSCL-Woodfield-MPFA-QL e solução analítica, considerando-se 64 VC quadrangulares e valores de contorno na direção x , para o transporte unidimensional de soluto traçador com difusão dominante. Conforme os seguintes valores: $t = 30$ d, $CFL = 0,2$, $Pe = 0,187500$ 101
- Gráfico 10 – Perfis de concentração obtidos numericamente pelos métodos FOU-MPFA-QL, MUSCL-MPFA-QL, MUSCL-Woodfield-MPFA-QL e solução analítica, considerando-se 128 VC triangulares e valores de contorno na direção x , para o transporte unidimensional de soluto traçador com difusão dominante. Conforme os seguintes valores: $t = 30$ d, $CFL = 0,2$, $Pe = 0,093750$ 102
- Gráfico 11 – Perfis de concentração obtidos numericamente pelos métodos FOU-MPFA-QL, MUSCL-MPFA-QL, MUSCL-Woodfield-MPFA-QL e solução analítica, considerando-se 128 VC quadrangulares e valores de contorno na direção x , para o transporte unidimensional de soluto traçador com

	difusão dominante. Conforme os seguintes valores: $t = 30$ d, $CFL = 0,2$, $Pe = 0,093750$	102
Gráfico 12 –	Perfis de concentração obtidos numericamente pelos métodos FOU-MPFA-QL, MUSCL-MPFA-QL, MUSCL-Woodfield-MPFA-QL e solução analítica, considerando-se 256 VC triangulares e valores de contorno na direção x , para o transporte unidimensional de soluto traçador com difusão dominante. Conforme os seguintes valores: $t = 30$ d, $CFL = 0,2$, $Pe = 0,046875$	103
Gráfico 13 –	Perfis de concentração obtidos numericamente pelos métodos FOU-MPFA-QL, MUSCL-MPFA-QL, MUSCL-Woodfield-MPFA-QL e solução analítica, considerando-se 256 VC quadrangulares e valores de contorno na direção x , para o transporte unidimensional de soluto traçador com difusão dominante. Conforme os seguintes valores: $t = 30$ d, $CFL = 0,2$, $Pe = 0,046875$	103
Gráfico 14 –	Erros associados ao refinamento das malhas com volumes de controle triangulares, para os métodos numéricos aplicados no transporte unidimensional de soluto traçador, com difusão dominante	106
Gráfico 15 –	Erros associados ao refinamento das malhas com volumes de controle quadrangulares, para os métodos numéricos aplicados no transporte unidimensional de soluto traçador, com difusão dominante	106
Gráfico 16 –	Perfis de concentração obtidos numericamente pelos métodos FOU-MPFA-QL, MUSCL-MPFA-QL, MUSCL-Woodfield-MPFA-QL e solução analítica, considerando-se 16 VC triangulares e valores de contorno na direção x , para o transporte unidimensional de soluto traçador com advecção dominante. Conforme os seguintes valores: $t = 50$ d, $Pe = 100,00$	108
Gráfico 17 –	Perfis de concentração obtidos numericamente pelos métodos FOU-MPFA-QL, MUSCL-MPFA-QL, MUSCL-	

	Woodfield-MPFA-QL e solução analítica, considerando-se 16 VC quadrangulares e valores de contorno na direção x , para o transporte unidimensional de soluto traçador com advecção dominante. Conforme os seguintes valores: $t = 50$ d, $Pe = 100,00$	109
Gráfico 18 –	Perfis de concentração obtidos numericamente pelos métodos FOU-MPFA-QL, MUSCL-MPFA-QL, MUSCL-Woodfield-MPFA-QL e solução analítica, considerando-se 32 VC triangulares e valores de contorno na direção x , para o transporte unidimensional de soluto traçador com advecção dominante. Conforme os seguintes valores: $t = 50$ d, $Pe = 50,00$	110
Gráfico 19 –	Perfis de concentração obtidos numericamente pelos métodos FOU-MPFA-QL, MUSCL-MPFA-QL, MUSCL-Woodfield-MPFA-QL e solução analítica, considerando-se 32 VC quadrangulares e valores de contorno na direção x , para o transporte unidimensional de soluto traçador com advecção dominante. Conforme os seguintes valores: $t = 50$ d, $Pe = 50,00$	110
Gráfico 20 –	Perfis de concentração obtidos numericamente pelos métodos FOU-MPFA-QL, MUSCL-MPFA-QL, MUSCL-Woodfield-MPFA-QL e solução analítica, considerando-se 64 VC triangulares e valores de contorno na direção x , para o transporte unidimensional de soluto traçador com advecção dominante. Conforme os seguintes valores: $t = 50$ d, $Pe = 25,00$	111
Gráfico 21 –	Perfis de concentração obtidos numericamente pelos métodos FOU-MPFA-QL, MUSCL-MPFA-QL, MUSCL-Woodfield-MPFA-QL e solução analítica, considerando-se 64 VC quadrangulares e valores de contorno na direção x , para o transporte unidimensional de soluto traçador com advecção dominante. Conforme os seguintes valores: $t = 50$ d, $Pe = 25,00$	111

- Gráfico 22 – Perfis de concentração obtidos numericamente pelos métodos FOU-MPFA-QL, MUSCL-MPFA-QL, MUSCL-Woodfield-MPFA-QL e solução analítica, considerando-se 128 VC triangulares e valores de contorno na direção x , para o transporte unidimensional de soluto traçador com advecção dominante. Conforme os seguintes valores: $t = 50$ d, $Pe = 12,50$ 112
- Gráfico 23 – Perfis de concentração obtidos numericamente pelos métodos FOU-MPFA-QL, MUSCL-MPFA-QL, MUSCL-Woodfield-MPFA-QL e solução analítica, considerando-se 128 VC quadrangulares e valores de contorno na direção x , para o transporte unidimensional de soluto traçador com advecção dominante. Conforme os seguintes valores: $t = 50$ d, $Pe = 12,50$ 112
- Gráfico 24 – Perfis de concentração obtidos numericamente pelos métodos FOU-MPFA-QL, MUSCL-MPFA-QL, MUSCL-Woodfield-MPFA-QL e solução analítica, considerando-se 256 VC triangulares e valores de contorno na direção x , para o transporte unidimensional de soluto traçador com advecção dominante. Conforme os seguintes valores: $t = 50$ d, $Pe = 6,25$ 113
- Gráfico 25 – Perfis de concentração obtidos numericamente pelos métodos FOU-MPFA-QL, MUSCL-MPFA-QL, MUSCL-Woodfield-MPFA-QL e solução analítica, considerando-se 256 VC quadrangulares e valores de contorno na direção x , para o transporte unidimensional de soluto traçador com advecção dominante. Conforme os seguintes valores: $t = 50$ d, $Pe = 6,25$ 113
- Gráfico 26 – Erros associados ao refinamento das malhas com volumes de controle triangulares, para os métodos numéricos aplicados (FOU-MPFA-QL, MUSCL-MPFA-QL, MUSCL-Woodfield-MPFA-QL) no transporte unidimensional de soluto traçador, com advecção dominante 115

- Gráfico 27 – Erros associados ao refinamento das malhas com volumes de controle quadrangulares, para os métodos numéricos aplicados (FOU-MPFA-QL, MUSCL-MPFA-QL, MUSCL-Woodfield-MPFA-QL) no transporte unidimensional de soluto traçador, com advecção dominante 116
- Gráfico 28 – Perfis de concentração obtidos numericamente pelos métodos MUSCL-MPFA-QL ($\lambda = 1/3$, $\lambda = -1$, $\lambda = 0$) e solução analítica, considerando-se 16 VC triangulares e valores de contorno na direção x , para o transporte unidimensional de soluto traçador com advecção dominante. Conforme os seguintes valores: $t = 50$ d, $Pe = 100,00$ 117
- Gráfico 29 – Perfis de concentração obtidos numericamente pelos métodos MUSCL-MPFA-QL ($\lambda = 1/3$, $\lambda = -1$, $\lambda = 0$) e solução analítica, considerando-se 32 VC triangulares e valores de contorno na direção x , para o transporte unidimensional de soluto traçador com advecção dominante. Conforme os seguintes valores: $t = 50$ d, $Pe = 50,00$ 118
- Gráfico 30 – Perfis de concentração obtidos numericamente pelos métodos MUSCL-MPFA-QL ($\lambda = 1/3$, $\lambda = -1$, $\lambda = 0$) e solução analítica, considerando-se 64 VC triangulares e valores de contorno na direção x , para o transporte unidimensional de soluto traçador com advecção dominante. Conforme os seguintes valores: $t = 50$ d, $Pe = 25,00$ 118
- Gráfico 31 – Perfis de concentração obtidos numericamente pelos métodos MUSCL-MPFA-QL ($\lambda = 1/3$, $\lambda = -1$, $\lambda = 0$) e solução analítica, considerando-se 128 VC triangulares e valores de contorno na direção x , para o transporte unidimensional de soluto traçador com advecção dominante. Conforme os seguintes valores: $t = 50$ d, $Pe = 12,50$ 119
- Gráfico 32 – Perfis de concentração obtidos numericamente pelos métodos MUSCL-MPFA-QL ($\lambda = 1/3$, $\lambda = -1$, $\lambda = 0$) e solução analítica, considerando-se 256 VC triangulares e valores de contorno na direção x , para o transporte

	unidimensional de soluto traçador com advecção dominante. Conforme os seguintes valores: $t = 50$ d, $Pe = 6,25$	119
Gráfico 33 –	Erros associados ao refinamento das malhas com volumes de controle triangulares, para os métodos numéricos aplicados (MUSCL-MPFA-QL) no transporte unidimensional de soluto traçador, com advecção dominante	120
Gráfico 34 –	Perfis de concentração obtidos numericamente pelos métodos FOU-MPFA-QL, MUSCL-Woodfield-MPFA-QL e solução analítica, considerando-se 16 VC triangulares e valores de contorno na direção x , para o transporte unidimensional de soluto traçador com termo de decaimento radioativo ($\gamma = 0,5$ d ⁻¹ , $\gamma = 0,05$ d ⁻¹ , $\gamma = 0,02$ d ⁻¹). Conforme os seguintes valores: $t = 50$ d, $Pe = 150,000$	123
Gráfico 35 –	Perfis de concentração obtidos numericamente pelos métodos FOU-MPFA-QL, MUSCL-Woodfield-MPFA-QL e solução analítica, considerando-se 32 VC triangulares e valores de contorno na direção x , para o transporte unidimensional de soluto traçador com termo de decaimento radioativo ($\gamma = 0,5$ d ⁻¹ , $\gamma = 0,05$ d ⁻¹ , $\gamma = 0,02$ d ⁻¹). Conforme os seguintes valores: $t = 50$ d, $Pe = 75,000$	123
Gráfico 36 –	Perfis de concentração obtidos numericamente pelos métodos FOU-MPFA-QL, MUSCL-Woodfield-MPFA-QL e solução analítica, considerando-se 64 VC triangulares e valores de contorno na direção x , para o transporte unidimensional de soluto traçador com termo de decaimento radioativo ($\gamma = 0,5$ d ⁻¹ , $\gamma = 0,05$ d ⁻¹ , $\gamma = 0,02$ d ⁻¹). Conforme os seguintes valores: $t = 50$ d, $Pe = 37,500$	124
Gráfico 37 –	Perfis de concentração obtidos numericamente pelos métodos FOU-MPFA-QL, MUSCL-Woodfield-MPFA-QL e solução analítica, considerando-se 128 VC triangulares e valores de contorno na direção x , para o transporte unidimensional de soluto traçador com termo de decaimento	

	radioativo ($\gamma = 0,5 \text{ d}^{-1}$, $\gamma = 0,05 \text{ d}^{-1}$, $\gamma = 0,02 \text{ d}^{-1}$). Conforme os seguintes valores: $t = 50 \text{ d}$, $Pe = 18,750$	124
Gráfico 38 –	Perfis de concentração obtidos numericamente pelos métodos FOU-MPFA-QL, MUSCL-Woodfield-MPFA-QL e solução analítica, considerando-se 256 VC triangulares e valores de contorno na direção x , para o transporte unidimensional de soluto traçador com termo de decaimento radioativo ($\gamma = 0,5 \text{ d}^{-1}$, $\gamma = 0,05 \text{ d}^{-1}$, $\gamma = 0,02 \text{ d}^{-1}$). Conforme os seguintes valores: $t = 50 \text{ d}$, $Pe = 9,375$	125
Gráfico 39 –	Erros associados ao refinamento das malhas com volumes de controle triangulares, para os métodos numéricos aplicados (FOU-MPFA-QL, MUSCL-Woodfield-MPFA-QL) no transporte unidimensional de soluto traçador, com termo de decaimento radioativo e $\gamma = 0,5 \text{ d}^{-1}$	127
Gráfico 40 –	Erros associados ao refinamento das malhas com volumes de controle triangulares, para os métodos numéricos aplicados (FOU-MPFA-QL, MUSCL-Woodfield-MPFA-QL) no transporte unidimensional de soluto traçador, com termo de decaimento radioativo e $\gamma = 0,05 \text{ d}^{-1}$	128
Gráfico 41 –	Erros associados ao refinamento das malhas com volumes de controle triangulares, para os métodos numéricos aplicados (FOU-MPFA-QL, MUSCL-Woodfield-MPFA-QL) no transporte unidimensional de soluto traçador, com termo de decaimento radioativo e $\gamma = 0,02 \text{ d}^{-1}$	129
Gráfico 42 –	Perfis de concentração obtidos para o transporte bidimensional de soluto traçador com uma fonte contínua a montante e malha M11. Dados os seguintes valores: $t = 1 \text{ d}$, $CFL = 0,2$, $Pe = 0,05$	134
Gráfico 43 –	Perfis de concentração obtidos para o transporte bidimensional de soluto traçador com uma fonte contínua a montante e malha M12. Dados os seguintes valores: $t = 1 \text{ d}$, $CFL = 0,2$, $Pe = 0,05$	136

Gráfico 44 – Perfis de concentração obtidos para o transporte bidimensional de soluto traçador com uma fonte contínua a montante e malha M11. Dados os seguintes valores: $t = 4$ d, $CFL = 0,2$, $Pe = 0,05$	139
Gráfico 45 – Perfis de concentração obtidos para o transporte bidimensional de soluto traçador com uma fonte contínua a montante e malha M12. Dados os seguintes valores: $t = 4$ d, $CFL = 0,2$, $Pe = 0,05$	141
Gráfico 46 – Perfis de concentração obtidos para o transporte bidimensional de soluto traçador com uma fonte contínua a montante, malha M12 e diferentes razões de anisotropia. Dados os seguintes valores: $t = 2$ d, $CFL = 0,2$, $Pe = 0,05$	146
Gráfico 47 – Perfis de concentração obtidos numericamente pelos métodos FOU-MPFA-QL, MUSCL-MPFA-QL, MUSCL-Woodfield-MPFA-QL, considerando-se a malha M13, para o transporte bidimensional de soluto traçador em um reservatório isotrópico e heterogêneo. Conforme os seguintes valores: $t = 12$ d, $CFL = 0,2$ e $Pe = 0,25$	153
Gráfico 48 – Perfis de concentração obtidos numericamente pelos métodos FOU-MPFA-QL, MUSCL-MPFA-QL, MUSCL-Woodfield-MPFA-QL, considerando-se a malha M14, para o transporte bidimensional de soluto traçador em um reservatório isotrópico e heterogêneo. Conforme os seguintes valores: $t = 12$ d, $CFL = 0,2$ e $Pe = 0,25$	155

LISTA DE TABELAS

Tabela 1 –	Verificação de acurácia dos métodos numéricos (FOU-MPFA-QL, MUSCL-MPFA-QL e MUSCL-Woodfield-MPFA-QL) para o problema de transporte unidimensional de soluto traçador com difusão dominante e aplicação de volumes de controle triangulares	104
Tabela 2 –	Verificação de acurácia dos métodos numéricos (FOU-MPFA-QL, MUSCL-MPFA-QL e MUSCL-Woodfield-MPFA-QL) para o problema de transporte unidimensional de soluto traçador com difusão dominante e aplicação de volumes de controle quadrangulares	104
Tabela 3 –	Verificação de acurácia dos métodos numéricos (FOU-MPFA-QL, MUSCL-MPFA-QL e MUSCL-Woodfield-MPFA-QL) para o problema de transporte unidimensional de soluto traçador com advecção dominante e aplicação de volumes de controle triangulares	114
Tabela 4 –	Verificação de acurácia dos métodos numéricos (FOU-MPFA-QL, MUSCL-MPFA-QL e MUSCL-Woodfield-MPFA-QL) para o problema de transporte unidimensional de soluto traçador com advecção dominante e aplicação de volumes de controle quadrangulares	114
Tabela 5 –	Verificação de acurácia da solução obtida pelo MUSCL-MPFA-QL para os diferentes parâmetros de ponderação ($\lambda = -1$, $\lambda = 0$): problema de transporte unidimensional de soluto traçador com advecção dominante e aplicação de volumes de controle triangulares	120
Tabela 6 –	Verificação de acurácia dos métodos numéricos (FOU-MPFA-QL e MUSCL-Woodfield-MPFA-QL) para o problema de transporte unidimensional de soluto traçador com termo de decaimento radioativo e aplicação de volumes de controle triangulares. Constante de decaimento radioativo: $\gamma = 0,5 \text{ d}^{-1}$	126

Tabela 7 – Verificação de acurácia dos métodos numéricos (FOU-MPFA-QL e MUSCL-Woodfield-MPFA-QL) para o problema de transporte unidimensional de soluto traçador com termo de decaimento radioativo e aplicação de volumes de controle triangulares. Constante de decaimento radioativo: $\gamma = 0,05 \text{ d}^{-1}$ 127

Tabela 8 – Verificação de acurácia dos métodos numéricos (FOU-MPFA-QL e MUSCL-Woodfield-MPFA-QL) para o problema de transporte unidimensional de soluto traçador com termo de decaimento radioativo e aplicação de volumes de controle triangulares. Constante de decaimento radioativo: $\gamma = 0,02 \text{ d}^{-1}$ 128

LISTA DE SIGLAS

6P4O	<i>Six-Point Fourth-Order</i>
ADR	Advecção-dispersão-reação
CC	Condições de contorno
DMP	<i>Discrete Maximum Principle</i>
EMPFA	<i>Enriched Multi-Point Flux Approximation</i>
FOU	<i>First Order Upwind</i>
GOE	<i>Grid Orientation Effect</i>
IMPEC	<i>Implicit Pressure and Explicit Concentration</i>
IOR	<i>Improved Oil Recovery</i>
LPEW	<i>Linearity-Preserving Explicit Weighted</i>
MDF	Método das Diferenças Finitas
MEF	Método dos Elementos Finitos
MEFGC	Método dos Elementos Finitos de Galerkin Contínuo
MEFGD	Método dos Elementos Finitos de Galerkin Descontínuo
MEFGE	Método dos Elementos Finitos de Galerkin Enriquecido
MPFA	<i>Multi-Point Flux Approximation</i>
MPFA-D	<i>Multi-Point Flux Approximation with a Diamond stencil</i>
MPFA-FPS	<i>Multi-Point Flux Approximation Full Pressure Support</i>
MPFA-G	<i>Multi-Point Flux Approximation G-method</i>
MPFA-H	<i>Multi-Point Flux Approximation using Harmonic points</i>
MPFA-HD	<i>Multi-Point Flux Approximation with Half-Diamond region</i>
MPFA-L	<i>Multi-Point Flux Approximation L-method</i>
MPFA-O	<i>Multi-Point Flux Approximation O-method</i>
MPFA-QL	<i>Multi-Point Flux Approximation Quasi-Local</i>
MPFA-U	<i>Multi-Point Flux Approximation U-method</i>
MUSCL	<i>Monotonic Upstream-Centered Schemes for Conservation Laws</i>
MUSCL-TVD	<i>Monotonic Upstream-Centered Schemes for Conservation Laws based on Total Variation Diminishing</i>
MVF	Método dos Volumes Finitos
MVFCC	Método dos Volumes Finitos Centrados nas Células

NLFV-DMP	<i>Non Linear Finite Volume that satisfies the Discrete Maximum Principle</i>
NLFV-PP	<i>Non Linear Finite Volume that Positive Preserving</i>
RMS	<i>Root Mean Square</i>
SC	Superficie(s) de controle
SDHM	<i>Stabilized Dual Hybrid Mixed</i>
SUPG	<i>Streamline Upwind Petrov-Galerkin</i>
TPFA	<i>Two-Point Flux Approximation</i>
VC	Volume(s) de controle

LISTA DE SÍMBOLOS

ΔV	Volume elementar cúbico
Δt	Intervalo de tempo
ϕ	Porosidade do reservatório
ρ_i	Massa específica do componente i
Q_i	Vazão volumétrica relacionada ao componente i
\vec{v}_i	Vetor de velocidade do componente i
Q	Vazão volumétrica total
ρ	Massa específica total
\vec{v}	Vetor velocidade total
p	Pressão no reservatório
\mathbf{K}	Tensor de permeabilidade efetiva do reservatório
μ	Viscosidade dinâmica do fluido
g	Magnitude da aceleração gravitacional
\vec{g}	Vetor da aceleração gravitacional
Q_T	Vazão volumétrica específica total
$\vec{\mathcal{F}}_{A,i}$	Fluxo advectivo do componente i
C_i	Concentração do componente i
$\vec{\mathcal{F}}_{dif,i}$	Fluxo difusivo do componente i
\mathbf{D}_{dif}	Tensor de difusão molecular
\mathbf{D}_0	Coefficiente de difusão molecular
τ	Tensor de tortuosidade do reservatório
$\vec{\mathcal{F}}_{disp,i}$	Fluxo dispersivo do componente i
\mathbf{D}_{mec}	Tensor de dispersão mecânica
α_{ijmn}	Componente de um tensor de quarta ordem denominado como dispersividade do reservatório
Pe	Número de Péclet
α	Tensor de dispersividade
α_L	Constante de dispersividade longitudinal
α_T	Constante de dispersividade transversal
δ_{ij}	Delta de Krönecker

\mathcal{N}	Número de núclídeos
\mathcal{A}	Radioatividade
γ	Constante de decaimento radioativo total
ΔC_i	Variação da concentração do componente i
γ_i	Constante de decaimento radioativo do componente i
C	Concentração do soluto traçador
\mathbf{D}_H	Tensor de dispersão hidrodinâmica
Q_c	Termo de fonte ou sumidouro
$\vec{\mathcal{F}}_H$	Fluxo de dispersão hidrodinâmica
\vec{x}	Vetor posição
t	Instante de tempo
T	Tempo total
Ω	Domínio contínuo do espaço
Γ	Condições de contorno
\vec{x}_c	Vetor posição das condições de contorno do domínio Ω
Γ_D	Condição de contorno de Dirichlet
D_{ij}	Componente do tensor de dispersão hidrodinâmica
\vec{n}_i	Componente do vetor normal unitário
Γ_N	Condição de contorno de Neumann
v_i	Componente da velocidade do fluido
Γ_C	Condição de contorno de Cauchy
Q_{inj}	Vazão volumétrica no poço injetor
Q_{prod}	Vazão volumétrica no poço produtor
p_{inj}	Pressão no poço injetor
p_{prod}	Pressão no poço produtor
\vec{p}	Vetor de pressão do reservatório
\vec{x}_i	Vetor posição das condições de contorno interna do reservatório
$\partial\Omega$	Contorno do domínio contínuo do espaço
Γ_{inj}	Condição de contorno do poço injetor
Γ_{prod}	Condição de contorno do poço produtor
C_0	Concentração conhecida na posição \vec{x}

\mathcal{D}	Tripleto que caracteriza a discretização espacial pelo método dos volumes finitos centrados nas células
\mathcal{M}	Conjunto de todos os volumes de controle gerados no domínio Ω
\mathcal{E}	Conjunto de todas as faces da malha gerada no domínio Ω
\mathcal{O}	Conjunto de todos os pontos baricentros de \mathcal{M}
$\hat{L}, V_{\hat{L}}$	Volume de controle à esquerda da face IJ , ou volume de controle arbitrário
\hat{R}	Volume de controle à direita da face IJ
$\mathbf{x}_{\hat{L}}$	Baricentro do volume de controle \hat{L}
$\mathcal{E}_{\hat{L}}$	Subconjunto de todas as faces do volume de controle \hat{L}
\mathcal{E}^{ext}	Conjunto das faces que têm interseção com o contorno do domínio
\mathcal{E}^{int}	Conjunto das faces que são internas ao domínio
$\mathbf{x}_{\hat{R}}$	Baricentro do volume de controle \hat{R}
\vec{n}	Vetor normal unitário
$\partial\hat{L}$	Superfície de controle do volume de controle \hat{L}
\mathcal{F}	Fluxo genérico
$\bar{Q}_{c\hat{L}}$	Valor médio do termo de fonte ou sumidouro no volume de controle \hat{L}
$V_{\hat{L}}$	Volume (ou área em 2D) do volume de controle \hat{L}
$\bar{\gamma}_{\hat{L}}$	Valor médio da constante de decaimento radioativo no volume de controle \hat{L}
$\bar{C}_{\hat{L}}$	Valor médio da concentração no volume de controle \hat{L}
$\gamma_{\hat{L}}$	Constante de decaimento radioativo no volume de controle \hat{L}
$C_{\hat{L}}$	Concentração no volume de controle \hat{L}
$\vec{\mathcal{F}}_A$	Fluxo advectivo
$\vec{\mathcal{F}}_T$	Fluxo total
\vec{n}_{IJ}	Vetor normal unitário da face IJ
$\vec{\mathcal{F}}_{T,IJ}$	Fluxo total na face IJ
\vec{N}_{IJ}	Vetor área normal à face IJ
$\vec{\mathcal{F}}_{H,IJ}$	Fluxo numérico hidrodinâmico único na face IJ
$\vec{\mathcal{F}}_{A,IJ}$	Fluxo advectivo na face IJ

∇	Operador gradiente ou divergente (del)
$\mathbf{D}_{H\hat{L}}^T$	Tensor de dispersão hidrodinâmico transposto do volume de controle \hat{L}
∇C	Gradiente de concentração
$\vec{\mathcal{F}}_{H\hat{L}}^{\hat{L}}$	Fluxo numérico hidrodinâmico na face IJ referente ao volume de controle \hat{L}
$\vec{\mathcal{F}}_{H\hat{L}}^{\hat{R}}$	Fluxo numérico hidrodinâmico na face IJ referente ao volume de controle \hat{R}
\vec{N}_{JI}	Vetor área normal à face JI
$C_{\hat{L}}$	Concentração no centroide do volume de controle \hat{L}
$C_{\hat{L},i(IJ)}$	Concentração do nó i na face IJ referente ao volume de controle \hat{L}
$C_{\hat{L},j(IJ)}$	Concentração do nó j na face IJ referente ao volume de controle \hat{L}
$C_{\hat{R}}$	Concentração do centroide do volume de controle \hat{R}
$C_{\hat{R},i(IJ)}$	Concentração do nó i na face IJ referente ao volume de controle \hat{R}
$C_{\hat{R},j(IJ)}$	Concentração do nó j na face IJ referente ao volume de controle \hat{R}
$\mathbf{K}_{\hat{L}}^T$	Tensor de permeabilidade transposto do volume de controle \hat{L}
$\vec{v}_{IJ}^{\hat{L}}$	Velocidade numérica de Darcy unilateral na face IJ do volume de controle \hat{L}
$\vec{v}_{IJ}^{\hat{R}}$	Velocidade numérica de Darcy unilateral na face IJ do volume de controle \hat{R}
$C_{IJ}^{\hat{L}}$	Concentração na face IJ do volume de controle \hat{L}
$C_{IJ}^{\hat{R}}$	Concentração na face IJ do volume de controle \hat{R}
$\vec{\mathcal{F}}_{AIJ}$	Fluxo advectivo único na face IJ
$C_{\hat{L},IJ}^+$	Concentração calculada à esquerda da face IJ
$C_{\hat{R},IJ}^-$	Concentração calculada à direita da face IJ
$S_{\hat{L}}^*$	Limitador de inclinação relacionado ao volume de controle \hat{L}
$S_{\hat{R}}^*$	Limitador de inclinação relacionado ao volume de controle \hat{R}
$\Delta C_{\hat{L}}^{bwd}$	Operador de diferenças para trás
$C_{\hat{R}}^{fwd}$	Operador de diferenças para frente
$\vec{d}_{\hat{L}\hat{R}}$	Vetor posição entre dois centroides de volumes de controle adjacentes

$S_{IJ}^{\hat{L}}$	Limitador de Van Albada aplicado na face IJ relativo ao volume de controle \hat{L}
$S_{IJ}^{\hat{R}}$	Limitador de Van Albada aplicado na face IJ relativo ao volume de controle \hat{R}
S_i	Limitador de Woodfield
CFL	Número de Courant
$erfc$	Função de erro complementar
erf	Função de erro

SUMÁRIO

1	INTRODUÇÃO	36
1.1	MOTIVAÇÃO	36
1.2	ESTADO DA ARTE	40
1.3	OBJETIVO GERAL	48
1.4	OBJETIVOS ESPECÍFICOS	48
1.5	ORGANIZAÇÃO DA DISSERTAÇÃO	49
2	FORMULAÇÃO MATEMÁTICA	50
2.1	EQUAÇÃO DE CONSERVAÇÃO DE MASSA	50
2.2	EQUAÇÃO DE DARCY	52
2.3	EQUAÇÃO DA PRESSÃO	52
2.4	TRANSPORTE ADVECTIVO	53
2.5	LEI DE FICK	54
2.6	TRANSPORTE DISPERSIVO	55
2.6.1	Coefficientes de Dispersão Longitudinal (D_L) e Dispersão Transversal (D_T)	56
2.7	DECAIMENTO RADIOATIVO	58
2.8	EQUAÇÃO DE ADVECÇÃO-DISPERSÃO-REAÇÃO	59
2.9	CONDIÇÕES DE CONTORNO E INICIAIS	60
3	FORMULAÇÃO NUMÉRICA	63
3.1	DISCRETIZAÇÃO DO FLUXO PELO MÉTODO MPFA-QL	64
3.1.1	Definições Fundamentais da Formulação Numérica MPFA-QL	64
3.1.1.1	Polígono do Tipo <i>Star-Shaped</i> e <i>Kernel</i> de um Polígono	65
3.1.2	Formulação Numérica da Equação de Advecção-Dispersão-Reação	67
3.1.3	Formulação Numérica do Fluxo Hidrodinâmico pelo MPFA-QL	71
3.1.3.1	Construção do Fluxo Único para o Fluxo Hidrodinâmico	74
3.1.3.2	Tratamento do Fluxo Hidrodinâmico nos Contornos da Malha	75
3.1.3.3	Cálculo das Incógnitas nos nós	76
3.1.4	Formulação Numérica do Fluxo Advectivo	79
3.1.4.1	<i>First Order Upwind</i> (FOU) na Discretização da Concentração de Solutos Traçadores	82

3.1.4.2	<i>Monotonic Upstream-Centered Schemes for Conservation Laws (MUSCL) na Discretização da Concentração de Solutos Traçadores</i>	84
3.1.5	Discretização Temporal e Formulação Numérica da Equação de Advecção-Dispersão-Reação	89
3.2	AVALIAÇÃO DE ERROS DOS MÉTODOS NUMÉRICOS	90
4	RESULTADOS NUMÉRICOS	92
4.1	TRANPORTE UNIDIMENSIONAL DE SOLUTOS TRAÇADORES EM RESERVATÓRIOS	92
4.1.1	Dispersão Hidrodinâmica com Difusão Dominante	94
4.1.2	Dispersão Hidrodinâmica com Advecção Dominante	107
4.1.3	Dispersão Hidrodinâmica com Termo de Fonte com Decaimento Radioativo	121
4.2	TRANSPORTE BIDIMENSIONAL DE SOLUTOS TRAÇADORES EM RESERVATÓRIOS	129
4.2.1	Transporte de Solute Traçador em Reservatórios com uma Fonte Contínua a Montante	129
4.2.2	Transporte de Solute Traçador em Reservatório com Razão de Dispersão Hidrodinâmica não Unitária	142
4.2.3	Transporte de Solute Traçador em Reservatórios Heterogêneos: presença de barreira	147
5	CONCLUSÕES E TRABALHOS FUTUROS	156
	REFERÊNCIAS	159
	APÊNDICE A – FLUXOGRAMA DO ALGORITMO UTILIZADO PARA RESOLVER A EQUAÇÃO DE ADVECÇÃO-DISPERSÃO-REAÇÃO ATRAVÉS DA ESTRATÉGIA IMPEC	171

1 INTRODUÇÃO

1.1 MOTIVAÇÃO

Um reservatório de petróleo é um meio poroso que contém hidrocarbonetos, e a recuperação destes hidrocarbonetos geralmente tem sido subdividida em três etapas (EWING, 1983; FANCHI, 2001). A recuperação primária, que consiste em quantidades de hidrocarboneto recuperadas pela própria energia do reservatório. A recuperação secundária, que consiste em impor pressão nos poços injetores, e.g., a partir da injeção de água para continuar recuperando o hidrocarboneto aprisionado. A recuperação terciária, que consiste na utilização de técnicas avançadas como, e.g., injeção de gases miscíveis, fluidos químicos e energia térmica para tentar produzir o hidrocarboneto restante sem alterar as propriedades abruptamente. Nesse sentido, a indústria de petróleo depende de a capacidade do fluido manar através das rochas porosas do reservatório, em que se encontra aprisionado (FANCHER, 1956). Assim, uma avaliação adequada do escoamento de fluidos no interior dos reservatórios de petróleo, quando submetido à diferentes etapas de recuperação, permite a economia de recursos e a maximização dos lucros por parte das empresas petrolíferas (ROSA; CARVALHO; XAVIER, 2006).

Os testes realizados com traçadores têm se tornado uma poderosa ferramenta para descrever o comportamento dos reservatórios, isto é, fornecem informações acerca da distribuição e trajetória dos fluidos envolvidos, identificando-se as características geológicas da região considerada, e, tais informações são crucias para o bom gerenciamento dos reservatórios, e influenciam produzindo grande impacto na indústria, tal como, otimizando-se a área de drenagem na recuperação secundária, reduzindo-se os riscos existentes e aumentando a eficiência de produção (ZEMEL, 1995). Segundo Zemel (1995), traçadores são substâncias que são utilizadas para marcar fisicamente um determinado volume de fluido, tornando-se possível sua identificação a posteriori, através de um determinado percurso. Logo, o fluxo do traçador dissolvido é representado pelo movimento de um grande número de partículas, e cada partícula representa uma certa massa do traçador (YI; DALTABAN; DAWE, 1994; STALGOROVA; BABADAGLI, 2012), deve-se levar em conta que a substância traçadora não interage com o meio poroso, ou seja, no escoamento do

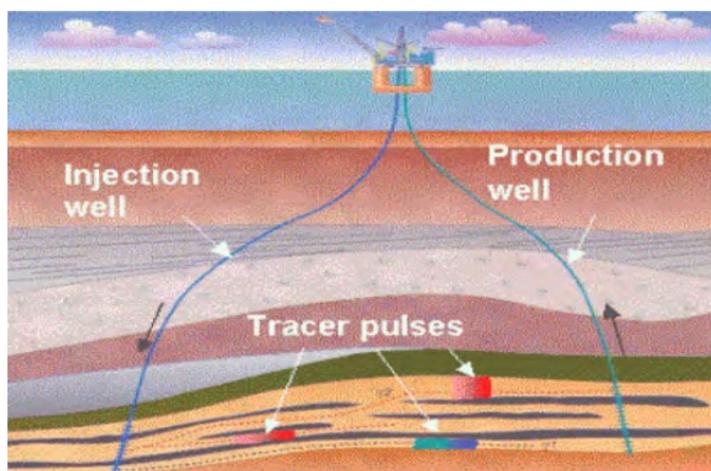
fluido apenas mecanismos de advecção e dispersão são considerados. Desse modo, o traçador injetado no fluido se move ao longo de as linhas de corrente e se dispersa simultaneamente, longitudinal e transversalmente, experimentando diversas características do fluxo num reservatório que serão refletidas na produção dos poços (YI; DALTABAN; DAWE, 1994). Assim, os traçadores são utilizados para caracterizar reservatórios de petróleo, sendo adequados na avaliação e otimização da recuperação secundária e terciária, e são basicamente empregados para se verificar a taxa de movimento do fluido injetado e produzido, determinando-se as conectividades internas, as estruturas de camadas, as barreiras aos fluxos e a eficiência de varredura, em meios altamente heterogêneos e naturalmente fraturados (YI; DALTABAN; DAWE, 1994; STALGOROVA; BABADAGLI, 2012; DUGSTAD et al., 2013).

As primeiras aplicações de traçadores, em meios porosos, foram desenvolvidas na década de 1900 para investigar o movimento de águas subterrâneas, e, na indústria de petróleo essas aplicações datam da década de 1950, como objetivo inicial a identificação da existência de comunicação entre os poços (WELGE, 1955 apud ZEMEL, 1995)¹, à vista disso, apenas análises qualitativas eram disponíveis para avaliar os dados de testes com traçadores (GUAN; DU, 2004; DU; GUAN, 2005). Posteriormente, de acordo com Guan e Du (2004), na década de 1960, essas aplicações vêm a se tornarem de caráter quantitativo, através de modelos semi-analíticos apresentados por Brigham e Smith (1965) e modelos analíticos decorrentes de Abbaszadeh-Dehghani e Brigham (1984). Atualmente, emprega-se os traçadores tanto em caráter qualitativo quanto em caráter quantitativo, sendo possível esta concordância, a partir de trabalhos como Melo, Holleben e Almeida (2001); Du e Guan (2005). As informações qualitativas estão relacionadas com as interconectividades entre poços produtores e/ou injetores, características direcionais e heterogeneidades, presenças de falhas, fraturas naturais, barreiras, *pinch-out* e outras peculiaridades existentes nos reservatórios (ABBASZADEH-DEHGHANI; BRIGHAM, 1984; GUAN; DU, 2004; DU; GUAN, 2005; AL-QASIM et al., 2019), por outro lado, as informações quantitativas estão relacionadas com o tempo de residência do fluido no reservatório, as velocidades relativas entre diferentes fluidos investigados (ver esquema da Figura 1), a distribuição do fluido injetado e o volume varrido (GUAN; DU, 2004; AL-QASIM

¹ WELGE, H. E. Super sleuths trace flow of injected gas. **Oil & Gas Journal**, [S.l.], p. 77-79, ago. 1955.

et al., 2019). Sendo assim, as informações qualitativa e quantitativa são extremamente úteis e complementares para o bom gerenciamento de reservatórios.

Figura 1 – Esquema da aplicação de teste com traçadores entre poços produtor e injetor para recuperação de óleo melhorada (IOR – *Improved Oil Recovery*) na indústria de petróleo



Fonte: Al-Qasim *et al.* (2019, p. 3).

Nesse cenário, o advento do computador trouxe uma ferramenta bastante utilizada na área de engenharia de reservatórios: a simulação computacional (ou simulação de reservatórios) que combinam a física, a matemática, a engenharia de reservatório e a programação de computadores para compreender as complexidades do escoamento de fluidos que acontecem nos reservatórios e nos poços produtores e injetores (ERTEKIN; ABOU-KASSEM; KING, 2001). Dessa forma, a simulação computacional pode fornecer um melhor entendimento da geologia do reservatório e do fluxo de fluidos no interior do mesmo, possibilitando realizar previsões do comportamento do reservatório, das estimativas de volumes originais, dos volumes recuperáveis e das reservas disponíveis (THOMAS, 2001).

Do ponto de vista de algumas das maiores empresas de energia do mundo, existe um valor estratégico na simulação de reservatórios, pois é primordial desenvolver e aplicar as mais recentes tecnologias de simulação que fornecem uma vantagem competitiva entre as empresas (GILMAM; OZGEN, 2013). Por isso, esta ferramenta se tornou padrão e amplamente utilizada na indústria de petróleo moderna, já que o engenheiro de reservatórios pode simular diversos cenários de exploração, locações de poços de produção e de injeção, e a partir dos resultados obtidos, busca-se aquela solução que proporcione a maximização do fator de recuperação e minimização de riscos envolvidos na produção (ERTEKIN; ABOU-KASSEM; KING, 2001; CHEN, 2007; GILMAN; OZGEN, 2013). É sabido que, no Brasil, as maiores

reservas de petróleo estão presentes na camada do Pré-sal, esta zona geológica é de caráter muito heterogêneo e anisotrópico, praticamente sem um padrão conhecido, devido à presença de sal, falhas geológicas, *pinch-out*, canais, cavernas, carstes, entre outras (LUCIA, 2007; CHANG et al., 2008; RICCOMINI; SANT'ANNA; TASSINARI, 2012; MORAIS, 2013). Dessarte, o comportamento com respeito a recuperação de óleo nessa região é completamente desconhecido pela indústria petrolífera dificultando a replicação de modelos físicos e geológicos conhecidos, adotados em outros reservatórios de petróleo (MORAIS, 2013). Nesse contexto, o engenheiro de reservatórios tem que afrontar desafios associados à modelagem de geometrias complicadas, resultantes da presença de características geológicas complexas e da análise numérica dos processos envolvidos no escoamento dos fluidos em tais reservatórios (CARVALHO, 2005; CANNON, 2018).

Sob outra perspectiva, para se obter as informações necessárias para um bom gerenciamento de reservatório e representar os fenômenos físicos de maneira adequada, baseia-se no conhecimento do comportamento da substância traçadora no meio poroso, assim, o simulador numérico empregado deve ser suficientemente robusto e acurado para simular o comportamento adequado do traçador no domínio estudado (GILMAM; OZGEN, 2013; ISLAM et al., 2016; RAMIREZ, 2018). Contudo, sabe-se que as soluções numéricas fornecidas pelos simuladores comerciais são limitadas ao modelar o transporte de solutos traçadores, principalmente em meios altamente heterogêneos e anisotrópicos, no entanto, tais simuladores são bastante eficientes computacionalmente (BECKNER et al., 2001; ISLAM et al., 2016; RAMIREZ, 2018; BODIN, 2020). Desse modo, evidencia-se que a principal motivação para se desenvolver o estudo desta dissertação de mestrado é justamente apresentar formulações numéricas alternativas, com boas propriedades de robustez e acurácia baseado no Método dos Volumes Finitos (MVF), para poder simular e estudar o transporte de solutos traçadores no interior de reservatórios. Assim, conhecendo-se a dinâmica dos traçadores em meios porosos, é possível descrever e analisar o comportamento do escoamento de fluidos em reservatórios heterogêneos e anisotrópicos.

1.2 ESTADO DA ARTE

O início da análise racional do fluxo num meio poroso ocorreu, em 1856, por Henry Philibert G. Darcy, que publicou um trabalho de grande relevância para o estudo de escoamentos em meios porosos (BROWN, 2002; SIMMONS, 2008). Inicialmente, o estudo desse tipo de escoamento era realizado de maneira empírica e foi gradualmente substituído por descrições teóricas dos fenômenos (HÁLEK; ŠVEC, 1979; BROWN, 2002). Com a introdução da lei de Darcy no campo da hidráulica e hidrologia de águas subterrâneas, permitiu-se medir racionalmente a dinâmica do escoamento em meios porosos (BROWN, 2002). A equação da lei de Darcy foi generalizada para permitir soluções de equações diferenciais, fluxo insaturado e fluxo multifásico (BROWN, 2002), essa lei é a base para muitos cálculos na engenharia, em particular na engenharia de reservatórios de petróleo (FANCHER, 1956). De outra parte, o fluxo difusivo foi quantificado matematicamente por Fick (1855), em que o mesmo adotou um processo análogo à transferência de calor por condução proveniente da equação desenvolvida anteriormente por Fourier (1822).

De modo geral, a equação de advecção-dispersão-reação (ADR) descreve o transporte de um soluto, que pode representar o transporte de traçador (ou contaminante) injetado num meio poroso, heterogêneo e anisotrópico, saturado por um fluido (SUN, 1996 apud CHIVATA, 2016)². Devido à complexidade das propriedades existente no fluido e no meio poroso, encontrar soluções analíticas da equação de ADR ainda é um desafio, no entanto, para poder resolver esta equação é possível utilizar algum método numérico, que consiste em substituir as derivadas existentes por expressões algébricas (processo de discretização), permitindo-se resolver computacionalmente a equação mencionada (ERTEKIN; ABOU-KASSEM; KING, 2001; MALISKA, 2004; ISLAM et al., 2016). Os métodos numéricos são mais gerais em suas aplicações, e, se provaram ser altamente bem-sucedidos na obtenção de soluções de certas equações diferenciais para situações de reservatórios com características complexas (PEACEMAN, 1977; ISLAM et al., 2016). Diversos métodos numéricos foram desenvolvidos para resolver numericamente a equação de ADR e, conseqüentemente, estudar o comportamento delas, sendo que alguns dos primeiros

² SUN, N.-Z. **Mathematical modeling of groundwater pollution**. New York: Springer-Verlag, 1995. 377 p. ISBN: 978-1-4757-2560-5.

modelos numéricos foram propostos por Peaceman (1977), Voss (1984), Nofziger *et al.* (1989), Healy (1990), e Yeh *et al.* (1993). No entanto, um dos métodos numéricos mais antigos que foi utilizado para resolver as equações diferenciais de fluxos de fluidos é o Método das Diferenças Finitas (MDF), particularmente este método foi amplamente implementado em simuladores comerciais da indústria petrolífera, devido sua simplicidade e baixo custo computacional no processamento de dados (PEACEMAN, 1977; ERTEKIN; ABOU-KASSEM; KING, 2001; ISLAM *et al.*, 2016). O MDF é utilizado para aproximar as derivadas parciais sobre um domínio discretizado formado por pontos que são denominados elementos, e, usualmente esse domínio também é apontado na literatura como domínio computacional o qual é formado por um conjunto de estêncis. Este método é baseado em expansões da série de Taylor, e é caracterizado por sua facilidade de implementação e robustez em problemas onde as direções principais dos coeficientes tensoriais são alinhadas com a malha (AAVATSMARK, 2002; CHEN; HUAN; MA, 2006; AAVATSMARK, 2007). Segundo Carvalho (2005), o MDF dificulta a utilização de procedimentos de adaptação automática de malhas, os quais são naturalmente incorporados aos métodos capazes de lidar com malhas não estruturadas, como o Método dos Elementos Finitos (MEF) ou o MVF.

O MEF foi desenvolvido inicialmente para realizar análises estruturais estáticas e, posteriormente, análises estruturais dinâmicas, todavia este método em sua forma clássica pode não se comporta bem ao lidar com a conservação local de propriedades, isto é, no sentido das leis de conservação da física, como massa, energia e momento (CLOUGH, 1990; FUNG; HIEBERT; NGHIEM, 1992; HUGHES *et. al.*, 2000; COCKBURN; GOPALAKRISHNAN; WANG, 2007; SUN; LIU, 2009). À vista disso, Garcia (1997) empregou o MEF de Galerkin para tratar problemas de escoamentos de fluidos miscíveis em reservatórios de petróleo – mais especificamente – o método foi utilizado para calcular preliminarmente o campo de pressões e, em seguida, calcular o campo de velocidades como consequência de técnicas de pós-processamento para impor determinada conservação de massa ao método. Além disso, a concentração do traçador foi discretizada espacialmente através de uma formulação de Petrov-Galerkin (SUPG – *Streamline Upwind Petrov-Galerkin*) com parâmetro de estabilização, pois as funções-peso descontínuas resultantes do método clássico de Galerkin introduz perturbações as quais atuam na direção das linhas de

corrente no nível dos elementos (GARCIA, 1997). Em contrapartida, os autores Cockburn, Gopalakrishnan e Wang (2007), levando-se em consideração as limitações presentes no método clássico de Galerkin para aproximar fluxos de forma conservativa, utilizaram uma técnica de pós-processamento dividida em duas etapas os quais seus resultados apresentam satisfatórias convergências e acurácias. Em alternativa, Sun e Liu (2009) propõem um MEF localmente conservativo baseado no melhoramento da aproximação espacial do MEF de Galerkin Contínuo (MEFGC) com utilização de funções constantes elemento a elemento, denominado MEF de Galerkin Enriquecido (MEFGE) que utiliza uma formulação fraca semelhante à do MEF de Galerkin Descontínuo (MEFGD), mas com um número menor de graus de liberdade do que o MEFGD, a fim de constatar as vantagens do método, os autores apresentam resultados de simulações de fluxos e transportes acoplados em meios porosos.

Outro método de grande destaque é o MVF, este método conserva as propriedades tanto no nível local quanto global (MALISKA, 2004). Neste método, é necessário selecionar a aproximação de integrais de volume e/ou superfície, utilizando-se a forma integral das equações governantes como ponto de partida e, assim, a equação que inicialmente era definida sobre um domínio contínuo, agora está definida sobre um domínio discreto, em outras palavras, o domínio estudado é subdividido em um número finito de VC (FERZIGER; PERIĆ, 2002). De acordo com Carvalho (2005), não existe uma metodologia unificada e generalizada do MVF, que se permita construir um método de ordem qualquer (no sentido de aproximação por polinômio de Taylor), e com características conservativas, ao qual se pode fazer uso de qualquer tipo de malha. O MVF Centrados nas Células (MVFCC) é uma variação do MVF, e possui as mesmas características deste, com a particularidade de armazenar os graus de liberdade nos centroides das células (CONTRERAS, 2012). Rees *et al.* (2004) apresentam uma aplicação de um MVF computacionalmente eficiente para modelar fluxo de águas subterrâneas em solos saturados-insaturados, este método é centrado no vértice, e utiliza um algoritmo baseado na aresta (*vertex-centred edge-based finite volume*) sobre malhas estruturadas e não estruturadas. Lewis, Masters e Rees (2006) apresentaram modelos, acoplados e desacoplados, de transporte de contaminantes através de aquíferos pela aplicação de um MVF baseado em arestas e centrada no vértice.

Particularmente, para resolver numericamente o transporte de solutos em meios porosos, diversas metodologias numéricas foram propostas na literatura, e várias delas já foram implementadas através de *softwares* comerciais como, por exemplo: FEFLOW (2017), tNavigator (2017), Nexus (2018), MODFLOW (2019), COMSOL Multiphysics (2019), ECLIPSE (2020). Nesse contexto, Rao e Hathaway (1989) desenvolveram um modelo de célula de mistura para o transporte de solutos tridimensional com base em princípios de conservação da massa de água e soluto. Neste método, assume-se que o fluxo em cada VC considerado advém apenas dos VC adjacentes e/ou das condições de contorno, de modo que não existem gradientes de concentração dentro de determinado VC, logo qualquer quantidade que entra neste VC se dispersa ao longo deste e, portanto, o fluxo de saída tem a mesma concentração do próprio VC (CAMPANA, 1975). O modelo de célula de mistura, aplicado na simulação numérica da equação de transporte convectivo, pode simular alterações na qualidade da água devido ao transporte por convecção em águas subterrâneas, no entanto, o mesmo apresenta uma dispersão numérica que tem efeitos semelhantes à dispersão física, muitas vezes referida como dispersão artificial (RAO; HATHAWAY, 1989). Yeh *et al.* (1993) desenvolveram um modelo bidimensional utilizando o MEF para simular o transporte de um soluto quimicamente reativo. Yu e Singh (1995) fizeram modificações no MEF de Galerkin para mitigar os problemas presentes nas soluções numéricas (e.g.: oscilações numéricas, dispersão artificial) que surgiam em fluxos dominados por advecção num sistema de fluxos de águas subterrâneas. Segundo Li (1996), o transporte de soluto em solo arenoso é dominado pela advecção, resultando-se em oscilações e difusão numérica quando se utiliza métodos convencionais (e.g.: MDF *upwind*, Crank-Nicolson, Lax-Wendroff) para este tipo de problema. Desse modo, Li (1996) apresenta uma metodologia para superar essas dificuldades numéricas, assim, o fluxo de água é resolvido por meio de um MEF linear e o transporte do soluto é resolvido utilizando um esquema baseado em características conservativas de seis pontos de quarta ordem (6P4O – *Six-Point Fourth-Order*)³ com um limitador de fluxo e, conforme os resultados apresentados pelo autor, esta metodologia mitiga as limitações encontradas nos métodos convencionais.

³ O método 6P4O é fundamentado no método das características em que se utiliza uma combinação sofisticada de três polinômios cúbicos para aproximar a solução do problema (LI, 1996). Para mais detalhes do referido método, recomenda-se consultar Yu e Li (1994). YU, T. S.; LI, C. W. Efficient higher-order backward characteristics schemes for transient advection. **Int. J. Numer. Methods Fluids**, [S.l.], v. 19, n. 11, p. 997-1012, dec. 1994. DOI: 10.1002/flid.1650191104.

Por outro lado, Siegel *et al.* (1997) resolveram a equação de advecção-difusão por um método baseado em elementos finitos descontínuos para discretizar o termo advectivo e uma aproximação mista é usada para o termo difusivo da equação de transporte de soluto em meio poroso. Sun (1996) e Kovarik (2000) apresentam, separadamente, metodologias numéricas para resolver equações de ADR com dispersão hidrodinâmica, tais métodos são fundamentados no MDF e no MEF, respectivamente. Hossain e Yonge (1997) investigaram a acurácia e a estabilidade de alguns métodos baseados em MEF aplicados no transporte de contaminantes em águas subterrâneas. No contexto de traçadores, Wu e Pruess (2000) desenvolveram uma abordagem para modelar o transporte de traçadores através de rochas fraturadas heterogêneas em um sistema multifásico não isotérmico, incorporando-se um tensor de dispersão hidrodinâmica completo, com o uso tridimensional de malhas estruturadas e não estruturadas.

Rubio, Zalts e El Hasi (2008) desenvolveram um método, baseado no número de Damköhler, para resolver a equação de ADR, que permite simular e ajustar dados experimentais para processos de transporte com reações lentas e rápidas, além disso, os resultados foram melhorados incorporando-se uma segregação espacial de reagentes. O número de Damköhler ($Da \equiv t_A/t_R$) indica se a advecção ou a reação é o fenômeno físico dominante, onde t_A e t_R representam, nesta ordem, os tempos de advecção e reação característicos (RUBIO, ZALTS; EL HASI, 2008). Se $Da \gg 1$, então a reação acontece mais rápida do que a advecção, dificultando-se sua simulação numérica devido ao aumento do custo de tempo computacional (RUBIO, ZALTS; EL HASI, 2008). Por outro lado, Nunez *et al.* (2012) apresentaram soluções numéricas para processos de injeção em meios porosos, propondo-se o método denominado *Stabilized Dual Hybrid Mixed* (SDHM), a fim de computar eficientemente o campo de velocidades, e para a equação de concentração de traçadores é levado em conta um MEF estabilizado (SUPG), que utiliza uma aproximação espacial combinada com um MDF para trás no tempo.

Em meados da década de 1990, surge uma nova família de métodos conservativos capazes de tratar fluxos em meios porosos, denominada *Multi-Point Flux Approximation* (MPFA), que calcula os fluxos nas faces lidando com estêncis de múltiplos pontos, em contraste com o método *Two-Point Flux Approximation* (TPFA), que calcula os fluxos unicamente por meio de dois pontos (AAVATSMARK *et al.*,

1998a, 1998b; CARVALHO, 2005). Primeiramente, Crumpton, Shaw e Ware (1995) aplicaram o TPFA para demonstrar que este método se limita à utilização de malhas uniformes e que tem dificuldades para lidar com meios heterogêneos formado por tensores não diagonais e descontinuidades acentuadas. Por outro lado, os autores Aavatsmark *et al.* (1998a, 1998b) e Edwards e Rogers (1998) propuseram os fundamentos da metodologia MPFA que utiliza mais pontos que o TPFA, assim, os autores mostraram melhorias na acurácia em relação a este, e o MPFA também se mostrou ser capaz de lidar com malhas diversas e tensores não diagonais e completos. Posto isto, os métodos do tipo MPFA têm características de ser localmente conservativos lidando adequadamente tanto com malhas estruturadas quanto não estruturadas, como também, os mesmos lidam adequadamente com meios heterogêneos e anisotrópicos (AAVATSMARK *et al.*, 1998a, 1998b; EDWARDS; ROGERS, 1998; CARVALHO, 2005). De modo geral, os métodos MPFA dividem cada VC em subcélulas e considera-se uma variação linear da variável dependente dentro de cada subcélula e, além disso, impõe-se restrições adicionais sobre o fluxo a fim de garantir continuidade entre as faces dos VC e subcélulas adjacentes (CARVALHO, 2005).

Na literatura, tem-se disposto diversos métodos lineares do tipo MPFA, descritos detalhadamente por seus respectivos autores, cita-se alguns: MPFA-O e MPFA-U que foram os primeiros apresentados por Aavatsmark *et al.* (1998a), MPFA-L (AAVATSMARK *et al.*, 2008), MPFA-FPS (EDWARDS; ZHENG, 2008), MPFA-G (AGÉLAS; DI PIETRO; DRONIOU, 2010). Apesar das vantagens inerentes aos métodos do tipo MPFA – em suas formas clássicas e lineares – são não monótonos ao lidar com tensores completos ou com malhas poligonais em geral (LIPNIKOV *et al.*, 2007; GAO; WU, 2013). Nesse sentido, Eigestad e Klausen (2005) propuseram modificações no método MPFA-O, com o objetivo de transformar o sistema condicionado a uma matriz-M e, portanto, assegurar monotonicidade nas soluções. A posteriori, surge o método denominado *Enriched Multi-Point Flux Approximation* (EMPFA) como uma alternativa capaz de reduzir as oscilações numéricas correlacionadas à aproximação pobre do gradiente de pressão do fluxo devido à extrapolação das incógnitas próximo às superfícies de controle (CHEN *et al.*, 2008). Segundo Contreras (2017), embora os métodos clássicos do tipo MPFA tenham melhorado bastante sua robustez, tais métodos ainda não são capazes de reproduz

adequadamente soluções de problemas mais desafiadores. Nesse contexto, Contreras (2017) mostrou que os métodos lineares MPFA-H e MPFA-HD são capazes de mitigar as oscilações espúrias e preservar a positividade da solução, em problemas que envolvem meios porosos altamente heterogêneos e anisotrópicos.

Sob outra perspectiva, Chivata (2016) apresentou uma metodologia do MVFCC para modelar o transporte de solutos traçadores, reativos e não reativos, que são dissolvidos em escoamentos monofásicos no interior de meios porosos. O autor realizou a discretização dos termos elípticos da equação de ADR através do método MPFA-D (*Multi-Point Flux Approximation with a Diamond stencil*), assim como, a discretização do termo hiperbólico aconteceu através dos métodos FOU (*First Order Upwind*) e MUSCL (*Monotonic Upstream-Centered Schemes for Conservation Laws*). Os testes das formulações propostas por Chivata (2016) foram realizados através de estudos de casos com características uni e bidimensionais, resolvendo-se problemas de *benchmark* da literatura, sob diversas situações: problemas fortemente advectivos ou fortemente dispersivos, considerando-se ou não termos de fonte, em meios porosos homogêneos ou heterogêneos. A metodologia apresentada por Chivata (2016) apresentou potencial para simular escoamentos em malhas não estruturadas, ou geometrias complexas, assim como para escoamentos multifásicos em meios porosos heterogêneos e suavemente anisotrópicos. Entretanto, como foi demonstrado em Contreras (2012) e Contreras, Lyra e Carvalho (2019), o MPFA-D não é monótono ao lidar com meios altamente heterogêneos e anisotrópicos, apresentando-se dificuldades ao lidar com malhas severamente distorcidas. Nesse cenário, justifica-se o estudo de novas metodologias capazes de mitigar estas limitações mencionadas.

Segundo os autores Lipnikov *et al.* (2007), Yuan e Sheng (2008) e Contreras, Lyra e Carvalho (2019), um método numérico para ser considerado como ideal na resolução de problemas de escoamento em meios porosos, precisa-se satisfazer as seguintes propriedades:

- a) reproduzir soluções exatamente lineares por partes, em problemas que têm soluções analíticas lineares;
- b) deve ser capaz de lidar com malhas não estruturadas e poligonais de formas genéricas que podem ser severamente distorcidas;
- c) permitir o uso de tensores altamente anisotrópicos em meios porosos heterogêneos;

- d) ter uma acurácia de segunda ordem ou superior para soluções suaves;
- e) ser localmente conservativo, ou garantir a continuidade do fluxo normal através das interfaces entre os volumes de controle;
- f) ser monótono, isto é, satisfazer o princípio do máximo discreto (DMP – *Discrete Maximum Principle*) ou preservar a positividade da solução diferencial.

Dessarte, os métodos numéricos que conseguirem incorporar o maior número de propriedades, citadas anteriormente, apresentam soluções numéricas mais acuradas. À vista disso, no presente trabalho, apresenta-se uma metodologia numérica alternativa baseada no MVF para resolver a equação de ADR, onde os termos da dispersão hidrodinâmica (termo elíptico) e da velocidade de escoamento (termo hiperbólico) da referida equação serão resolvidos por meio de um MVF denominado MPFA *Quasi-Local* (MPFA-QL) o qual foi aplicado anteriormente por Contreras, Lyra e Carvalho (2019) para resolver problemas de fluxos difusivos em meios porosos, utilizando-se malhas poligonais quaisquer. As vantagens deste método dá-se pela utilização de um estêncil quase local, no qual se baseia na decomposição da conormal e por sua estratégia de interpolação linear por partes (ver detalhes na seção 3.1), logo, este método é capaz de reproduz soluções lineares por partes quando o problema tem solução exata linear, podendo-se lidar com meios heterogêneos e altamente anisotrópicos, e também, com malhas não estruturadas e severamente distorcidas (CONTRERAS; LYRA; CARVALHO, 2019). Basicamente, o método MPFA-QL calcula os fluxos laterais em cada superfície de controle, logo o fluxo único na superfície de controle é escrito como combinação convexa dos fluxos laterais, obtendo-se uma representação compacta do fluxo sobre a superfície de controle, respeitando-se a lei de conservação local. Nesse método, as variáveis auxiliares estão localizadas nos vértices da malha que, por sua vez, são expressas no centroide do VC através de uma estratégia de interpolação linear proposta por Gao e Wu (2011), assim, por consequência, o MPFA-QL se torna do tipo centrado totalmente no VC. De outra forma, o termo da concentração presente no termo de advecção da equação de ADR é discretizado por um método de primeira ordem do tipo *upwind* (i.e., FOU) (ver seção 3.1.4.1), e até onde se sabe, este método é altamente robusto no tratamento de descontinuidades, além de produz soluções numéricas sem oscilações numéricas próximo às mesmas, contudo, este método produz soluções com excessiva

difusão numérica e isto pode dificultar a análise e predição adequadas do comportamento de traçadores no interior dos reservatórios. Então, para poder superar esta desvantagem, também, adota-se um método de mais alta ordem (i.e., MUSCL, ver seção 3.1.4.2), pois produz resultados numéricos com menor quantidade de difusão numérica. Entretanto, perto das descontinuidades, os métodos de alta ordem (considerando-se a expansão em series de Taylor) em sua forma original produz oscilações numéricas indesejáveis, desse modo, necessita-se utilizar algum limitador que auxilie evitar ou minimizar essas oscilações. Por esse motivo, aplica-se o limitador de Van Albada como limitador de face, e para se verificar uma melhoria na estabilidade do método numérico, também, aplica-se o limitador de Woodfield como limitador de VC. E, finalmente, a discretização temporal da equação de ADR será realizada por meio de um método de Euler explícito.

1.3 OBJETIVO GERAL

O principal objetivo desta pesquisa é adotar métodos numéricos baseados em formulações de volumes finitos para fornecer soluções numéricas da equação de advecção-dispersão-reação.

1.4 OBJETIVOS ESPECÍFICOS

Os objetivos específicos são evidenciados a seguir:

- a) apresentar o método MPFA-QL como solução numérica do fenômeno físico da dispersão hidrodinâmica e das velocidades de Darcy, que acontecem no interior dos reservatórios;
- b) apresentar os métodos FOU e MUSCL como soluções numéricas para determinar as concentrações dos solutos traçadores e, portanto, calcular os fluxos advectivos associados à essas concentrações;
- c) representar adequadamente o termo de reação para fornecer uma solução completa, em casos que se tem aplicação de traçadores radioativos nos reservatórios;
- d) implementar os métodos numéricos apresentados, por meio de algoritmos elaborados na linguagem de programação MATLAB;

- e) estudar a acurácia e robustez dos métodos apresentados, mediante problemas existentes na literatura (*benchmarks*).

1.5 ORGANIZAÇÃO DA DISSERTAÇÃO

Além da presente seção (seção 1) – que tem o propósito de introduzir ao leitor o tema da pesquisa, detalhando-se a motivação, o estado da arte e os objetivos da mesma – esta dissertação de mestrado, ainda tem mais quatro seções, as referências e um apêndice. Na seção 2, apresenta-se os modelos matemáticos, com suas hipóteses simplificadoras, os quais foram utilizados nos problemas físicos de interesse. Na seção 3, descreve-se detalhadamente os métodos numéricos que foram utilizados para solucionar as equações governantes. Na seção 4, resolve-se alguns problemas de *benchmark* da literatura, e, interpreta-se seus resultados, a fim de validar a metodologia numérica proposta no presente trabalho. Na seção 5, aponta-se os principais achados e recomendações de pesquisas correlacionadas aos temas aqui abordados. Nas referências, expõe-se a descrição completa de outros trabalhos que serviram como base para esta pesquisa. E, finalmente, o Apêndice A que contém um fluxograma com a representação geral do algoritmo utilizado para resolver os problemas propostos na seção 4.

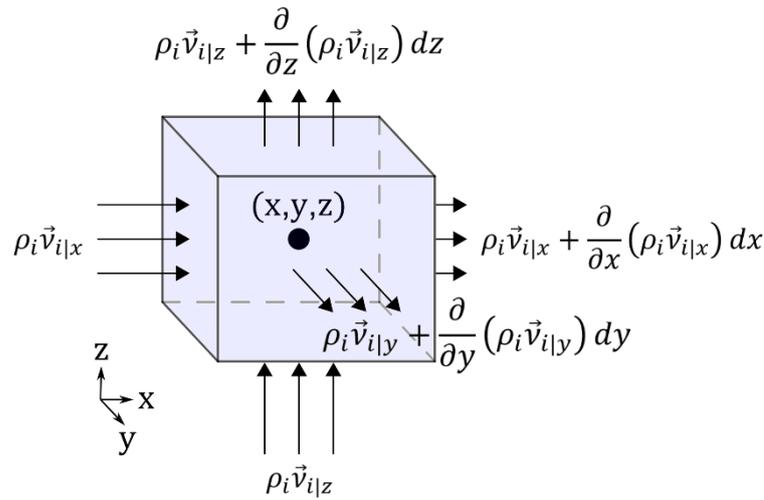
2 FORMULAÇÃO MATEMÁTICA

Os modelos matemáticos das equações que governam o fluxo e o transporte de solutos traçadores em reservatórios de petróleo consideram que a realidade física possa ser representada com aproximações aceitáveis (i.e., hipóteses simplificadoras), de modo que muitas vezes não é praticável e nem necessário modelar os detalhes dos fenômenos que ocorrem no interior do reservatório (BEAR; CHEN, 2010). Portanto, as hipóteses consideradas neste trabalho são realizadas para o transporte de solutos traçadores em fluidos newtonianos que ocupa todo espaço de vazios num meio poroso (i.e.: reservatório) sob condições isotérmicas, as equações governantes para o fluxo num reservatório de petróleo são dadas pela conservação de massa, pela lei de Darcy e pela equação de estado, e, também, considera-se que nenhuma massa do fluido pode atravessar as partículas sólidas, tornando-se a parte sólida uma superfície para o escoamento do fluido, denominada matriz sólida (CHEN; HUAN; MA, 2006).

2.1 EQUAÇÃO DE CONSERVAÇÃO DE MASSA

Assume-se que ΔV é um volume elementar cúbico com dimensões $\Delta V = \Delta x \Delta y \Delta z$, centrado num ponto $P = (x, y, z)$, e referenciado num sistema de coordenadas cartesianas x, y, z (ver Figura 2). Considerando-se o balanço de massa de um componente i no volume elementar (ΔV), e fazendo-se o uso do princípio de conservação de massa, obtém-se a variação de massa no volume (ΔV), ao longo do tempo (Δt), igual a soma do fluxo de massa que entra (ou sai) com a produção (ou eliminação) desse componente i , mediante reações químicas ou outras causas (SUN, 1996).

Figura 2 – Balanço de massa de um componente num volume elementar



Fonte: O Autor (2021).

Com $\partial/\partial t$ sendo a diferenciação do tempo, pode-se representar a acumulação de massa, devido ao efeito da compressibilidade por unidade de tempo, pela seguinte expressão (PEACEMAN, 1977; CHEN; HUAN; MA, 2006):

$$\frac{\partial(\phi\rho_i)}{\partial t} \Delta V, \quad (1)$$

em que a remoção de massa no volume elementar (ΔV), isto é, o decréscimo (ou acúmulo) de massa devido ao termo de fonte Q_i (massa por unidade de volume por unidade de tempo) do componente i , é dada por:

$$-Q_i \Delta V. \quad (2)$$

Empregando-se o conceito de limite, com $\Delta V \rightarrow 0$ e $\Delta t \rightarrow 0$, a equação de conservação de massa de um componente i na solução, em um meio poroso, é dada por (PEACEMAN, 1977; SUN, 1996; CHEN; HUAN; MA, 2006):

$$\begin{aligned} & \left[\frac{\partial}{\partial x} (\rho_i \vec{v}_{i|x}) dx \right] dy dz dt + \left[\frac{\partial}{\partial y} (\rho_i \vec{v}_{i|y}) dy \right] dx dz dt \\ & + \left[\frac{\partial}{\partial z} (\rho_i \vec{v}_{i|z}) dz \right] dx dy dt = Q_i dV dt - \left[\frac{\partial(\phi\rho_i)}{\partial t} dt \right] dV, \end{aligned} \quad (3)$$

onde ρ_i , ϕ e \vec{v}_i representam, respectivamente, a massa específica do fluido, a porosidade e a velocidade de Darcy do escoamento do fluido em relação ao componente i . De outra parte, Q_i representa o termo de fonte (ou sumidouro) relacionado ao componente i . Essa mesma regra pode ser aplicada a todos os componentes i do sistema de fluidos (SUN, 1996).

Reorganizando-se a Eq. (3), e usando as seguintes relações:

$$Q = \sum_{i=1}^N Q_i, \rho = \sum_{i=1}^N \rho_i \text{ e } \rho \vec{v} = \sum_{i=1}^N \rho_i \vec{v}_i, \quad (4)$$

obtém-se a equação da conservação de massa, para todo o sistema de fluidos, torna-se:

$$\frac{\partial(\phi\rho)}{\partial t} = Q - \text{div}(\rho\vec{v}), \quad (5)$$

onde N representa quantos componentes estão sendo considerados no balanço de massa. Essa equação desenvolvida (Eq. (5)), também, pode ser chamada de equação da continuidade (SUN, 1996).

2.2 EQUAÇÃO DE DARCY

Na modelagem e simulação de fluxos no interior do reservatório, a equação de movimento é dada na forma da lei de Darcy, que é fundamental para o transporte de solutos através de meios porosos (CHEN; HUAN; MA, 2006; BEAR; CHENG, 2010). Inúmeros experimentos, considerando-se processos monofásicos, mostram que essa lei indica uma relação linear entre velocidade do fluido e o gradiente de pressão da carga hidráulica, dada pela seguinte expressão (HELMING, 1997; CHEN; HUAN; MA, 2006):

$$\vec{v} = -\frac{\mathbf{K}}{\mu}(\nabla p - \rho g \nabla Z), \quad (6)$$

onde p é a pressão do fluido, \mathbf{K} é o tensor de permeabilidade efetiva do meio poroso, μ é a viscosidade dinâmica do fluido, ρ é a massa específica, g é a magnitude da aceleração gravitacional e Z é a coordenada na direção de \vec{g} . E, a velocidade de escoamento, \vec{v} , é aquela que massa do soluto experimenta ao ser transportado pelo fluido analisado no meio poroso (BATU, 2006; BEAR; CHENG, 2010).

2.3 EQUAÇÃO DA PRESSÃO

Substituindo-se a equação da velocidade de escoamento do fluido, Eq. (6), na equação de conservação de massa, Eq. (5), obtém-se:

$$\frac{\partial(\phi\rho)}{\partial t} = -div\left\{\rho\left[-\frac{K}{\mu}(\nabla p - \rho g\nabla Z)\right]\right\} + Q. \quad (7)$$

Considerando-se que o fluido e a rocha são incompressíveis, portanto, a porosidade e a densidade são constantes, desprezando-se os efeitos da capilaridade e da gravidade, e admitindo-se como valores unitários a viscosidade, obtém-se:

$$div(-K\nabla p) = Q_T. \quad (8)$$

A Eq. (8) é definida como a equação da pressão, onde $Q_T = Q/\rho$ representa a vazão volumétrica específica total (m^3/s , no Sistema Internacional de Unidades (SI)) (EWING, 1983), onde Q e ρ são definidos pela Eq. (4).

2.4 TRANSPORTE ADVECTIVO

Para se estudar o fenômeno de advecção, admite-se um meio poroso completamente saturado, desconsiderando-se o efeito da difusão e da dispersão (BEAR; VERRUIJT, 1987). O transporte advectivo (ou transporte convectivo)⁴ se refere a uma substância transportada (e.g., traçador ou contaminante) juntamente ao movimento preferencial do fluido (LEVEQUE, 2004; BATU, 2006).

O fluxo advectivo de um componente i é simplesmente o produto da velocidade (\vec{v}) do fluido no meio poroso, que representa um fluxo volumétrico (i.e.: produto do volume pela área sobre determinado tempo), e a concentração de i num volume considerado (CHOY; REIBLE, 2000). Assim, o fluxo advectivo pode ser definido pela seguinte equação:

$$\vec{F}_{A,i} = \vec{v}C_i, \quad (9)$$

sendo $\vec{F}_{A,i}$ o fluxo advectivo ou a massa transportada por unidade de seção transversal de área em determinado período de tempo (unidade de medida no SI: $kg \cdot m^{-2} \cdot t^{-1}$), \vec{v} é a velocidade média de escoamento do fluido, e C_i é a concentração do soluto, estabelecida como a massa do soluto pelo volume da solução (BEAR, 1972; CHOY; REIBLE, 2000; LEVEQUE, 2004). Portanto, a equação de advecção, Eq. (9), modela o fenômeno físico de advecção associado ao soluto traçador (substância

⁴ Os termos “advecção” e “convecção” são utilizados indiscriminadamente na literatura de análise numérica (HUNDSDORFER; VERWER, 2003).

numa pequena quantidade que não afeta a o escoamento do fluido) presente no fluxo do fluido (LEVEQUE, 2004).

O fluxo advectivo, com auxílio da equação (6) é dado pela seguinte expressão (SUN, 1996; CARVALHO, 2005; CHIVATA, 2016):

$$\vec{\mathcal{F}}_{A,i} = -(\mathbf{K}\nabla p)C_i. \quad (10)$$

2.5 LEI DE FICK

Difusão é o processo pelo qual a matéria é transportada de uma parte de um sistema para outro como resultado de movimentos moleculares aleatórios (CRANK, 1975). O efeito do movimento molecular se traduz na tendência ao equilíbrio e a uniformidade de uma substância, uma vez que a diferença de concentração cria um movimento no espaço, de modo a reduzir a não homogeneidade (HIRSH, 2007). A difusão molecular é um processo análogo à transferência de calor por condução, devido aos movimentos moleculares aleatórios (CRANK, 1975).

A lei de difusão molecular – ou lei de Fick – depende do pressuposto de uma relação linear homogênea entre os fluxos de massa diferencial e o gradiente da concentração, causados por forças motrizes que produzem o movimento da massa, num sistema com i -componentes (BEAR, 1972; SUN, 1996; BATU, 2006). A lei de Fick relaciona o fluxo da matéria, matematicamente, pela seguinte equação (BEAR, 1972; CRANK, 1975; SUN, 1996):

$$\vec{\mathcal{F}}_{dif,i} = -\mathbf{D}_{dif}\nabla C_i, \quad (11)$$

onde $\vec{\mathcal{F}}_{dif,i}$ é o fluxo difusivo por unidade de área de uma seção, C_i é a concentração da substância difusa i , e \mathbf{D}_{dif} é chamado coeficiente de difusão molecular. O sinal negativo, no lado direito da equação, indica que a difusão vai para o fluxo de maior a menor concentração (SUN, 1996; BATU, 2006; CHIVATA, 2016).

Modificando-se a primeira lei de Fick, Eq. (11), devido à presença da fase sólida no escoamento, o fluxo de difusão em meios porosos saturados se torna (BATU, 2006):

$$\vec{\mathcal{F}}_{dif,i} = -\emptyset\mathbf{D}_{dif}\nabla C_i, \quad (12)$$

onde \emptyset é a porosidade efetiva do meio poroso.

O coeficiente de difusão molecular é afetado, principalmente, pela tortuosidade do meio poroso (KOVARIK, 2000). Esse coeficiente é definido por:

$$D_{dif} = D_0 \tau \text{ com } 0 \leq \tau \leq 1, \quad (13)$$

sendo D_0 o coeficiente de difusão molecular da solução, e, τ o tensor de tortuosidade do meio poroso (KOVARIK, 2000).

2.6 TRANSPORTE DISPERSIVO

Considera-se um fluxo saturado, através do meio poroso, com uma porção de um domínio de fluxo contendo uma certa massa de soluto. Este soluto será referido como uma substância traçadora, que é uma porção marcada no mesmo fluido, podendo ser identificado por sua cor, densidade, etc. (BEAR, 1972).

Experiências mostram que traçadores se espalham gradualmente e ocupam uma porção cada vez maior no domínio do fluxo, além de ocupar uma região maior que o fluxo médio (BEAR, 1972). Esse fenômeno de espalhamento é chamado de dispersão hidrodinâmica (dispersão, deslocamento miscível) num meio poroso (BEAR, 1972). A dispersão hidrodinâmica é o resultado combinado de dois processos de transporte de massa no meio poroso: dispersão mecânica e difusão molecular (SUN, 1996). Num fluido multicomponente, o transporte do componente i pode ser resolvido em duas partes: uma é o transporte juntamente ao fluido por advecção, seguindo a velocidade média do fluxo e a outra é a difusão molecular, causada pelo gradiente de concentração do componente no fluido (SUN, 1996).

A dispersão hidrodinâmica é um processo irreversível e não estável (de modo que a distribuição inicial do traçador não pode ser obtida revertendo-se o sentido de escoamento do fluido) na qual a massa do soluto traçador se mistura com a porção não marcada do fluido (BEAR, 1972). A dispersão é, outrossim, representada como um fenômeno macroscópico, mas as causas reais acontecem na interação da microestrutura complexa do meio poroso e o movimento não uniforme do fluido (SUN, 1996; DELLEUR, 1999).

A interação entre a superfície sólida da matriz porosa e o líquido pode assumir várias formas: adsorção de partículas traçadoras na superfície sólida, deposição, solução, troca iônica, etc. Todos esses fenômenos causam alteração na concentração do traçador que flui no líquido (BEAR, 1972). Define-se como um traçador ideal,

aquele que é inerte em relação ao meio líquido e sólido, e, que não afeta as propriedades do fluido analisado. Desse modo, a utilização desse tipo de traçador, em concentrações relativamente baixas, produz resultados satisfatórios para a maioria dos fins práticos (BEAR, 1972).

Experimentos realizados em campos e laboratórios mostraram que a dispersão hidrodinâmica pressupõe que tanto o fluxo de difusão molecular ($\vec{\mathcal{F}}_{dif,i}$) quanto o fluxo de dispersão mecânica ($\vec{\mathcal{F}}_{disp,i}$) (ou simplesmente fluxo dispersivo), levando em conta um componente i , podem ser expressos na forma da lei de Fick (SUN, 1996; BATU, 2006). Assim, o fluxo de dispersão mecânica no meio poroso pode ser calculado da seguinte forma:

$$\vec{\mathcal{F}}_{disp,i} = -\phi \mathbf{D}_{mec} \nabla C_i, \quad (14)$$

onde \mathbf{D}_{mec} é o coeficiente de dispersão mecânica (SUN, 1996). O sinal negativo da equação indica que o soluto se move em direção à zona de menor concentração (BATU, 2006).

2.6.1 Coeficientes de Dispersão Longitudinal (D_L) e Dispersão Transversal (D_T)

Recomenda-se (BEAR, 1972; BEAR; BACHMAT, 1990; SUN, 1996; BEAR; CHENG, 2010) a seguinte expressão para os coeficientes de dispersão mecânica:

$$\mathbf{D}_{mec} = \alpha_{ijmn} \frac{v_m v_n}{|\vec{v}|} f(Pe, r) \text{ com } i, j, m, n = 1, 2, 3, \quad (15)$$

onde α_{ijmn} é um componente de um tensor de quarta ordem, chamado de dispersividade do meio poroso (unidade de medida no SI: m), v_m e v_n ($m, n = 1, 2, 3$) são componentes da velocidade média no meio poroso (BEAR; BACHMAT, 1990; SUN, 1996; BEAR; CHENG, 2010). A função $f(Pe, r)$ é definida como (SUN, 1996):

$$f(Pe, r) = \frac{Pe}{Pe + 4r^2 + 2}, \quad (16)$$

onde r é um parâmetro que descreve a forma dos canais no meio poroso, em que corresponde à relação entre os comprimentos característicos, na direção do fluxo e a normal a ele, dentro de um poro (BEAR; BACHMAT, 1990; SUN, 1996). O número de Péclet, Pe , estabelece a relação entre a taxa de transporte por advecção e por difusão

molecular em um meio poroso, isto é, expressa a condição predominante na dispersão hidrodinâmica, sendo definido por (BEAR, 1972; BEAR; BACHMAT, 1990; SUN, 1996; BEAR; CHENG, 2010):

$$Pe = \frac{\vec{v}d}{D_{dif}}, \quad (17)$$

onde \vec{v} é a velocidade média do fluxo nos poros, d é o comprimento característico (ou canal) do poro e D_{dif} é o coeficiente de difusão da fase fluida (BEAR, 1972; SUN, 1996; YU; JACKSON; HARMON, 1999; BEAR; CHENG, 2010).

O tensor de dispersividade (α) está relacionado com duas constantes: a dispersividade longitudinal α_L e a dispersividade transversal α_T , através da seguinte equação (SUN, 1996):

$$\alpha = \alpha_T \delta_{ij} \delta_{mn} + \frac{\alpha_L - \alpha_T}{2} (\delta_{im} \delta_{jn} + \delta_{in} \delta_{jm}), \quad (18)$$

onde δ_{ij} é o delta de Krönecker, definido como:

$$\delta_{ij} = \begin{cases} 0 & \text{quando } i \neq j; \\ 1 & \text{quando } i = j, \end{cases} \quad (19)$$

e δ_{mn} , δ_{im} , δ_{jn} , δ_{in} e δ_{jm} são calculados da mesma maneira que δ_{ij} .

Para um fluxo tridimensional, o tensor de dispersão mecânica (D_{mec}) pode ser expresso como:

$$D_{mec} = \begin{bmatrix} D_{xx} & D_{xy} & D_{xz} \\ D_{yx} & D_{yy} & D_{yz} \\ D_{zx} & D_{zy} & D_{zz} \end{bmatrix}, \quad (20)$$

os componentes do tensor são definidos pelas seguintes expressões:

$$\begin{aligned} D_{xx} &= \frac{\alpha_T(v_y^2 + v_z^2) + \alpha_L v_x^2}{\phi |\vec{v}|}, & D_{xy} &= D_{yx} = \frac{(\alpha_L - \alpha_T)}{\phi |\vec{v}|} |v_x v_y|, \\ D_{yy} &= \frac{\alpha_T(v_x^2 + v_z^2) + \alpha_L v_y^2}{\phi |\vec{v}|}, & D_{yz} &= D_{zy} = \frac{(\alpha_L - \alpha_T)}{\phi |\vec{v}|} |v_y v_z|, \\ D_{zz} &= \frac{\alpha_T(v_x^2 + v_y^2) + \alpha_L v_z^2}{\phi |\vec{v}|}, & D_{zx} &= D_{xz} = \frac{(\alpha_L - \alpha_T)}{\phi |\vec{v}|} |v_x v_z|. \end{aligned} \quad (21)$$

2.7 DECAIMENTO RADIOATIVO

A radioatividade é resultado da desintegração natural de núclídeos⁵, e o decaimento radioativo é um fenômeno aleatório que, para um número suficiente de núcleos radioativos, pode-se relacionar com a taxa de decaimento (dN/dt) proporcionalmente ao número de núclídeos (N). Dessarte, a radioatividade (A) pode ser dada pela seguinte equação (ZEMEL, 1995):

$$A = \frac{dN}{dt} = \gamma N, \quad (22)$$

em que γ é a constante de decaimento própria de cada isótopo.

Os isótopos radioativos são empregados em solutos traçadores para aumentar sua sensibilidade e selecionar os traçadores químicos que são marcados (ZEMEL, 1995). Assim, os mesmos podem sofrer algum decaimento (decomposição, degradação)⁶ radioativo conforme são transportados no meio poroso (BEAR; 1972).

Experimentos mostram que a concentração de uma substância radioativa decai, proporcionalmente, de acordo com a seguinte lei (BATU, 2006):

$$\Delta C_i = -\gamma_i C_i \Delta t, \quad (23)$$

onde C_i é a concentração do material não degradado, ΔC_i é a concentração que decai em um intervalo de tempo Δt , e γ é a constante de decaimento radioativo (unidade de medida no SI: s^{-1}). Ademais, a constante de decaimento é específica para cada constituinte do soluto radioativo (BATU, 2006).

Aplicando-se o conceito de limite, $\Delta C_i \rightarrow 0$ e $\Delta t \rightarrow 0$, na Eq. (23) e rearranjando os fatores da mesma equação, pode-se escrever a mudança resultante da deterioração de um traçador radioativo, sem adsorção do meio poroso, pela seguinte expressão (BATU, 2006; BEAR, 1972; MARINO, 1974):

$$\frac{\partial C_i}{\partial t} = -\gamma_i C_i, \quad (24)$$

⁵ Núclídeo é uma espécie de átomo que se diferencia por seu número de massa, número atômico, e estado de energia nuclear, desde que sua vida média nesse estado seja duradoura o suficiente para ser observável (BRUIN, 1982).

BRUIN, M. de. Glossary of terms used in nuclear analytical chemistry. **Pure & Appl. Chem.**, Great Britain, v. 54, n. 8, p. 1533-1554, aug. 1982. DOI: 10.1351/pac198254081533.

⁶ Os termos “degradação” e “decomposição” radioativa podem, igualmente, referir-se ao termo “decaimento” radioativo do soluto traçador (BATU, 2006; BEAR, 1972, tradução nossa).

Os traçadores radioativos são altamente detectáveis, no entanto, tais substâncias se deterioram ao passar do tempo, e a constante de decaimento radioativo γ determina qual a vida útil média do traçador (MARINO, 1974; FERRONI, 1996). Por consequência, a escolha do soluto traçador radioativo é determinante para identificar a concentração do mesmo no meio poroso.

2.8 EQUAÇÃO DE ADVECÇÃO-DISPERSÃO-REAÇÃO

O modelo de ADR lida com a evolução temporal de substâncias químicas ou biológicas dentro de um fluido (e.g.: água ou ar) (SUN, 1996; HUNDSDORFER; VERWER, 2003; BATU, 2006). Considerando-se a variação global da concentração de cada componente dada pela combinação da advecção, dispersão hidrodinâmica e a variação de massa devido às fontes, sumidouros ou reações químicas, assumindo-se que a porosidade efetiva é constante e unitária, obtém-se a seguinte expressão para a equação de ADR (SUN, 1996; HUNDSDORFER; VERWER, 2003; BATU, 2006):

$$\frac{\partial C}{\partial t} + \nabla(\vec{v}C) - \nabla(\mathbf{D}_H \nabla C) = Q_c, \quad (25)$$

onde \mathbf{D}_H é o coeficiente de dispersão hidrodinâmica, que pode ser obtido a partir da soma dos coeficientes de dispersão mecânica (\mathbf{D}_{mec}) e difusão molecular (\mathbf{D}_{dif}) pela seguinte expressão:

$$\mathbf{D}_H = \mathbf{D}_{mec} + \mathbf{D}_{dif}, \quad (26)$$

assim o fluxo de dispersão hidrodinâmica é definido como:

$$\vec{\mathcal{F}}_H = -\mathbf{D}_H \nabla C. \quad (27)$$

O primeiro termo do primeiro membro da Eq. (25) representa a variação de concentração do soluto traçador com o tempo ($\partial C / \partial t$); o segundo termo do primeiro membro da Eq. (25) representa o fenômeno da advecção para um soluto traçador com concentração C submetido a uma velocidade média de escoamento \vec{v} ; o terceiro termo do primeiro membro da Eq. (25) representa os efeitos macroscópicos da dispersão hidrodinâmica; e, o primeiro termo do segundo membro da Eq. (25) representa o termo de fonte, sumidouro ou reação química presente no domínio estudado, que de acordo

com Sun (1996) este termo pode fornecer um aumento ou uma diminuição do soluto no sistema.

2.9 CONDIÇÕES DE CONTORNO E INICIAIS

O processo de simulação de um reservatório de petróleo consiste em representar o comportamento de um reservatório real, a partir de um modelo físico ou matemático (PEACEMAN, 1977). O modelo matemático usa equações diferenciais (i.e., equações governantes) as quais podem corresponder a um modelo físico (e.g.: descrever os fluxos de fluidos e o transporte de massa) usando as condições de contorno e iniciais apropriadas (PEACEMAN, 1977; CARVALHO, 2005; CHEN, 2007).

A solução da equação de ADR, Eq. (25), é a distribuição de concentração $C(\vec{x}, t)$, que depende da posição \vec{x} e do tempo t . Para se obter uma solução particular, além de atender a Eq. (25), é necessário considerar as seguintes especificações (SUN, 1996):

- a) o domínio no espaço (Ω) e o intervalo de tempo $(0, T)$ do problema considerado devem ser fornecidos;
- b) devem ser fornecidos: o campo de fluxo no domínio considerado (Ω) e as distribuições de parâmetros relevantes na equação como a velocidade de escoamento (\vec{v}), as dispersividades longitudinal (α_L) e transversal (α_T), a tortuosidade (τ), a porosidade (\emptyset), e assim por diante;
- c) as condições iniciais para o domínio (Ω) e as condições de contorno (Γ) para seu limite devem ser fornecidas.

De acordo com Sun (1996), na simulação de escoamento em meios porosos, existem três tipos de condições de contorno. A primeira condição de contorno se especifica a distribuição de concentração ao longo do contorno e é dada por (SUN, 1996):

$$C(\vec{x}_c, t) = g_1(\vec{x}_c, t) \text{ com } 0 < t < T \text{ e } \vec{x}_c \in \Gamma_D, \quad (28)$$

onde Γ_D é parte do contorno de Ω , \vec{x}_c é um ponto no contorno e $g_1(\vec{x}_c, t)$ é uma função escalar conhecida. Caso o valor da função (g_1) seja uma variável escalar prescrita ao longo do contorno (Γ_D), essa condição é chamada de condição de contorno de Dirichlet (WENDT, 2009; JAYANTI, 2018).

O segundo tipo de condição de contorno associado ao transporte de soluto fornece um fluxo de dispersão conhecido ao longo do contorno (SUN, 1996). Essa condição de contorno, aplica o gradiente normal ao contorno conhecido (Γ_N), denominada condição de contorno de Neumann (WENDT, 2009; JAYANTI, 2018). A expressão para este tipo de condição de contorno pode ser dada por (SUN, 1996):

$$-D_{ij} \frac{\partial c}{\partial x_j} \vec{n}_i \Big|_{\vec{x}_c} = g_2(\vec{x}_c, t) \text{ com } 0 < t < T \text{ e } \vec{x}_c \in \Gamma_N, \quad (29)$$

onde Γ_N é também parte do contorno de Ω , \vec{n}_i ($i = 1, 2, 3$) são componentes do vetor normal unitário de Γ_N e $g_2(\vec{x}_c, t)$ é uma função conhecida.

O terceiro tipo de condição de contorno define o fluxo de transporte de soluto na superfície de contorno. É chamada condição de contorno de Cauchy, e é dada por (SUN, 1996):

$$\left(C v_i - D_{ij} \frac{\partial c}{\partial x_j} \vec{n}_i \right) \Big|_{\vec{x}_c} = g_3(\vec{x}_c, t) \text{ com } 0 < t < T \text{ e } \vec{x}_c \in \Gamma_C, \quad (30)$$

onde Γ_C é parte do contorno de Ω e $g_3(\vec{x}_c, t)$ é uma função conhecida.

Nos reservatórios de petróleo, os poços injetores e produtores são condições de contorno internas ao domínio, onde a vazão do fluido injetado (Q_{inj}) nos poços injetores e a vazão do fluido produzido (Q_{prod}) pelos poços produtores são consideradas condições de contorno de Neumann, de outra forma que a pressão nos poços injetores (p_{inj}) e produtores (p_{prod}) são condições de contorno de Dirichlet (ERTEKIN; ABOU-KASSEM; KING, 2001). De acordo com Ertekin, Abou-Kassem e King (2001), quando a fronteira do reservatório é completamente impermeável, isto é, se o reservatório não tem fluxo no contorno, a entrada e saída de massa se dá apenas pelos poços injetores e produtores, respectivamente.

As condições de contorno associadas à pressão de um reservatório e seus poços injetores e/ou produtores, assim como as vazões fornecidas por estes, podem ser escritas como (CARVALHO, 2005; CONTRERAS, 2017):

$$\vec{p}(\vec{x}_c, t) = g_4(\vec{x}_c, t) \text{ com } 0 < t < T \text{ e } \vec{x}_c \in \Gamma_D, \quad (31)$$

$$\vec{v}(\vec{x}_c, t) \cdot \vec{n} = g_5(\vec{x}_c, t) \text{ com } 0 < t < T \text{ e } \vec{x}_c \in \Gamma_N, \quad (32)$$

$$\vec{p}(\vec{x}_i, t) = p_{inj} \text{ ou } \vec{v}(\vec{x}_i, t) \cdot \vec{n} = Q_{inj} \text{ com } 0 < t < T \text{ e } \vec{x}_i \in \Gamma_{inj}, \quad (33)$$

$$\vec{p}(\vec{x}_i, t) = p_{prod} \text{ ou } \vec{v}(\vec{x}_i, t) \cdot \vec{n} = Q_{prod} \text{ com } 0 < t < T \text{ e } \vec{x}_i \in \Gamma_{prod}, \quad (34)$$

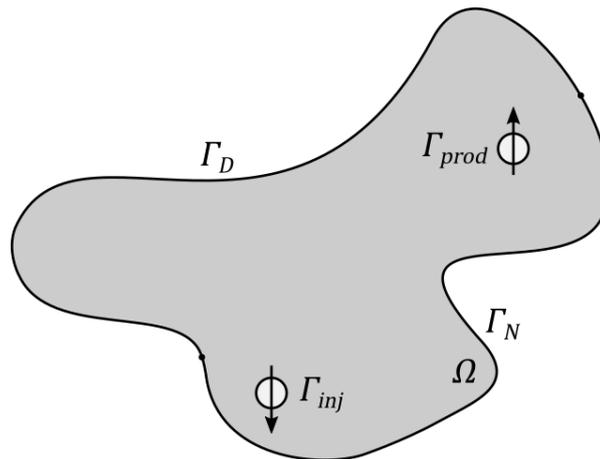
onde $g_4(\vec{x}_c, t)$ é a pressão prescrita no contorno de Dirichlet, $g_5(\vec{x}_c, t)$ é o fluxo prescrito no contorno de Neumann, e \vec{x}_i é um ponto interno ao domínio que pode representar um poço injetor ou produtor.

O domínio (Ω) pode ser representado num formato genérico (ver Figura 3), limitado por seu contorno dado por $\partial\Omega$, que satisfaz a união dos diferentes tipos de condições de contorno (CHIVATA, 2016; CONTRERAS, 2017):

$$\partial\Omega = \Gamma_D \cup \Gamma_N \cup \Gamma_{inj} \cup \Gamma_{prod}, \quad (35)$$

onde Γ_D , Γ_N , Γ_{inj} e Γ_{prod} são, respectivamente, as condições de contorno (CC) de Dirichlet, as CC de Neumann, os poços injetores e os poços produtores.

Figura 3 – Identificação do domínio 2D e condições de contorno de um modelo esquemático de reservatório



Fonte: O Autor (2021).

As condições iniciais, devem ser satisfeitas em todos os pontos do domínio que está sendo considerado no momento específico em que o processo físico se inicia (BEAR, 1972). A condição inicial para o domínio (Ω) é a distribuição de concentração no instante $t = 0$, dada por (SUN, 1996):

$$C(\vec{x}, 0) = C_0(\vec{x}) \text{ com } x \in \Omega, \quad (36)$$

onde $t = 0$ é o tempo inicial arbitrário e $C_0(\vec{x})$ é uma função conhecida na posição \vec{x} .

3 FORMULAÇÃO NUMÉRICA

Os modelos matemáticos, que são utilizados para representar o transporte de soluto traçador num meio poroso, são formados por equações diferenciais parciais com condições de contorno e/ou iniciais apropriadas, contudo as soluções analíticas desses modelos são limitadas para problemas relativamente simples, cujas aplicações não são apropriadas em casos mais complexos (BATU, 2006; CHEN, 2007). Assim, as soluções analíticas acabam sendo aplicadas em um número limitado de problemas, por isso se necessita empregar métodos numéricos para se resolver as equações governantes num domínio discretizado e, desta forma, obter soluções aproximadas dos fenômenos estudados (CHEN, 2007; CHIVATA, 2016). Nesse sentido, os desafios relacionados às representações adequadas de escoamentos multifásicos e multicomponentes em meios porosos, heterogêneos e anisotrópicos, são geralmente sem precedentes, de forma que os métodos numéricos precisam lidar com malhas não estruturadas e serem cada vez mais robustos para, por exemplo, poder simular satisfatoriamente as estruturas geológicas com características geométricas complexas (CARVALHO, 2005).

Toda formulação numérica necessita de um domínio discreto, com número finitos de graus de liberdade, relacionado algebricamente com as equações diferenciais parciais em alguns pontos do domínio, possibilitando-se resolver computacionalmente as equações através de operações aritméticas e lógicas com auxílio de uma linguagem de programação (CHEN; HUAN; MA, 2006; SHARMA, 2017; CHAPRA, 2018). A linguagem MATLAB possui uma estrutura simples e flexível capaz de lidar diretamente com matemática de alto nível, assim é mais eficiente que linguagens compiladas para testar e validar algoritmos de forma coerente e estruturada, gerando-se resultados numéricos e gráficos úteis para uma análise da formulação numérica (CHAPRA, 2018; LIE, 2019; LINDFIELD; PENNY, 2019). Por esses motivos apresentados, o *software* MATLAB (2019) será a linguagem de programação implementada nesta dissertação de mestrado. No Apêndice A, apresenta-se o fluxograma com funcionamento global do algoritmo usado para resolver numericamente a equação de ADR.

3.1 DISCRETIZAÇÃO DO FLUXO PELO MÉTODO MPFA-QL

Como foi mencionado no Estado de Arte, o método MPFA-QL foi anteriormente usado por Contreras, Lyra e Carvalho (2019) para discretizar problemas de difusão em malhas poligonais severamente distorcidas. Este método utiliza um estêncil quase local, fundamentado na decomposição da conormal para aproximar o fluxo na superfície de controle (SC), sendo capaz de produzir soluções exatamente lineares por partes em problemas que tem soluções lineares exatas, além disso, o método é bastante robusto quando se trata meios heterogêneos e altamente anisotrópicos (CONTRERAS; LYRA; CARVALHO, 2019).

3.1.1 Definições Fundamentais da Formulação Numérica MPFA-QL

A formulação numérica do método MPFA-QL, resulta em incógnitas centradas em todos os volumes de controle (VC) analisados, além disso, o método também utiliza uma estratégia de interpolação dos vértices proposta por Gao e Wu (2011).

A discretização pelo método dos volumes finitos no domínio (Ω) é caracterizada pelo tripleto $\mathcal{D} = (\mathcal{M}, \mathcal{E}, \mathcal{O})$ (ver Figura 4) definidos a seguir (CONTRERAS, 2017; CONTRERAS; LYRA; CARVALHO, 2019):

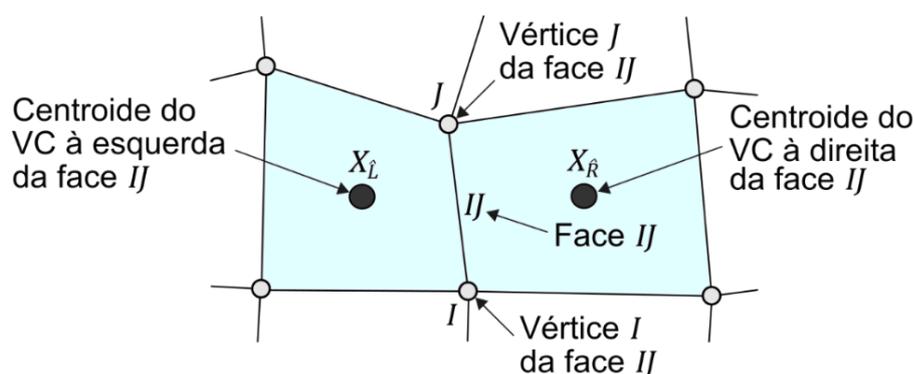
- a) \mathcal{M} é um conjunto de VC determinado de tal forma que $\cup_{\hat{L} \in \mathcal{M}} \hat{L} = \Omega$. Onde cada VC, representado pela letra \hat{L} (*left* para os elementos situados à esquerda e \hat{R} , *right* para os elementos situados à direita do fluxo calculado nas SC), é um polígono que pode ser do tipo *star-shaped*⁷ e está relacionado ao baricentro da célula, $\mathbf{x}_{\hat{L}}$. O volume (ou área em 2D) de cada VC $\hat{L} \in \mathcal{M}$, também podendo ser denotado por $V_{\hat{L}}$ em volumes centrados na célula, tem mensuração do cardinal de \mathcal{M} dado por $|\mathcal{M}| = m$;
- b) $\mathcal{E} = \{IJ\}$ é um conjunto de faces da malha gerada no domínio Ω . Para qualquer $\hat{L} \in \mathcal{M}$, existe um subconjunto $\mathcal{E}_{\hat{L}}$ de \mathcal{E} , de tal modo que $\cup_{IJ \in \mathcal{E}_{\hat{L}}} IJ = \partial \hat{L}$. Considera-se que para todo $IJ \in \mathcal{E}$, que se tem algum $IJ \in \partial \Omega$ ou $IJ \subset \hat{L} \cap \hat{R}$ de $(\hat{L}, \hat{R}) \in \mathcal{M} \times \mathcal{M}$. Os conjuntos de faces externas e internas são

⁷ Se existe um ponto S pertencente a um polígono (ou volume de controle) \hat{L} , tal que todos os pontos deste polígono são visíveis a partir do ponto S , então o polígono \hat{L} pode ser considerado do tipo *star-shape* (CONTRERAS, 2017).

denotados por $\mathcal{E}^{ext} = \mathcal{E} \cap \partial\Omega$ e $\mathcal{E}^{int} = \mathcal{E} \cap \Omega$, respectivamente. Para se determinar o comprimento da face IJ se utiliza a norma Euclidiana, que é um valor real denotada por $\|\vec{IJ}\|$;

- c) $\mathcal{O} = \{x_{\hat{L}}\}_{\hat{L} \in \mathcal{M}}$ é um conjunto de pontos (baricentro de cada VC) do domínio Ω , tal que para todo $\hat{L} \in \mathcal{M}$ se tem algum $x_{\hat{L}} \in \hat{L}$.

Figura 4 – Identificação de alguns componentes presentes na discretização espacial do método dos volumes finitos centrado em volumes de controle



Fonte: O Autor (2021).

3.1.1.1 Polígono do Tipo *Star-Shaped* e *Kernel* de um Polígono

Polígonos podem ser representações apropriadas e precisas de problemas do mundo real, que se permite simplificar o estudo do mesmo, através de algoritmos computacionais gerando um domínio físico discretizado (O'ROURKE, 1998; GEORGE et al., 2019). Em função da sua importância, necessita-se entender adequadamente as definições do tipo de polígono aplicado na simulação numérica. Nesta seção, serão definidos polígonos do tipo *star-shaped*, que é um subconjunto dos polígonos gerais, e que contém os polígonos convexos (PREPARATA; SHAMOS, 1985).

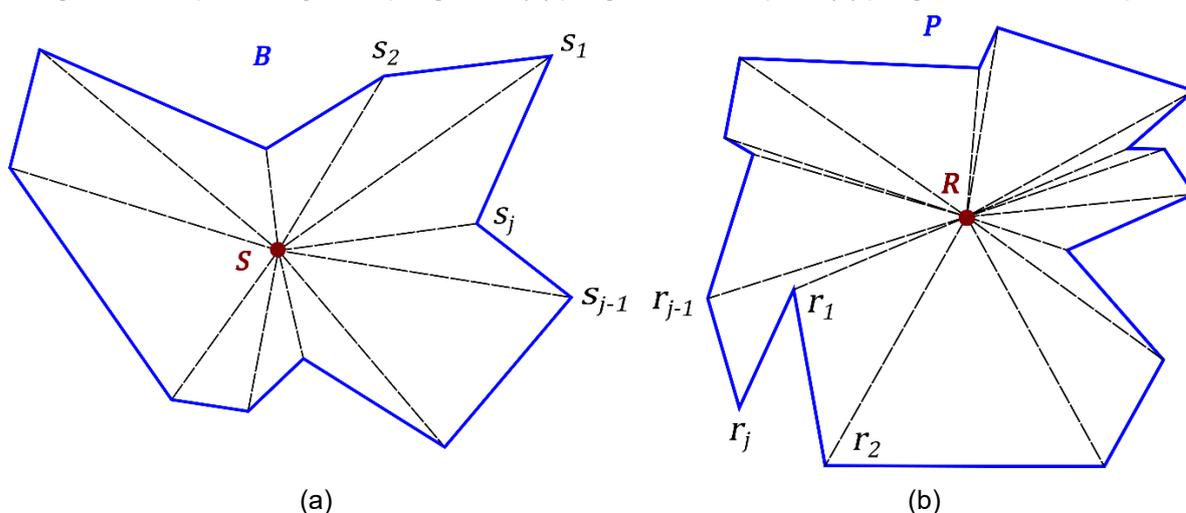
Definição 1. Um polígono B é formado por um conjunto de semiretas, denominadas arestas, que formam um circuito fechado, onde duas arestas consecutivas não podem se cruzar (LEE, 1983; GHOSH, 2007).

Definição 2. B contém um conjunto de pontos que podem ser representados por vetores referenciados num sistema de coordenadas cartesianas, onde as arestas são limitadas por n pontos denominados vértices, dados por $B = (b_1, b_2, \dots, b_n)$ e localizados por (x_i, y_i) , onde $i = 1, 2, \dots, n$ (LEE, 1983; PREPARATA; SHAMOS, 1985).

A partir da definição 2, pode-se identificar N infinitos pontos entre dois vértices quaisquer do polígono B representados por (s_1, s_2, \dots, s_j) e localizados em (x_j, y_j) , onde $j = 1, 2, \dots, N$. Assim, quando $(x_j, y_j) = (x_i, y_i)$, tem-se que o ponto $s_j = b_n$.

De acordo com Preparata e Shamos (1985), um polígono B pode ser classificado como *star-shaped*, se houver um ponto $S \in B$, de modo que $\forall s_j \in B$, qualquer seguimento $\overline{Ss_j}$ é formado de modo que está inteiramente dentro de B (ver Figura 5a). Consequentemente, em um polígono *star-shaped* todo o contorno do polígono pode ser visualizado a partir do ponto S . Por outro lado, um polígono P é classificado como não *star-shaped*, se houver algum ponto $R \in P$, de modo que $\forall r_j \in P$, existe algum seguimento $\overline{Rr_j}$, tal que algum ponto deste segmento não pertence a P (GHOSH, 2007) (ver Figura 5b). Assim, nota-se que em um polígono não *star-shaped* há uma região não captada por este ponto R .

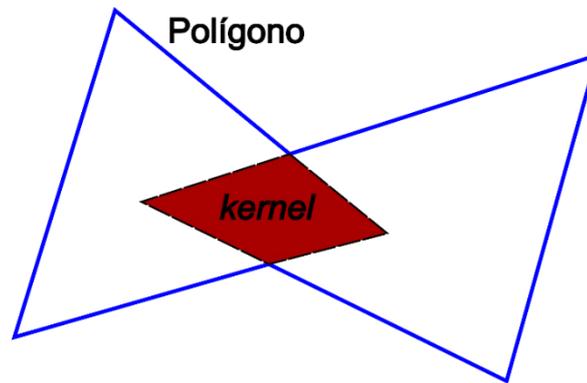
Figura 5 – Representação de polígonos: (a) polígono *star-shaped*; (b) polígono não *star-shaped*



Fonte: O Autor (2021)

Nota: Adaptado de Preparata e Shamos (1985, p. 44) e de Ghosh (2007, p. 40).

Um polígono formado por um conjunto de pontos que têm as mesmas características de S é denominado *kernel* (MATOUŠEK; SHARIR; WELZL, 1996; SOHLER, 1999; GDAWIEC, 2014). Assim, o termo *kernel* define uma entidade geométrica interna a um polígono *star-shaped*, capaz de visualizar todo contorno deste polígono, em qualquer ponto contido no mesmo (ver Figura 6) (GHOSH, 2007).

Figura 6 – Kernel de um polígono *star-shaped*

Fonte: O Autor (2021)

Nota: Adaptado de Gdawiec (2014, p. 1450009-3).

3.1.2 Formulação Numérica da Equação de Advecção-Dispersão-Reação

Com base na Eq. (25), tem-se a seguinte expressão:

$$\frac{\partial C}{\partial t} = \nabla(\mathbf{D}_H \nabla C) - \nabla(\vec{v}C) + Q_c. \quad (37)$$

Integrando-se a Eq. (37) sobre todo o domínio (Ω), obtém-se:

$$\int_{\Omega} \frac{\partial C}{\partial t} d\Omega = \int_{\Omega} \nabla(\mathbf{D}_H \nabla C) d\Omega - \int_{\Omega} \nabla(\vec{v}C) d\Omega + \int_{\Omega} Q_c d\Omega. \quad (38)$$

Decompondo-se o domínio contínuo (Ω), consegue-se dividir o mesmo em um conjunto de VC (definido anteriormente por \mathcal{M} , ver seção 3.1.1), assim as integrais anteriores podem ser realizadas dentro de cada VC \hat{L} e a equação anterior pode ser reescrita como (CONTRERAS; LYRA; CARVALHO, 2019):

$$\sum_{\hat{L} \in \mathcal{M}} \int_{\hat{L}} \frac{\partial C}{\partial t} d\hat{L} = \sum_{\hat{L} \in \mathcal{M}} \int_{\hat{L}} \nabla(\mathbf{D}_H \nabla C) d\hat{L} - \sum_{\hat{L} \in \mathcal{M}} \int_{\hat{L}} \nabla(\vec{v}C) d\hat{L} + \sum_{\hat{L} \in \mathcal{M}} \int_{\hat{L}} Q_c d\hat{L}. \quad (39)$$

Aplicando o teorema do divergente⁸ (ou de Gauss) nas integrais do primeiro e do segundo termo no lado direito da Eq. (39), obtém-se as seguintes expressões:

⁸ O teorema do divergente pode ser aplicado em todo o domínio ou pode ser dado pela união finita de regiões sólidas (volumes de controle), para demonstração do cálculo do teorema se recomenda consultar Stewart (2013). STEWART, J. **Cálculo**. 7. ed. v. 2. São Paulo: Cengage Learning, 2013. 1044 p. ISBN-13: 978-0-538-49887-6.

$$\int_{\hat{L}} \nabla(\mathbf{D}_H \nabla C) d\hat{L} = \int_{\partial\hat{L}} \mathbf{D}_H \nabla C \cdot \vec{n} d\partial\hat{L}, \quad (40)$$

e

$$\int_{\hat{L}} \nabla(\vec{v}C) d\hat{L} = \int_{\partial\hat{L}} \vec{v}C \cdot \vec{n} d\partial\hat{L}. \quad (41)$$

Substituindo as Eqs. (40) e (41) na Eq. (39), consegue-se reescrever:

$$\sum_{\hat{L} \in \mathcal{M}} \int_{\hat{L}} \frac{\partial C}{\partial t} d\hat{L} = \sum_{\hat{L} \in \mathcal{M}} \int_{\partial\hat{L}} \mathbf{D}_H \nabla C \cdot \vec{n} d\partial\hat{L} - \sum_{\hat{L} \in \mathcal{M}} \int_{\partial\hat{L}} \vec{v}C \cdot \vec{n} d\partial\hat{L} + \sum_{\hat{L} \in \mathcal{M}} \int_{\hat{L}} Q_c d\hat{L}, \quad (42)$$

onde \vec{n} é o vetor normal unitário da SC ($\partial\hat{L}$), orientado positivamente (para fora), $d\hat{L}$ é o volume infinitesimal das integrais no VC e $d\partial\hat{L}$ é a área infinitesimal da integral na SC. Portanto, quando se aplica o teorema do divergente na Eq. (39), os termos das integrais aplicados em todos os VC \hat{L} , agora são transformados em integrais nas SC $\partial\hat{L}$ (Eq. (42)).

Para conseguir uma solução satisfatória dos termos no lado direito da Eq. (42), é necessário utilizar alguma formulação numérica para aproximar os fluxos nas SC (CHIVATA, 2016). Outrossim, os fluxos poderão ser calculados utilizando-se o teorema do divergente nas SC ou teorema do valor médio para as integrais aplicadas em cada VC (CONTRERAS, 2017; CONTRERAS; LYRA; CARVALHO, 2019). Com finalidade de interpretar a aplicação do teorema do valor médio dos fluxos descritos para cada VC, em integrais de várias variáveis, considera-se $\mathcal{F}: \hat{L} \rightarrow \mathbb{R}$ uma função contínua de um fluxo genérico em $\vec{x} \in \hat{L}$, onde $\hat{L} \subset \Omega \subset \mathbb{R}^N$, para $N \geq 1$, e se assume que \hat{L} é um conjunto limitado, aberto, convexo e conectado (DENNY, 2014). Assim, \exists um ponto $\vec{c} \in \hat{L}$ tal que $\mathcal{F}(\vec{c})$ é o fluxo médio neste VC (DENNY, 2014).

Se existe um conjunto que não é aberto $A \subset \hat{L}$ tal que $\mathcal{F}(\vec{x}) = \mathcal{F}(\vec{c})$ para todo $\vec{x} \in A$, então pode-se assumir que $\mathcal{F}(\vec{c})$ não é valor mínimo ou máximo absoluto de \mathcal{F} em \hat{L} , i.e., $\mathcal{F}(\vec{c})$ é um valor intermediário do fluxo neste conjunto considerado, logo pode existir um conjunto $S \subset \hat{L}$, tal que (DENNY, 2014):

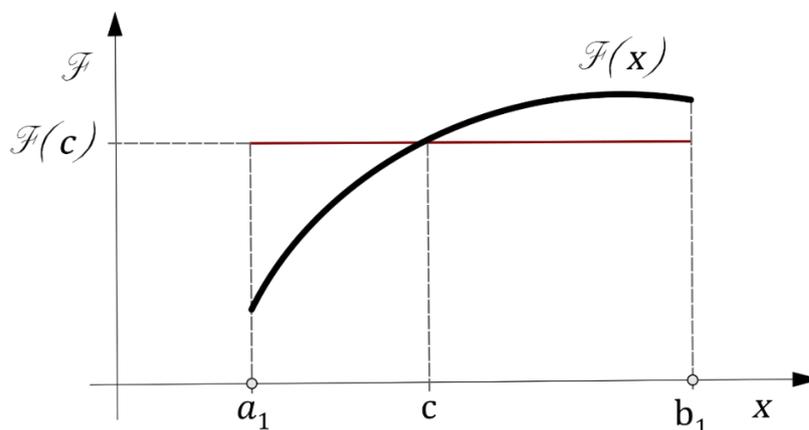
$$\mathcal{F}(\vec{c}) = \frac{1}{\|S\|} \int_S \mathcal{F}(\vec{x}) d\vec{x}. \quad (43)$$

Denny (2014) demonstra o teorema do valor médio em dois casos do domínio \mathbb{R}^N : quando a dimensão espacial é $N = 1$ e quando $N \geq 2$. No primeiro caso ($N = 1$), o fluxo médio será definido num intervalo $[a_1, b_1] \in \hat{L}$ tal que $a_1 < c < b_1$ e conforme descrito em Guidorizzi (2001), pelo teorema do valor intermediário, existirá pelo menos um ponto $c \in [a_1, b_1]$ tal que:

$$\mathcal{F}(c) = \frac{1}{\|b_1 - a_1\|} \int_{a_1}^{b_1} \mathcal{F}(x) dx, \quad (44)$$

onde $\|b_1 - a_1\|$ representa o intervalo considerado, ou seja, pode ser o valor de comprimento da face calculada pela norma euclidiana. A fim de representar geometricamente o teorema do valor médio para uma dimensão (\mathbb{R}) apresenta-se, no Gráfico 1, um esboço do fluxo médio adaptado de Guidorizzi (2001).

Gráfico 1 – Interpretação geométrica do teorema do valor médio para integral



Fonte: O Autor (2021)

Nota: Adaptado de Guidorizzi (2001, p. 18).

Quando $N \geq 2$, então existe um conjunto $S \subset \hat{L}$, onde se tem um ponto dado por $\vec{c} = (c_1, c_2, \dots, c_N) \in S$, onde $S = [a_1, b_1] \times [a_2, b_2] \times \dots \times [a_N, b_N]$ tal que (DENNY, 2014):

$$\mathcal{F}(\vec{c}) = \frac{1}{\prod_{j=1}^N (b_j - a_j)} \int_{a_N}^{b_N} \int_{a_{N-1}}^{b_{N-1}} \int_{a_{N-2}}^{b_{N-2}} \dots \int_{a_1}^{b_1} f(x_1, x_2, \dots, x_N) dx_1 dx_2 \dots dx_N. \quad (45)$$

Desse modo, o teorema do valor médio pode ser aplicado em um domínio \mathbb{R}^N , sem restrições de dimensões. Em muitos casos práticos, é utilizado o domínio até o \mathbb{R}^3 ($1 \leq N \leq 3$) e, nesta dissertação de mestrado, estará restrito aplicar o teorema até o \mathbb{R}^2 ($1 \leq N \leq 2$), pois serão conforme os casos analisados na literatura, para poder

validar a formulação numérica proposta neste trabalho, todavia, é possível a mesma ser expandida para o domínio \mathbb{R}^3 , em trabalhos futuros.

A integral do termo de fonte (ou sumidouro) presente na Eq. (42) pode ser expressa adequadamente usando o teorema do valor médio no volume de controle \hat{L} , assim o valor do fluxo desse termo é representado em um ponto com valor médio para cada $x_{\hat{L}} \in \hat{L}$ (KOREN, 1993; CONTRERAS, 2017) da seguinte forma:

$$\int_{\hat{L}} Q_c d\hat{L} = \bar{Q}_{c\hat{L}} V_{\hat{L}}, \quad (46)$$

onde $\bar{Q}_{c\hat{L}}$ é o valor médio do termo de fonte (ou sumidouro) no volume de controle $V_{\hat{L}}$. Assim, atribuindo-se o termo de fonte igual ao termo reativo da equação de ADR, substituindo-se a Eq. (24), obtém-se:

$$\bar{Q}_{c\hat{L}} V_{\hat{L}} = -\bar{\gamma}_{\hat{L}} \bar{C}_{\hat{L}} V_{\hat{L}} = -\gamma_{\hat{L}} C_{\hat{L}} V_{\hat{L}}, \quad (47)$$

em que $\bar{\gamma}_{\hat{L}}$, $\bar{C}_{\hat{L}}$ são, respectivamente, os valores médios da constante de decaimento radioativo e da concentração no volume de controle $V_{\hat{L}}$.

De acordo com Chivata (2016), a soma do fluxo de dispersão hidrodinâmica ($\vec{\mathcal{F}}_H = -\mathbf{D}_H \nabla C$) com o fluxo advectivo ($\vec{\mathcal{F}}_A = \vec{v}C$) fornece o fluxo total ($\vec{\mathcal{F}}_T$) e pode ser escrito, para uma SC $\partial\hat{L}$, da seguinte forma:

$$\int_{\partial\hat{L}} \vec{\mathcal{F}}_T \cdot \vec{n} d\partial\hat{L} = \int_{\partial\hat{L}} (\vec{\mathcal{F}}_H + \vec{\mathcal{F}}_A) \cdot \vec{n} d\partial\hat{L}. \quad (48)$$

Realizando-se um balanço das propriedades em cada VC \hat{L} , obtém-se o fluxo para cada face $IJ \in \mathcal{E}_{\hat{L}}$, sendo escrito do seguinte modo:

$$\int_{\partial\hat{L}} \vec{\mathcal{F}}_T \cdot \vec{n} d\partial\hat{L} = \sum_{IJ \in \mathcal{E}_{\hat{L}}} \int_{IJ} \vec{\mathcal{F}}_T \cdot \vec{n}_{IJ} ds, \quad (49)$$

onde \vec{n}_{IJ} é o vetor normal unitário da face IJ , orientado positivamente, e ds representa a área infinitesimal da integral na face IJ . Sendo assim, pelo teorema do valor médio, a integral realizada na face IJ , torna-se:

$$\int_{IJ} \vec{\mathcal{F}}_T \cdot \vec{n} ds = \|IJ\| \cdot \vec{\mathcal{F}}_{T_{IJ}} \cdot \frac{\vec{N}_{IJ}}{\|IJ\|} = \vec{\mathcal{F}}_{T_{IJ}} \cdot \vec{N}_{IJ}, \quad (50)$$

onde \vec{N}_{IJ} é o vetor área normal à face IJ . Logo, os fluxos da Eq. (48) podem ser reescritos da seguinte forma:

$$\int_{\partial\hat{L}} \vec{\mathcal{F}}_T \cdot \vec{n} d\hat{L} \cong \sum_{IJ \in \mathcal{E}_{\hat{L}}} \vec{\mathcal{F}}_{T_{IJ}} \cdot \vec{N}_{IJ} = \sum_{IJ \in \mathcal{E}_{\hat{L}}} \left(\vec{\mathcal{F}}_{H_{IJ}} \cdot \vec{N}_{IJ} + \vec{\mathcal{F}}_{A_{IJ}} \cdot \vec{N}_{IJ} \right). \quad (51)$$

Os fluxos numéricos presentes na Eq. (51) podem ser aproximados por diversos métodos numéricos, todavia, Chivata (2016) utilizou anteriormente o método MPFA-D para este tipo de problema, de outra forma, a proposta do presente trabalho é empregar um método alternativo, o MPFA-QL, para se obter os fluxos numéricos com as características associadas a este método (descrito nas próximas seções). Dessarte, a velocidade de escoamento do fluido (velocidade de Darcy), e o fluxo de dispersão hidrodinâmica serão discretizados usando o MPFA-QL (CONTRERAS; LYRA; CARVALHO, 2019). O fluxo advectivo será discretizado utilizando o FOU (*First Order Upwind*), que é um método de aproximação de primeira ordem, e o MUSCL (*Monotonic Upstream-Centered Scheme for Conservation Laws*), que é um método com aproximação de mais alta ordem.

3.1.3 Formulação Numérica do Fluxo Hidrodinâmico pelo MPFA-QL

O fluxo de dispersão hidrodinâmica (ou simplesmente fluxo hidrodinâmico), $\vec{\mathcal{F}}_H$, dado pela Eq. (27), pode ser reescrito pelo operador de divergência como (GAO; WU, 2011):

$$\vec{\nabla} \vec{\mathcal{F}}_H = \nabla(-\mathbf{D}_H \nabla C), \quad (52)$$

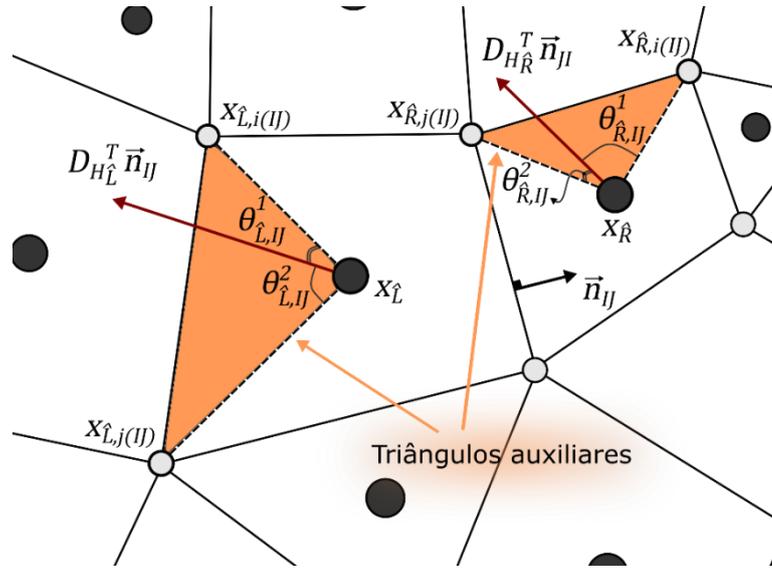
onde C é uma função que representa a concentração do soluto traçador e \mathbf{D}_H é uma matriz tensorial do coeficiente de dispersão hidrodinâmica (ver seção 2.6.1).

A partir das Eqs. (27) e (40), apenas considerando o fenômeno do fluxo hidrodinâmico, $\vec{\mathcal{F}}_H$, unilateral reproduzido pelo soluto de concentração C , através da aresta IJ no VC \hat{L} , o mesmo poderá ser expresso da seguinte forma (CONTRERAS; LYRA; CARVALHO, 2019):

$$\int_{IJ} \vec{\mathcal{F}}_H \cdot \vec{n}_{IJ} ds = - \int_{IJ} \mathbf{D}_{H\hat{L}} \nabla C \cdot \vec{n}_{IJ} ds = - \int_{IJ} \nabla C \cdot \mathbf{D}_{H\hat{L}}^T \vec{n}_{IJ} ds \text{ para cada } IJ \in \mathcal{E}_{\hat{L}}, \quad (53)$$

onde o tensor de dispersão hidrodinâmico transposto do volume de controle \hat{L} é representado por $\mathbf{D}_{H\hat{L}}^T$, e será calculado a seguir. O gradiente ∇C será aproximado a partir da expansão da série de Taylor, usando os triângulos auxiliares mostrados na Figura 7 (CONTRERAS; LYRA; CARVALHO, 2019; YUAN; SHENG, 2008). Nota-se que esta formulação numérica gera um método de aproximação de primeira ordem, com erro de segunda ordem, gerado pelo truncamento da série de Taylor.

Figura 7 – Parâmetros físicos-geométricos e triângulos auxiliares (regiões hachuradas) – do método dos volumes finitos MPFA-QL – utilizados para obter o fluxo hidrodinâmico no meio poroso



Fonte: O Autor (2021).

Considera-se o triângulo $\Delta x_L x_{L,i(IJ)} x_{L,j(IJ)}$ da Figura 7 para delimitar a conormal $\mathbf{D}_{H\hat{L}}^T \vec{n}_{IJ}$. Esta poderá ser escrita como uma combinação convexa linear de $\overline{x_L x_{L,i(IJ)}}$ e $\overline{x_L x_{L,j(IJ)}}$, desde que o volume de controle \hat{L} seja do tipo *star-shaped* (ver definição da seção 3.1.1.1), da seguinte forma (CONTRERAS; LYRA; CARVALHO, 2019):

$$\mathbf{D}_{H\hat{L}}^T \vec{n}_{IJ} = \alpha_{L,i(IJ)} \overline{x_L x_{L,i(IJ)}} + \alpha_{L,j(IJ)} \overline{x_L x_{L,j(IJ)}}, \quad (54)$$

onde

$$\alpha_{L,i(IJ)} > 0, \alpha_{L,j(IJ)} > 0 \text{ e } \alpha_{L,i(IJ)} + \alpha_{L,j(IJ)} > 0. \quad (55)$$

Além disso, tem-se:

$$\alpha_{L,j(IJ)} = \frac{|\mathbf{D}_{H\hat{L}}^T \vec{n}_{IJ}| \text{sen}(\theta_{L,IJ}^1)}{|\overline{x_L x_{L,j(IJ)}}| \text{sen}(\theta_{L,IJ}^1 + \theta_{L,IJ}^2)}, \quad (56)$$

onde $|\alpha_{\hat{L},j(IJ)}| = \alpha_{\hat{L},j(IJ)} > 0$, a partir dos ângulos que satisfazem as seguintes condições $0 < \theta_{\hat{L},IJ}^1, \theta_{\hat{L},IJ}^2 < \pi$ e $\theta_{\hat{L},IJ}^1 + \theta_{\hat{L},IJ}^2 < \pi$. De forma análoga, o parâmetro $\alpha_{\hat{L},i(IJ)}$ é dado por:

$$\alpha_{\hat{L},i(IJ)} = \frac{|\mathbf{D}_{H\hat{L}}^T \vec{n}_{IJ}| \text{sen}(\theta_{\hat{L},IJ}^2)}{|\vec{x}_{\hat{L}} \vec{x}_{\hat{L},i(IJ)}| \text{sen}(\theta_{\hat{L},IJ}^1 + \theta_{\hat{L},IJ}^2)}, \quad (57)$$

onde $|\alpha_{\hat{L},i(IJ)}| = \alpha_{\hat{L},i(IJ)} > 0$.

Dessa forma, sabe-se que o método adotado neste trabalho não é estritamente monótono, pois os coeficientes $\alpha_{\hat{L},i(IJ)}$ e $\alpha_{\hat{L},j(IJ)}$ existem e sua soma é positiva, i.e., $\alpha_{\hat{L},i(IJ)} + \alpha_{\hat{L},j(IJ)} > 0$, no entanto, essa característica não é suficiente para garantir as propriedades de monotonicidade ou de preservação de extremos do método numérico (LIPNIKOV et al., 2007; GAO; WU, 2013).

Inserindo a Eq. (54) na Eq. (53), obtém-se a seguinte expressão para a face IJ no volume de controle \hat{L} :

$$\int_{IJ} \vec{\mathcal{F}}_H \cdot \vec{n}_{IJ} ds = - \int_{IJ} (\alpha_{\hat{L},i(IJ)} \nabla C \cdot \vec{x}_{\hat{L}} \vec{x}_{\hat{L},i(IJ)} + \alpha_{\hat{L},j(IJ)} \nabla C \cdot \vec{x}_{\hat{L}} \vec{x}_{\hat{L},j(IJ)}) ds. \quad (58)$$

O fluxo unilateral na aresta IJ do volume de controle \hat{L} (ver Figura 8) é obtido usando um método de diferenças finitas local (YUAN; SHENG, 2008; CONTRERAS; LYRA; CARVALHO, 2019), assim a derivada parcial da concentração ∇C , ao longo das direções $\vec{x}_{\hat{L}} \vec{x}_{\hat{L},i(IJ)}$ e $\vec{x}_{\hat{L}} \vec{x}_{\hat{L},j(IJ)}$, é calculado da seguinte forma (CONTRERAS; LYRA; CARVALHO, 2019):

$$\vec{\mathcal{F}}_{HIJ}^{\hat{L}} \cdot \vec{N}_{IJ} = -\|\vec{IJ}\| \cdot [\alpha_{\hat{L},i(IJ)}(C_{\hat{L},i(IJ)} - C_{\hat{L}}) + \alpha_{\hat{L},j(IJ)}(C_{\hat{L},j(IJ)} - C_{\hat{L}})], \quad (59)$$

onde $\vec{\mathcal{F}}_{HIJ}^{\hat{L}}$ representa o fluxo numérico hidrodinâmico, \vec{N}_{IJ} é o vetor área normal da face IJ .

A Eq. (59) pode ser escrita na forma compacta, como:

$$\vec{\mathcal{F}}_{HIJ}^{\hat{L}} \cdot \vec{N}_{IJ} = \|\vec{IJ}\| \left(\psi_{\hat{L},IJ} C_{\hat{L}} - \sum_{\gamma=i,j} \alpha_{\hat{L},\gamma(IJ)} C_{\hat{L},\gamma(IJ)} \right), \quad (60)$$

onde $\psi_{\hat{L},IJ} = \alpha_{\hat{L},i(IJ)} + \alpha_{\hat{L},j(IJ)}$ e $\psi_{\hat{L},IJ} > 0$.

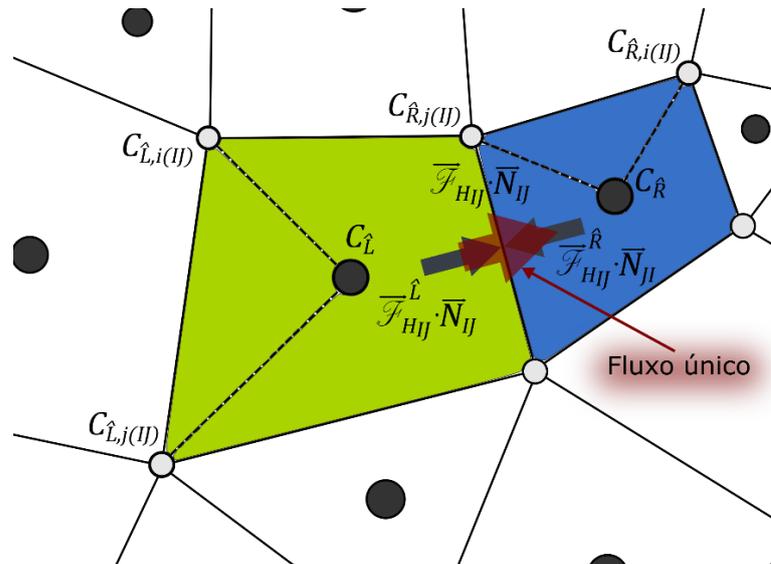
De forma análoga, o fluxo unilateral calculado para o volume de controle \hat{R} é expresso como:

$$\vec{\mathcal{F}}_{HIJ}^{\hat{R}} \cdot \vec{N}_{JI} = \|\vec{IJ}\| \left(\psi_{\hat{R},IJ} C_{\hat{R}} - \sum_{\gamma=i,j} \alpha_{\hat{R},\gamma(IJ)} C_{\hat{R},\gamma(IJ)} \right), \quad (61)$$

onde $\psi_{\hat{R},IJ} = \alpha_{\hat{R},i(IJ)} + \alpha_{\hat{R},j(IJ)}$ e $\psi_{\hat{R},IJ} > 0$.

Nas Eqs. (60) e (61), identifica-se que os fluxos unilaterais também dependem das concentrações dos nós de cada VC, indicadas por $C_{\hat{L},\gamma(IJ)}$ e $C_{\hat{R},\gamma(IJ)}$, as quais não pertencem necessariamente às faces IJ avaliadas (ver Figura 8). Sendo assim, os valores das concentrações nos nós são obtidos por meio de uma combinação linear ponderada de concentrações centradas dos VC circundantes, conforme o método proposto por Gao e Wu (2011), conseqüentemente, a formulação apresentada se torna completamente centrada no VC (ver detalhes na seção 3.1.3.3).

Figura 8 – Representação dos fluxos unilaterais, do fluxo único e das concentrações auxiliares



Fonte: O Autor (2021).

3.1.3.1 Construção do Fluxo Único para o Fluxo Hidrodinâmico

Como mencionado em Contreras, Lyra e Carvalho (2019), qualquer fluxo numérico deve satisfazer a equação de conservação local, que para uma face geral IJ é dada por:

$$\vec{\mathcal{F}}_{HIJ} \cdot \vec{N}_{IJ} + \vec{\mathcal{F}}_{HJI} \cdot \vec{N}_{JI} = 0, \quad (62)$$

onde o produto definido por $\vec{\mathcal{F}}_{HIJ} \cdot \vec{N}_{IJ}$ representa o fluxo hidrodinâmico numérico.

Com a finalidade de construir um método conservativo, serão usadas as Eqs. (60) e (61) para determinar o fluxo único na face IJ , adjacente aos volumes de controle de \hat{L} e \hat{R} . Portanto, considerando a continuidade do fluxo na face IJ dada na Eq. (62), obtém-se a seguinte expressão:

$$\vec{\mathcal{F}}_{HIJ} \cdot \vec{N}_{IJ} = \vec{\mathcal{F}}_{HIJ}^{\hat{L}} \cdot \vec{N}_{IJ} = -\vec{\mathcal{F}}_{HIJ}^{\hat{R}} \cdot \vec{N}_{JI}. \quad (63)$$

De outra forma, a partir das Eqs. (60) e (61), e substituindo-as na Eq. (63), obtém-se as seguintes expressões para o fluxo único na face IJ :

$$\frac{1}{\psi_{\hat{L},IJ}} \vec{\mathcal{F}}_{HIJ} \cdot \vec{N}_{IJ} = \|\vec{IJ}\| \left(C_{\hat{L}} - \frac{1}{\psi_{\hat{L},IJ}} \sum_{\gamma=\hat{i},\hat{j}} \alpha_{\hat{L},\gamma(IJ)} C_{\hat{L},\gamma(IJ)} \right), \quad (64)$$

e

$$\frac{1}{\psi_{\hat{R},IJ}} \vec{\mathcal{F}}_{HJI} \cdot \vec{N}_{JI} = -\|\vec{IJ}\| \left(C_{\hat{R}} - \frac{1}{\psi_{\hat{R},IJ}} \sum_{\gamma=\hat{i},\hat{j}} \alpha_{\hat{R},\gamma(IJ)} C_{\hat{R},\gamma(IJ)} \right). \quad (65)$$

Adicionando-se as Eqs. (64) e (65), com algumas manipulações algébricas, pode-se obter o fluxo único na face IJ para o fluxo hidrodinâmico discreto da seguinte maneira:

$$\vec{\mathcal{F}}_{HIJ} \cdot \vec{N}_{IJ} = w_{\hat{L},IJ} \vec{\mathcal{F}}_{HIJ}^{\hat{L}} \cdot \vec{N}_{IJ} - w_{\hat{R},IJ} \vec{\mathcal{F}}_{HJI}^{\hat{R}} \cdot \vec{N}_{JI}, \quad (66)$$

onde os dois pesos positivos, $w_{\hat{L},IJ}$ e $w_{\hat{R},IJ}$, são descritos a seguir:

$$w_{\hat{L},IJ} = \frac{\psi_{\hat{R},IJ}}{\psi_{\hat{L},IJ} + \psi_{\hat{R},IJ}} \text{ e } w_{\hat{R},IJ} = \frac{\psi_{\hat{L},IJ}}{\psi_{\hat{L},IJ} + \psi_{\hat{R},IJ}}. \quad (67)$$

3.1.3.2 Tratamento do Fluxo Hidrodinâmico nos Contornos da Malha

As condições de contorno de Dirichlet prescrevem valores escalares para as faces IJ de todo o contorno do domínio $\Gamma_D \subset \mathcal{C}_{\hat{L}} \cap \mathcal{C}^{ext}$, considerando-se as Eqs. (60) e (63), obtém-se (CONTRERAS; LYRA; CARVALHO, 2019):

$$\vec{\mathcal{F}}_{HIJ} \cdot \vec{N}_{IJ} = \vec{\mathcal{F}}_{HIJ}^{\hat{L}} \cdot \vec{N}_{IJ} = \|\vec{IJ}\| \left(\psi_{\hat{L},IJ} C_{\hat{L}} - \sum_{\gamma=I,J} \alpha_{\hat{L},\gamma(IJ)} C_{\hat{L},\gamma(IJ)} \right), \quad (68)$$

onde em $C_{\hat{L},\gamma(IJ)}$ são atribuídos os valores de concentração prescrita, de forma que nos pontos de contorno, as concentrações podem ser substituídas, tal que $C_{\hat{L},\gamma(IJ)} = \bar{C}_{\hat{L},\gamma(IJ)}$, onde $\bar{C}_{\hat{L},\gamma(IJ)}$ são os valores prescritos da concentração.

As condições de contorno de Neumann atribuem valores de fluxos prescritos para as faces de todo o contorno do domínio $\Gamma_N \subset \mathcal{E}_{\hat{L}} \cap \mathcal{E}^{ext}$ e, novamente, considerando as Eqs. (29) e (60), obtém-se (CONTRERAS; LYRA; CARVALHO, 2019):

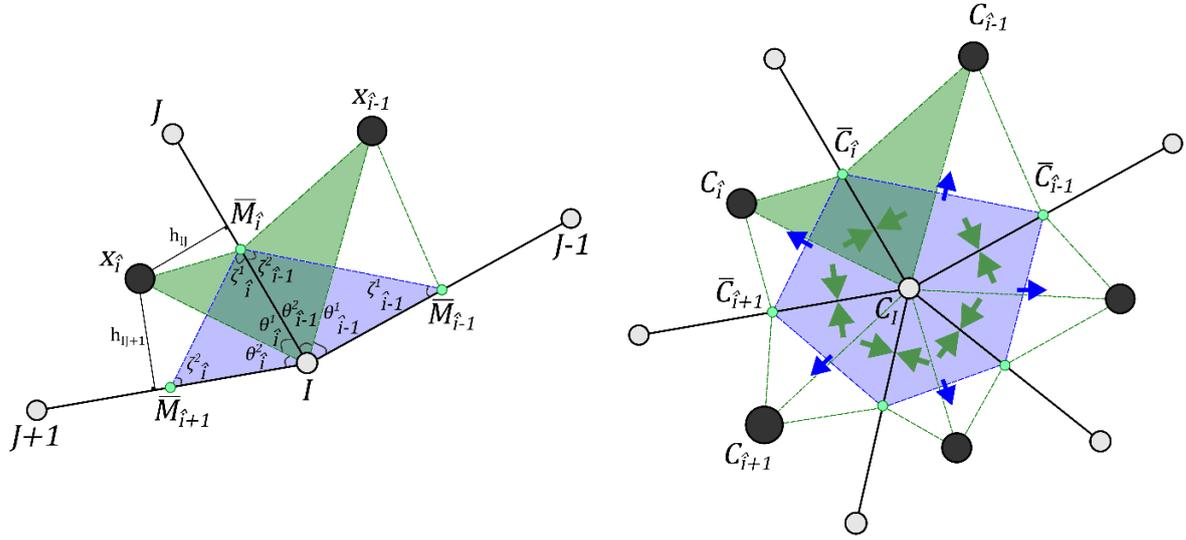
$$\vec{\mathcal{F}}_{HIJ} \cdot \vec{N}_{IJ} = -\bar{g}_{N,IJ} \|\vec{IJ}\|, \quad (69)$$

em que o fluxo normal em Γ_N é dado pelo valor médio $\bar{g}_{N,IJ}$.

3.1.3.3 Cálculo das Incógnitas nos nós

As incógnitas dos vértices de cada VC \hat{L} podem ser expressas como uma combinação linear dos pesos das incógnitas que foram calculadas no centro de cada VC adjacente aos vértices, assim o MPFA-QL se torna um método que é do tipo centrado totalmente nas células (CONTRERAS; LYRA; CARVALHO, 2019). Empregando uma ponderação explícita que preserva a linearidade (LPEW – *Linearity-Preserving Explicit Weighted*), os pesos explícitos da Eq. (70) são derivados utilizando a equação da continuidade através dos volumes auxiliares construídos em volta de cada vértice da malha, conectando os pontos médios das arestas adjacentes da malha (ver Figura 9).

Figura 9 – À esquerda: entidades geométricas para construir a interpolação LPEW; à direita: representação da primeira etapa (setas verdes) e da segunda etapa (setas azuis) para calcular os fluxos no meio das superfícies de controle $I\bar{M}_i$ e nas SC $\bar{M}_i\bar{M}_{i+1}$



Fonte: O Autor (2021).

Nesse caso, a incógnita da concentração no vértice I pode ser expressa como (CONTRERAS; LYRA; CARVALHO, 2019):

$$C_I = \sum_{\hat{i}=1}^{nvc} w_{\hat{i}} C_{\hat{i}}, \quad (70)$$

onde nvc é o número de VC que circundam o nó I , $w_{\hat{i}}$ representa o peso atribuído à cada VC \hat{i} e pode ser expresso como:

$$w_{\hat{i}} = \bar{\omega}_{\hat{i}} / \sum_{\hat{i}=1}^{nvc} \bar{\omega}_{\hat{i}}, \quad (71)$$

onde $\bar{\omega}_{\hat{i}}$ são coeficientes determinados em duas etapas. A primeira etapa é construir o fluxo no meio da superfície de controle $I\bar{M}_i$ utilizando o triângulo $\Delta I\bar{M}_i x_{\hat{i}}$ (ver Figura 9), logo:

$$\vec{\mathcal{F}}_{I\bar{M}_i}^{\hat{i}} \cdot \vec{N}_{I\bar{M}_i} = \mathbf{D}_{H_{\hat{i},1}}^{(n)} \eta_{\hat{i},1} (C_{\hat{i}} - C_I) - \left(\mathbf{D}_{H_{\hat{i},1}}^{(t)} + \cot(\theta_{\hat{i}}^1) \mathbf{D}_{H_{\hat{i},1}}^{(n)} \right) (\bar{C}_{\hat{i}} - C_I), \quad (72)$$

e o fluxo na face $\bar{M}_i I$, utilizando o triângulo $\Delta x_{\hat{i}-1} \bar{M}_i I$, é dado por:

$$\vec{\mathcal{F}}_{\bar{M}_i I}^{\hat{i}-1} \cdot \vec{N}_{\bar{M}_i I} = \mathbf{D}_{H_{\hat{i}-1,2}}^{(n)} \eta_{\hat{i}-1,2} (C_{\hat{i}-1} - C_I) + \left(\mathbf{D}_{H_{\hat{i}-1,2}}^{(t)} - \cot(\theta_{\hat{i}-1}^2) \mathbf{D}_{H_{\hat{i}-1,2}}^{(n)} \right) (\bar{C}_{\hat{i}} - C_I). \quad (73)$$

Por efeito da continuidade do fluxo na região $I\bar{M}_i$, obtém-se a seguinte expressão:

$$\bar{C}_i - C_I = \frac{\mathbf{D}_{H_{i,1}}^{(n)} \eta_{i,1} (C_i - C_I) + \mathbf{D}_{H_{i-1,2}}^{(n)} \eta_{i,2} (C_{i-1} - C_I)}{\mathbf{D}_{H_{i-1,2}}^{(n)} \cot(\theta_{i-1}^2) + \mathbf{D}_{H_{i,1}}^{(n)} \cot(\theta_i^1) - \mathbf{D}_{H_{i-1,2}}^{(t)} + \mathbf{D}_{H_{i,1}}^{(t)}}, \quad (74)$$

onde $\eta_{i,1}$ e $\eta_{i,2}$ são dados por:

$$\eta_{i,1} = |\overrightarrow{IM_i}|/h_{IJ} \text{ e } \eta_{i,2} = |\overrightarrow{IM_{i+1}}|/h_{IJ+1}. \quad (75)$$

Nessa primeira etapa é obtido a equação relacionadas ao *nvc* para cada \bar{C}_i . Por consequência, a segunda etapa consiste em eliminar todas as incógnitas relacionadas aos valores intermediários \bar{C}_i , assim, ao se realizar um balanço de massa na região auxiliar (ver Figura 9), obtém-se a seguinte expressão:

$$\sum_{i=1}^{nvc} \overrightarrow{\mathcal{F}}_{\bar{M}_i \bar{M}_{i+1}}^i \cdot \vec{N}_{\bar{M}_i \bar{M}_{i+1}} = 0, \quad (76)$$

onde o fluxo $\overrightarrow{\mathcal{F}}_{\bar{M}_i \bar{M}_{i+1}}^i \cdot \vec{N}_{\bar{M}_i \bar{M}_{i+1}}$ na face $\bar{M}_i \bar{M}_{i+1}$ é derivado se considerando o triângulo $\Delta I \bar{M}_i \bar{M}_{i+1}$, obtendo-se a seguinte expressão:

$$\begin{aligned} \overrightarrow{\mathcal{F}}_{\bar{M}_i \bar{M}_{i+1}}^i \cdot \vec{N}_{\bar{M}_i \bar{M}_{i+1}} &= \left(\bar{\mathbf{D}}_{H_i}^{(t)} - \bar{\mathbf{D}}_{H_i}^{(n)} \cot(\zeta_i^2) \right) (\bar{C}_i - C_I) - \\ &\left(\bar{\mathbf{D}}_{H_i}^{(t)} + \bar{\mathbf{D}}_{H_i}^{(n)} \cot(\zeta_i^1) \right) (\bar{C}_{i+1} - C_I), \end{aligned} \quad (77)$$

onde $\vec{N}_{\bar{M}_i \bar{M}_{i+1}}$ representa o vetor área da face $\bar{M}_i \bar{M}_{i+1}$.

Substituindo a Eq. (77) na Eq. (76), obtém-se a seguinte equação:

$$\sum_{i=1}^{nvc} \left[\bar{\mathbf{D}}_{H_{i-1}}^{(t)} - \bar{\mathbf{D}}_{H_{i-1}}^{(n)} \cot(\zeta_{i-1}^1) + \bar{\mathbf{D}}_{H_i}^{(n)} \cot(\zeta_i^2) \right] (\bar{C}_{i+1} - C_I) = 0, \quad (78)$$

onde para cada $i = 1, 2, \dots, nvc$, se tem:

$$\bar{\mathbf{D}}_{H_i}^{(n)} = \left[(\vec{N}_{\bar{M}_i \bar{M}_{i+1}})^T \mathbf{D}_{H_i} (\vec{N}_{\bar{M}_i \bar{M}_{i+1}}) \right] / |\overrightarrow{\bar{M}_i \bar{M}_{i+1}}|^2, \quad (79)$$

e

$$\bar{\mathbf{D}}_{H_i}^{(t)} = \left[(\vec{N}_{\bar{M}_i \bar{M}_{i+1}})^T \mathbf{D}_{H_i} (\overrightarrow{\bar{M}_i \bar{M}_{i+1}}) \right] / |\overrightarrow{\bar{M}_i \bar{M}_{i+1}}|^2. \quad (80)$$

Substituindo a Eq. (74) na Eq. (78), obtém-se:

$$\sum_{i=1}^{nvc} \bar{\omega}_i (C_i - C_I) = 0, \text{ com } \bar{\omega}_i = \mathbf{D}_{H_{\hat{i},1}}^{(n)} \eta_{\hat{i},1} \xi(\hat{i}) + \xi(\hat{i} + 1) \mathbf{D}_{H_{\hat{i},2}}^{(n)} \eta_{\hat{i},2}, \quad (81)$$

e

$$\xi(\hat{i}) = \frac{\bar{\mathbf{D}}_{H_{\hat{i}}}^{(n)} \cot(\zeta_{\hat{i}}^2) - \bar{\mathbf{D}}_{H_{\hat{i}}}^{(t)} + \bar{\mathbf{D}}_{H_{\hat{i}-1}}^{(n)} \cot(\zeta_{\hat{i}-1}^1) + \bar{\mathbf{D}}_{H_{\hat{i}-1}}^{(t)}}{\mathbf{D}_{H_{\hat{i}-1,2}}^{(n)} \cot(\theta_{\hat{i}-1}^2) + \mathbf{D}_{H_{\hat{i},1}}^{(n)} \cot(\theta_{\hat{i}}^1) - \mathbf{D}_{H_{\hat{i}-1,2}}^{(t)} + \mathbf{D}_{H_{\hat{i},1}}^{(t)}}, \quad (82)$$

onde

$$\mathbf{D}_{H_{\hat{i},k}}^{(t)} = [(\vec{N}_{I\bar{M}_{\vartheta}})^T \mathbf{D}_{H_{\hat{i}}}(\overrightarrow{IM_{\vartheta}})] / |\overrightarrow{IM_{\vartheta}}|^2 \text{ e } \mathbf{D}_{H_{\hat{i},k}}^{(n)} = [(\vec{N}_{I\bar{M}_{\vartheta}})^T \mathbf{D}_{H_{\hat{i}}}(\vec{N}_{I\bar{M}_{\vartheta}})] / |\overrightarrow{IM_{\vartheta}}|^2, \quad (83)$$

aqui $\vartheta = \hat{i} + k - 1$ e $k = 1, 2$.

Os parâmetros físicos-geométricos $\bar{\mathbf{D}}_{H_{\hat{i}}}^{(n)}$, $\bar{\mathbf{D}}_{H_{\hat{i}}}^{(t)}$, $\mathbf{D}_{H_{\hat{i},k}}^{(n)}$, $\mathbf{D}_{H_{\hat{i},k}}^{(t)}$ e $\xi(\hat{i})$ são computados durante a etapa de pré-processamento (CONTRERAS; LYRA; CARVALHO, 2019).

3.1.4 Formulação Numérica do Fluxo Advectivo

O fluxo advectivo, $\vec{\mathcal{F}}_A$, dado pela Eq. (9), pode ser reescrito pelo operador de divergência como (GAO; WU, 2011):

$$\nabla \vec{\mathcal{F}}_A = \nabla(\vec{v}C), \quad (84)$$

onde C é uma função que representa a concentração do soluto e \vec{v} é a velocidade de escoamento no meio poroso.

Como consequência das Eqs. (6), (9) e (41), a velocidade resultante do fluxo advectivo (ou velocidade de Darcy) no meio poroso, com as devidas hipóteses simplificadoras, é calculada numericamente através da aresta IJ do VC \hat{L} , pela seguinte expressão (PEACEMAN, 1977; CONTRERAS; LYRA; CARVALHO, 2019):

$$\int_{IJ} \vec{\mathcal{F}}_A \cdot \vec{n}_{IJ} ds = \int_{IJ} \mathbf{K}_{\hat{L}} \nabla p \cdot \vec{n}_{IJ} ds = \int_{IJ} \nabla p \cdot \mathbf{K}_{\hat{L}}^T \vec{n}_{IJ} ds \text{ para cada } IJ \in \mathcal{E}_{\hat{L}}, \quad (85)$$

onde p é a pressão, e o tensor de permeabilidade transposto, no VC \hat{L} , é representado por $\mathbf{K}_{\hat{L}}^T$, em que o mesmo é calculado como uma combinação convexa linear de

$\overline{x_{\hat{L}}x_{\hat{L},i(IJ)}}$ e $\overline{x_{\hat{L}}x_{\hat{L},j(IJ)}}$, desde que o VC \hat{L} seja do tipo *star-shaped* (ver definição da seção 3.1.1.1), da seguinte forma (CONTRERAS; LYRA; CARVALHO, 2019):

$$\mathbf{K}_{\hat{L}}^T \vec{n}_{IJ} = \beta_{\hat{L},i(IJ)} \overline{x_{\hat{L}}x_{\hat{L},i(IJ)}} + \beta_{\hat{L},j(IJ)} \overline{x_{\hat{L}}x_{\hat{L},j(IJ)}}, \quad (86)$$

onde

$$\beta_{\hat{L},i(IJ)} > 0, \beta_{\hat{L},j(IJ)} > 0 \text{ e } \beta_{\hat{L},i(IJ)} + \beta_{\hat{L},j(IJ)} > 0. \quad (87)$$

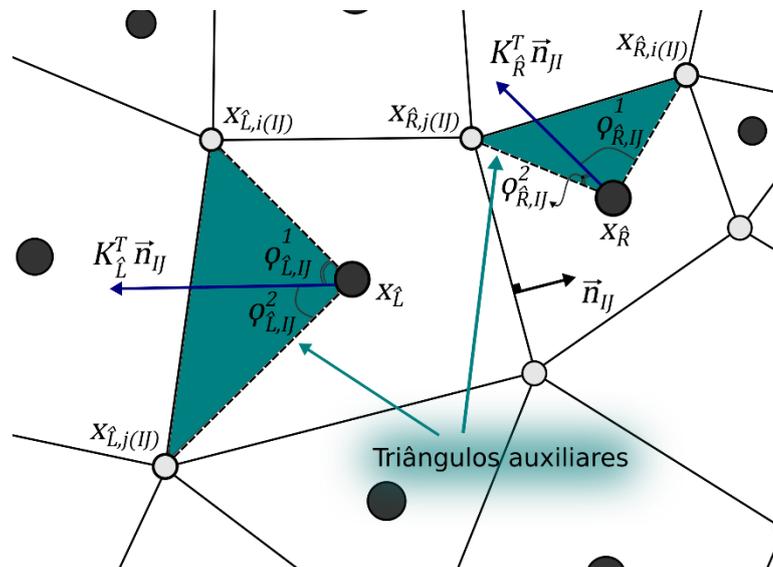
Nas Eqs. (86) e (87), os valores dos parâmetros associados à velocidade de Darcy são obtidos analogamente aos parâmetros do fluxo hidrodinâmico, Eqs. (54) e (55), no entanto, as primeiras equações são relacionadas ao tensor de permeabilidade (ver Figura 10), logo, correlaciona-se ao campo de velocidades do fluxo advectivo no meio poroso. Dessa forma, observa-se que cada tensor transposto carrega as informações físicas correspondente ao tipo de fluxo investigado. Assim, os valores dos parâmetros físicos-geométricos presentes nas Eqs. (86) e (87) são calculados como:

$$\beta_{\hat{L},i(IJ)} = \frac{|\mathbf{K}_{\hat{L}}^T \vec{n}_{IJ}| \text{sen}(\varphi_{\hat{L},IJ}^2)}{|\overline{x_{\hat{L}}x_{\hat{L},i(IJ)}}| \text{sen}(\varphi_{\hat{L},IJ}^1 + \varphi_{\hat{L},IJ}^2)}, \quad (88)$$

e

$$\beta_{\hat{L},j(IJ)} = \frac{|\mathbf{K}_{\hat{L}}^T \vec{n}_{IJ}| \text{sen}(\varphi_{\hat{L},IJ}^1)}{|\overline{x_{\hat{L}}x_{\hat{L},j(IJ)}}| \text{sen}(\varphi_{\hat{L},IJ}^1 + \varphi_{\hat{L},IJ}^2)}. \quad (89)$$

Figura 10 – Parâmetros físicos-geométricos e triângulos auxiliares (regiões hachuradas) – do método dos volumes finitos MPFA-QL – utilizados para obter as velocidades de Darcy no meio poroso



Fonte: O Autor (2021).

A descrição do fluxo hidrodinâmico pelo operador divergente, Eq. (52), permite-se que, analogamente, as Eqs. (60) e (61) possam ser reproduzidas adequadamente para o fluxo advectivo no meio poroso o qual também pode ser expresso pelo operador divergente, Eq. (84). Desse modo, a velocidade de Darcy unilateral é calculada numericamente pelo MPFA-QL, no VC \hat{L} , da seguinte maneira:

$$\vec{v}_{IJ}^{\hat{L}} \cdot \vec{N}_{IJ} = -\|\vec{IJ}\| \left(Y_{\hat{L},IJ} p_{\hat{L}} - \sum_{\gamma=i,j} \beta_{\hat{L},\gamma(IJ)} p_{\hat{L},\gamma(IJ)} \right), \quad (90)$$

onde $Y_{\hat{L},IJ} = \beta_{\hat{L},i(IJ)} + \beta_{\hat{L},j(IJ)}$ e $Y_{\hat{L},IJ} > 0$.

Da mesma forma, a velocidade unilateral do VC \hat{R} é calculado como:

$$\vec{v}_{IJ}^{\hat{R}} \cdot \vec{N}_{IJ} = -\|\vec{IJ}\| \left(Y_{\hat{R},IJ} p_{\hat{R}} - \sum_{\gamma=i,j} \beta_{\hat{R},\gamma(IJ)} p_{\hat{R},\gamma(IJ)} \right), \quad (91)$$

onde $Y_{\hat{R},IJ} = \beta_{\hat{R},i(IJ)} + \beta_{\hat{R},j(IJ)}$ e $Y_{\hat{R},IJ} > 0$.

Com o auxílio das Eqs. (41) e (51), o fluxo advectivo unilateral – relacionado ao transporte de soluto traçador em meios porosos – pode ser calculado numericamente pela seguinte expressão:

$$\int_{\partial\hat{L}} \vec{\mathcal{F}}_A \cdot \vec{n} \, d\partial\hat{L} \cong \sum_{IJ \in \mathcal{E}_{\hat{L}}} C_{IJ}^{\hat{L}} \cdot \vec{v}_{IJ}^{\hat{L}} \cdot \vec{N}_{IJ}, \quad (92)$$

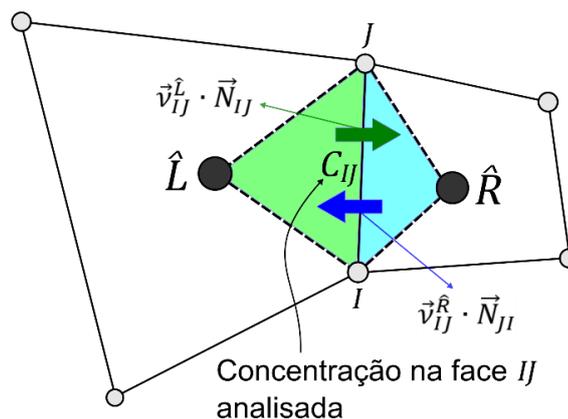
em que o termo $\vec{v}_{IJ}^{\hat{L}} \cdot \vec{N}_{IJ}$ pode ser conseguido a partir da Eq. (90). O termo da concentração ($C_{IJ}^{\hat{L}}$), presente na Eq. (92), pode ser aproximado numericamente pelo método denominado *First Order Upwind* (FOU) e, de outra forma, pelo *Monotonic Upstream-Centered Schemes for Conservation Laws* (MUSCL). O primeiro método é uma aproximação de primeira ordem, enquanto o segundo diz respeito a uma aproximação de mais alta ordem e, nessa sequência, ambos os métodos serão descritos a seguir para esta aplicação específica.

3.1.4.1 *First Order Upwind* (FOU) na Discretização da Concentração de Solutos Traçadores

Conforme relatado em Patankar (1980), documentadamente, o método denominado *First Order Upwind* (FOU) foi proposto por Courant, Isaacson e Rees (1952). Este método é baseado em diferenças finitas que utiliza uma discretização espacial ou temporal, separadamente, para simular o fenômeno físico estudado, podendo ser trabalhado com passos para trás (a montante) ou para frente (a jusante) (HIRSCH, 2007).

Os principais problemas encontrados na discretização do termo advectivo são a realização do cálculo da propriedade transportada nas faces dos VC e determinar o fluxo advectivo através desses limites (VERSTEEG; MALALASEKERA, 2007). À vista disso, o FOU do tipo *upwind* (a montante) considera que a aproximação da advecção é tida como fraca no ponto a jusante, logo, o valor da concentração na face IJ é admitido como o valor da concentração obtida a montante (PATANKAR, 1980; VERSTEEG; MALALASEKERA, 2007; MOUKALLED; MANGANI; DARWISH, 2016). Desse modo, o sentido do fluxo advectivo vai influenciar diretamente às concentrações calculadas nas faces do VC considerado (ver Figura 11) (MOUKALLED; MANGANI; DARWISH, 2016).

Figura 11 – Esquema dos fluxos advectivos unilaterais calculados numericamente pelo MPFA-QL, e concentração determinada na face IJ



Fonte: O Autor (2021).

O valor da concentração \hat{C}_{IJ}^L da Eq. (92), obtido na face IJ do volume de controle \hat{L} , pode ser calculado da seguinte forma (PATANKAR, 1980; MOUKALLED; MANGANI; DARWISH, 2016):

$$C_{IJ}^{\hat{L}} \cdot \vec{v}_{IJ}^{\hat{L}} \cdot \vec{N}_{IJ} = C_{\hat{L}} f_{\hat{L},IJ}^+ + C_{\hat{R}} f_{\hat{L},IJ}^-, \quad (93)$$

onde

$$f_{\hat{L},IJ}^+ = \max(\vec{v}_{IJ}^{\hat{L}} \cdot \vec{N}_{IJ}, 0) \text{ e } f_{\hat{L},IJ}^- = \min(\vec{v}_{IJ}^{\hat{L}} \cdot \vec{N}_{IJ}, 0). \quad (94)$$

Portanto, o fluxo advectivo unilateral discretizado no VC \hat{L} para o transporte de soluto traçador, Eq. (92), com a aplicação do FOU poderá ser reescrito da seguinte forma:

$$\int_{\partial \hat{L}} \vec{\mathcal{F}}_A \cdot \vec{n} \, d\partial \hat{L} \cong \sum_{IJ \in \mathcal{E}_{\hat{L}}} (C_{\hat{L}} f_{\hat{L},IJ}^+ + C_{\hat{R}} f_{\hat{L},IJ}^-). \quad (95)$$

O fluxo na face IJ do VC \hat{R} pode ser definido similarmente, assim, obtém-se a seguinte expressão (PATANKAR, 1980):

$$C_{IJ}^{\hat{R}} \cdot \vec{v}_{IJ}^{\hat{R}} \cdot \vec{N}_{JI} = C_{\hat{R}} f_{\hat{R},IJ}^+ + C_{\hat{L}} f_{\hat{R},IJ}^-, \quad (96)$$

onde

$$f_{\hat{R},IJ}^+ = \max(\vec{v}_{IJ}^{\hat{R}} \cdot \vec{N}_{JI}, 0) \text{ e } f_{\hat{R},IJ}^- = \min(\vec{v}_{IJ}^{\hat{R}} \cdot \vec{N}_{JI}, 0), \quad (97)$$

em que o vetor área normal à face IJ do VC \hat{R} é representado por \vec{N}_{JI} , quando adjacente à face IJ do VC \hat{L} , tem-se que $\vec{N}_{JI} = -\vec{N}_{IJ}$.

O valor do fluxo advectivo unilateral discretizado no VC \hat{R} pode ser obtido de forma análoga à Eq. (95), logo:

$$\int_{\partial \hat{R}} \vec{\mathcal{F}}_A \cdot \vec{n} \, d\partial \hat{R} \cong \sum_{IJ \in \mathcal{E}_{\hat{R}}} (C_{\hat{R}} f_{\hat{R},IJ}^+ + C_{\hat{L}} f_{\hat{R},IJ}^-). \quad (98)$$

Considerando-se a continuidade do fluxo advectivo na face IJ (similar à Eq. (62)), e com algumas manipulações algébricas, pode-se representar o fluxo advectivo como resultado do fluxo único na face IJ , pela discretização através dos métodos MPFA-QL e FOU, da seguinte maneira:

$$\vec{\mathcal{F}}_{AIJ} \cdot \vec{N}_{IJ} = f_{\hat{L},IJ} \cdot (C_{\hat{L}} f_{\hat{L},IJ}^+ + C_{\hat{R}} f_{\hat{L},IJ}^-) - f_{\hat{R},IJ} \cdot (C_{\hat{R}} f_{\hat{R},IJ}^+ + C_{\hat{L}} f_{\hat{R},IJ}^-), \quad (99)$$

onde os dois pesos positivos, $f_{\hat{L},IJ}$ e $f_{\hat{R},IJ}$, são calculados como:

$$f_{\hat{L},IJ} = \frac{Y_{\hat{R},IJ}}{Y_{\hat{L},IJ} + Y_{\hat{R},IJ}} \text{ e } f_{\hat{R},IJ} = \frac{Y_{\hat{L},IJ}}{Y_{\hat{L},IJ} + Y_{\hat{R},IJ}}. \quad (100)$$

A aplicação de métodos de baixa ordem, neste caso o FOU, assegura a ausência de oscilações espúrias na presença de choques (ou descontinuidades) os quais são manifestadas em métodos de mais alta ordem (LYRA, 1994; CARVALHO, 2005). No entanto, o FOU tem uma tendência a apresentar difusões numéricas artificiais, assim, precisa-se empregar métodos de mais alta ordem para aproximar o fluxo advectivo e atenuar esse efeito não físico (CARVALHO, 2005).

3.1.4.2 *Monotonic Upstream-Centered Schemes for Conservation Laws* (MUSCL) na Discretização da Concentração de Solutos Traçadores

Como dito anteriormente, os métodos de primeira ordem não são adequados para lidar com fenômenos de advecção com maior acurácia, portanto, necessita-se empregar métodos com precisão de mais alta ordem, tanto no espaço quanto no tempo (HIRSCH, 2007). Nesse sentido, Van Leer (1974) inicialmente apresentou a resolução da equação de advecção unidimensional para fluxos compressíveis ideais, com o método de Fromm de segunda ordem, levando em conta a condição de monotonicidade declarada em Van Leer (1973). Posteriormente, em sequência, Van Leer (1976) expôs o método denominado *Monotonic Upstream-Centered Scheme for Conservation Laws* (MUSCL) como uma sequência modificada de Godunov (1959) para se obter uma acurácia de segunda ordem, sabendo-se da capacidade do método em se desenvolver para terceira ordem, com a descrição completa do código MUSCL mostrada em Van Leer (1979).

Tendo em consideração a reconstrução da concentração na face IJ a qual é adjacente à dois VC \hat{L} e \hat{R} , através do desenvolvimento da série de Taylor modificada, obtém-se as seguintes equações para aproximação de alta ordem da concentração, mediante o método MUSCL (HIRSCH, 1990):

$$C_{\hat{L},IJ}^+ = C_{\hat{L}} + \frac{S_{\hat{L}}^*}{4} [(1 - \lambda)\Delta C_{\hat{L}}^{bwd} + (1 + \lambda)(C_{\hat{R}} - C_{\hat{L}})], \quad (101)$$

e

$$C_{\hat{R},IJ}^- = C_{\hat{R}} - \frac{S_{\hat{R}}^*}{4} [(1 - \lambda)\Delta C_{\hat{R}}^{fwd} + (1 + \lambda)(C_{\hat{R}} - C_{\hat{L}})], \quad (102)$$

onde os sobrescritos + e – representam as concentrações à esquerda e à direita da face IJ , respectivamente. A escolha do parâmetro λ define os diferentes métodos e ordem de acurácia adotada na estratégia MUSCL (LYRA, 1994):

- $\lambda = -1 \quad \Rightarrow \quad$ método totalmente *upwind* de 2.^a ordem;
- $\lambda = 0 \quad \Rightarrow \quad$ método de Fromm;
- $\lambda = 1/3 \quad \Rightarrow \quad$ método *upwind* de 3.^a ordem;
- $\lambda = 1 \quad \Rightarrow \quad$ método de diferenças centrais com três pontos.

No presente trabalho, o termo advectivo quando for aproximado pelo método de 2.^a ordem (método MUSCL), adota-se o parâmetro de valor $\lambda = 1/3$, assim como os valores recomendados em Carvalho (2005) e Chivata (2016). Ademais, outros valores diferentes para λ serão especificados em cada problema, caso seja pertinente sua alteração.

Os valores dos operadores de diferenças para trás da Eq. (101), $\Delta C_{\hat{L}}^{bwd}$, e para frente da Eq. (102), $\Delta C_{\hat{R}}^{fwd}$, podem ser definidos da seguinte maneira (CARVALHO, 2005; SOUZA, 2015):

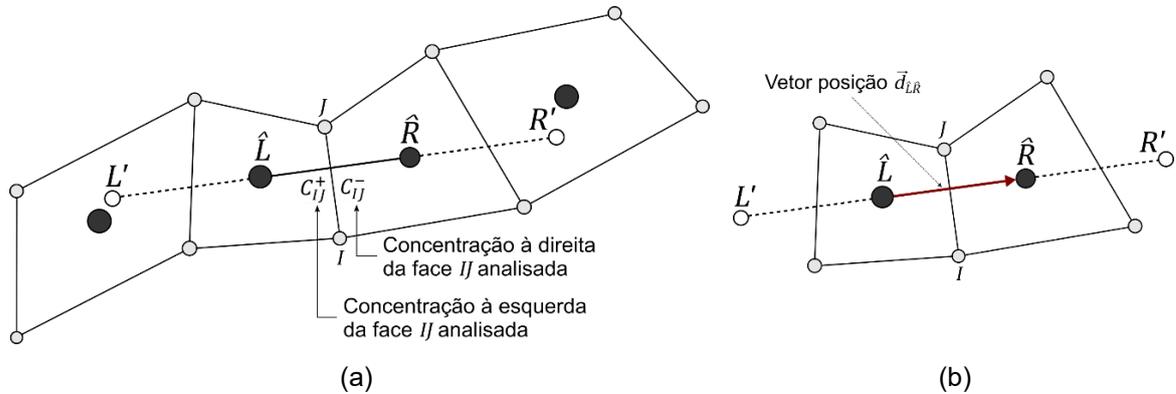
$$\Delta C_{\hat{L}}^{bwd} = C_{\hat{L}} - C_{L'} = 2\vec{d}_{\hat{L}\hat{R}} \nabla C_{\hat{L}} - (C_{\hat{R}} - C_{\hat{L}}), \quad (103)$$

e

$$\Delta C_{\hat{R}}^{fwd} = C_{R'} - C_{\hat{R}} = 2\vec{d}_{\hat{L}\hat{R}} \nabla C_{\hat{R}} - (C_{\hat{R}} - C_{\hat{L}}), \quad (104)$$

onde $\vec{d}_{\hat{L}\hat{R}}$ representa o vetor posição entre os pontos $\vec{x}_{\hat{L}}$ e $\vec{x}_{\hat{R}}$ (ver Figura 12). Os valores de $C_{L'}$ e $C_{R'}$ são obtidos pela reconstrução do gradiente ao longo do vetor $\vec{d}_{\hat{L}\hat{R}}$ a partir dos nós fictícios L' e R' (CARVALHO, 2005).

Figura 12 – Estratégia utilizada para aproximar a concentração do soluto traçador pelo método MUSCL: (a) fragmentação de malha e construção de um estêncil com os pontos L' , \hat{L} , \hat{R} e R' , utilizados na reconstrução da concentração; (b) indicação do vetor posição $\vec{d}_{\hat{L}\hat{R}}$



Fonte: O Autor (2021).

Os parâmetros S_L^* e S_R^* (das Eqs. (101) e (102)) são limitadores de inclinação, que definem a ordem de aproximação do método MUSCL, isto é, $S_i^* = 0$ ($i = \hat{L}, \hat{R}$) reduz o método para primeira ordem, e $S_i^* = 1$ define o método como de alta ordem (HIRSCH, 1990; CARVALHO, 2005). E, também, estes parâmetros são empregados para prevenir as oscilações numéricas (*overshoots* e *undershoots*) não físicas que são desenvolvidas próximas às mudanças repentinas nos gradientes de concentração computados (EWING, 1983; LYRA, 1994; WOODFIELD; SUZUKI; NAKABE, 2004; SOUZA, 2015). Portanto, aplica-se os limitadores de inclinação para realizar uma transição entre a aproximação de alta ordem nas regiões em que o fluxo é suave, enquanto nas regiões com elevado gradiente, a contribuição do termo de alta ordem é reduzida para primeira ordem (CARVALHO, 2005; SOUZA, 2015). À vista disso, esses parâmetros podem ser escritos pela seguinte equação (WOODFIELD; SUZUKI; NAKABE, 2004; CONTRERAS et al., 2016):

$$S_i^* = S_i \cdot S_{IJ}^i, \quad i = \hat{L}, \hat{R}, \quad (105)$$

onde S_{IJ}^i , é um limitador aplicado na face IJ (ver Figura 13) o qual é responsável por garantir que os valores das concentrações na referida face não ultrapassem os valores médios dos VC adjacentes (LÖHNER, 2008; CONTRERAS et al., 2016), e S_i proporciona ao limitador característica de transição de alta ordem para primeira ordem no método MUSCL, quando é necessário, a fim de garantir a monotonicidade (WOODFIELD; SUZUKI; NAKABE, 2004; CONTRERAS et al., 2016).

Na literatura há inúmeros limitadores de inclinação, desse modo, no presente trabalho, todas as vezes que houver aplicação do método MUSCL será adotado o

limitador de Van Albada no termo $S_{IJ}^{\hat{L}}$ da Eq. (105), pois o mesmo pode apresentar baixa difusão numérica do soluto traçador e possui característica de ser continuamente diferenciável (i.e., a cada verificação) (CARVALHO, 2005; LÖHNER, 2008). Este limitador é definido como (LÖHNER, 2008):

$$S_{IJ}^{\hat{L}} = \max \left\{ 0, \frac{2\Delta C_{\hat{L}}^{bwd}(C_{\hat{R}} - C_{\hat{L}}) + \varepsilon_1}{(\Delta C_{\hat{L}}^{bwd})^2 + (C_{\hat{R}} - C_{\hat{L}})^2 + \varepsilon_1} \right\}, \quad (106)$$

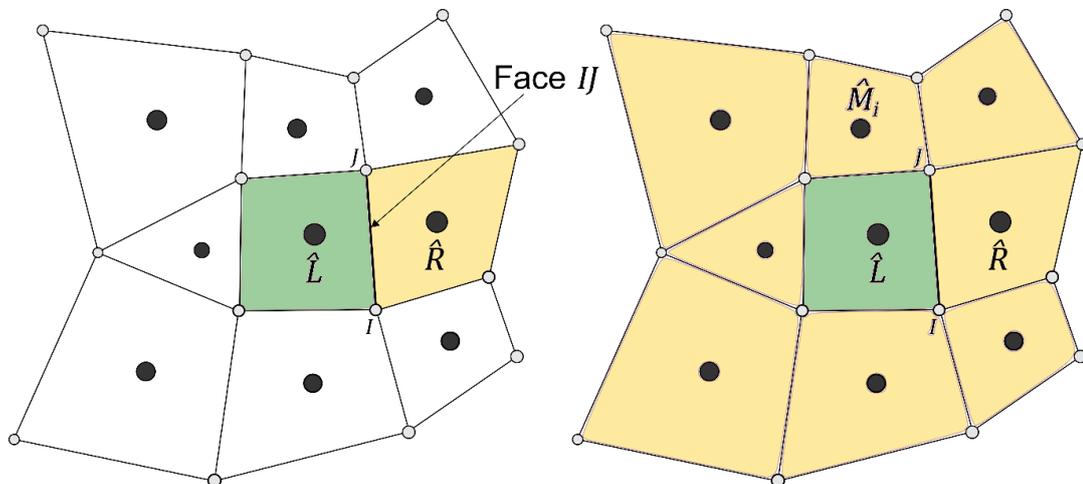
e

$$S_{IJ}^{\hat{R}} = \max \left\{ 0, \frac{2\Delta C_{\hat{R}}^{fwd}(C_{\hat{R}} - C_{\hat{L}}) + \varepsilon_1}{(\Delta C_{\hat{R}}^{fwd})^2 + (C_{\hat{R}} - C_{\hat{L}})^2 + \varepsilon_1} \right\}, \quad (107)$$

onde ε_1 é um número muito pequeno utilizado para evitar a divisão por zero no denominador.

O termo S_i (da Eq. (105)) é um limitador de VC, o qual considera todos os VC \hat{M}_i conectados diretamente ao VC \hat{L} para comparação dos valores computados, excluindo-se o próprio VC \hat{L} nessa análise (ver Figura 13) (WOODFIELD; SUZUKI; NAKABE, 2004). Este limitador foi proposto inicialmente por Woodfield, Suzuki e Nakabe (2004) com o propósito de eliminar as oscilações numéricas causadas pela aproximação de segunda ordem (i.e., MUSCL) e, também, diminuir a difusão numérica artificial. Posteriormente, tal limitado é utilizado no contexto da simulação de reservatórios de petróleo por Souza (2015) e Contreras *et al.* (2016).

Figura 13 – À esquerda: limitador de face (IJ) utilizado entre dois volumes de controle adjacentes (\hat{L} e \hat{R}); à direita: limitador de volume de controle, considerando-se os volumes de controle (\hat{M}_i) circunvizinhos ao \hat{L}



Fonte: O Autor (2021).

O limitador de Woodfield (S_i) consiste em verificar se há *overshoots* e/ou *undershoots* nos VC circunvizinhos, que tendem a ocorrer nas mudanças súbitas de gradientes e, às vezes, em locais onde o gradiente deveria ser zero. Este limitador é definido da seguinte forma (WOODFIELD; SUZUKI; NAKABE, 2004):

$$S_i = \begin{cases} 0, & \text{se } \varphi_{\hat{L}} \geq 1 \text{ ou } \varphi_{\hat{L}} \leq 0, \\ 1, & \text{se } \delta \leq \varphi_{\hat{L}} \leq 1 - \delta, \\ \varphi_{\hat{L}}/\delta, & \text{se } 0 \leq \varphi_{\hat{L}} < \delta, \\ (1 - \varphi_{\hat{L}})/\delta, & \text{se } 1 - \delta < \varphi_{\hat{L}} < 1, \\ 1, & \text{se } C^{max} - C^{min} \leq \varepsilon_2, \end{cases} \quad (108)$$

onde δ é uma constante limitadora de transição, C^{max} e C^{min} são, respectivamente, os valores máximo e mínimo das concentrações calculadas nos VC circunvizinhos. O parâmetro adimensional $\varphi_{\hat{L}}$ é definido da seguinte maneira:

$$\varphi_{\hat{L}} = \frac{C_{\hat{L}} - C^{min}}{C^{max} - C^{min}}. \quad (109)$$

Após o cálculo das concentrações numéricas na face IJ , a Eq. (99) pode ser reescrita para definir o fluxo advectivo pelo método MUSCL (Eqs. (101) e (102)) da seguinte maneira:

$$\vec{\mathcal{F}}_{AIJ} \cdot \vec{N}_{IJ} = f_{L,IJ} \cdot C_{L,IJ}^+ - f_{R,IJ} \cdot C_{R,IJ}^-. \quad (110)$$

O valor da constante δ (na Eq. (108)) precisa ser escolhido entre o intervalo de 0 a 0,5, no entanto, os estudos realizados por Woodfield, Suzuki e Nakabe (2004) apontam que a melhor escolha deste valor é $\delta = 0,2$, portanto, no presente trabalho será adotado este valor. Pois, de acordo com os resultados dos autores, o valor $\delta = 0,05$ não apresentou boa convergência e também não foi capaz de suprimir as oscilações numéricas presentes nas soluções, por outro lado, $\delta = 0,5$ produziu uma quantidade significativa de difusão numérica artificial.

Os coeficientes ε_1 (Eqs. (106) e (107)) e ε_2 (Eq. (108)) são inseridos nas referidas equações para se evitar alguma singularidade matemática pelo surgimento do valor zero no denominador, assim, adota-se nesta dissertação de mestrado: $\varepsilon_1 = \varepsilon_2 = 10^{-20}$ (WOODFIELD; SUZUKI; NAKABE, 2004; LÖHNER, 2008).

3.1.5 Discretização Temporal e Formulação Numérica da Equação de Advecção-Dispersão-Reação

A integral espacial do termo transiente da concentração do soluto traçador em cada VC \hat{L} , presente na Eq. (42), pode ser representada como:

$$\int_{\hat{L}} \frac{\partial C}{\partial t} d\hat{L} + \int_{\hat{L}} \mathcal{L}(C) d\hat{L} = 0, \quad (111)$$

onde $\mathcal{L}(C)$ é um operador diferencial espacial que inclui todos os termos não transientes da Eq. (42), isto é, os fenômenos de advecção, dispersão e reação. Assim, após a discretização espacial e aplicando o teorema do valor médio, tem-se a seguinte expressão:

$$\left. \frac{\partial C}{\partial t} \right|_{\hat{L}} V_{\hat{L}} = \mathcal{R}(C_{\hat{L}}^t), \quad (112)$$

onde $\mathcal{R}(C_{\hat{L}}^t)$ é um resíduo o qual é resultado da discretização espacial expressa em algum tempo de referência t . Realizando-se uma expansão da série de Taylor para calcular o termo transiente da concentração do soluto traçador sobre uma direção progressiva do tempo (método de Euler explícito), e truncando-se a série nos termos que iniciam na ordem Δt^2 , obtém-se a seguinte equação para representar numericamente a derivada temporal da concentração (MOUKALLED; MANGANI; DARWISH, 2016):

$$\frac{\partial C(t)}{\partial t} = \frac{C(t + \Delta t) - C(t)}{\Delta t} + \mathcal{O}(\Delta t). \quad (113)$$

Consequentemente, substituindo-se a Eq. (113) na Eq. (112), tem-se a seguinte equação:

$$\frac{C_{\hat{L}}^{t+\Delta t} - C_{\hat{L}}^t}{\Delta t} = \frac{1}{V_{\hat{L}}} \mathcal{R}(C_{\hat{L}}^t), \quad (114)$$

rearranjando-se os termos, tem-se:

$$C_{\hat{L}}^{t+\Delta t} = C_{\hat{L}}^t + \frac{\Delta t}{V_{\hat{L}}} \mathcal{R}(C_{\hat{L}}^t). \quad (115)$$

A principal vantagem da discretização pelo método de Euler explícito advém de sua capacidade em gerar soluções avançando no tempo sem a necessidade de

resolver um sistema de equações em cada nível n de tempo (MOUKALLED; MANGANI; DARWISH, 2016). Dessarte, substituindo-se os fluxos numéricos das Eqs. (47) e (51) na Eq. (115), tem-se:

$$C_L^{n+1} = C_L^n + \frac{\Delta t}{V_L} \left[\sum_{IJ \in \mathcal{E}_L} \left(\vec{\mathcal{F}}_{HIJ} \cdot \vec{N}_{IJ} + \vec{\mathcal{F}}_{AIJ} \cdot \vec{N}_{IJ} \right) \right]^n - (\gamma C)_L^n \Delta t. \quad (116)$$

O valor Δt é determinado respeitando-se o critério de estabilidade, necessário para a convergência de métodos transientes explícitos, denominado como condição de Courant-Friedrichs-Lewy ou condição de CFL, estabelecida após a demonstração dos conceitos fundamentais de convergência e estabilidade por Courant, Friedrichs e Lewy (1928) (HIRSCH, 1988; LEVEQUE, 2004; MOUKALLED; MANGANI; DARWISH, 2016). E, conforme recomendado no trabalho de Chivata (2016), em problemas de advecção-dispersão-reação, pode-se definir o critério de CFL da seguinte forma:

$$\Delta t \leq \frac{CFL \cdot \Delta h^2}{\left[\|\mathbf{D}_H\| + \max_{IJ \in \mathcal{E}_L} \left(\frac{\vec{v} \cdot \vec{N}}{A} \right)_{IJ} \Delta h + \gamma \Delta h \right] (2k + 1)}; \quad 0 \leq CFL \leq 1, \quad (117)$$

onde o número adimensional CFL é chamado de número de Courant, Δh é o comprimento característico da malha, em que neste trabalho foi utilizado a distância entre os centroides de VC adjacentes (i.e., $\Delta h = \vec{d}_{L\hat{R}}$, ver seção 3.1.4.2), A representa a área de cada face IJ , e o valor de k define o grau de acurácia do método, de modo que quando $k = 0$ (valor aplicado neste trabalho), reduz-se ao método de Euler explícito.

3.2 AVALIAÇÃO DE ERROS DOS MÉTODOS NUMÉRICOS

A solução numérica, \hat{u} , gerada pelos métodos numéricos empregados, produz-se algum erro de truncamento E_h estabelecido em relação a uma quantidade de interesse u , numa malha com $N \times M$ nós, calculado como (HYMAN; SHASHKOV; STEINBERG, 1997; VERSTEEG; MALALASEKERA, 2007):

$$\|E_h\| = u - \hat{u} \cong Ch^q + \mathcal{O}(h^{q+1}), \quad (118)$$

onde q é a ordem do erro, a constante da taxa de convergência C é independente de h , e $\|\cdot\|$ é alguma norma utilizada.

Os erros de truncamento são avaliados em uma sequência de malhas h , $h/2$, $h/4$, ..., e a taxa de convergência q é estimada a partir da razão entre as normas dos erros $\|E_h\|$ e $\|E_{h/2}\|$ dada por (HYMAN; SHASHKOV; STEINBERG, 1997; CARVALHO, 2005):

$$q \cong \log_2 \left(\frac{\|E_h\|}{\|E_{h/2}\|} \right). \quad (119)$$

Os erros avaliados nesta dissertação de mestrado, utiliza-se três tipos de normas, são elas as normas do máximo (∞), L_2 e *Root Mean Square* (RMS), respectivamente, relacionadas aos erros numéricos absolutos $\|E\|_\infty$, $\|E\|_2$ e $\|E\|_{RMS}$. Estas normas são calculadas, como segue (HYMAN; SHASHKOV; STEINBERG, 1997; CHAI; DRAXLER, 2014; GOULART et al., 2018):

$$\|E\|_\infty = \|u - \hat{u}\|_{L_\infty} = \max \|u_i - \hat{u}_i\|, \text{ para } i = 1, \dots, N_{VC}, \quad (120)$$

$$\|E\|_2 = \|u - \hat{u}\|_{L_2} = \left\{ \sum_{i=1}^{N_{VC}} [(u_i - \hat{u}_i)^2 \cdot V_i] \right\}^{\frac{1}{2}}, \text{ para } i = 1, \dots, N_{VC}, \quad (121)$$

$$\|E\|_{RMS} = \|u - \hat{u}\|_{L_{RMS}} = \left[\frac{1}{N_{VC}} \sum_{i=1}^{N_{VC}} (u_i - \hat{u}_i)^2 \right]^{\frac{1}{2}}, \text{ para } i = 1, \dots, N_{VC}, \quad (122)$$

onde N_{VC} é o número de VC da malha, no qual, cada VC tem seu volume (ou área em 2D) indicado por V_i .

4 RESULTADOS NUMÉRICOS

Nesta seção, serão resolvidos problemas da literatura (*benchmarks*) de natureza uni (1D) e bidimensionais (2D), a fim de comparar e validar os resultados da formulação numérica adotada neste trabalho. Para resolver os problemas propostos, leva-se em conta algumas hipóteses simplificadoras, tais como:

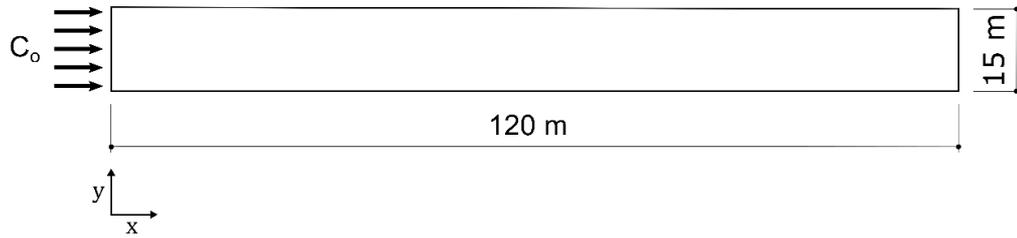
- a) a porosidade e a viscosidade são consideradas constantes e unitárias;
- b) a variação de temperatura não afeta as propriedades dos fluidos e da rocha (meio poroso), i.e., os problemas são considerados isotérmicos;
- c) assume-se que a rocha e o fluido são incompressíveis;
- d) desconsidera-se os efeitos da gravidade e da capilaridade no sistema;
- e) a densidade do óleo e da água são considerados iguais e unitários.

Nos problemas analisados, calcula-se inicialmente a pressão pelo MPFA-QL para depois se calcular as velocidades de escoamento (velocidades de Darcy) no reservatório, com os valores das velocidades associadas ao traçador, pode-se obter os valores dos coeficientes de dispersão hidrodinâmicos, e com isso, obtém-se a solução da equação de concentração. Desse modo, obtém-se uma estratégia denominada *Implicit Pressure and Explicit Concentration* (IMPEC) para resolver a concentração numérica do soluto traçador, dado pela Eq. (116) (ver fluxograma do Apêndice A).

4.1 TRANPORTE UNIDIMENSIONAL DE SOLUTOS TRAÇADORES EM RESERVATÓRIOS

Os problemas propostos a seguir são adaptados de Sun (1996) e Carvalho (2005). Considera-se o transporte unidimensional de um soluto traçador, injetado constantemente a montante e com concentração C num modelo de reservatório, homogêneo e isotrópico, com dimensões de comprimento 120 x 15 m (ver Figura 14).

Figura 14 – Domínio e condições de contorno utilizados para o estudo de transporte unidimensional de soluto traçador num reservatório isotrópico e homogêneo



Fonte: O Autor (2021).

Para este problema não se considera a existência do termo de fonte, e sua análise pode ser simplificada na direção predominante (direção x), tornando-se uma análise de natureza unidimensional, assim a Eq. (25) pode ser reescrita da seguinte maneira:

$$\frac{\partial C}{\partial t} = D_L \frac{\partial^2 C}{\partial x^2} - v \frac{\partial C}{\partial x}, \text{ para } 0 < x < 120 \text{ m}, \quad (123)$$

onde $D_L = D_{xx}$ é o coeficiente de dispersão hidrodinâmica longitudinal.

A equação da pressão, Eq. (8), também pode ser reescrita como:

$$\frac{\partial^2 p}{\partial x^2} = -\frac{Q_T}{K}, \text{ para } 0 < x < 120 \text{ m}. \quad (124)$$

Para atender estes problemas específicos, utiliza-se as seguintes condições de contorno e inicial:

a) para a equação da concentração (Eq. (123)):

$$\begin{aligned} C(x, 0) &= 0 \text{ (g/m}^3\text{) para } 0 \leq x \leq 120 \text{ m,} \\ C(0, t) &= C_o \text{ para } t \geq 0, \\ C(120, t) &= 0 \text{ (g/m}^3\text{) para } t \geq 0; \end{aligned} \quad (125)$$

b) para a equação da pressão (Eq. (124)):

$$\begin{aligned} p(0, t) &= p_o \text{ para } t \geq 0, \\ p(120, t) &= 0 \text{ (Pa) para } t \geq 0. \end{aligned} \quad (126)$$

A solução analítica deste problema é encontrada em Sun (1996), e é dada da seguinte maneira:

$$C(x, t) = \frac{C_o}{2} \left\{ \operatorname{erfc} \left[\frac{x - vt}{2\sqrt{D_L t}} \right] + \exp\left(\frac{vx}{D_L}\right) \cdot \operatorname{erfc} \left[\frac{x + vt}{2\sqrt{D_L t}} \right] \right\}, \quad (127)$$

onde exp é a função exponencial de base e (natural), enquanto $erfc$ é a função de erro complementar e pode ser expressa como (DIAS, 2003):

$$erf(x) = \frac{2}{\sqrt{\pi}} \int_0^x exp(\xi^2) d\xi \text{ e } erfc(x) = 1 - erf(x), \quad (128)$$

onde erf é a função de erro. O valor de ξ depende do fenômeno analisado e para o caso em que se ocorre difusão e advecção sem o termo de decaimento, em meio poroso e unidimensional, pode ser escrito da seguinte maneira (DIAS, 2003):

$$\xi = \frac{-x + vt}{2\sqrt{D_L t}}. \quad (129)$$

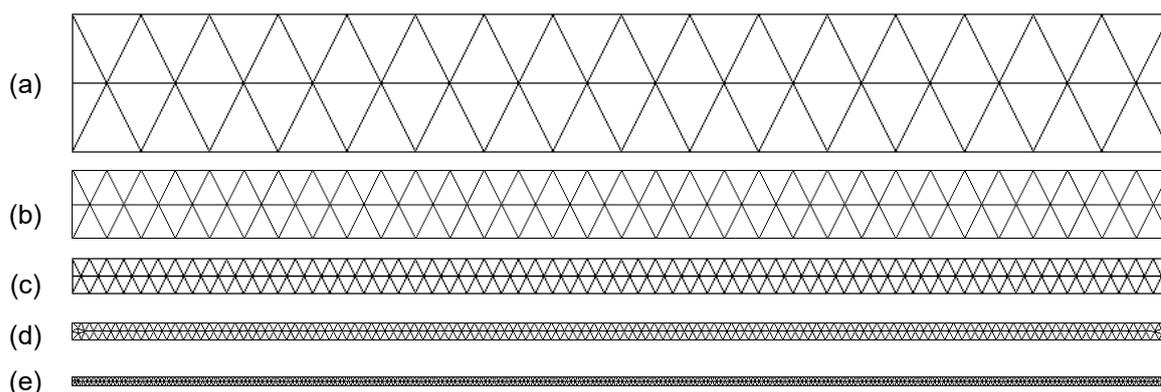
4.1.1 Dispersão Hidrodinâmica com Difusão Dominante

Estudando o fenômeno com difusão dominante, de acordo com Sun (1996), Carvalho (2005) e Chivata (2016), o problema será avaliado primeiramente com um número pequeno de Péclet, $Pe = 0,750000$, e as seguintes informações: $C_o = 10 \text{ g/m}^3$, $D_L = 10 \text{ m}^2/\text{d}$, $\alpha_L = 10 \text{ m}$, $D_0 = 2 \cdot 10^{-9} \text{ m}^2/\text{d}$, $v = 1 \text{ m/d}$, $p_o = 10 \text{ Pa}$. Para atender ao número de Péclet analisado, será utilizado uma malha inicialmente com espaçamento $\Delta x = 7,50000 \text{ m}$ ($\Delta x = Pe \cdot D_L/|v|$), desse modo, o domínio estudado configura 66 VC triangulares (malha M1), mas se avalia apenas os 16 VC inferiores na direção x , isto é, nos VC com centroides localizados em $y = \Delta y/3$ (sentido positivo dos eixos adotados na Figura 14), e para que o domínio discretizado mantenha simetria na direção y , tem-se $\Delta y = 7,50000 \text{ m}$ com 2 divisões na direção y (ver Figura 15) e, seguindo-se esta mesma racionalidade, verifica-se também o comportamento da simulação numérica através da malha com 64 VC quadrangulares (malha M6), analisando-se seus 16 VC inferiores na direção x , isto é, nos VC com centroides localizados em $y = \Delta y/2$ (sentido positivo dos eixos adotados na Figura 14), e para que o domínio discretizado mantenha simetria na direção y , tem-se $\Delta y = 3,75000 \text{ m}$ com 4 divisões na direção y (ver Figura 16). Nota-se que a fim de se comparar os resultados entre as triangulares e quadrangulares, tem-se densidades das malhas próximas entre si.

Nesse contexto, considera-se que o problema poderá ser estudado unidimensionalmente sem perder as características da física, logo se pode comparar

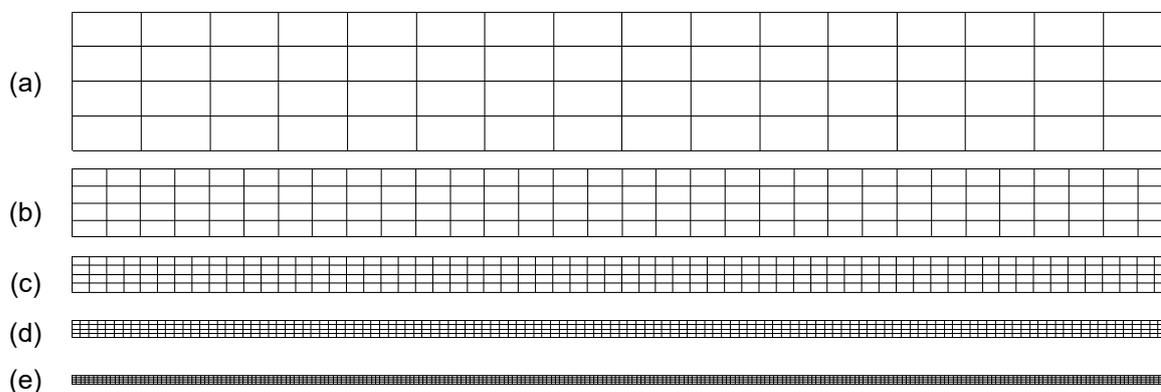
os resultados numéricos de parte a parte, bem como a solução analítica do problema (Eq. (127)), e será descrito neste trabalho os resultados em função dos pontos de interesse para cada malha em suas respectivas análises. As malhas empregadas nas discretizações espaciais foram geradas no *software* Gmsh (2020), utilizando-se um processo denominado “Frontal-Delaunay”.

Figura 15 – Malhas triangulares utilizadas na discretização espacial do problema de transporte unidimensional: (a) malha M1, com 66 VC; (b) malha M2, com 130 VC; (c) malha M3, com 258 VC; (d) malha M4, com 518 VC; e (e) malha M5, com 1030 VC



Fonte: O Autor (2021).

Figura 16 – Malhas quadrangulares utilizadas na discretização espacial do problema de transporte unidimensional: (a) malha M6, com 64 VC; (b) malha 7, 128 VC; (c) malha M8, com 256 VC; (d) malha M9, com 512 VC; e (e) malha M10, com 1024 VC



Fonte: O Autor (2021).

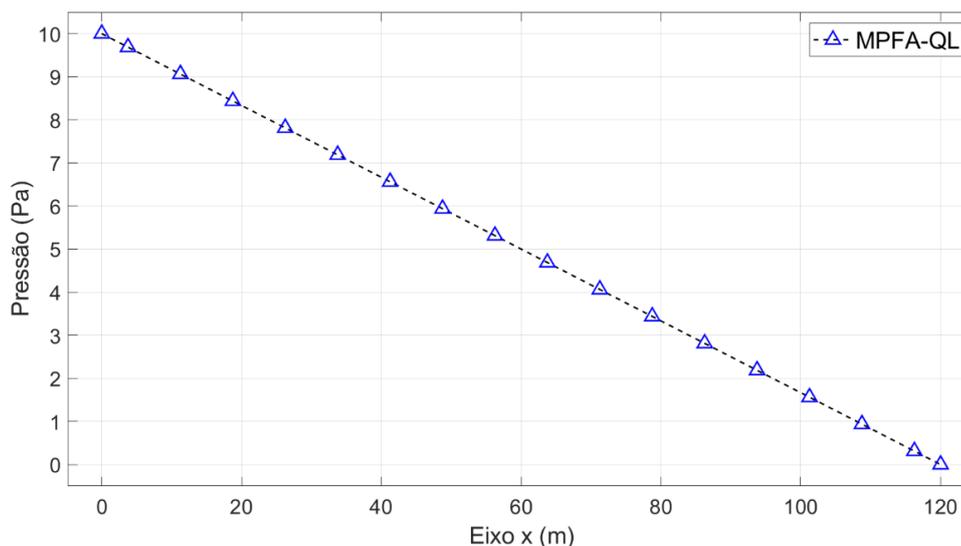
O tempo total considerado para os resultados numéricos e a solução analítica é $t = 30$ d e o valor do número de Courant é $CFL = 0,2$. As informações físicas do reservatório são complementadas pelos seguintes tensores:

$$\mathbf{K} = \begin{bmatrix} 12 & 0 \\ 0 & 12 \end{bmatrix} \text{ e } \boldsymbol{\tau} = \begin{bmatrix} 5 \cdot 10^{-1} & 0 \\ 0 & 5 \cdot 10^{-1} \end{bmatrix}, \quad (130)$$

onde \mathbf{K} é o tensor de permeabilidade e $\boldsymbol{\tau}$ é o tensor de tortuosidade.

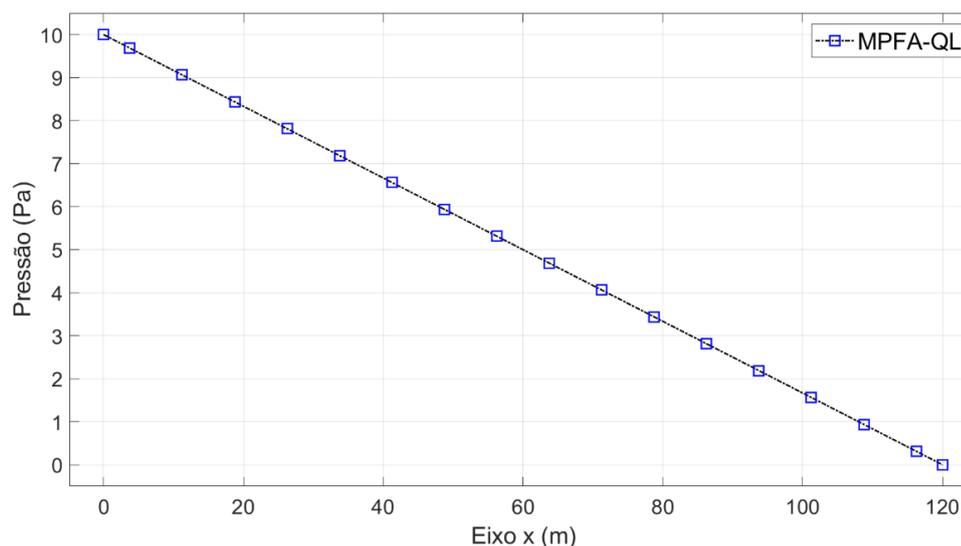
No Gráfico 2, apresenta-se a pressão calculada numericamente pelo MPFA-QL com 16 VC triangulares inferiores da malha M1 e seus valores de contorno na direção x , observa-se que há um comportamento linear da pressão ao longo do domínio. No Gráfico 3, verifica-se resultados similares com a aplicação de VC quadrangulares (malha M6).

Gráfico 2 – Pressão ao longo da direção x no domínio, utilizando-se o MPFA-QL com 16 VC triangulares e valores de contorno, para o transporte unidimensional de soluto traçador com difusão dominante



Fonte: O Autor (2021).

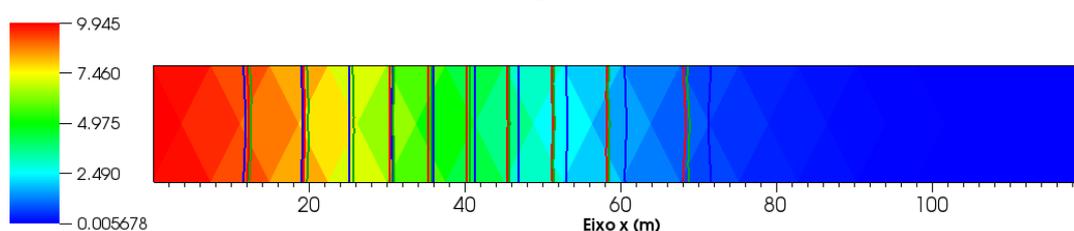
Gráfico 3 – Pressão ao longo da direção x no domínio, utilizando-se o MPFA-QL com 16 VC quadrangulares e valores de contorno, para o transporte unidimensional de soluto traçador com difusão dominante



Fonte: O Autor (2021).

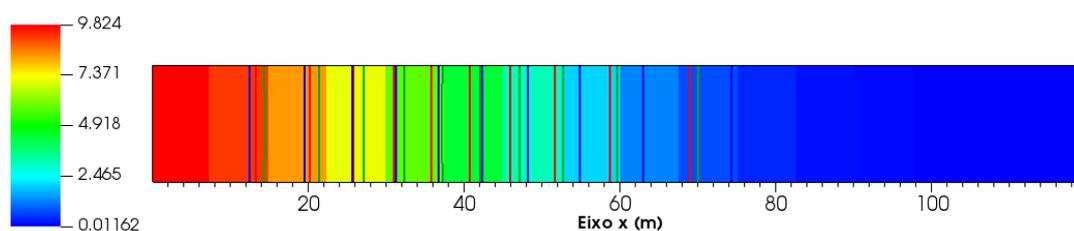
Nas Figuras 17 e 18, identifica-se o desenvolvimento do campo de concentração do soluto traçador e suas isolinhas, com a aplicação de VC triangulares e quadrangulares, respectivamente, e ambos resultados foram gerados no *software* VisIt (2020). O campo de concentração é calculado numericamente pelos métodos MUSCL-MPFA-QL, cujos valores numéricos, mínimo e máximo, são mostrados em suas respectivas figuras. As isolinhas são utilizadas para contrapor os resultados do transporte de soluto para cada método numérico empregado: isolinhas de cor azul indicam os valores de concentração produzidos pelos métodos FOU-MPFA-QL, isolinhas de cor vermelha indicam os valores de concentração produzidos pelos métodos MUSCL-MPFA-QL, e, isolinhas de cor verde indicam os valores de concentração produzidos pelos métodos MUSCL-Woodfield-MPFA-QL. Observa-se que os resultados obtidos com o método FOU são mais difusivos que os resultados obtidos pelos métodos de alta ordem. Além disso, comparando-se os resultados nos dois tipos de malhas, identifica-se que os valores das concentrações numéricas, resultante da malha com os VC triangulares, são mais próximos dos valores atribuídos nos contornos e as isolinhas da malha com os VC quadrangulares foram mais difusivas numericamente, em todos os métodos numéricos aplicados.

Figura 17 – Campo de concentração do traçador obtido pelo MUSCL-MPFA-QL e isolinhas de concentração obtidas pelos métodos: FOU-MPFA-QL (azuis), MUSCL-MPFA-QL (vermelhas), MUSCL-Woodfield-MPFA-QL (verdes). O tempo de transporte unidimensional é $t = 30$ d, com 66 VC triangulares



Fonte: O Autor (2021).

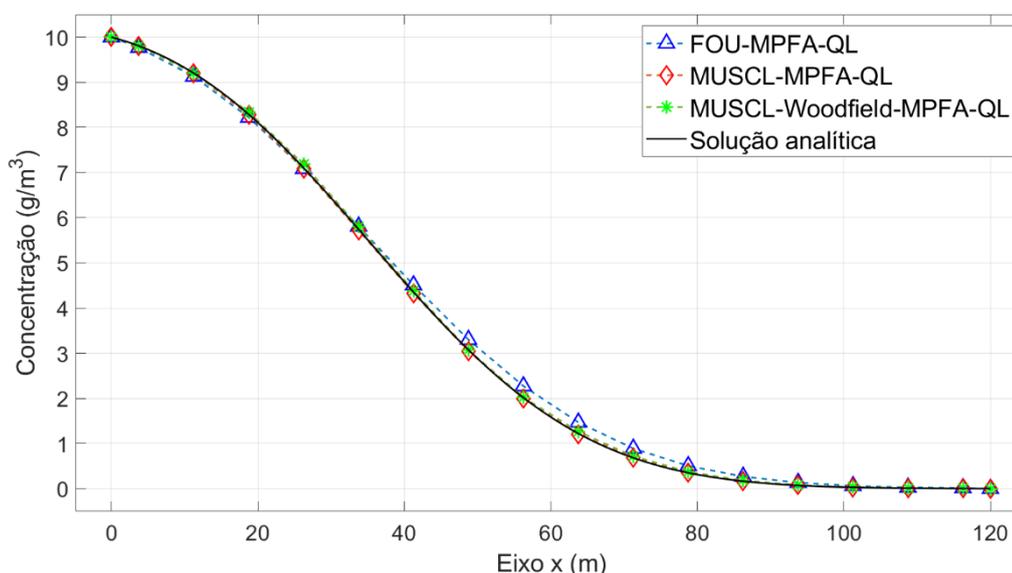
Figura 18 – Campo de concentração do traçador obtido pelo MUSCL-MPFA-QL e isolinhas de concentração obtidas pelos métodos: FOU-MPFA-QL (azuis), MUSCL-MPFA-QL (vermelhas), MUSCL-Woodfield-MPFA-QL (verdes). O tempo de transporte unidimensional é $t = 30$ d, com 64 VC quadrangulares



Fonte: O Autor (2021).

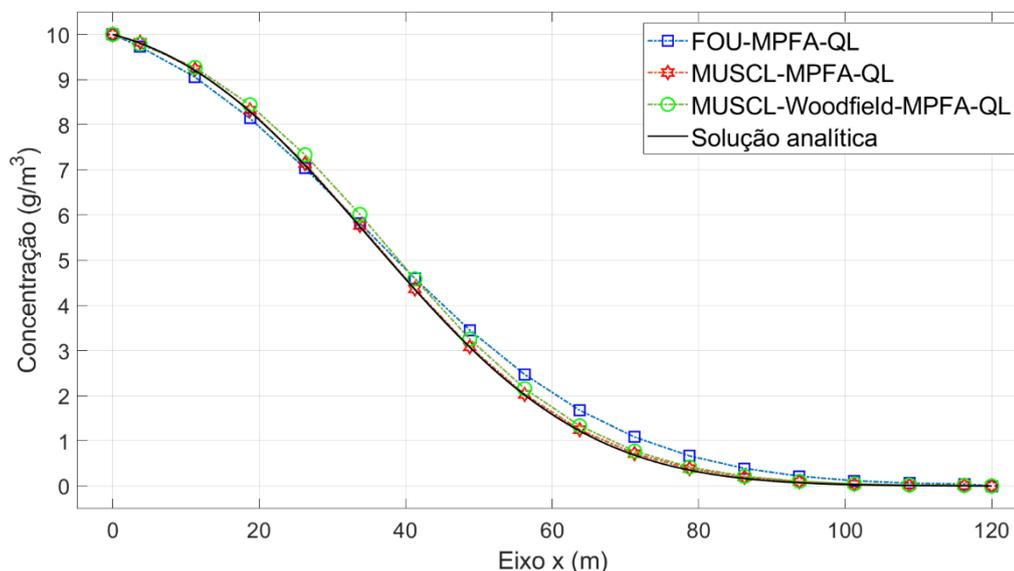
Nos Gráficos 4 e 5 são apresentados os perfis de concentração, respectivamente, das malhas com VC triangulares e quadrangulares, para os seguintes métodos numéricos: FOU-MPFA-QL, MUSCL-MPFA-QL, MUSCL-Woodfield-MPFA-QL, bem como a solução analítica (ver Eq. (127)) do problema em estudo. Naturalmente, para se calcular o termo do fluxo de dispersão hidrodinâmica, apenas foi empregado o MPFA-QL para obter os valores das incógnitas da concentração no reservatório, em contrapartida, o termo advectivo, diferenciou-se pela combinação de outros métodos (FOU, MUSCL, MUSCL-Woodfield) com o MPFA-QL, a fim de observar o comportamento do fluxo advectivo-dispersivo no reservatório.

Gráfico 4 – Perfis de concentração obtidos numericamente pelos métodos FOU-MPFA-QL, MUSCL-MPFA-QL, MUSCL-Woodfield-MPFA-QL e solução analítica, considerando-se 16 VC triangulares e valores de contorno na direção x , para o transporte unidimensional de soluto traçador com difusão dominante. Conforme os seguintes valores: $t = 30$ d, $CFL = 0,2$, $Pe = 0,750000$



Fonte: O Autor (2021).

Gráfico 5 – Perfis de concentração obtidos numericamente pelos métodos FOU-MPFA-QL, MUSCL-MPFA-QL, MUSCL-Woodfield-MPFA-QL e solução analítica, considerando-se 16 VC quadrangulares e valores de contorno na direção x , para o transporte unidimensional de soluto traçador com difusão dominante. Conforme os seguintes valores: $t = 30$ d, $CFL = 0,2$, $Pe = 0,750000$

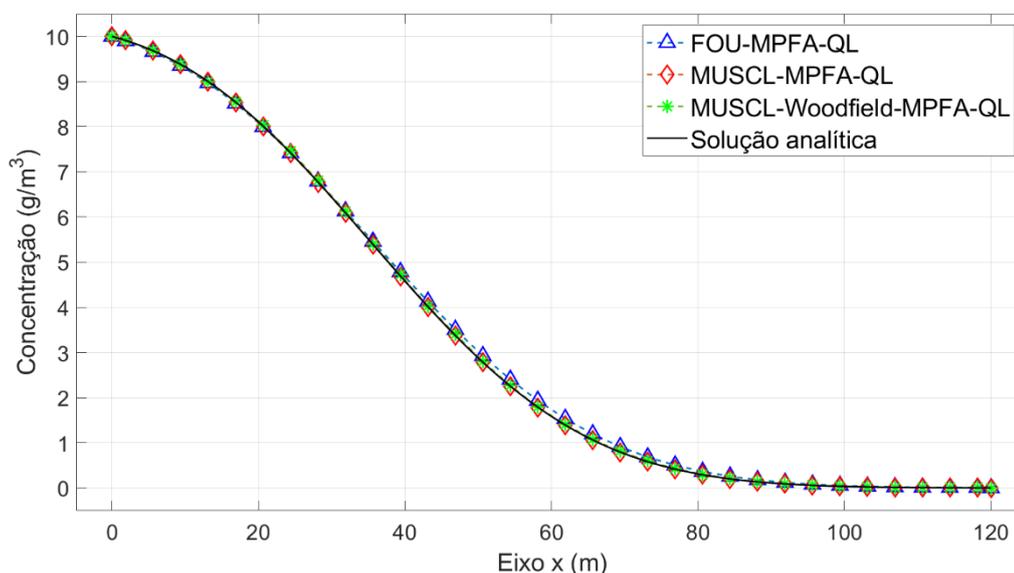


Fonte: O Autor (2021).

O refinamento realizado a partir das malhas anteriores tem a finalidade de examinar a convergência das soluções numéricas obtidas pelos métodos apresentados. Para tal, considera-se também malhas triangulares com 130, 258, 518 e 1030 VC (ver Figura 15), e malhas quadrangulares com 128, 256, 512 e 1024 VC (ver Figura 16). Visto que o fluxo é predominantemente unidimensional, a direção x é mais relevante neste caso, sendo assim, com o propósito de manter a simetria no eixo y , deliberadamente as dimensões das malhas nesta direção passaram por uma adaptação sem perder suas características na análise unidimensional. Conseqüentemente, modificando-se o espaçamento da malha na direção x , os valores de Péclet são alterados para $Pe = 0,375000$, $Pe = 0,187500$, $Pe = 0,093750$ e $Pe = 0,046875$, nesta ordem, para as malhas se considerados: 32 VC ($\Delta x = 3,75000$ m), 64 VC ($\Delta x = 1,87500$ m), 128 VC ($\Delta x = 0,93750$ m) e 256 VC ($\Delta x = 0,46875$ m) inferiores na direção x e, concomitantemente, nos centroides localizados em $y = \Delta y/3$ para malhas triangulares e $y = \Delta y/2$ para malhas quadrangulares.

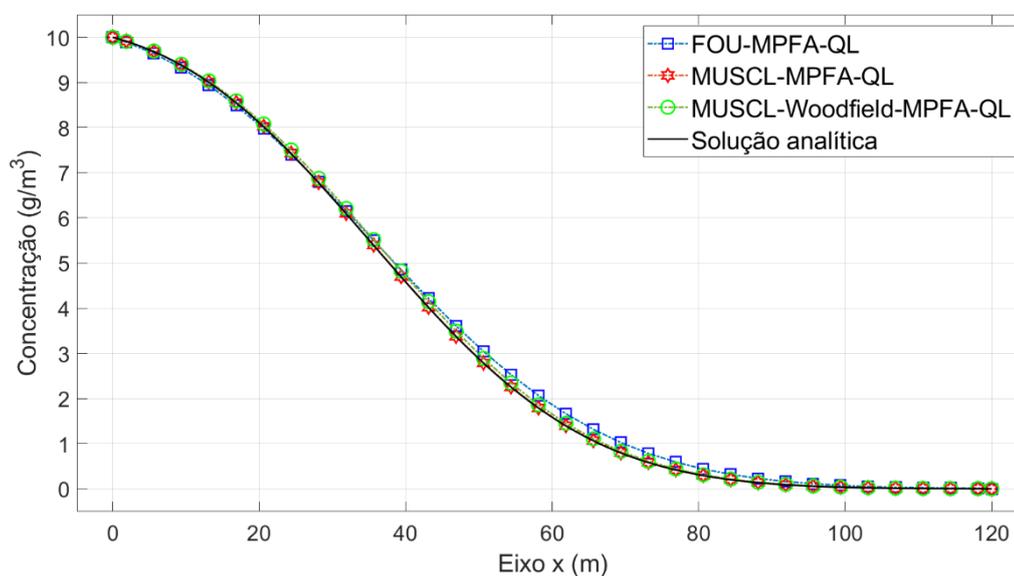
Do Gráfico 6 até o Gráfico 13, apresenta-se os perfis de concentração para os métodos numéricos, com 32 até 256 VC inferiores das malhas e seus valores de contorno na direção x , alternando-se entre VC triangulares e quadrangulares, com a finalidade de comparar os resultados das malhas empregadas.

Gráfico 6 – Perfis de concentração obtidos numericamente pelos métodos FOU-MPFA-QL, MUSCL-MPFA-QL, MUSCL-Woodfield-MPFA-QL e solução analítica, considerando-se 32 VC triangulares e valores de contorno na direção x , para o transporte unidimensional de soluto traçador com difusão dominante. Conforme os seguintes valores: $t = 30$ d, $CFL = 0,2$, $Pe = 0,375000$



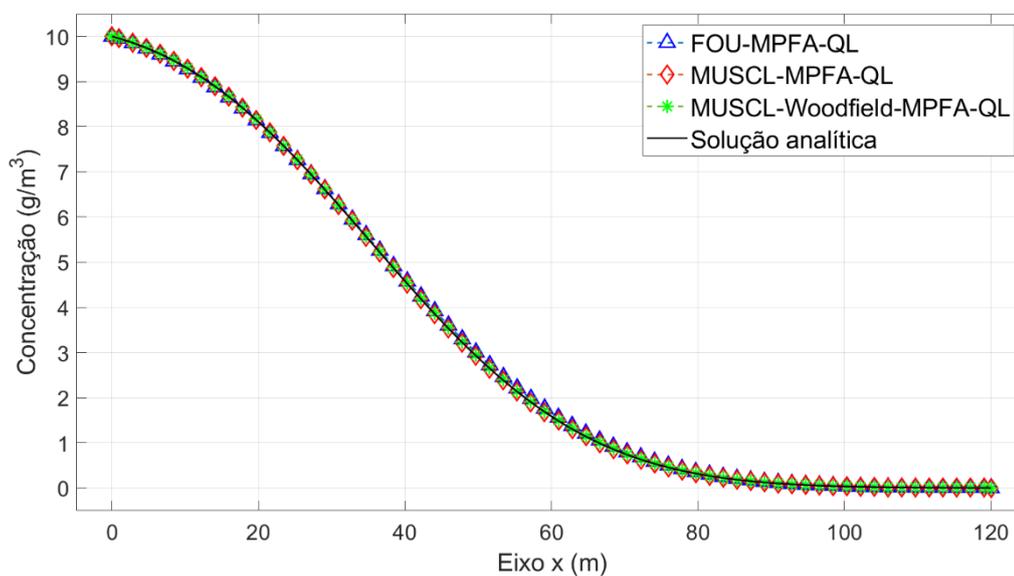
Fonte: O Autor (2021).

Gráfico 7 – Perfis de concentração obtidos numericamente pelos métodos FOU-MPFA-QL, MUSCL-MPFA-QL, MUSCL-Woodfield-MPFA-QL e solução analítica, considerando-se 32 VC quadrangulares e valores de contorno na direção x , para o transporte unidimensional de soluto traçador com difusão dominante. Conforme os seguintes valores: $t = 30$ d, $CFL = 0,2$, $Pe = 0,37500$



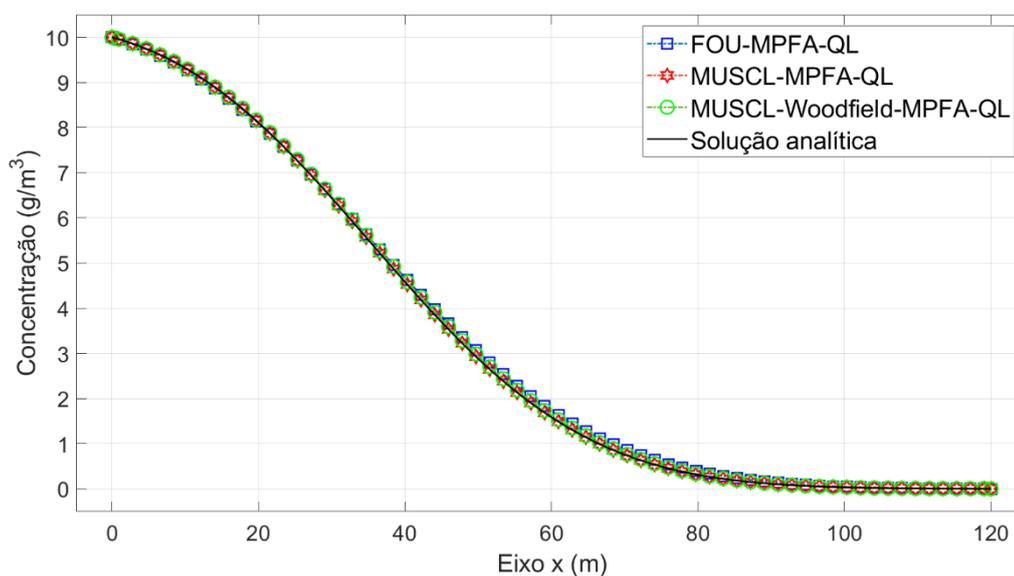
Fonte: O Autor (2021).

Gráfico 8 – Perfis de concentração obtidos numericamente pelos métodos FOU-MPFA-QL, MUSCL-MPFA-QL, MUSCL-Woodfield-MPFA-QL e solução analítica, considerando-se 64 VC triangulares e valores de contorno na direção x , para o transporte unidimensional de soluto traçador com difusão dominante. Conforme os seguintes valores: $t = 30$ d, $CFL = 0,2$, $Pe = 0,187500$



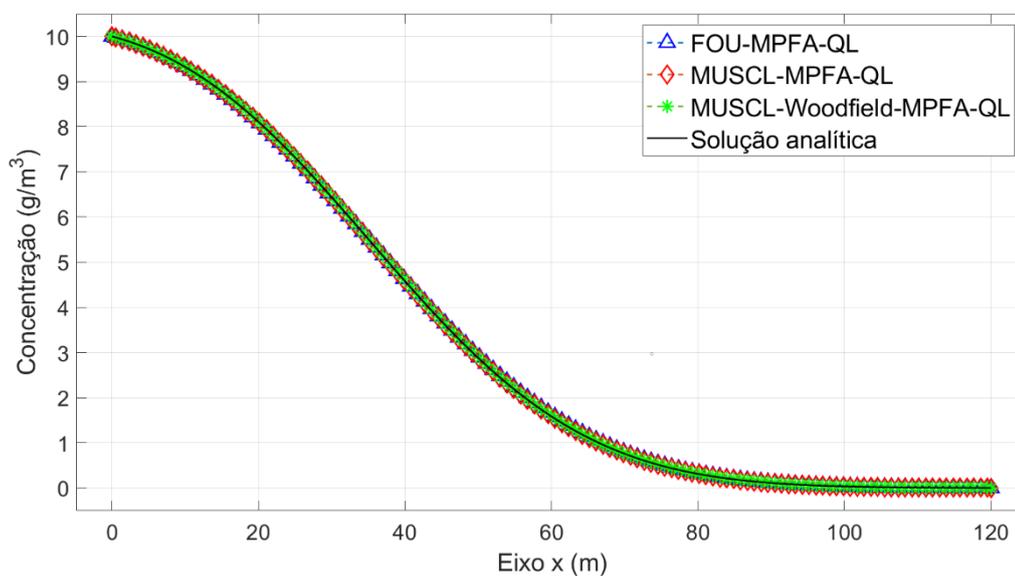
Fonte: O Autor (2021).

Gráfico 9 – Perfis de concentração obtidos numericamente pelos métodos FOU-MPFA-QL, MUSCL-MPFA-QL, MUSCL-Woodfield-MPFA-QL e solução analítica, considerando-se 64 VC quadrangulares e valores de contorno na direção x , para o transporte unidimensional de soluto traçador com difusão dominante. Conforme os seguintes valores: $t = 30$ d, $CFL = 0,2$, $Pe = 0,187500$



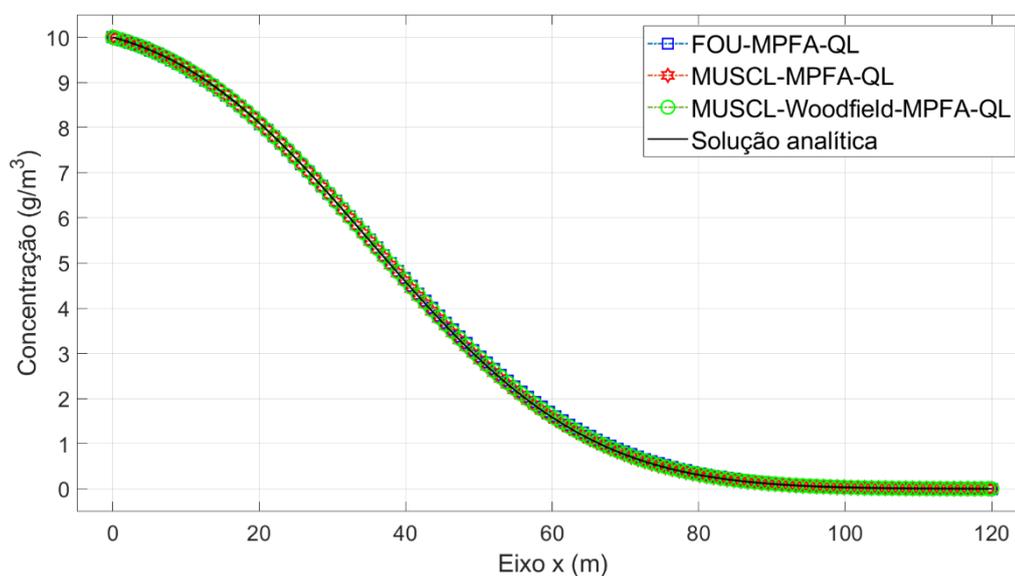
Fonte: O Autor (2021).

Gráfico 10 – Perfis de concentração obtidos numericamente pelos métodos FOU-MPFA-QL, MUSCL-MPFA-QL, MUSCL-Woodfield-MPFA-QL e solução analítica, considerando-se 128 VC triangulares e valores de contorno na direção x , para o transporte unidimensional de soluto traçador com difusão dominante. Conforme os seguintes valores: $t = 30$ d, $CFL = 0,2$, $Pe = 0,093750$



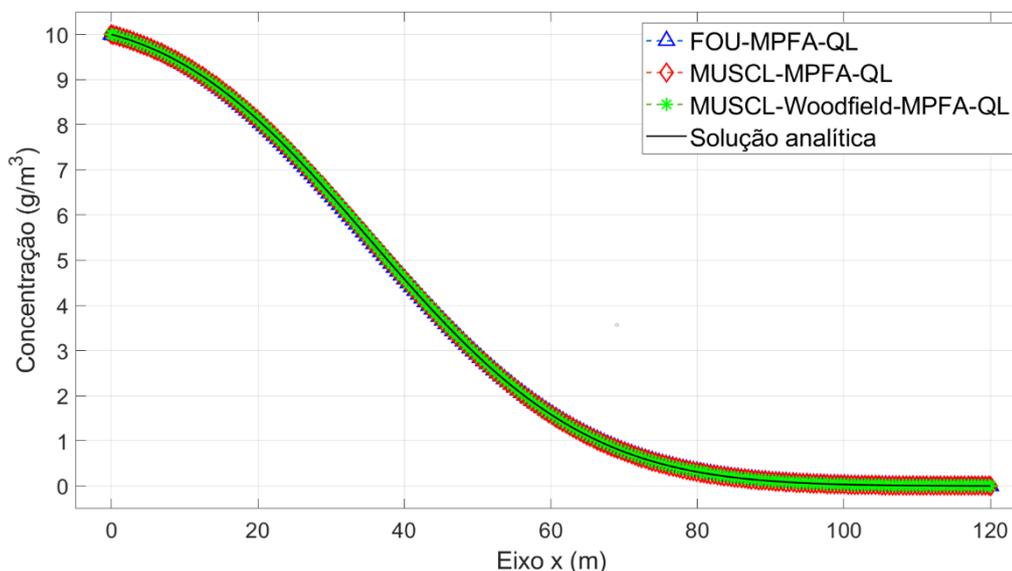
Fonte: O Autor (2021).

Gráfico 11 – Perfis de concentração obtidos numericamente pelos métodos FOU-MPFA-QL, MUSCL-MPFA-QL, MUSCL-Woodfield-MPFA-QL e solução analítica, considerando-se 128 VC quadrangulares e valores de contorno na direção x , para o transporte unidimensional de soluto traçador com difusão dominante. Conforme os seguintes valores: $t = 30$ d, $CFL = 0,2$, $Pe = 0,093750$



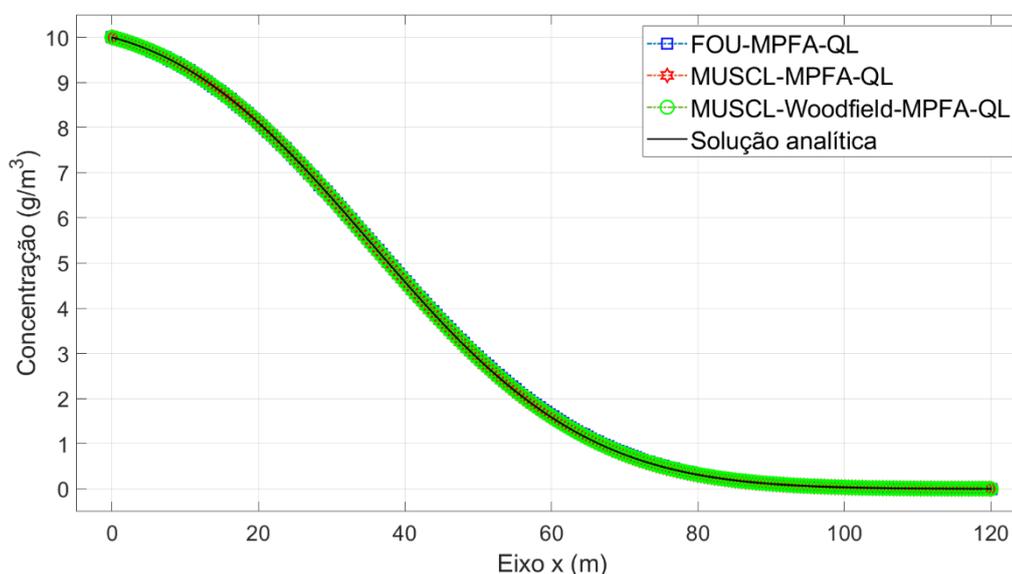
Fonte: O Autor (2021).

Gráfico 12 – Perfis de concentração obtidos numericamente pelos métodos FOU-MPFA-QL, MUSCL-MPFA-QL, MUSCL-Woodfield-MPFA-QL e solução analítica, considerando-se 256 VC triangulares e valores de contorno na direção x , para o transporte unidimensional de soluto traçador com difusão dominante. Conforme os seguintes valores: $t = 30$ d, $CFL = 0,2$, $Pe = 0,046875$



Fonte: O Autor (2021).

Gráfico 13 – Perfis de concentração obtidos numericamente pelos métodos FOU-MPFA-QL, MUSCL-MPFA-QL, MUSCL-Woodfield-MPFA-QL e solução analítica, considerando-se 256 VC quadrangulares e valores de contorno na direção x , para o transporte unidimensional de soluto traçador com difusão dominante. Conforme os seguintes valores: $t = 30$ d, $CFL = 0,2$, $Pe = 0,046875$



Fonte: O Autor (2021).

Pelos perfis de concentração apresentados, consegue-se identificar que a distribuição do soluto traçador acontece de forma difusiva ao longo do domínio, mas o mesmo não alcança o limite a jusante (em $x = 120$ m). Outrossim, pela natureza física estudada, o fluxo advectivo quase não tem contribuição, assim a maior parcela

da análise numérica decorre dos métodos empregados para se calcular a dispersão hidrodinâmica.

Nas Tabelas 1 e 2 são apresentados os valores dos erros numéricos absolutos $\|E\|_{\infty}$, $\|E\|_2$ e $\|E\|_{RMS}$, respectivamente, para os VC triangulares e quadrangulares analisados anteriormente.

Tabela 1 – Verificação de acurácia dos métodos numéricos (FOU-MPFA-QL, MUSCL-MPFA-QL e MUSCL-Woodfield-MPFA-QL) para o problema de transporte unidimensional de soluto traçador com difusão dominante e aplicação de volumes de controle triangulares

FOU-MPFA-QL					
Δx (m)	N.º de divisões	Pe	$\ E\ _{\infty}$	$\ E\ _2$	$\ E\ _{RMS}$
7,5000	16	0,750000	$2,5750 \cdot 10^{-1}$	9,2059	$1,3717 \cdot 10^{-1}$
3,7500	32	0,375000	$1,4684 \cdot 10^{-1}$	4,9964	$7,7191 \cdot 10^{-2}$
1,8750	64	0,187500	$7,9083 \cdot 10^{-2}$	2,6357	$4,1267 \cdot 10^{-2}$
0,9375	128	0,093750	$4,0848 \cdot 10^{-2}$	1,3540	$2,1273 \cdot 10^{-2}$
0,46875	256	0,046875	$2,0895 \cdot 10^{-2}$	$6,9328 \cdot 10^{-1}$	$1,0880 \cdot 10^{-2}$
MUSCL-MPFA-QL					
Δx (m)	N.º de divisões	Pe	$\ E\ _{\infty}$	$\ E\ _2$	$\ E\ _{RMS}$
7,5000	16	0,750000	$2,9399 \cdot 10^{-2}$	$8,5328 \cdot 10^{-1}$	$1,4146 \cdot 10^{-2}$
3,7500	32	0,375000	$7,9031 \cdot 10^{-3}$	$2,3163 \cdot 10^{-1}$	$3,8447 \cdot 10^{-3}$
1,8750	64	0,187500	$2,4698 \cdot 10^{-3}$	$7,1145 \cdot 10^{-2}$	$1,1483 \cdot 10^{-3}$
0,9375	128	0,093750	$2,7226 \cdot 10^{-3}$	$1,8391 \cdot 10^{-2}$	$4,2545 \cdot 10^{-4}$
0,46875	256	0,046875	$2,9001 \cdot 10^{-3}$	$1,0761 \cdot 10^{-2}$	$3,9094 \cdot 10^{-4}$
MUSCL-Woodfield-MPFA-QL					
Δx (m)	N.º de divisões	Pe	$\ E\ _{\infty}$	$\ E\ _2$	$\ E\ _{RMS}$
7,5000	16	0,750000	$8,0734 \cdot 10^{-2}$	2,0555	$3,3679 \cdot 10^{-2}$
3,7500	32	0,375000	$3,9788 \cdot 10^{-2}$	$9,6517 \cdot 10^{-1}$	$1,5328 \cdot 10^{-2}$
1,8750	64	0,187500	$1,9173 \cdot 10^{-2}$	$5,0295 \cdot 10^{-1}$	$7,8737 \cdot 10^{-3}$
0,9375	128	0,093750	$1,1763 \cdot 10^{-2}$	$5,5042 \cdot 10^{-1}$	$7,5787 \cdot 10^{-3}$
0,46875	256	0,046875	$9,8025 \cdot 10^{-3}$	$3,6988 \cdot 10^{-1}$	$5,5020 \cdot 10^{-3}$

Fonte: O Autor (2021).

Tabela 2 – Verificação de acurácia dos métodos numéricos (FOU-MPFA-QL, MUSCL-MPFA-QL e MUSCL-Woodfield-MPFA-QL) para o problema de transporte unidimensional de soluto traçador com difusão dominante e aplicação de volumes de controle quadrangulares

FOU-MPFA-QL					
Δx (m)	N.º de divisões	Pe	$\ E\ _{\infty}$	$\ E\ _2$	$\ E\ _{RMS}$
7,5000	16	0,750000	$4,5648 \cdot 10^{-1}$	$1,7549 \cdot 10^1$	$2,5226 \cdot 10^{-1}$
3,7500	32	0,375000	$2,7590 \cdot 10^{-1}$	9,6464	$1,4634 \cdot 10^{-1}$
1,8750	64	0,187500	$1,5285 \cdot 10^{-1}$	5,1576	$8,0194 \cdot 10^{-2}$
0,9375	128	0,093750	$8,0738 \cdot 10^{-2}$	2,6853	$4,2167 \cdot 10^{-2}$
0,46875	256	0,046875	$4,1535 \cdot 10^{-2}$	1,3748	$2,1649 \cdot 10^{-2}$

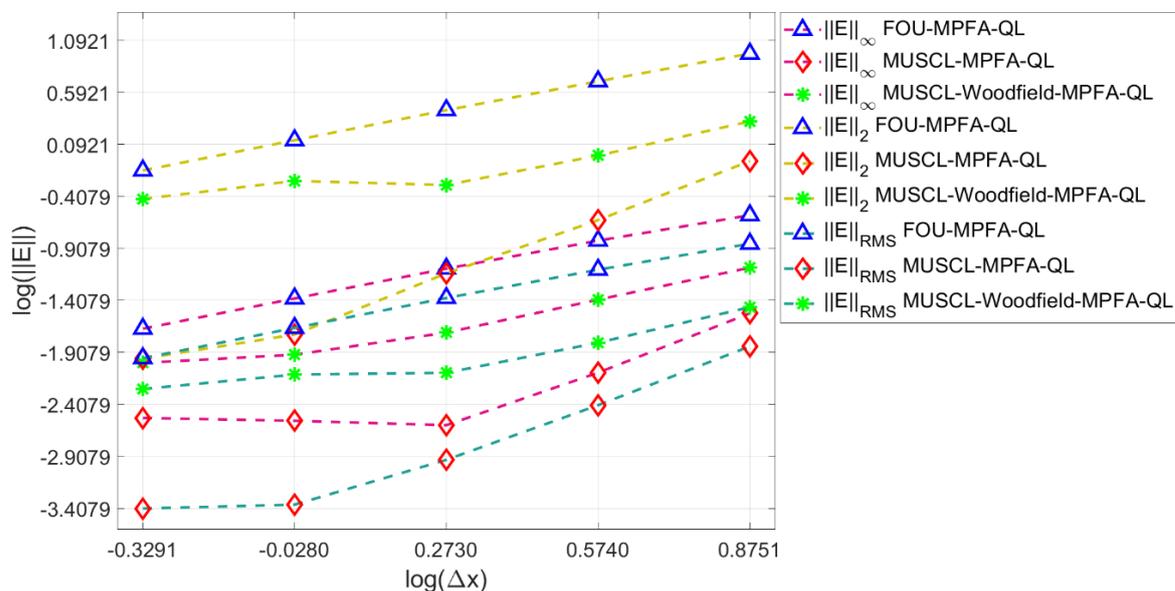
MUSCL-MPFA-QL					
Δx (m)	N.º de divisões	Pe	$\ E\ _{\infty}$	$\ E\ _2$	$\ E\ _{RMS}$
7,5000	16	0,750000	$3,7133 \cdot 10^{-2}$	1,8944	$2,4699 \cdot 10^{-2}$
3,7500	32	0,375000	$1,4075 \cdot 10^{-2}$	$5,2291 \cdot 10^{-1}$	$7,2353 \cdot 10^{-3}$
1,8750	64	0,187500	$3,7137 \cdot 10^{-3}$	$1,1831 \cdot 10^{-1}$	$1,8134 \cdot 10^{-3}$
0,9375	128	0,093750	$2,7851 \cdot 10^{-3}$	$3,2751 \cdot 10^{-2}$	$5,7160 \cdot 10^{-4}$
0,46875	256	0,046875	$2,9186 \cdot 10^{-3}$	$1,4295 \cdot 10^{-2}$	$4,0241 \cdot 10^{-4}$

MUSCL-Woodfield-MPFA-QL					
Δx (m)	N.º de divisões	Pe	$\ E\ _{\infty}$	$\ E\ _2$	$\ E\ _{RMS}$
7,5000	16	0,750000	$2,7060 \cdot 10^{-1}$	8,9422	$1,3516 \cdot 10^{-1}$
3,7500	32	0,375000	$1,2862 \cdot 10^{-1}$	4,0303	$6,4779 \cdot 10^{-2}$
1,8750	64	0,187500	$6,0311 \cdot 10^{-2}$	1,8854	$3,0929 \cdot 10^{-2}$
0,9375	128	0,093750	$3,2119 \cdot 10^{-2}$	1,0263	$1,6578 \cdot 10^{-2}$
0,46875	256	0,046875	$1,7819 \cdot 10^{-2}$	$5,8293 \cdot 10^{-1}$	$9,2335 \cdot 10^{-3}$

Fonte: O Autor (2021).

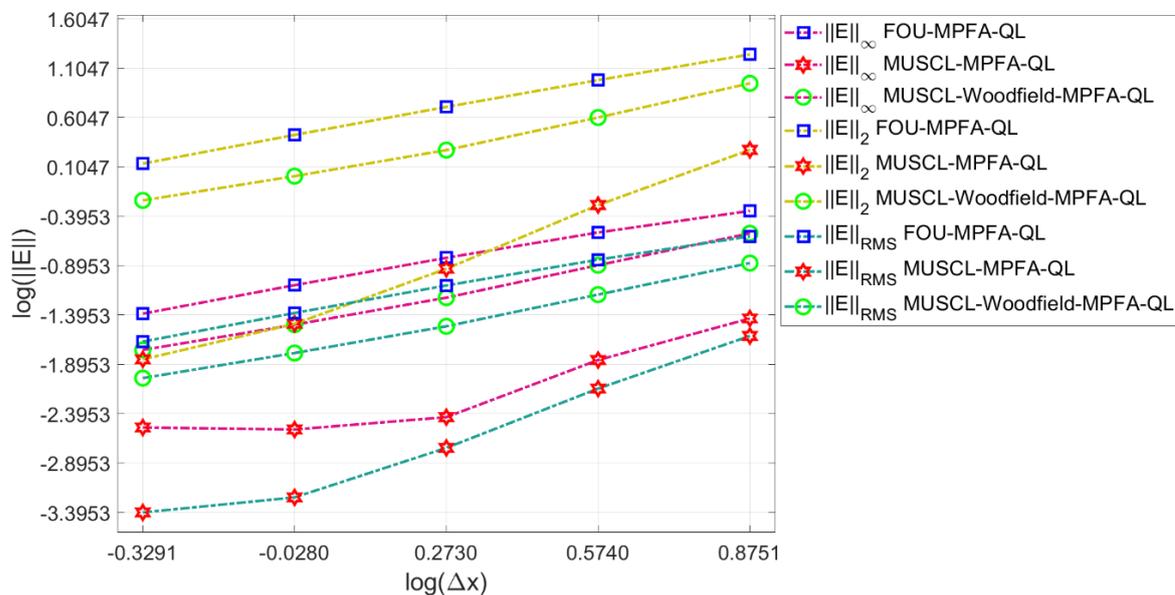
Nos Gráficos 14 e 15 são apresentados os gráficos de convergência – para as normas dos erros numéricos absolutos correspondentes aos métodos numéricos e malhas empregados no refinamento – respectivamente para os VC triangulares e quadrangulares.

Gráfico 14 – Erros associados ao refinamento das malhas com volumes de controle triangulares, para os métodos numéricos aplicados no transporte unidimensional de soluto traçador, com difusão dominante



Fonte: O Autor (2021).

Gráfico 15 – Erros associados ao refinamento das malhas com volumes de controle quadrangulares, para os métodos numéricos aplicados no transporte unidimensional de soluto traçador, com difusão dominante



Fonte: O Autor (2021).

Baseado nos resultados gerados do Gráfico 4 até o 13, interpreta-se que para ambas as malhas empregadas (triangulares e quadrangulares) que houve uma convergência dos métodos numéricos no que diz respeito à solução analítica do problema estudado, ao passo que se aplica refinamento nas malhas, assim todos os métodos se mostraram convergentes para problemas com essas características

supramencionadas. Todavia, o método FOU associado ao MPFA-QL apresentou uma solução menos acurada que os métodos MUSCL e MUSCL-Woodfield.

Confirma-se através dos resultados apresentados nas Tabelas 1 e 2, e nos Gráficos 14 e 15, que todos os métodos aplicados se aproximam da solução analítica, visto que os erros numéricos diminuem conforme se realiza o refinamento das malhas. Não obstante, consegue-se identificar pontualmente pequenas oscilações na análise dos erros, principalmente em malhas com VC triangulares, levando em conta os erros numéricos ∞ e 2, o que acontece bem menos em malha com VC quadrangulares, este último só acontece aplicando-se a norma ∞ dos erros numéricos absolutos, e, os demais tipos de erros (2 e *RMS*) continuam convergindo para todo o refinamento efetuado. Apesar disso, os erros apresentados nas malhas triangulares são sutilmente menores que as malhas quadrangulares, em todos os métodos empregados, desse modo, demonstrando-se que as aplicações das primeiras malhas são mais indicadas para o problema estudado. Desse modo, considera-se que o MPFA-QL associado aos outros métodos pode resolver numericamente este tipo de problema estudado, isto é, o transporte de soluto traçado em reservatórios com difusão dominante. Observa-se, também, que os métodos MUSCL-MPFA-QL e MUSCL-Woodfield apresentaram suas curvas de convergência com menor inclinação, se comparados ao FOU-MPFA-QL. Conseqüentemente, as metodologias de segunda ordem demonstraram ser mais acurada que o FOU-MPFA-QL (1.^a ordem), mesmo com um Δx maior. A combinação dos métodos MUSCL-MPFA-QL se mostrou mais acurada – entre as que foram aplicadas – para lidar com este tipo de problema estudado, logo, os mesmos apresentaram-se mais indicados para adquirir resultados em problemas com o número de Péclet pequeno.

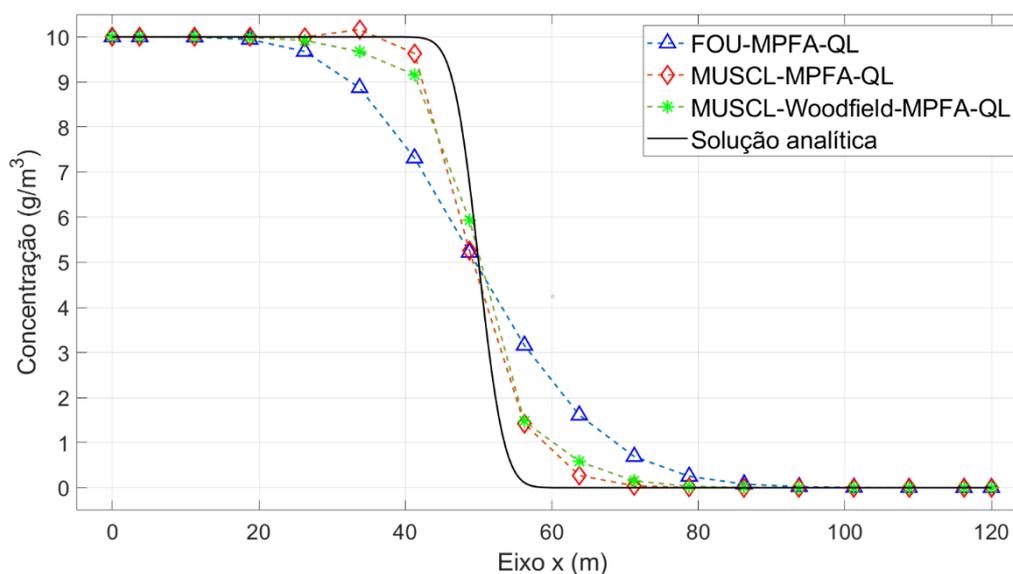
4.1.2 Dispersão Hidrodinâmica com Advecção Dominante

Este problema de advecção dominante, considera-se o mesmo domínio (ver Figura 14), malhas (ver Figura 15 e Figura 16) e dados da seção anterior, com ressalva do coeficiente de dispersividade longitudinal ser atribuído como $\alpha_L = 0,075$ m e o coeficiente de dispersão longitudinal $D_L = 0,075$ m²/d. O intervalo de tempo aplicado foi de $\Delta t = 0,01$ d, além disso, o tempo considerado para os resultados numéricos e a solução analítica é $t = 50$ d. Dado que as malha empregadas para discretizar o

problema, e a velocidade de escoamento do fluido no reservatório, permaneceram as mesmas do problema analisado anteriormente, a alteração no número de Péclet decorreu pela mudança do coeficiente de dispersão longitudinal, resultante da física investigada. Assim, não se faz necessário atender os critérios do número de Péclet mencionados na seção anterior.

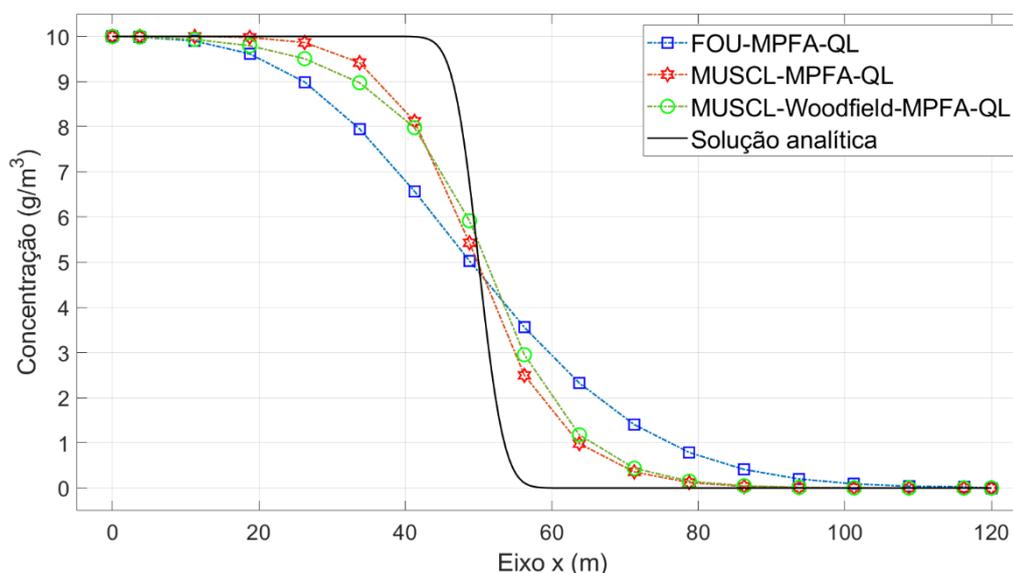
Nos Gráficos 16 e 17, observa-se os perfis de concentração no tempo $t = 50$ d respectivamente para as malhas (M1 e M6) limitadas aos 16 VC triangulares e quadrangulares inferiores, bem como seus valores de contorno na direção x , empregando-se os métodos FOU-MPFA-QL, MUSCL-MPFA-QL, MUSCL-Woodfield-MPFA-QL e a solução analítica.

Gráfico 16 – Perfis de concentração obtidos numericamente pelos métodos FOU-MPFA-QL, MUSCL-MPFA-QL, MUSCL-Woodfield-MPFA-QL e solução analítica, considerando-se 16 VC triangulares e valores de contorno na direção x , para o transporte unidimensional de soluto traçador com advecção dominante. Conforme os seguintes valores: $t = 50$ d, $Pe = 100,00$



Fonte: O Autor (2021).

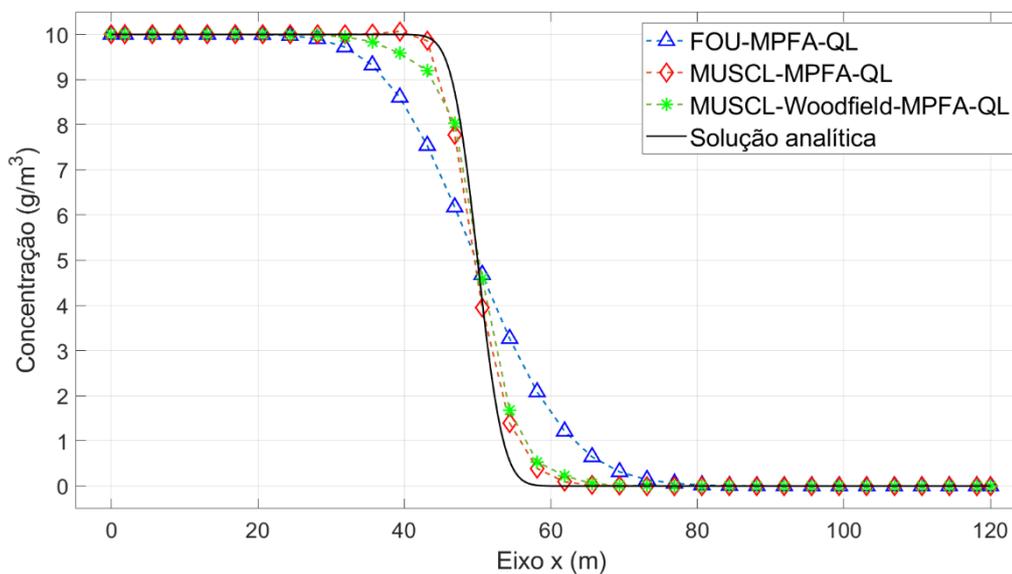
Gráfico 17 – Perfis de concentração obtidos numericamente pelos métodos FOU-MPFA-QL, MUSCL-MPFA-QL, MUSCL-Woodfield-MPFA-QL e solução analítica, considerando-se 16 VC quadrangulares e valores de contorno na direção x , para o transporte unidimensional de soluto traçador com advecção dominante. Conforme os seguintes valores: $t = 50$ d, $Pe = 100,00$



Fonte: O Autor (2021).

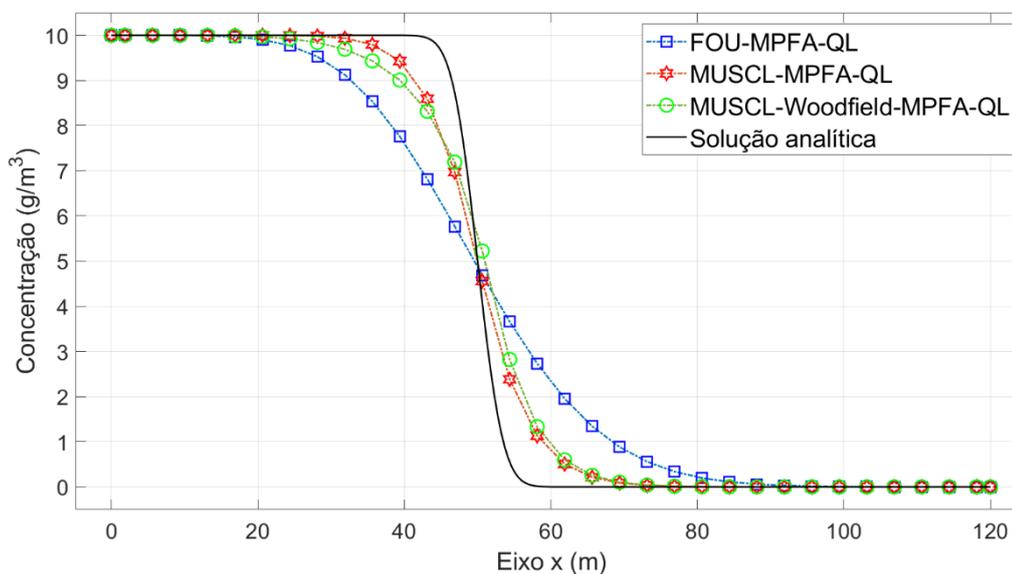
Com base nos resultados do Gráfico 16 – na malha com VC triangulares – percebe-se que a metodologia de segunda ordem, MUSCL-MPFA-QL, tem uma sutil oscilação numérica que acontece próximo à descontinuidade resultante do problema ser fortemente advectivo ($Pe = 100$). O mesmo não acontece quando se aplica a malha com VC quadrangulares (ver Gráfico 17), porém a solução se torna mais difusiva numericamente. Desse modo, realiza-se refinamentos e variações das malhas, assim como na seção anterior (i.e., problema fortemente difusivo), a fim de avaliar o comportamento dos métodos numéricos estudados e suas respectivas acurácias para o problema que é fortemente advectivo. Do Gráfico 18 até o Gráfico 25 são apresentados os perfis de concentração para 32 até 256 VC triangulares e quadrangulares inferiores e seus valores de contorno na direção x .

Gráfico 18 – Perfis de concentração obtidos numericamente pelos métodos FOU-MPFA-QL, MUSCL-MPFA-QL, MUSCL-Woodfield-MPFA-QL e solução analítica, considerando-se 32 VC triangulares e valores de contorno na direção x , para o transporte unidimensional de soluto traçador com advecção dominante. Conforme os seguintes valores: $t = 50$ d, $Pe = 50,00$



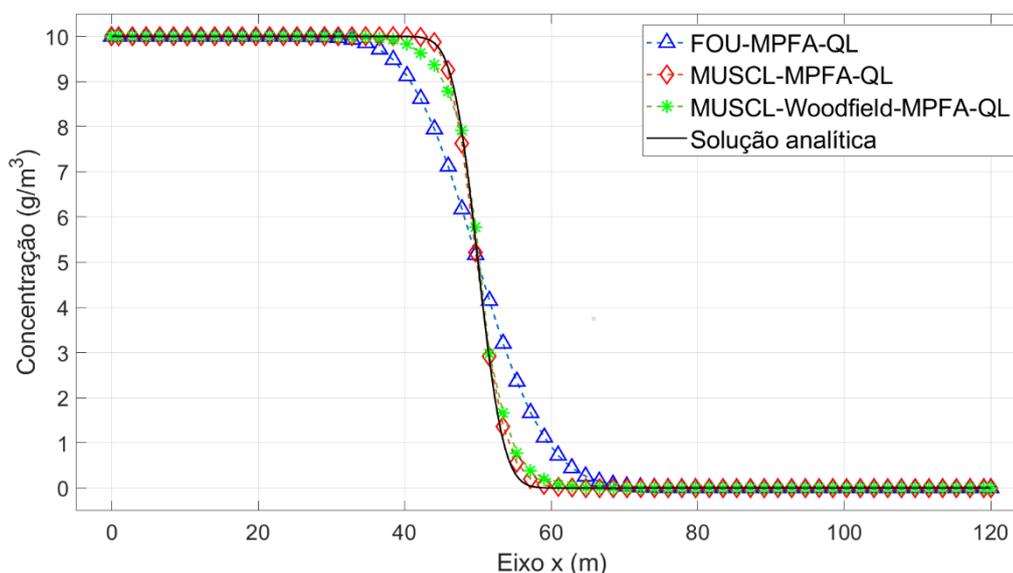
Fonte: O Autor (2021).

Gráfico 19 – Perfis de concentração obtidos numericamente pelos métodos FOU-MPFA-QL, MUSCL-MPFA-QL, MUSCL-Woodfield-MPFA-QL e solução analítica, considerando-se 32 VC quadrangulares e valores de contorno na direção x , para o transporte unidimensional de soluto traçador com advecção dominante. Conforme os seguintes valores: $t = 50$ d, $Pe = 50,00$



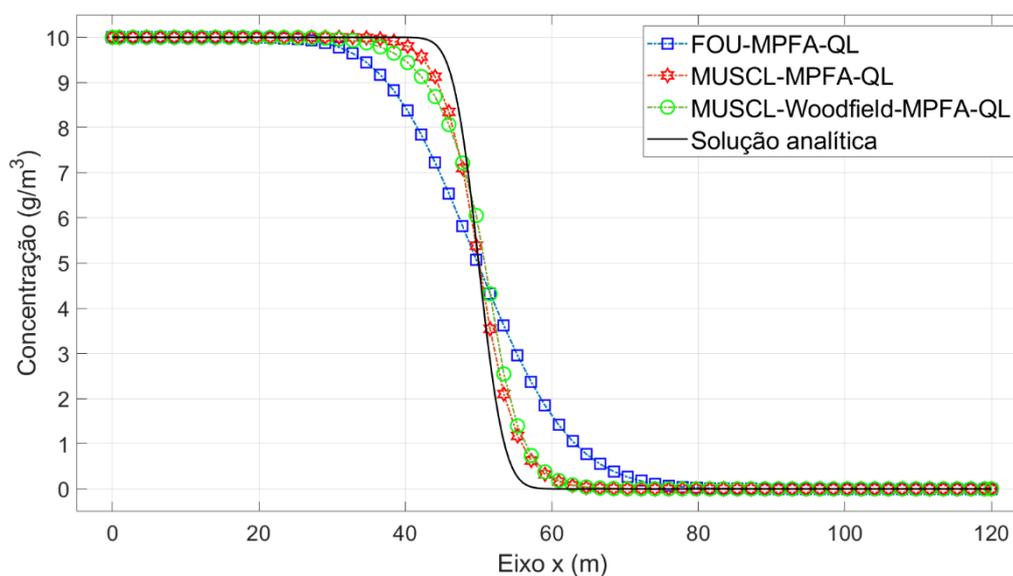
Fonte: O Autor (2021).

Gráfico 20 – Perfis de concentração obtidos numericamente pelos métodos FOU-MPFA-QL, MUSCL-MPFA-QL, MUSCL-Woodfield-MPFA-QL e solução analítica, considerando-se 64 VC triangulares e valores de contorno na direção x , para o transporte unidimensional de soluto traçador com advecção dominante. Conforme os seguintes valores: $t = 50$ d, $Pe = 25,00$



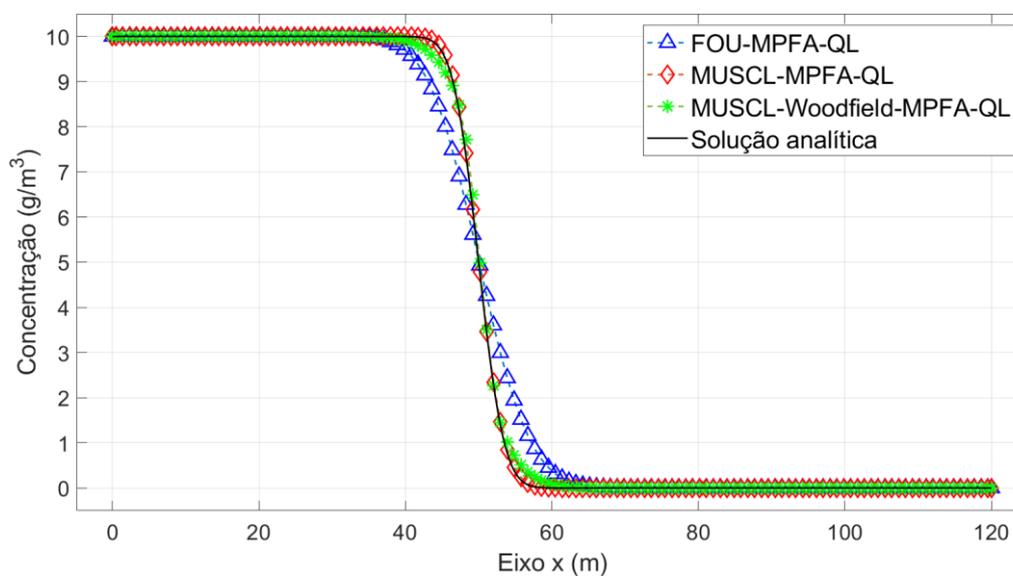
Fonte: O Autor (2021).

Gráfico 21 – Perfis de concentração obtidos numericamente pelos métodos FOU-MPFA-QL, MUSCL-MPFA-QL, MUSCL-Woodfield-MPFA-QL e solução analítica, considerando-se 64 VC quadrangulares e valores de contorno na direção x , para o transporte unidimensional de soluto traçador com advecção dominante. Conforme os seguintes valores: $t = 50$ d, $Pe = 25,00$



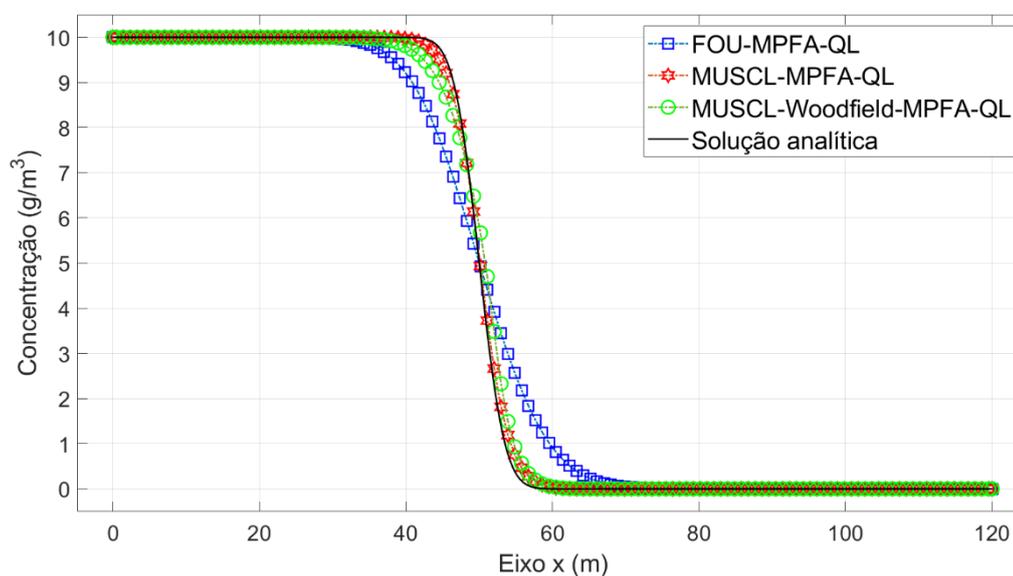
Fonte: O Autor (2021).

Gráfico 22 – Perfis de concentração obtidos numericamente pelos métodos FOU-MPFA-QL, MUSCL-MPFA-QL, MUSCL-Woodfield-MPFA-QL e solução analítica, considerando-se 128 VC triangulares e valores de contorno na direção x , para o transporte unidimensional de soluto traçador com advecção dominante. Conforme os seguintes valores: $t = 50$ d, $Pe = 12,50$



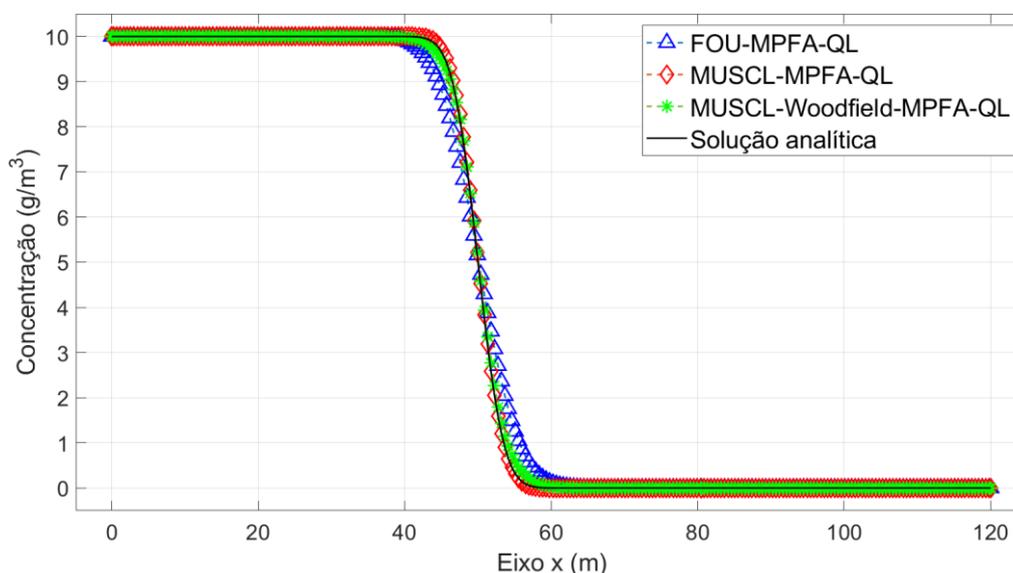
Fonte: O Autor (2021).

Gráfico 23 – Perfis de concentração obtidos numericamente pelos métodos FOU-MPFA-QL, MUSCL-MPFA-QL, MUSCL-Woodfield-MPFA-QL e solução analítica, considerando-se 128 VC quadrangulares e valores de contorno na direção x , para o transporte unidimensional de soluto traçador com advecção dominante. Conforme os seguintes valores: $t = 50$ d, $Pe = 12,50$



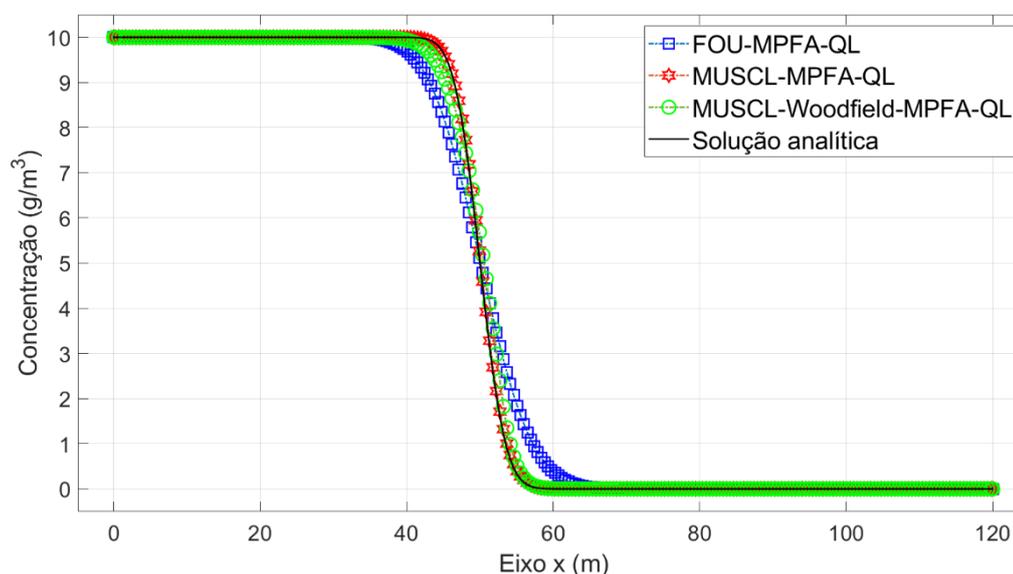
Fonte: O Autor (2021).

Gráfico 24 – Perfis de concentração obtidos numericamente pelos métodos FOU-MPFA-QL, MUSCL-MPFA-QL, MUSCL-Woodfield-MPFA-QL e solução analítica, considerando-se 256 VC triangulares e valores de contorno na direção x , para o transporte unidimensional de soluto traçador com advecção dominante. Conforme os seguintes valores: $t = 50$ d, $Pe = 6,25$



Fonte: O Autor (2021).

Gráfico 25 – Perfis de concentração obtidos numericamente pelos métodos FOU-MPFA-QL, MUSCL-MPFA-QL, MUSCL-Woodfield-MPFA-QL e solução analítica, considerando-se 256 VC quadrangulares e valores de contorno na direção x , para o transporte unidimensional de soluto traçador com advecção dominante. Conforme os seguintes valores: $t = 50$ d, $Pe = 6,25$



Fonte: O Autor (2021).

Nas Tabelas 3 e 4 são apresentados os valores dos erros numéricos absolutos $\|E\|_{\infty}$, $\|E\|_2$ e $\|E\|_{RMS}$, respectivamente, para os VC triangulares e quadrangulares analisados anteriormente. Nos Gráficos 26 e 27 são apresentados os valores de convergência, para as normas dos erros numéricos absolutos associadas aos

métodos FOU-MPFA-QL, MUSCL-MPFA-QL e MUSCL-Woodfield-MPFA-QL, respectivamente, para os VC triangulares e quadrangulares.

Tabela 3 – Verificação de acurácia dos métodos numéricos (FOU-MPFA-QL, MUSCL-MPFA-QL e MUSCL-Woodfield-MPFA-QL) para o problema de transporte unidimensional de soluto traçador com advecção dominante e aplicação de volumes de controle triangulares

FOU-MPFA-QL					
Δx (m)	N.º de divisões	Pe	$\ E\ _{\infty}$	$\ E\ _2$	$\ E\ _{RMS}$
7,5000	16	100,00	3,0445	60,6323	1,2079
3,7500	32	50,00	2,7120	40,3021	$9,4794 \cdot 10^{-1}$
1,8750	64	25,00	2,1877	25,7203	$6,8236 \cdot 10^{-1}$
0,9375	128	12,50	1,6688	15,57118	$4,6007 \cdot 10^{-1}$
0,46875	256	6,25	1,1542	8,9152	$2,8735 \cdot 10^{-1}$
MUSCL-MPFA-QL					
Δx (m)	N.º de divisões	Pe	$\ E\ _{\infty}$	$\ E\ _2$	$\ E\ _{RMS}$
7,5000	16	100,00	1,5033	19,3976	$5,1177 \cdot 10^{-1}$
3,7500	32	50,00	$9,5612 \cdot 10^{-1}$	6,8887	$2,3730 \cdot 10^{-1}$
1,8750	64	25,00	$3,2098 \cdot 10^{-1}$	2,0053	$7,3061 \cdot 10^{-2}$
0,9375	128	12,50	$9,4642 \cdot 10^{-2}$	$6,1699 \cdot 10^{-1}$	$2,1529 \cdot 10^{-2}$
0,46875	256	6,25	$1,5879 \cdot 10^{-1}$	$6,2763 \cdot 10^{-1}$	$2,8885 \cdot 10^{-2}$
MUSCL-Woodfield-MPFA-QL					
Δx (m)	N.º de divisões	Pe	$\ E\ _{\infty}$	$\ E\ _2$	$\ E\ _{RMS}$
7,5000	16	100,00	1,3598	22,2911	$4,8092 \cdot 10^{-1}$
3,7500	32	50,00	1,1241	12,0497	$3,1058 \cdot 10^{-1}$
1,8750	64	25,00	$6,1568 \cdot 10^{-1}$	5,2007	$1,5701 \cdot 10^{-1}$
0,9375	128	12,50	$3,7086 \cdot 10^{-1}$	3,3238	$9,9521 \cdot 10^{-2}$
0,46875	256	6,25	$2,7557 \cdot 10^{-1}$	2,0033	$6,4655 \cdot 10^{-2}$

Fonte: O Autor (2021).

Tabela 4 – Verificação de acurácia dos métodos numéricos (FOU-MPFA-QL, MUSCL-MPFA-QL e MUSCL-Woodfield-MPFA-QL) para o problema de transporte unidimensional de soluto traçador com advecção dominante e aplicação de volumes de controle quadrangulares

FOU-MPFA-QL					
Δx (m)	N.º de divisões	Pe	$\ E\ _{\infty}$	$\ E\ _2$	$\ E\ _{RMS}$
7,5000	16	100,00	3,4442	92,4577	1,5840
3,7500	32	50,00	3,1227	62,1429	1,2628

1,8750	64	25,00	2,7662	40,8923	$9,5086 \cdot 10^{-1}$
0,9375	128	12,50	2,2229	25,8030	$6,8313 \cdot 10^{-1}$
0,46875	256	6,25	1,6862	15,5801	$4,6099 \cdot 10^{-1}$

MUSCL-MPFA-QL

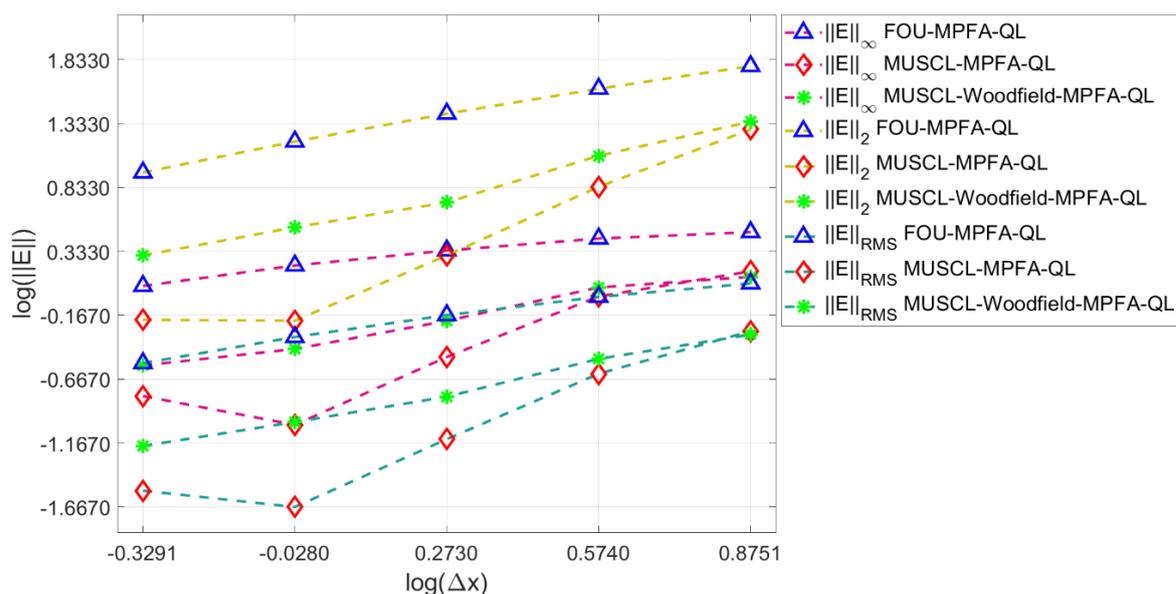
Δx (m)	N.º de divisões	Pe	$\ E\ _{\infty}$	$\ E\ _2$	$\ E\ _{RMS}$
7,5000	16	100,00	2,3821	41,5517	$8,8071 \cdot 10^{-1}$
3,7500	32	50,00	1,8315	21,8362	$5,7013 \cdot 10^{-1}$
1,8750	64	25,00	1,0538	9,4714	$2,8436 \cdot 10^{-1}$
0,9375	128	12,50	$4,2400 \cdot 10^{-1}$	3,0545	$1,0040 \cdot 10^{-1}$
0,46875	256	6,25	$1,5826 \cdot 10^{-1}$	$8,7490 \cdot 10^{-1}$	$3,3138 \cdot 10^{-2}$

MUSCL-Woodfield-MPFA-QL

Δx (m)	N.º de divisões	Pe	$\ E\ _{\infty}$	$\ E\ _2$	$\ E\ _{RMS}$
7,5000	16	100,00	2,8376	49,4872	$9,9244 \cdot 10^{-1}$
3,7500	32	50,00	2,2718	29,3028	$6,8537 \cdot 10^{-1}$
1,8750	64	25,00	1,4982	15,1596	$4,2003 \cdot 10^{-1}$
0,9375	128	12,50	1,2550	8,2124	$2,6634 \cdot 10^{-1}$
0,46875	256	6,25	$9,9225 \cdot 10^{-1}$	4,8699	$1,8154 \cdot 10^{-1}$

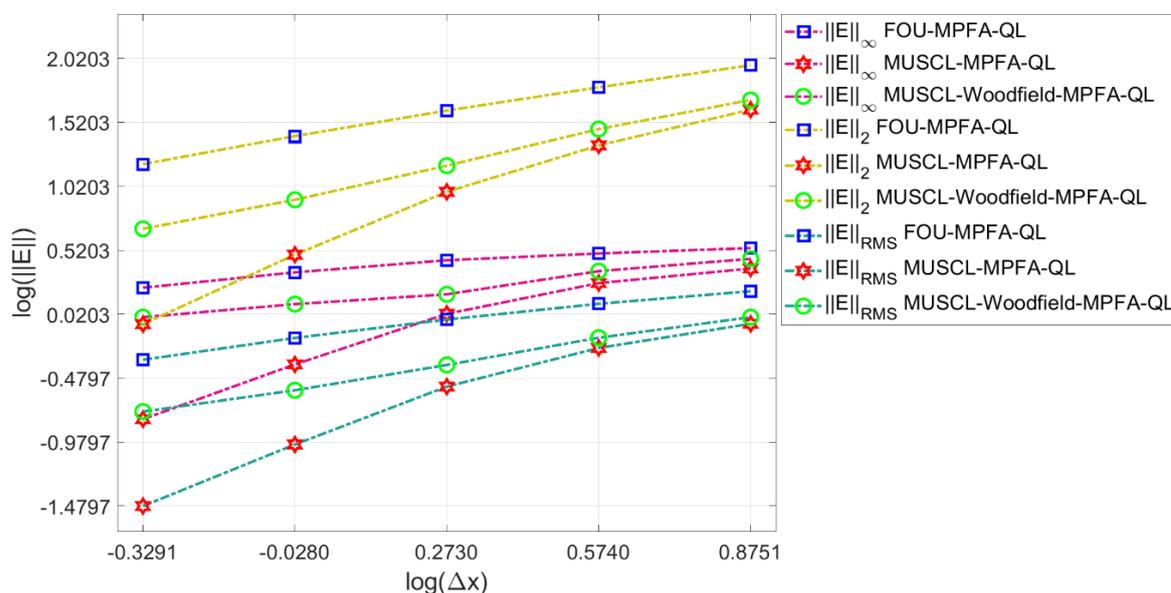
Fonte: O Autor (2021).

Gráfico 26 – Erros associados ao refinamento das malhas com volumes de controle triangulares, para os métodos numéricos aplicados (FOU-MPFA-QL, MUSCL-MPFA-QL, MUSCL-Woodfield-MPFA-QL) no transporte unidimensional de soluto traçador, com advecção dominante



Fonte: O Autor (2021).

Gráfico 27 – Erros associados ao refinamento das malhas com volumes de controle quadrangulares, para os métodos numéricos aplicados (FOU-MPFA-QL, MUSCL-MPFA-QL, MUSCL-Woodfield-MPFA-QL) no transporte unidimensional de soluto traçador, com advecção dominante

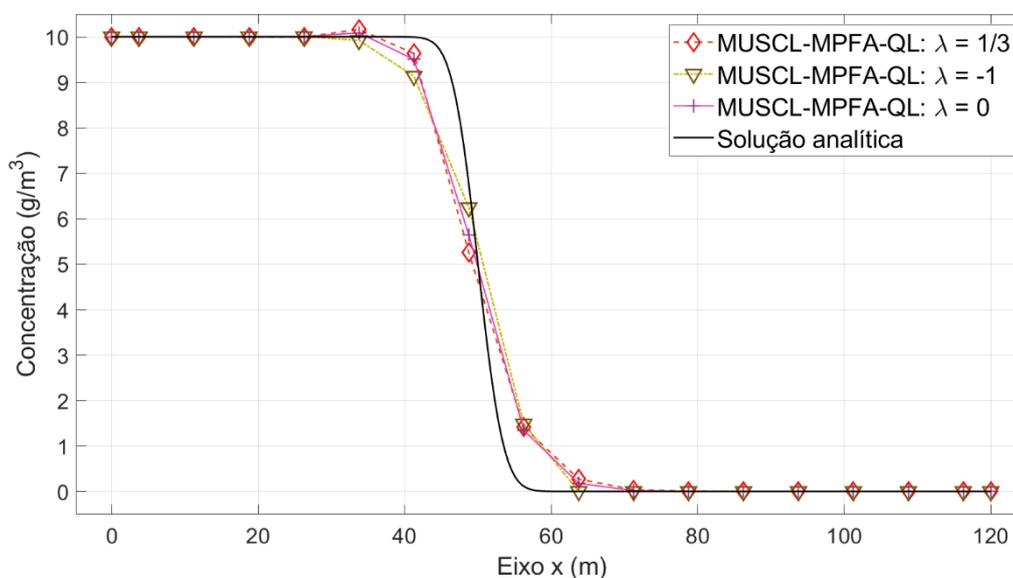


Fonte: O Autor (2021).

Do Gráfico 16 até o Gráfico 25, observou-se que para ambas as malhas, à medida que se realiza refinamentos das mesmas, as soluções numéricas convergem para a solução analítica do problema (ver Eq. (127)). A oscilação numérica identificada na primeira malha (M1, ver Gráfico 16) também foi atenuada com o refinamento da mesma. Assim, pode-se observar pelos gráficos que o método MUSCL-MPFA-QL obteve uma solução mais aproximada da solução analítica, seguido dos métodos MUSCL-Woodfield-MPFA-QL e FOU-MPFA-QL, nesta ordem, para ambos os tipos de malhas empregadas nesse estudo. Este último, sendo um método de baixa ordem, tornou-se mais difusivo numericamente durante todo o processo de refinamento. Nas Tabelas 3 e 4 é comprovado, através da avaliação dos erros numéricos, a validação dos métodos numéricos, visto que os erros tendem a zero à proporção que se realiza o refinamento das malhas. A exceção acontece no método MUSCL-MPFA-QL das malhas com VC triangulares, que independentemente do tipo de erro numérico utilizado na análise (∞ , 2, *RMS*), encontra-se uma instabilidade na convergência do método numérico. Por isso, e também, devido à oscilação numérica verificada próxima à descontinuidade que apresentou o MUSCL-MPFA-QL nas malhas com VC triangulares, avalia-se o comportamento do mesmo sob influência dos parâmetros empregados no método. Assim, estuda-se o comportamento deste método com diversos valores de parâmetros: $\lambda = 1/3$ (método de ponderação a montante de 3.^a

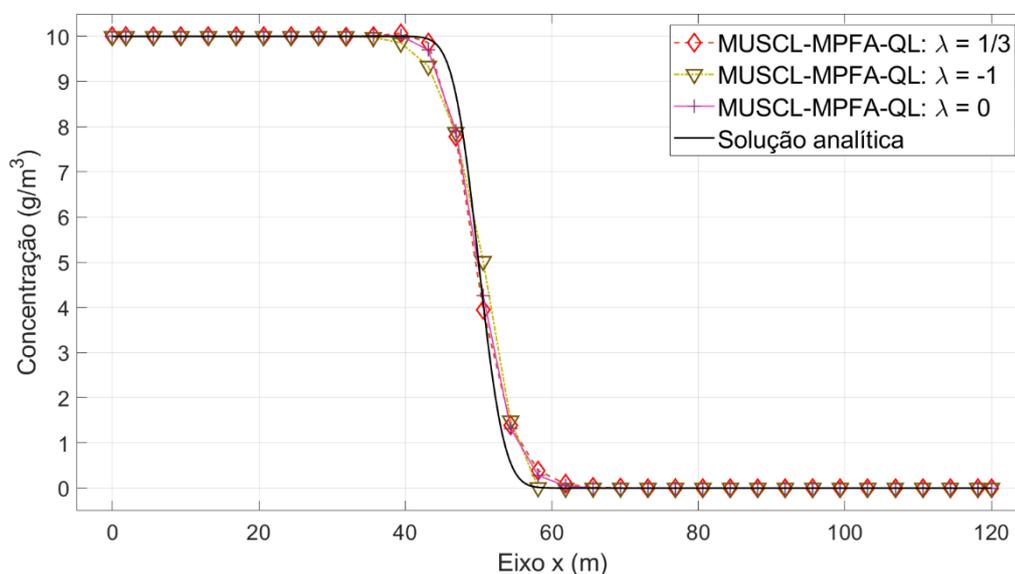
ordem), $\lambda = -1$ (método de ponderação a montante de 2.^a ordem) e $\lambda = 0$ (método de Fromm). Do Gráfico 28 até o Gráfico 32 são apresentados os perfis de concentração, para as malhas com VC triangulares (16, 32, 64, 128 e 256 divisões na direção x) e seus valores de contorno na direção x , dos diferentes métodos variantes do MUSCL-MPFA-QL resultantes das modificações efetuadas nos parâmetros de ponderação.

Gráfico 28 – Perfis de concentração obtidos numericamente pelos métodos MUSCL-MPFA-QL ($\lambda = 1/3$, $\lambda = -1$, $\lambda = 0$) e solução analítica, considerando-se 16 VC triangulares e valores de contorno na direção x , para o transporte unidimensional de soluto traçador com advecção dominante. Conforme os seguintes valores: $t = 50$ d, $Pe = 100,00$



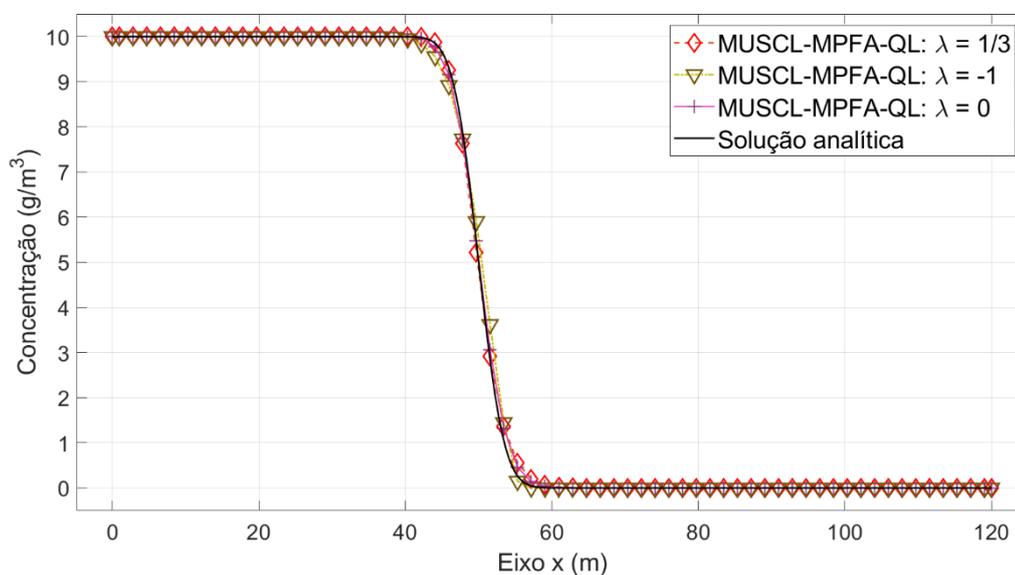
Fonte: O Autor (2021).

Gráfico 29 – Perfis de concentração obtidos numericamente pelos métodos MUSCL-MPFA-QL ($\lambda = 1/3$, $\lambda = -1$, $\lambda = 0$) e solução analítica, considerando-se 32 VC triangulares e valores de contorno na direção x , para o transporte unidimensional de soluto traçador com advecção dominante. Conforme os seguintes valores: $t = 50$ d, $Pe = 50,00$



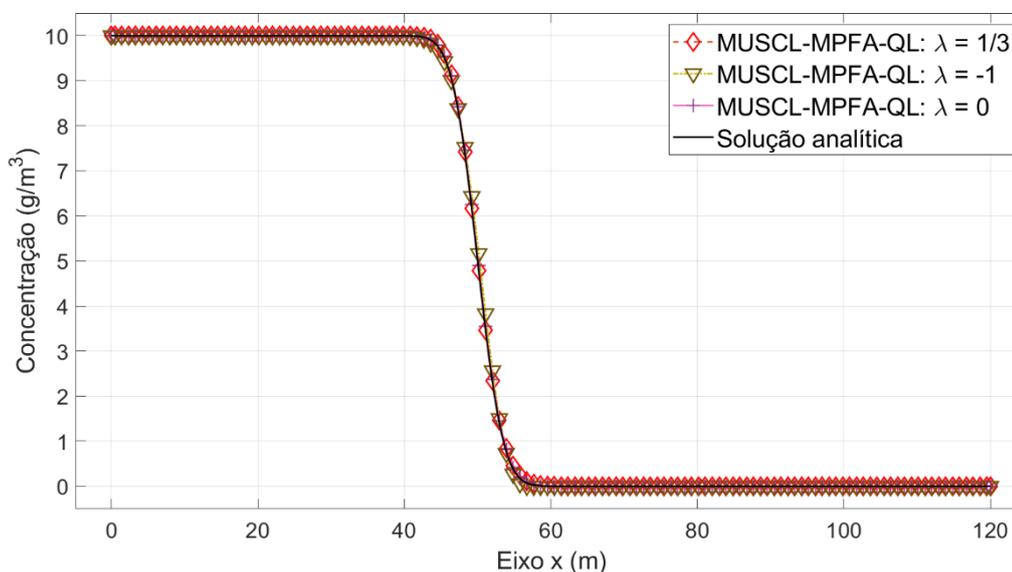
Fonte: O Autor (2021).

Gráfico 30 – Perfis de concentração obtidos numericamente pelos métodos MUSCL-MPFA-QL ($\lambda = 1/3$, $\lambda = -1$, $\lambda = 0$) e solução analítica, considerando-se 64 VC triangulares e valores de contorno na direção x , para o transporte unidimensional de soluto traçador com advecção dominante. Conforme os seguintes valores: $t = 50$ d, $Pe = 25,00$



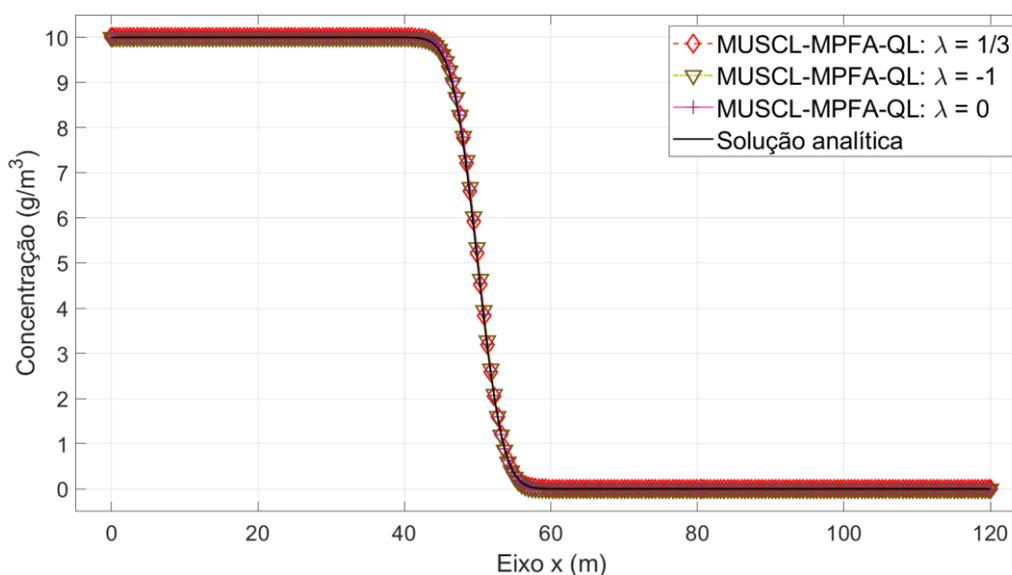
Fonte: O Autor (2021).

Gráfico 31 – Perfis de concentração obtidos numericamente pelos métodos MUSCL-MPFA-QL ($\lambda = 1/3$, $\lambda = -1$, $\lambda = 0$) e solução analítica, considerando-se 128 VC triangulares e valores de contorno na direção x , para o transporte unidimensional de soluto traçador com advecção dominante. Conforme os seguintes valores: $t = 50$ d, $Pe = 12,50$



Fonte: O Autor (2021).

Gráfico 32 – Perfis de concentração obtidos numericamente pelos métodos MUSCL-MPFA-QL ($\lambda = 1/3$, $\lambda = -1$, $\lambda = 0$) e solução analítica, considerando-se 256 VC triangulares e valores de contorno na direção x , para o transporte unidimensional de soluto traçador com advecção dominante. Conforme os seguintes valores: $t = 50$ d, $Pe = 6,25$



Fonte: O Autor (2021).

Na Tabela 5, apresenta-se os valores dos erros numéricos absolutos $\|E\|_{\infty}$, $\|E\|_2$ e $\|E\|_{RMS}$ para os VC triangulares analisados anteriormente, apenas dos parâmetros $\lambda = -1$ e $\lambda = 0$, pois na Tabela 3 já tem os valores dos mesmos erros para $\lambda = 1/3$. No Gráfico 33, apresenta-se os gráficos de convergência dos erros

numéricos referente aos parâmetros empregados no método MUSCL-MPFA-QL ($\lambda = 1/3$, $\lambda = -1$, $\lambda = 0$).

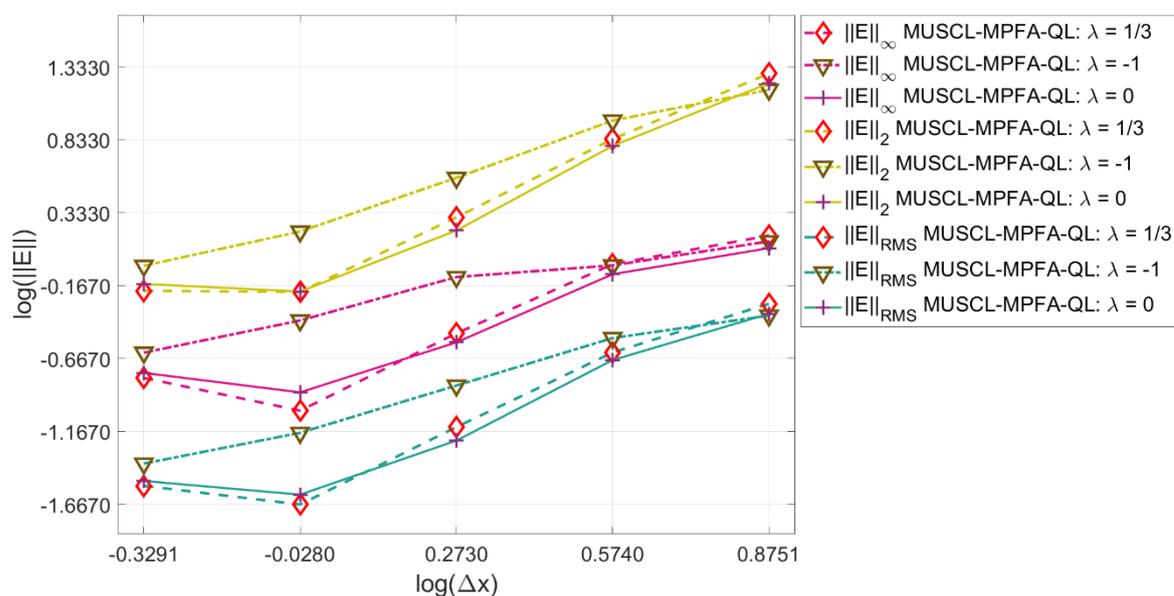
Tabela 5 – Verificação de acurácia da solução obtida pelo MUSCL-MPFA-QL para os diferentes parâmetros de ponderação ($\lambda = -1$, $\lambda = 0$): problema de transporte unidimensional de soluto traçador com advecção dominante e aplicação de volumes de controle triangulares

MUSCL-MPFA-QL: $\lambda = -1$					
Δx (m)	N.º de divisões	Pe	$\ E\ _{\infty}$	$\ E\ _2$	$\ E\ _{RMS}$
7,5000	16	100,00	1,3718	15,0140	$4,2508 \cdot 10^{-1}$
3,7500	32	50,00	$9,3876 \cdot 10^{-1}$	9,2350	$2,9809 \cdot 10^{-1}$
1,8750	64	25,00	$7,8049 \cdot 10^{-1}$	3,7412	$1,4075 \cdot 10^{-1}$
0,9375	128	12,50	$3,9330 \cdot 10^{-1}$	1,6016	$6,6770 \cdot 10^{-2}$
0,46875	256	6,25	$2,3666 \cdot 10^{-1}$	$9,3277 \cdot 10^{-1}$	$4,1078 \cdot 10^{-2}$

MUSCL-MPFA-QL: $\lambda = 0$					
Δx (m)	N.º de divisões	Pe	$\ E\ _{\infty}$	$\ E\ _2$	$\ E\ _{RMS}$
7,5000	16	100,00	1,2326	16,6369	$4,3707 \cdot 10^{-1}$
3,7500	32	50,00	$8,1611 \cdot 10^{-1}$	6,1908	$2,1054 \cdot 10^{-1}$
1,8750	64	25,00	$2,7832 \cdot 10^{-1}$	1,6281	$5,9050 \cdot 10^{-2}$
0,9375	128	12,50	$1,2643 \cdot 10^{-1}$	$6,2064 \cdot 10^{-1}$	$2,5150 \cdot 10^{-2}$
0,46875	256	6,25	$1,7187 \cdot 10^{-1}$	$7,0046 \cdot 10^{-1}$	$3,1194 \cdot 10^{-2}$

Fonte: O Autor (2021).

Gráfico 33 – Erros associados ao refinamento das malhas com volumes de controle triangulares, para os métodos numéricos aplicados (MUSCL-MPFA-QL) no transporte unidimensional de soluto traçador, com advecção dominante



Fonte: O Autor (2021).

Baseado nos gráficos e resultados das tabelas mencionados anteriormente, identifica-se que o método MUSCL-MPFA-QL com aplicação do parâmetro $\lambda = -1$ se torna mais adequado para resolver os problemas com oscilações numéricas causadas pelo elevado gradiente presente na curva de concentração, em um problema fortemente advectivo e malha com VC triangulares. Dito isso, os parâmetros $\lambda = 1/3$ e $\lambda = 0$, são menos adequados para problemas com essas características, observando-se as sutis oscilações numéricas próximas à descontinuidade do fenômeno advectivo e a instabilidade da avaliação dos erros numéricos, independentemente do tipo de erro (∞ , 2, *RMS*) escolhido para a análise. No entanto, para esta dissertação de mestrado, será mantido o valor do parâmetro $\lambda = 1/3$ com o objetivo de manter as características do problema anterior (fortemente difusivo) e *benchmarks* dos casos apresentados, salvo quando for especificado em algum problema particular. Outrossim, aplica-se o limitado de Woodfield nas análises numéricas para se verificar a influência na estabilidade do método MUSCL com a utilização deste limitador.

4.1.3 Dispersão Hidrodinâmica com Termo de Fonte com Decaimento Radioativo

O problema avaliado a seguir é adaptado de Sun (1996), Carvalho (2005) e Chivata (2016). Considera-se o mesmo domínio analisado até agora (ver Figura 14), as malhas com VC triangulares (ver Figura 15) e características físicas da seção anterior, salvo as seguintes informações que são diferentes: o coeficiente de dispersividade longitudinal é $\alpha_L = 0,05$ m e o coeficiente de dispersão longitudinal $D_L = 0,05$ m²/d. Neste estudo, também, é levado em conta a existência de um termo responsável pela perda de concentração (ou massa) do soluto traçador ao longo do tempo, denominado termo de decaimento radioativo, logo, a equação de ADR, Eq. (25), pode ser reescrita da seguinte maneira:

$$\frac{\partial C}{\partial t} = D_L \frac{\partial^2 C}{\partial x^2} - v \frac{\partial C}{\partial x} - \gamma C, \text{ para } 0 < x < 120 \text{ m}, \quad (131)$$

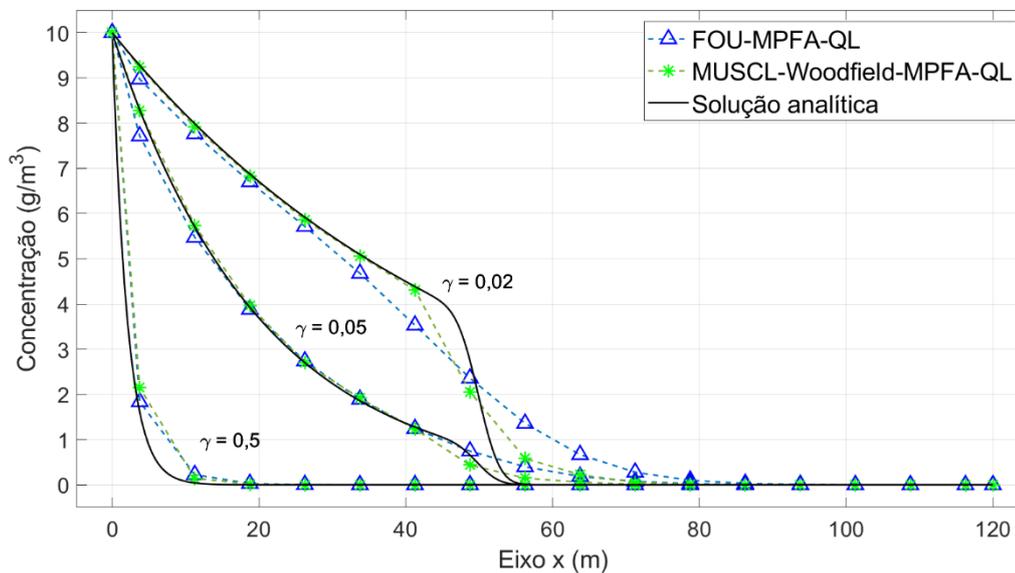
onde $D_L = D_{xx}$ é o coeficiente de dispersão hidrodinâmica longitudinal e γ é a constante de decaimento radioativo do traçador. Com a existência do termo de fonte, este problema tem a seguinte solução analítica (SUN, 1996):

$$C(x, t) = \frac{C_o}{2} \exp\left(\frac{vx}{2D_L}\right) \left\{ \exp\left[-\frac{x}{2D_L} \sqrt{(v^2 + 4\gamma D_L)}\right] \operatorname{erfc}\left[\frac{x - t\sqrt{(v^2 + 4\gamma D_L)}}{2\sqrt{(D_L t)}}\right] - \exp\left[\frac{x}{2D_L} \sqrt{(v^2 + 4\gamma D_L)}\right] \operatorname{erfc}\left[\frac{x + t\sqrt{(v^2 + 4\gamma D_L)}}{2\sqrt{(D_L t)}}\right] \right\}. \quad (132)$$

As condições iniciais e de contorno são as mesmas definidas no problema anterior (ver Eqs. (125) e (126)). Os valores da constante de decaimento radioativo analisados neste estudo são $\gamma = 0,5 \text{ d}^{-1}$, $\gamma = 0,05 \text{ d}^{-1}$ e $\gamma = 0,02 \text{ d}^{-1}$. O intervalo de tempo aplicado foi de $\Delta t = 0,01 \text{ d}$, além disso, o tempo considerado para os resultados numéricos e a solução analítica é $t = 50 \text{ d}$. Visto que o coeficiente de dispersão longitudinal está diferente do problema anterior, os valores de Péclet também são modificados para $Pe = 150,000$, $Pe = 75,000$, $Pe = 37,500$, $Pe = 18,750$ e $Pe = 9,375$. Portanto, o problema é igualmente considerado fortemente advectivo e, por isso, o método MUSCL-MPFA-QL ($\lambda = 1/3$) não será utilizado devido às propriedades numéricas que o mesmo apresentou neste tipo de fenômeno para estas condições (ver seção 4.1.2), de modo que apenas serão estudados os métodos FOU-MPFA-QL e MUSCL-Woodfield-MPFA-QL.

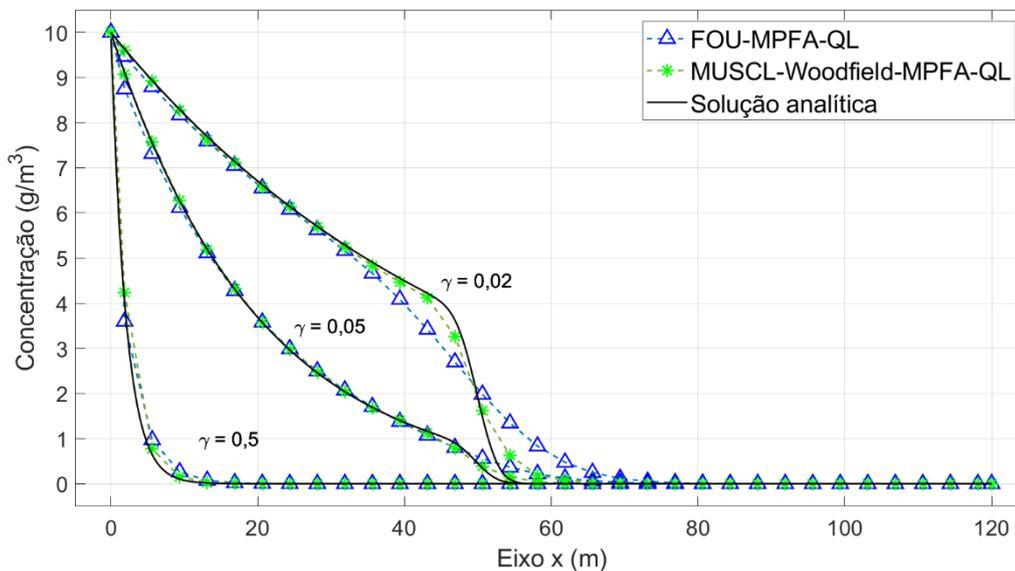
Do Gráfico 34 até a Gráfico 38 são mostrados os perfis de concentração obtidos numericamente levando em conta 16 até 256 VC inferiores das malhas e seus valores de contorno na direção x (i.e.: mesmas considerações especificadas na seção 4.1.1), respectivamente.

Gráfico 34 – Perfis de concentração obtidos numericamente pelos métodos FOU-MPFA-QL, MUSCL-Woodfield-MPFA-QL e solução analítica, considerando-se 16 VC triangulares e valores de contorno na direção x , para o transporte unidimensional de soluto traçador com termo de decaimento radioativo ($\gamma = 0,5 \text{ d}^{-1}$, $\gamma = 0,05 \text{ d}^{-1}$, $\gamma = 0,02 \text{ d}^{-1}$). Conforme os seguintes valores: $t = 50 \text{ d}$, $Pe = 150,000$



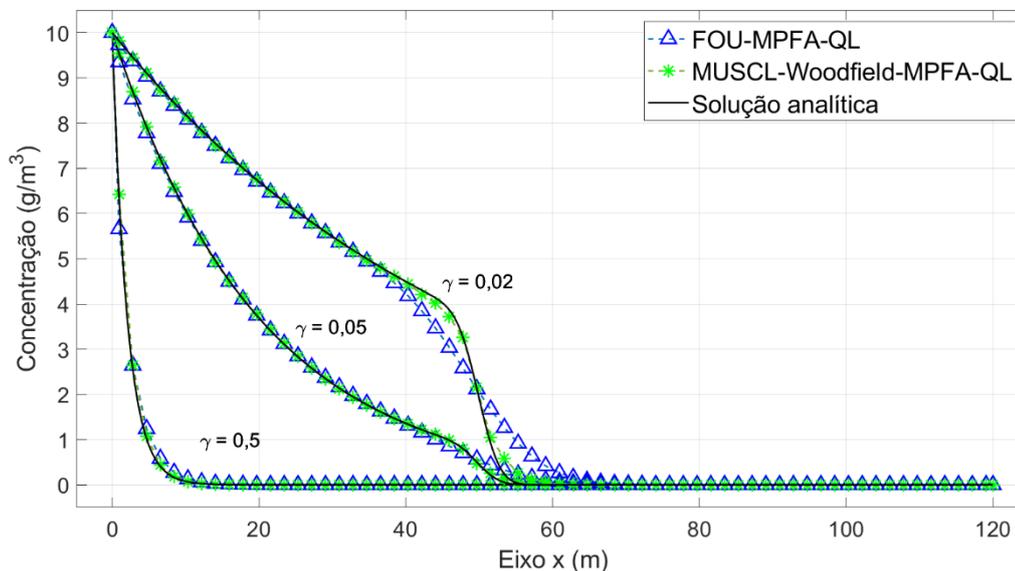
Fonte: O Autor (2021).

Gráfico 35 – Perfis de concentração obtidos numericamente pelos métodos FOU-MPFA-QL, MUSCL-Woodfield-MPFA-QL e solução analítica, considerando-se 32 VC triangulares e valores de contorno na direção x , para o transporte unidimensional de soluto traçador com termo de decaimento radioativo ($\gamma = 0,5 \text{ d}^{-1}$, $\gamma = 0,05 \text{ d}^{-1}$, $\gamma = 0,02 \text{ d}^{-1}$). Conforme os seguintes valores: $t = 50 \text{ d}$, $Pe = 75,000$



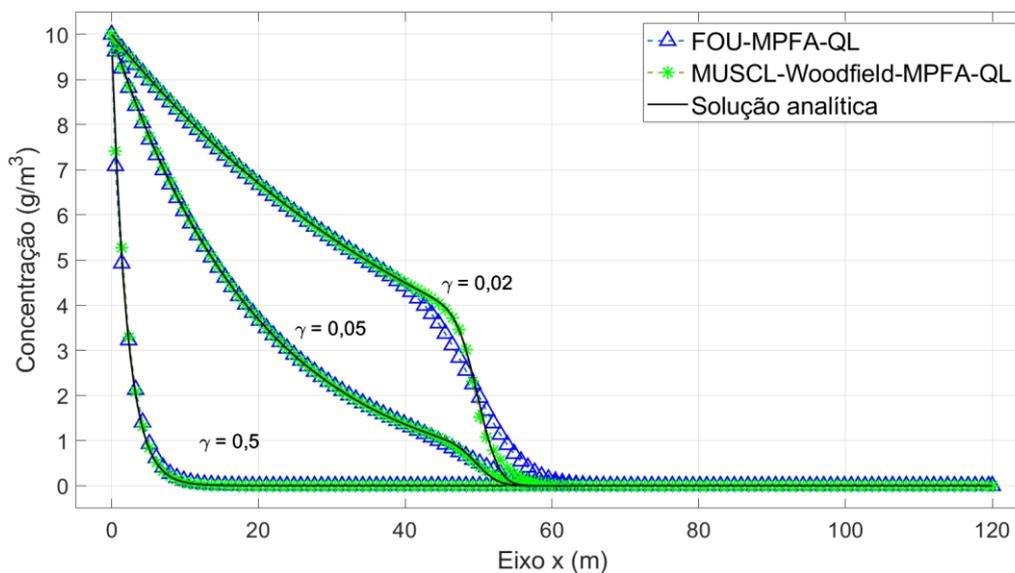
Fonte: O Autor (2021).

Gráfico 36 – Perfis de concentração obtidos numericamente pelos métodos FOU-MPFA-QL, MUSCL-Woodfield-MPFA-QL e solução analítica, considerando-se 64 VC triangulares e valores de contorno na direção x , para o transporte unidimensional de soluto traçador com termo de decaimento radioativo ($\gamma = 0,5 \text{ d}^{-1}$, $\gamma = 0,05 \text{ d}^{-1}$, $\gamma = 0,02 \text{ d}^{-1}$). Conforme os seguintes valores: $t = 50 \text{ d}$, $Pe = 37,500$



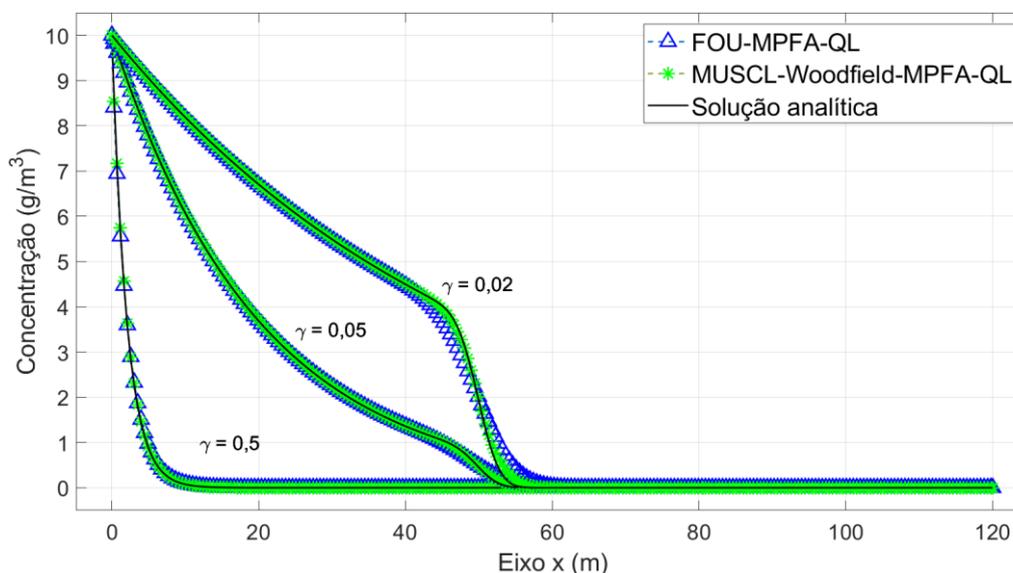
Fonte: O Autor (2021).

Gráfico 37 – Perfis de concentração obtidos numericamente pelos métodos FOU-MPFA-QL, MUSCL-Woodfield-MPFA-QL e solução analítica, considerando-se 128 VC triangulares e valores de contorno na direção x , para o transporte unidimensional de soluto traçador com termo de decaimento radioativo ($\gamma = 0,5 \text{ d}^{-1}$, $\gamma = 0,05 \text{ d}^{-1}$, $\gamma = 0,02 \text{ d}^{-1}$). Conforme os seguintes valores: $t = 50 \text{ d}$, $Pe = 18,750$



Fonte: O Autor (2021).

Gráfico 38 – Perfis de concentração obtidos numericamente pelos métodos FOU-MPFA-QL, MUSCL-Woodfield-MPFA-QL e solução analítica, considerando-se 256 VC triangulares e valores de contorno na direção x , para o transporte unidimensional de soluto traçador com termo de decaimento radioativo ($\gamma = 0,5 \text{ d}^{-1}$, $\gamma = 0,05 \text{ d}^{-1}$, $\gamma = 0,02 \text{ d}^{-1}$). Conforme os seguintes valores: $t = 50 \text{ d}$, $Pe = 9,375$



Com base nos gráficos, verifica-se que o valor atribuído à constante de decaimento radioativo tem forte influência na concentração do soluto traçador ao longo do domínio, isto ocorre devido à sua propriedade de reduzir a massa do mesmo, e quanto maior o valor da constante mais rápido acontece o decaimento da concentração, portanto acaba não sendo identificável sua concentração ao longo de todo o domínio. Desse modo, o problema assume uma física mais difusiva à medida que o termo de decaimento radioativo aumenta. Assim sendo, observa-se que num problema que o fenômeno de advecção é dominante é menos adequado aplicar solutos traçadores com valores elevados da constante de decaimento radioativo.

Baseado nos gráficos apresentados, também, identifica-se que os métodos numéricos aplicados se aproximam da solução analítica do problema, ao passo que se realiza o refinamento da malha. Porém, o método de baixa ordem se mostrou mais difusivo numericamente, principalmente em se tratando de traçadores com mais baixo valor na constante de decaimento radioativo. Por outro lado, valores mais elevados no coeficiente de decaimento radioativo se mostraram menos adequados para caracterizar o reservatório, pois sua massa é perdida bem antes de conseguir acompanhar a advecção presente no fenômeno. Identifica-se, por exemplo, que quando $\gamma = 0,5 \text{ d}^{-1}$, a concentração do soluto traçador não consegue atingir a

distância de 20 m no reservatório. Quando $\gamma = 0,05 \text{ d}^{-1}$, verifica-se que a perda de massa do soluto traçador acontece mais adiante, i.e., pouco antes de 60 m no reservatório estudado. Já, quando $\gamma = 0,02 \text{ d}^{-1}$, percebe-se que as curvas dos perfis de concentração adquirirão a forma de fluxo advectivo (surgimento de choque), mas ainda assim, a concentração não consegue atingir a distância de 60 m do reservatório. Mesmo com essas características adversas, os isótopos radioativos são importantes para aumentar a sensibilidade e selecionar os traçadores químicos que são marcados em um meio poroso (ZEMEL, 1995). Em outras palavras, os traçadores radioativos são muito importantes para realizar a caracterização hidrodinâmica, apesar da diminuição drástica da concentração dos mesmos, cabendo-se ao analista escolher adequadamente o tipo de soluto traçador mais adequado para sua aplicação.

O decaimento radioativo insere uma difusão física ao problema, resultante da não linearidade física do mesmo, assim a concentração de soluto traçado no reservatório é afetada significativamente. Embora o método de alta ordem (MUSCL-Woodfield-MPFA-QL) se mostrou mais acurado que o método de baixa ordem, em ambos os métodos empregados, ao se refinar a malha os resultados são satisfatórios, mostrando-se convergir adequadamente para a solução analítica. Ademais, observa-se da Tabela 6 até a Tabela 8, os valores dos erros numéricos, e, do Gráfico 39 até o Gráfico 41, os seus gráficos na escala logarítmica na base 10, respectivamente, com aplicação das constantes de decaimento radioativo $\gamma = 0,5 \text{ d}^{-1}$, $\gamma = 0,05 \text{ d}^{-1}$ e $\gamma = 0,02 \text{ d}^{-1}$.

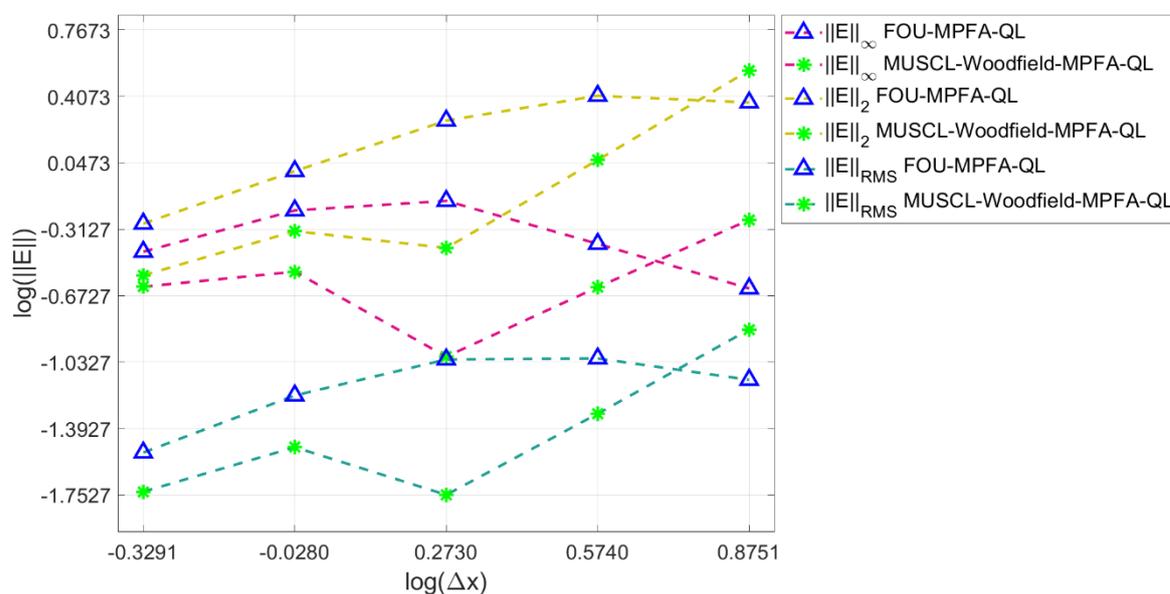
Tabela 6 – Verificação de acurácia dos métodos numéricos (FOU-MPFA-QL e MUSCL-Woodfield-MPFA-QL) para o problema de transporte unidimensional de soluto traçador com termo de decaimento radioativo e aplicação de volumes de controle triangulares. Constante de decaimento radioativo: $\gamma = 0,5 \text{ d}^{-1}$

FOU-MPFA-QL					
Δx (m)	N.º de divisões	Pe	$\ E\ _{\infty}$	$\ E\ _2$	$\ E\ _{RMS}$
7,5000	16	150,000	$2,3219 \cdot 10^{-1}$	2,3648	$7,4284 \cdot 10^{-2}$
3,7500	32	75,000	$4,0540 \cdot 10^{-1}$	2,5724	$9,6972 \cdot 10^{-2}$
1,8750	64	37,500	$6,9268 \cdot 10^{-1}$	1,8862	$9,5724 \cdot 10^{-2}$
0,9375	128	18,750	$6,1525 \cdot 10^{-1}$	1,0046	$6,1065 \cdot 10^{-2}$
0,46875	256	9,375	$3,6723 \cdot 10^{-1}$	$5,2171 \cdot 10^{-1}$	$2,9962 \cdot 10^{-2}$
MUSCL-Woodfield-MPFA-QL					

Δx (m)	N.º de divisões	Pe	$\ E\ _{\infty}$	$\ E\ _2$	$\ E\ _{RMS}$
7,5000	16	150,000	$5,4640 \cdot 10^{-1}$	3,5325	$1,3912 \cdot 10^{-1}$
3,7500	32	75,000	$2,3606 \cdot 10^{-1}$	1,1535	$4,8649 \cdot 10^{-2}$
1,8750	64	37,500	$9,9191 \cdot 10^{-2}$	$3,8510 \cdot 10^{-1}$	$1,7674 \cdot 10^{-2}$
0,9375	128	18,750	$2,8631 \cdot 10^{-1}$	$4,7487 \cdot 10^{-1}$	$3,2014 \cdot 10^{-2}$
0,46875	256	9,375	$2,3726 \cdot 10^{-1}$	$2,7349 \cdot 10^{-1}$	$1,8368 \cdot 10^{-2}$

Fonte: O Autor (2021).

Gráfico 39 – Erros associados ao refinamento das malhas com volumes de controle triangulares, para os métodos numéricos aplicados (FOU-MPFA-QL, MUSCL-Woodfield-MPFA-QL) no transporte unidimensional de soluto traçador, com termo de decaimento radioativo e $\gamma = 0,5 \text{ d}^{-1}$



Fonte: O Autor (2021).

Tabela 7 – Verificação de acurácia dos métodos numéricos (FOU-MPFA-QL e MUSCL-Woodfield-MPFA-QL) para o problema de transporte unidimensional de soluto traçador com termo de decaimento radioativo e aplicação de volumes de controle triangulares. Constante de decaimento radioativo: $\gamma = 0,05 \text{ d}^{-1}$

FOU-MPFA-QL					
Δx (m)	N.º de divisões	Pe	$\ E\ _{\infty}$	$\ E\ _2$	$\ E\ _{RMS}$
7,5000	16	150,000	$5,8045 \cdot 10^{-1}$	9,2456	$1,9400 \cdot 10^{-1}$
3,7500	32	75,000	$3,5985 \cdot 10^{-1}$	5,8484	$1,2132 \cdot 10^{-1}$
1,8750	64	37,500	$2,7158 \cdot 10^{-1}$	3,4551	$7,5910 \cdot 10^{-2}$
0,9375	128	18,750	$2,0113 \cdot 10^{-1}$	1,9859	$4,8314 \cdot 10^{-2}$
0,46875	256	9,375	$1,4002 \cdot 10^{-1}$	1,1233	$3,0092 \cdot 10^{-2}$

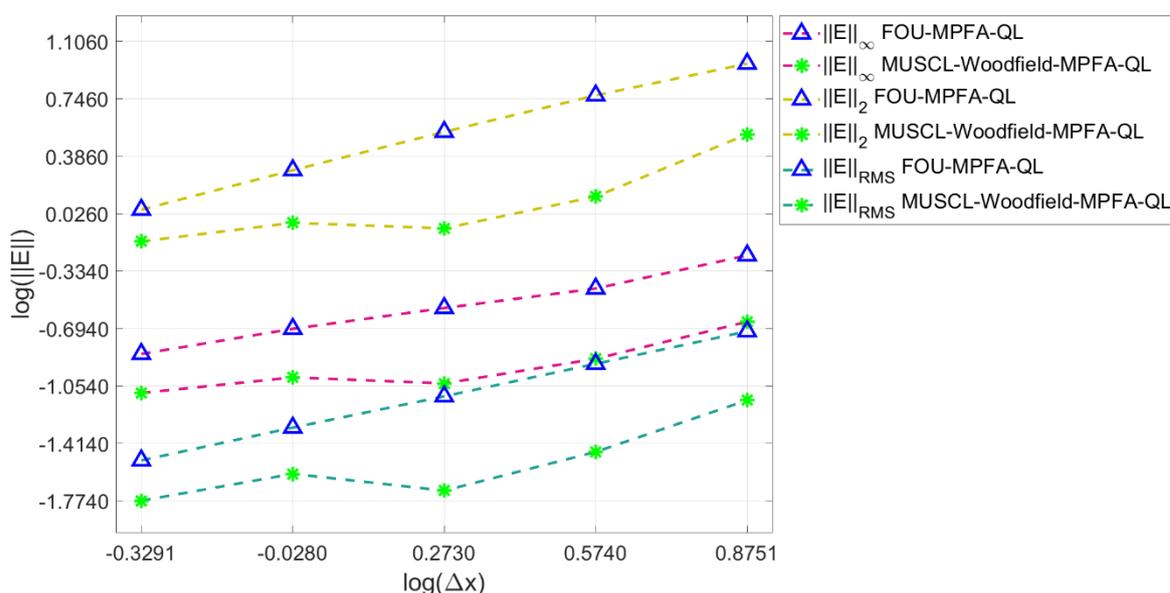
MUSCL-Woodfield-MPFA-QL

Δx (m)	N.º de divisões	Pe	$\ E\ _{\infty}$	$\ E\ _2$	$\ E\ _{RMS}$
7,5000	16	150,000	$5,4640 \cdot 10^{-1}$	3,5325	$1,3912 \cdot 10^{-1}$
3,7500	32	75,000	$2,3606 \cdot 10^{-1}$	1,1535	$4,8649 \cdot 10^{-2}$
1,8750	64	37,500	$9,9191 \cdot 10^{-2}$	$3,8510 \cdot 10^{-1}$	$1,7674 \cdot 10^{-2}$
0,9375	128	18,750	$2,8631 \cdot 10^{-1}$	$4,7487 \cdot 10^{-1}$	$3,2014 \cdot 10^{-2}$
0,46875	256	9,375	$2,3726 \cdot 10^{-1}$	$2,7349 \cdot 10^{-1}$	$1,8368 \cdot 10^{-2}$

Δx (m)	N.º de divisões	Pe	$\ E\ _{\infty}$	$\ E\ _2$	$\ E\ _{RMS}$
7,5000	16	150,000	$2,2279 \cdot 10^{-1}$	3,3348	$7,1742 \cdot 10^{-2}$
3,7500	32	75,000	$1,3047 \cdot 10^{-1}$	1,3579	$3,4016 \cdot 10^{-2}$
1,8750	64	37,500	$9,1469 \cdot 10^{-2}$	$8,5760 \cdot 10^{-1}$	$1,9454 \cdot 10^{-2}$
0,9375	128	18,750	$9,9771 \cdot 10^{-2}$	$9,2894 \cdot 10^{-1}$	$2,4765 \cdot 10^{-2}$
0,46875	256	9,375	$7,9645 \cdot 10^{-2}$	$7,1041 \cdot 10^{-1}$	$1,6826 \cdot 10^{-2}$

Fonte: O Autor (2021).

Gráfico 40 – Erros associados ao refinamento das malhas com volumes de controle triangulares, para os métodos numéricos aplicados (FOU-MPFA-QL, MUSCL-Woodfield-MPFA-QL) no transporte unidimensional de soluto traçador, com termo de decaimento radioativo e $\gamma = 0,05 \text{ d}^{-1}$



Fonte: O Autor (2021).

Tabela 8 – Verificação de acurácia dos métodos numéricos (FOU-MPFA-QL e MUSCL-Woodfield-MPFA-QL) para o problema de transporte unidimensional de soluto traçador com termo de decaimento radioativo e aplicação de volumes de controle triangulares. Constante de decaimento radioativo: $\gamma = 0,02 \text{ d}^{-1}$

FOU-MPFA-QL					
Δx (m)	N.º de divisões	Pe	$\ E\ _{\infty}$	$\ E\ _2$	$\ E\ _{RMS}$
7,5000	16	150,000	1,3493	26,5259	$4,7608 \cdot 10^{-1}$
3,7500	32	75,000	1,2476	18,2853	$3,8331 \cdot 10^{-1}$
1,8750	64	37,500	1,0302	11,1441	$2,8112 \cdot 10^{-1}$
0,9375	128	18,750	$7,8974 \cdot 10^{-1}$	6,8351	$1,9572 \cdot 10^{-1}$
0,46875	256	9,375	$5,6387 \cdot 10^{-1}$	3,9296	$1,2730 \cdot 10^{-1}$

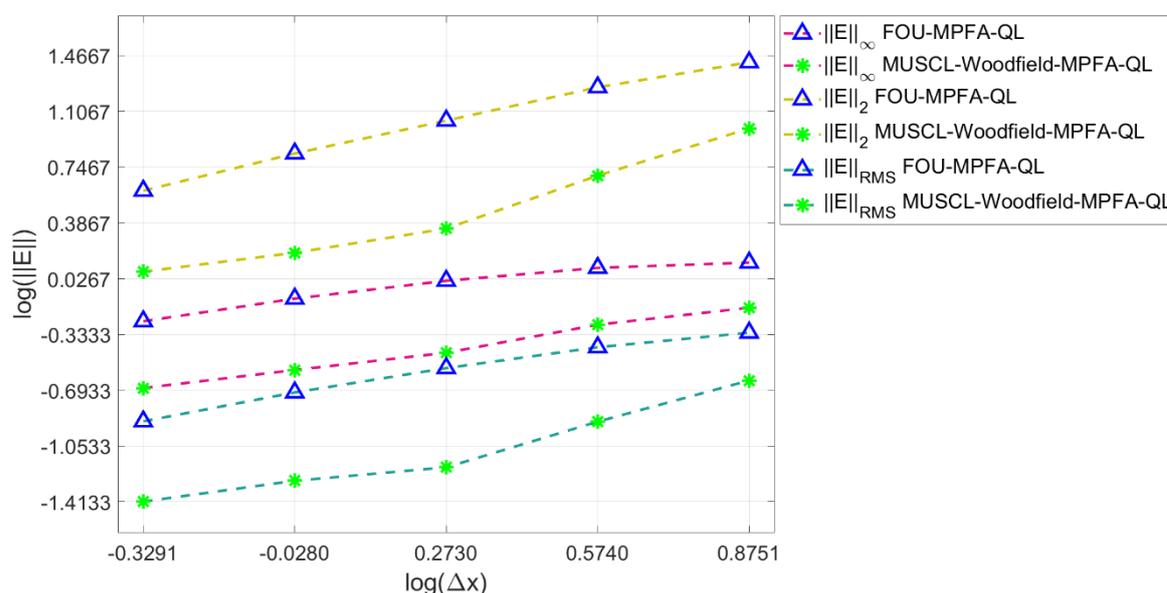
MUSCL-Woodfield-MPFA-QL

Δx (m)	N.º de divisões	Pe	$\ E\ _{\infty}$	$\ E\ _2$	$\ E\ _{RMS}$
7,5000	16	150,000	$2,2279 \cdot 10^{-1}$	3,3348	$7,1742 \cdot 10^{-2}$
3,7500	32	75,000	$1,3047 \cdot 10^{-1}$	1,3579	$3,4016 \cdot 10^{-2}$
1,8750	64	37,500	$9,1469 \cdot 10^{-2}$	$8,5760 \cdot 10^{-1}$	$1,9454 \cdot 10^{-2}$
0,9375	128	18,750	$9,9771 \cdot 10^{-2}$	$9,2894 \cdot 10^{-1}$	$2,4765 \cdot 10^{-2}$
0,46875	256	9,375	$7,9645 \cdot 10^{-2}$	$7,1041 \cdot 10^{-1}$	$1,6826 \cdot 10^{-2}$

Δx (m)	N.º de divisões	Pe	$\ E\ _{\infty}$	$\ E\ _2$	$\ E\ _{RMS}$
7,5000	16	150,000	$6,9011 \cdot 10^{-1}$	9,9216	$2,3387 \cdot 10^{-1}$
3,7500	32	75,000	$5,3575 \cdot 10^{-1}$	4,9134	$1,2673 \cdot 10^{-1}$
1,8750	64	37,500	$3,5310 \cdot 10^{-1}$	2,2383	$6,4277 \cdot 10^{-2}$
0,9375	128	18,750	$2,7319 \cdot 10^{-1}$	1,5616	$5,2608 \cdot 10^{-2}$
0,46875	256	9,375	$2,0887 \cdot 10^{-1}$	1,1797	$3,8611 \cdot 10^{-2}$

Fonte: O Autor (2021).

Gráfico 41 – Erros associados ao refinamento das malhas com volumes de controle triangulares, para os métodos numéricos aplicados (FOU-MPFA-QL, MUSCL-Woodfield-MPFA-QL) no transporte unidimensional de soluto traçador, com termo de decaimento radioativo e $\gamma = 0,02 \text{ d}^{-1}$



Fonte: O Autor (2021).

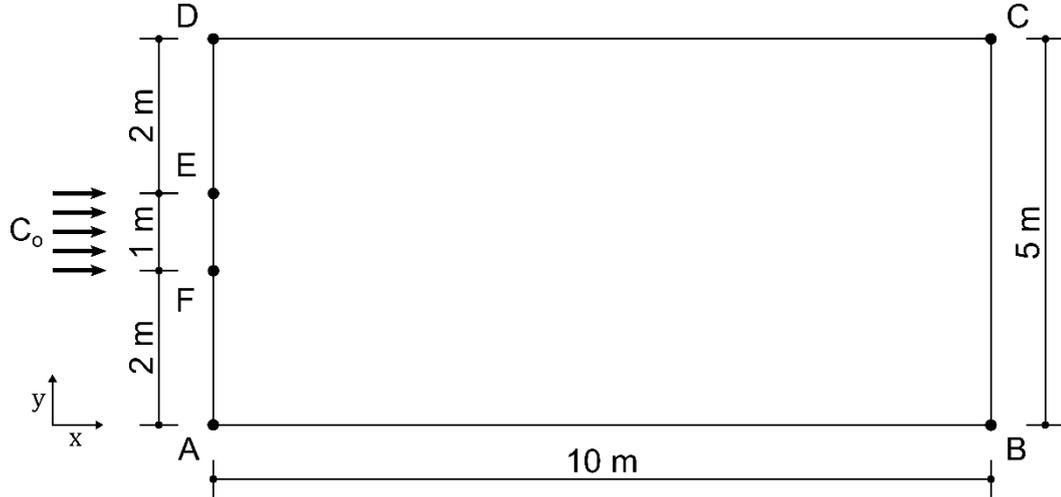
4.2 TRANSPORTE BIDIMENSIONAL DE SOLUTOS TRAÇADORES EM RESERVATÓRIOS

4.2.1 Transporte de Solute Traçador em Reservatórios com uma Fonte Contínua a Montante

O problema apresentado a seguir é adaptado de Yeh (1986), Rees (2004), Carvalho (2005) e Chivata (2016). Considera-se um problema de transporte bidimensional, com uma faixa de soluto traçador injetado a uma taxa constante na extremidade a montante, sem a existência do termo de fonte (ou sumidouro). O fluxo é preponderante na direção x , com velocidade $v = 1 \text{ m/d}$. Admite-se um reservatório,

isotrópico e homogêneo, com dimensões de comprimento 10 x 5 m (ver Figura 19). Assume-se que a dispersividade longitudinal é igual a dispersividade transversal com valores: $D_{xx} = 10 \text{ m}^2/\text{d}$ e $D_{yy} = 10 \text{ m}^2/\text{d}$.

Figura 19 – Domínio e condições de contorno utilizados para o estudo de transporte bidimensional, com uma fonte a montante de soluto traçador, em um reservatório isotrópico e homogêneo



Fonte: O Autor (2021).

Neste problema, a Eq. (25) pode ser reescrita da seguinte maneira:

$$\frac{\partial C}{\partial t} = \frac{\partial}{\partial x} \left(D_{xx} \frac{\partial C}{\partial x} \right) + \frac{\partial}{\partial y} \left(D_{yy} \frac{\partial C}{\partial y} \right) - v \frac{\partial C}{\partial x}, \text{ para } 0 < x < 10 \text{ m, e } 0 < y < 5 \text{ m.} \quad (133)$$

A equação da pressão (Eq. (8)) também pode ser reescrita como:

$$\frac{\partial}{\partial x} \left(K_{xx} \frac{\partial p}{\partial x} \right) + \frac{\partial}{\partial y} \left(K_{yy} \frac{\partial p}{\partial y} \right) = -Q_T, \text{ para } 0 < x < 10 \text{ m, e } 0 < y < 5 \text{ m.} \quad (134)$$

Para atender este problema específico, utiliza-se as seguintes condições de contorno e inicial:

a) para a equação da concentração (Eq. (133)):

$$\begin{aligned} C(x, y, 0) &= 0 \text{ (g/m}^3\text{) para } 0 \leq x \leq 10 \text{ e } 0 \leq y \leq 5 \text{ m,} \\ C &= C_o \text{ para } t \geq 0 \text{ no lado E-F,} \\ C &= 0 \text{ (g/m}^3\text{) para } t \geq 0 \text{ nos lados D-E e F-A,} \\ \frac{\partial C}{\partial x} &= 0 \text{ (g/m}^3\text{) para } t \geq 0 \text{ no lado B-C,} \\ \frac{\partial C}{\partial y} &= 0 \text{ (g/m}^3\text{) para } t \geq 0 \text{ nos lados A-B e C-D;} \end{aligned} \quad (135)$$

b) para a equação da pressão (Eq. (134)):

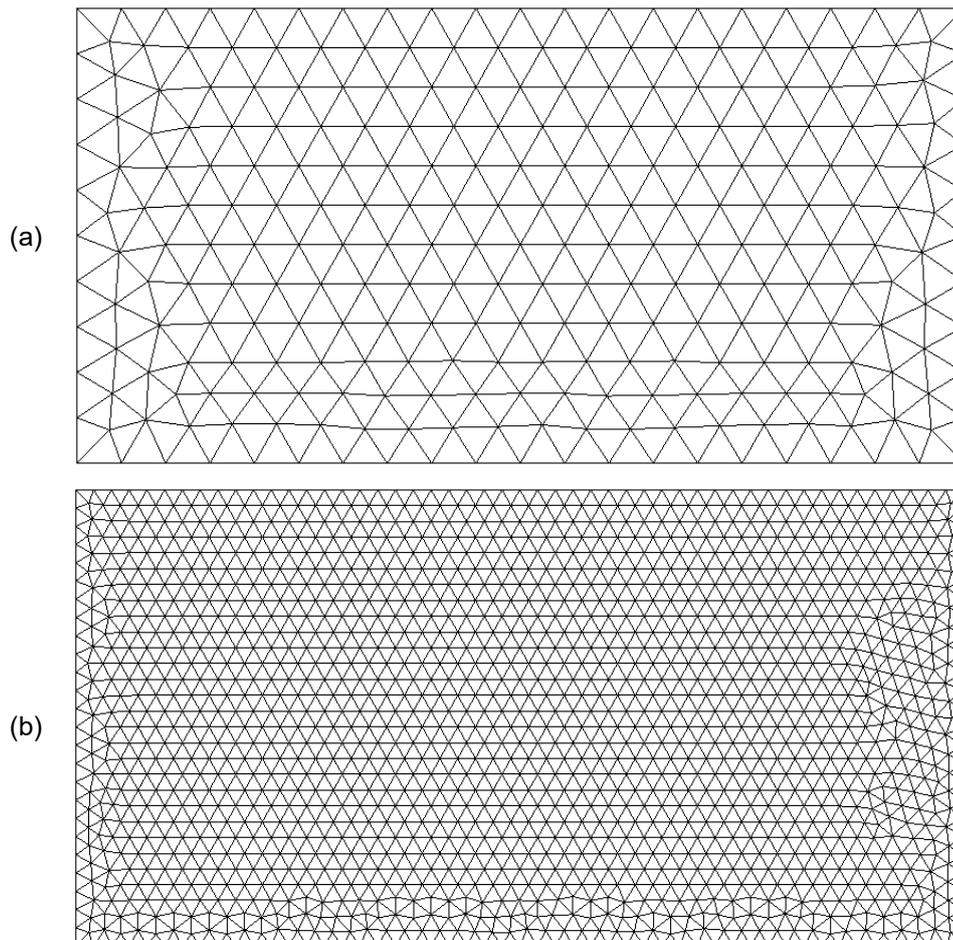
$$\begin{aligned}
 p &= p_o \text{ para } t \geq 0 \text{ nos lados D-E, E-F e F-A,} \\
 p &= 0 \text{ (Pa) para } t \geq 0 \text{ no lado B-C,} \\
 \frac{\partial p}{\partial y} &= 0 \text{ (Pa) para } t \geq 0 \text{ nos lados A-B e C-D.}
 \end{aligned}
 \tag{136}$$

As informações complementares para solucionar este problema são: $p_o = 1$ Pa, $C_o = 1$ g/m³, $\alpha_L = \alpha_T = 10$ m, $D_o = 2 \cdot 10^{-9}$ m²/d, com os seguintes tensores de permeabilidade e tortuosidade, respectivamente:

$$\mathbf{K} = \begin{bmatrix} 10 & 0 \\ 0 & 10 \end{bmatrix} \text{ e } \boldsymbol{\tau} = \begin{bmatrix} 5 \cdot 10^{-1} & 0 \\ 0 & 5 \cdot 10^{-1} \end{bmatrix}.
 \tag{137}$$

As malhas empregadas na discretização espacial foram do tipo não estruturadas com VC triangulares, denominadas “Frontal-Delaunay”, e geradas no software Gmsh (2020) (ver Figura 20).

Figura 20 – Malhas não estruturadas usadas na discretização espacial para o problema de transporte bidimensional: (a) malha M11, com 484 VC triangulares; e (b) malha M12, com 2932 VC triangulares



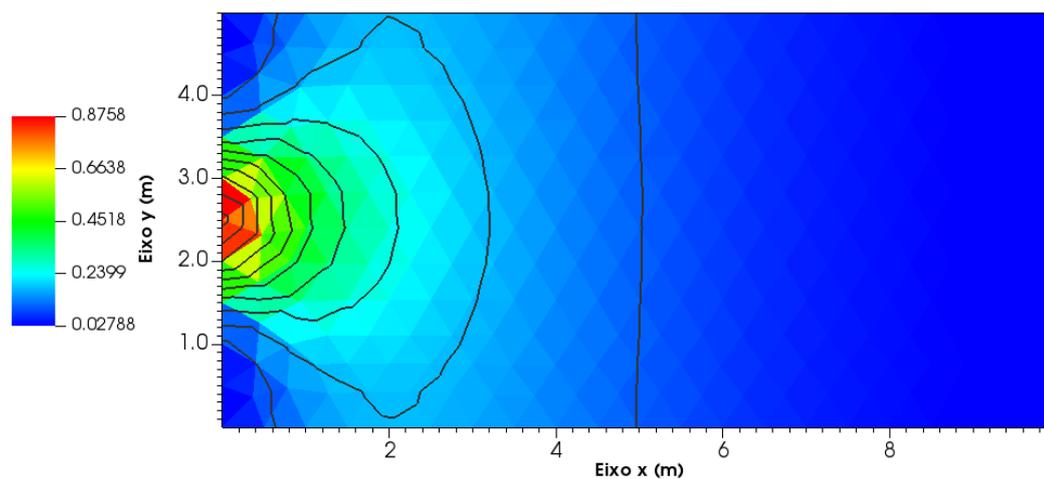
Fonte: O Autor (2021).

O número de Péclet aplicados nas simulações numéricas, em ambas as malhas, mantém-se inalterado em todos os casos estudados, $Pe = 0,05$, para isso, os coeficientes de dispersão hidrodinâmica aplicados na malha grossa (M11) e na malha fina (M12) são, respectivamente:

$$\mathbf{D}_H = \begin{bmatrix} 10 & 0 \\ 0 & 10 \end{bmatrix} \text{ e } \mathbf{D}_H = \begin{bmatrix} 4 & 0 \\ 0 & 4 \end{bmatrix}. \quad (138)$$

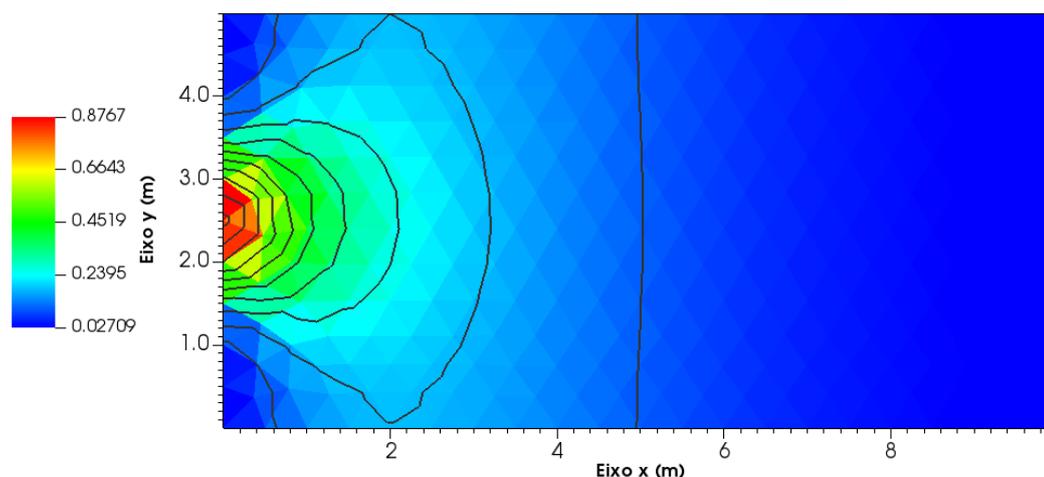
Da Figura 21 até a Figura 23 são identificados os campos de concentração e isolinhas do soluto traçador obtidos pelos métodos FOU-MPFA-QL, MUSCL-MPFA-QL e MUSCL-Woodfield-MPFA-QL, respectivamente. Ademais, emprega-se a malha grossa, com o tempo de simulação numérica avaliado em $t = 1$ d e o número de Courant aplicado é $CFL = 0,2$.

Figura 21 – Campo de concentração do traçador e suas isolinhas obtidos pelo FOU-MPFA-QL para o transporte bidimensional com uma fonte contínua a montante e malha M11. Dados os seguintes valores: $t = 1$ d, $CFL = 0,2$, $Pe = 0,05$



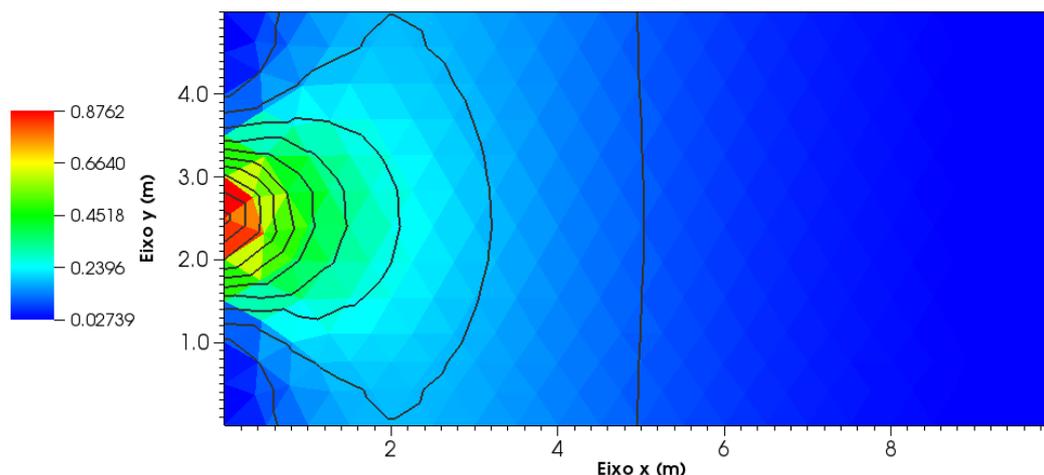
Fonte: O Autor (2021).

Figura 22 – Campo de concentração do traçador e suas isolinhas obtidos pelo MUSCL-MPFA-QL para o transporte bidimensional com uma fonte contínua a montante e malha M11. Dados os seguintes valores: $t = 1$ d, $CFL = 0,2$, $Pe = 0,05$



Fonte: O Autor (2021).

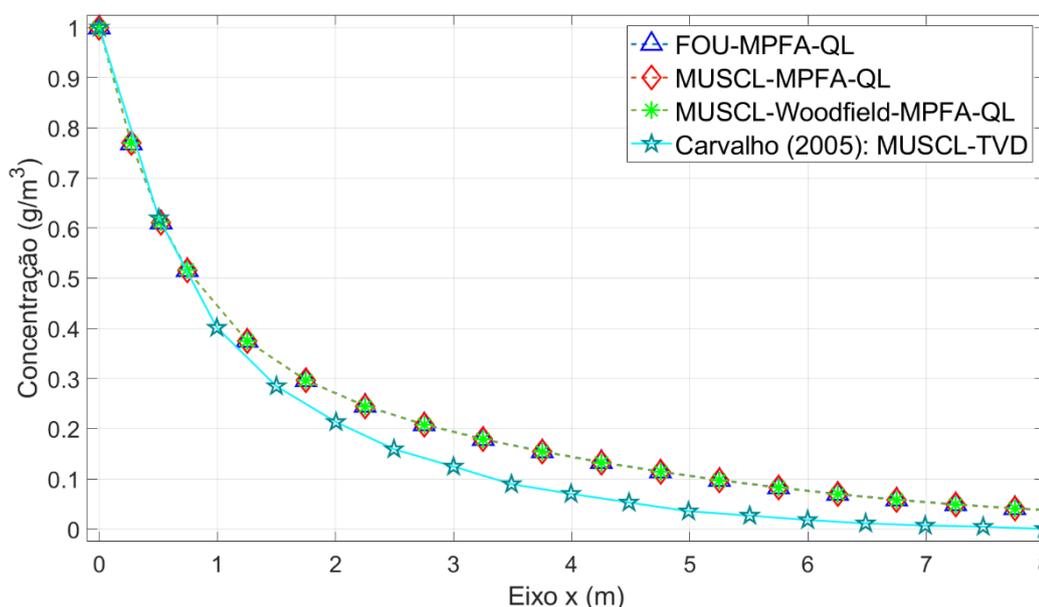
Figura 23 – Campo de concentração do traçador e suas isolinhas obtidos pelo MUSCL-Woodfield-MPFA-QL para o transporte bidimensional com uma fonte contínua a montante e malha M11. Dados os seguintes valores: $t = 1$ d, $CFL = 0,2$, $Pe = 0,05$



Fonte: O Autor (2021).

No Gráfico 42 são mostrados os perfis de concentrações obtidos pelos métodos FOU-MPFA-QL, MUSCL-MPFA-QL, MUSCL-Woodfield-MPFA-QL, e a solução numérica apresentada em Carvalho (2005), pelo método MUSCL-TVD, para este mesmo tipo de problema e malha semelhante a que foi empregada pelo autor (com 470 VC triangulares), ao longo do eixo x (em $y = 2,5$ m). Os dados extraídos de Carvalho (2005) foram obtidos por meio do software GetData Graph Digitizer[®] (2013).

Gráfico 42 – Perfis de concentração obtidos para o transporte bidimensional de soluto traçador com uma fonte contínua a montante e malha M11. Dados os seguintes valores: $t = 1$ d, $CFL = 0,2$, $Pe = 0,05$



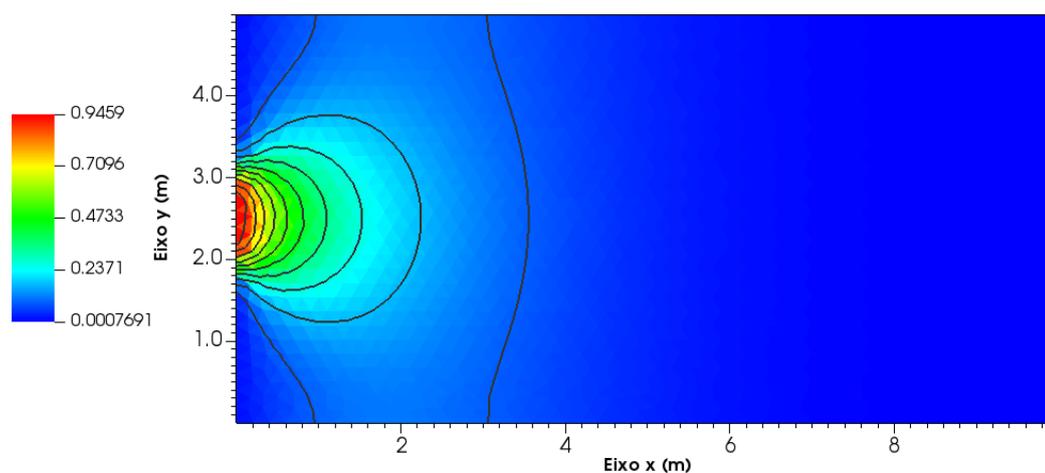
Fonte: O Autor (2021).

Os métodos estudados, mostraram resultados muito semelhantes entre si, no entanto, os mesmos tiveram resultados diferentes do método MUSCL-TVD, aplicando-se essa malha específica (malha M11). Observa-se, nesse caso, que para se resolver o transporte de soluto com os métodos numéricos FOU-MPFA-QL, MUSCL-MPFA-QL e MUSCL-Woodfield-MPFA-QL não apresentam qualquer preferência, tanto no campo de concentração e isolinhas quanto nos perfis de concentração. Esse comportamento, deve-se ao baixo número de Péclet, pois o fenômeno adquire um comportamento de difusão dominante, assim os métodos numéricos empregados na solução da advecção associados ao MPFA-QL influenciam muito pouco na descrição do fluxo hidrodinâmico.

Carvalho (2005) apresentou os resultados desse problema no domínio até 8 m, e, a fim de validar os métodos propostos neste trabalho, realizou-se a mesma análise proposta pelo autor. Como foi observado uma diferença entre os resultados apresentados pelo autor e os desenvolvidos neste trabalho, realiza-se um refinamento da malha para se verificar a convergência das soluções numéricas. De outra parte, observa-se os diferentes graus de liberdade aplicados aos VC dos métodos aplicados, pois em Carvalho (2005), utiliza-se um MVF com estrutura de dados por aresta, assim, suas incógnitas são calculadas nos vértices de cada VC, enquanto na formulação numérica aqui apresentada, as incógnitas são obtidas em cada centroide dos VC.

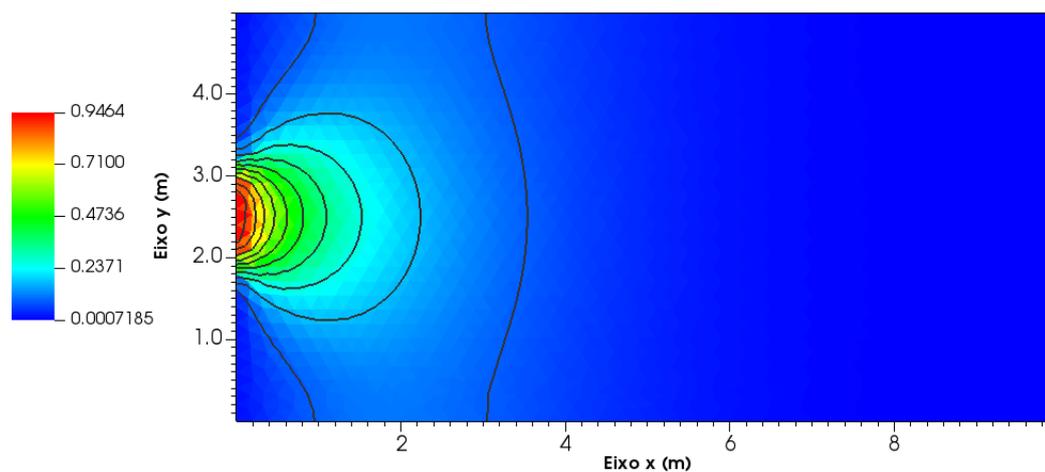
Portanto, aplicando-se um refinamento da malha (ver Figura 20), mantendo-se a análise com o mesmo número de Péclet mediante a alteração do tensor de dispersão hidrodinâmica especificado na Eq. (138), obtém-se os resultados da Figura 24 até a Figura 26 para os métodos FOU-MPFA-QL, MUSCL-MPFA-QL e MUSCL-Woodfield-MPFA-QL, respectivamente. O tempo de simulação numérica avaliado acontece em $t = 1$ d e o número de Courant aplicado é $CFL = 0,2$.

Figura 24 – Campo de concentração do traçador e suas isolinhas obtidos pelo FOU-MPFA-QL para o transporte bidimensional com uma fonte contínua a montante e malha M12. Dados os seguintes valores: $t = 1$ d, $CFL = 0,2$, $Pe = 0,05$



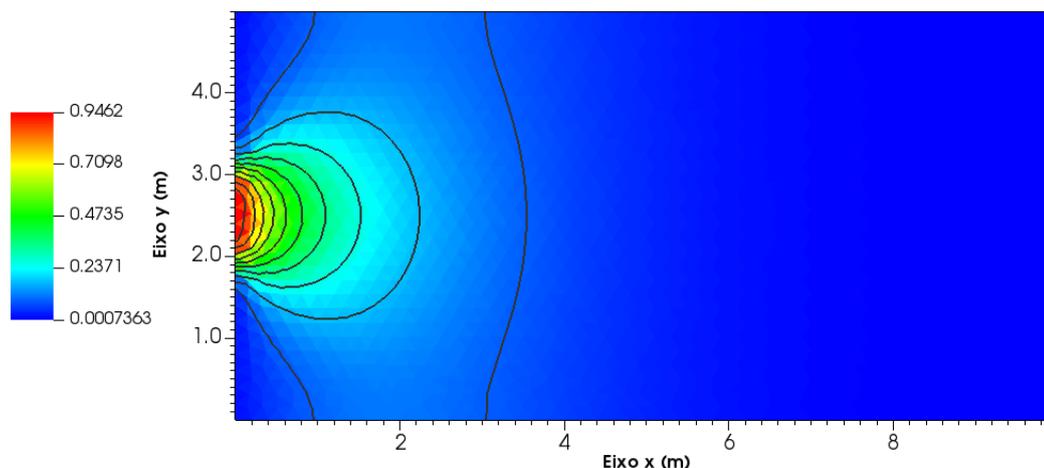
Fonte: O Autor (2021).

Figura 25 – Campo de concentração do traçador e suas isolinhas obtidos pelo MUSCL-MPFA-QL para o transporte bidimensional com uma fonte contínua a montante e malha M12. Dados os seguintes valores: $t = 1$ d, $CFL = 0,2$, $Pe = 0,05$



Fonte: O Autor (2021).

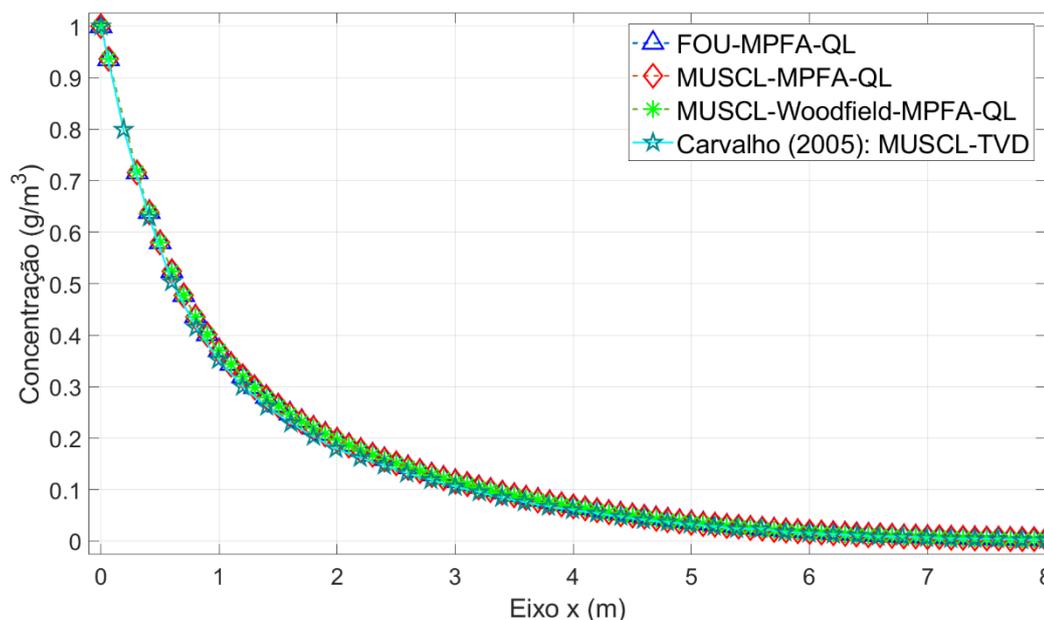
Figura 26 – Campo de concentração do traçador e suas isolinhas obtidos pelo MUSCL-Woodfield-MPFA-QL para o transporte bidimensional com uma fonte contínua a montante e malha M12. Dados os seguintes valores: $t = 1$ d, $CFL = 0,2$, $Pe = 0,05$



Fonte: O Autor (2021).

No Gráfico 43 são mostrados os perfis de concentração obtidos pelos métodos FOU-MPFA-QL, MUSCL-MPFA-QL, MUSCL-Woodfield-MPFA-QL, e a solução numérica apresentada em Carvalho (2005), pelo método MUSCL-TVD, para este mesmo tipo de problema e malha semelhante a que foi empregada pelo autor (com 2772 VC triangulares), ao longo do eixo x (em $y = 2,5$ m). Os dados extraídos de Carvalho (2005) foram obtidos por meio do software GetData Graph Digitizer® (2013).

Gráfico 43 – Perfis de concentração obtidos para o transporte bidimensional de soluto traçador com uma fonte contínua a montante e malha M12. Dados os seguintes valores: $t = 1$ d, $CFL = 0,2$, $Pe = 0,05$

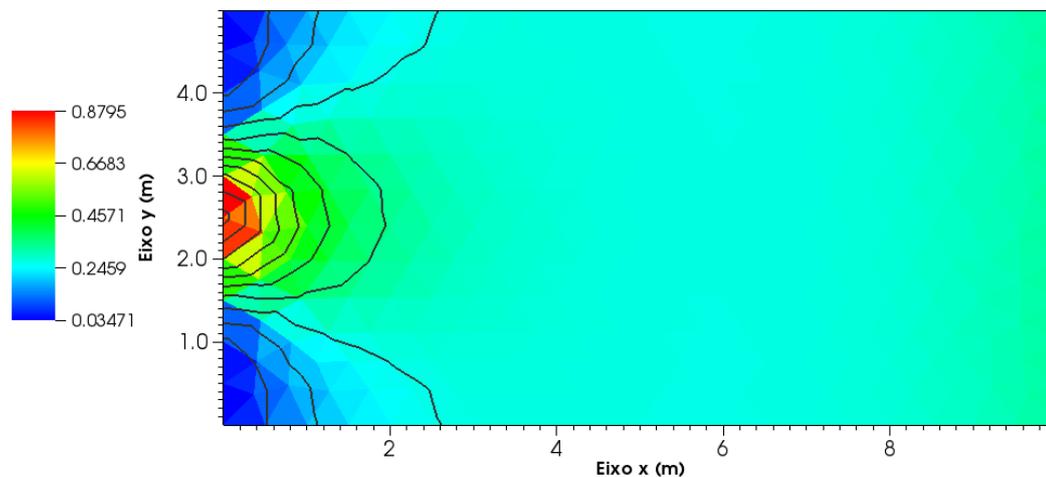


Fonte: O Autor (2021).

Através do refinamento da malha, os resultados mudaram consideravelmente, pois os perfis de concentração identificados no Gráfico 42 convergem para a solução proposta por Carvalho (2005) (ver Gráfico 43). Por outro lado, os campos de concentração também apresentaram mudanças significativas, uma vez que os mesmos mostraram valores de concentração e isolinhas mais contínuos e suaves do que na malha mais grossa, além dos valores máximos e mínimos se aproximarem mais das condições de contorno imposta no problema. Os métodos estudados ainda se comportaram semelhantes entre si, mas diferentemente da malha anterior (malha M11), esta malha refinada (malha M12) apresentou, também, uma aproximação melhorada relativa à solução proposta em Carvalho (2005). Assim, como citado anteriormente, pelo fenômeno manifestar-se por difusão dominante, os métodos numéricos que são associados ao fluxo de advecção (FOU, MUSCL, MUSCL-Woodfield) influenciam muito pouco na resolução deste problema.

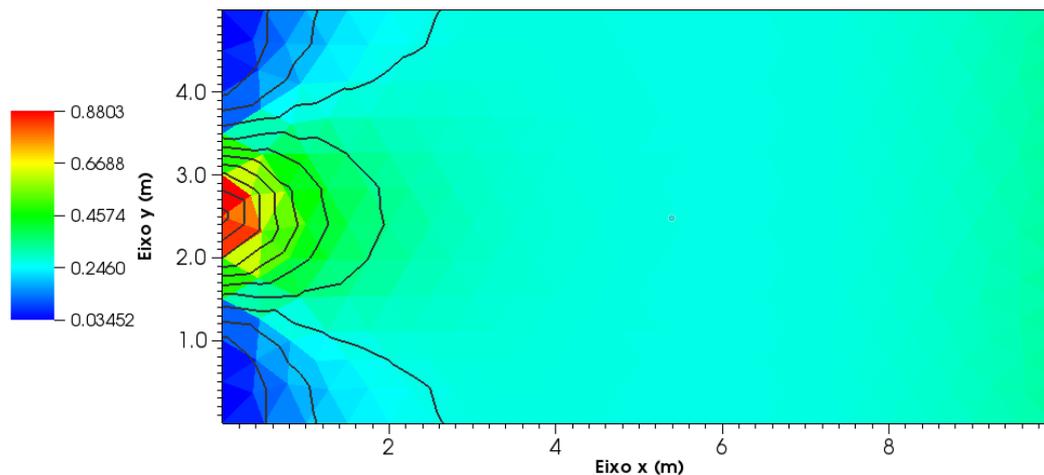
Considerando-se os mesmos parâmetros físicos e métodos numéricos apresentados anteriormente e com o objetivo de observar a distribuição de concentração ao longo do tempo, da Figura 27 até a Figura 29, são investigados os resultados numéricos para o transporte de soluto traçador no tempo $t = 4$ d e malha M11. No Gráfico 44 são identificados os perfis de concentrações obtidos pelos métodos FOU-MPFA-QL, MUSCL-MPFA-QL, MUSCL-Woodfield-MPFA-QL e a solução numérica apresentada em Carvalho (2005), pelo método MUSCL-TVD, para este mesmo tipo de problema, ao longo do eixo x (em $y = 2,5$ m). Os dados extraídos de Carvalho (2005) foram obtidos por meio do software GetData Graph Digitizer[©] (2013).

Figura 27 – Campo de concentração do traçador e suas isolinhas obtidos pelo FOU-MPFA-QL para o transporte bidimensional com uma fonte contínua a montante e malha M11. Dados os seguintes valores: $t = 4$ d, $CFL = 0,2$, $Pe = 0,05$



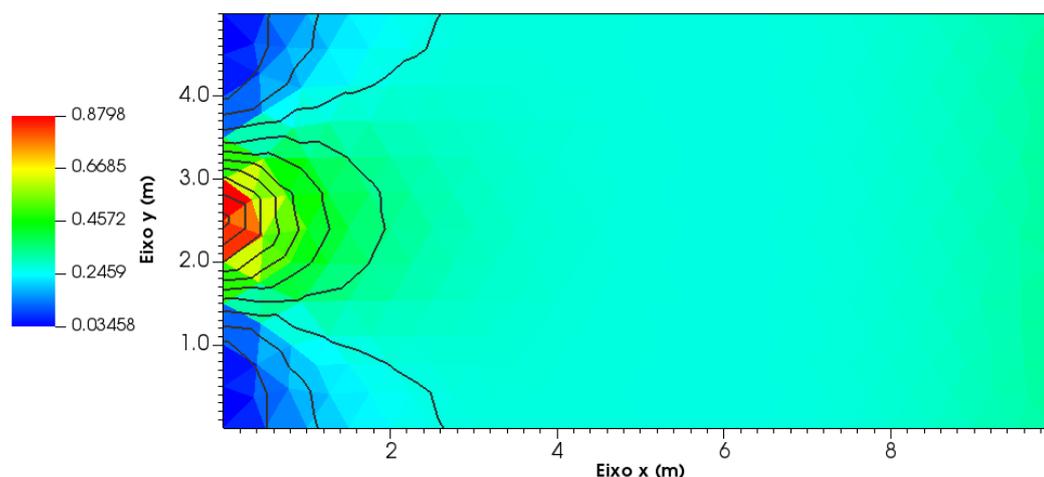
Fonte: O Autor (2021).

Figura 28 – Campo de concentração do traçador e suas isolinhas obtidos pelo MUSCL-MPFA-QL para o transporte bidimensional com uma fonte contínua a montante e malha M11. Dados os seguintes valores: $t = 4$ d, $CFL = 0,2$, $Pe = 0,05$



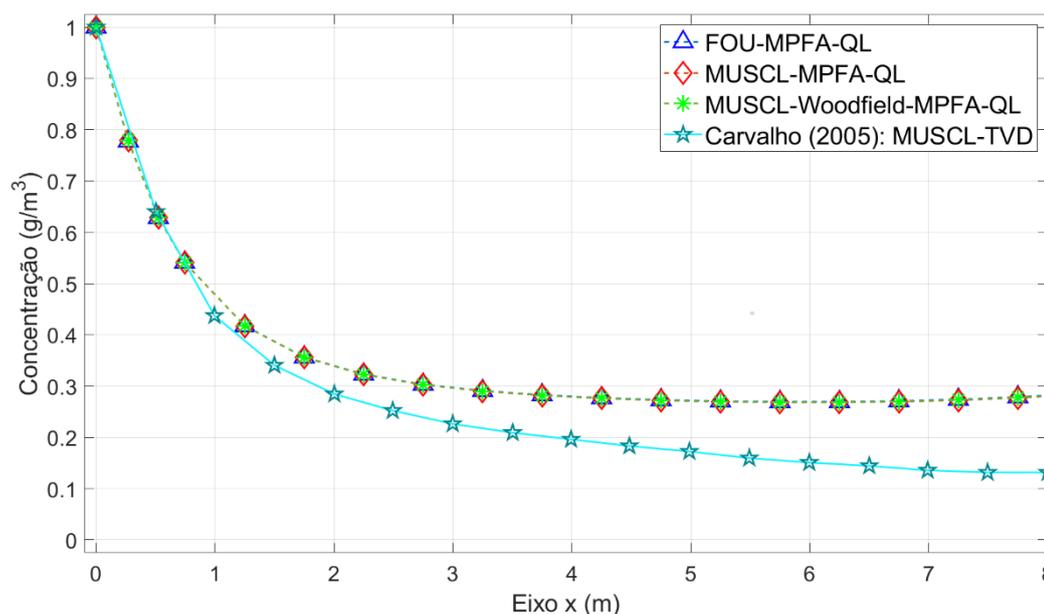
Fonte: O Autor (2021).

Figura 29 – Campo de concentração do traçador e suas isolinhas obtidos pelo MUSCL-Woodfield-MPFA-QL para o transporte bidimensional com uma fonte contínua a montante e malha M11. Dados os seguintes valores: $t = 4$ d, CFL = 0,2, Pe = 0,05



Fonte: O Autor (2021).

Gráfico 44 – Perfis de concentração obtidos para o transporte bidimensional de soluto traçador com uma fonte contínua a montante e malha M11. Dados os seguintes valores: $t = 4$ d, CFL = 0,2, Pe = 0,05

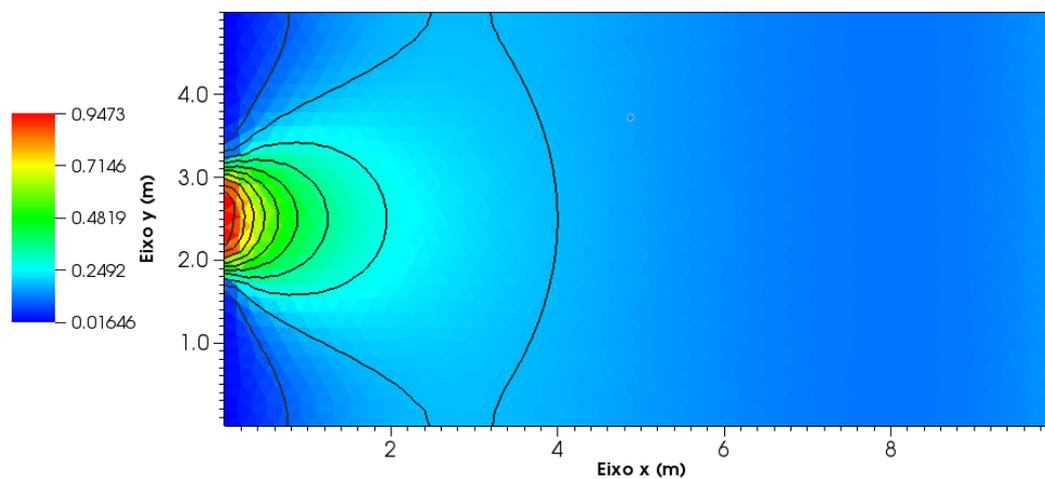


Fonte: O Autor (2021).

Da Figura 30 até a Figura 32 são apresentados os campos de concentração e isolinhas do soluto traçador obtidos, respectivamente, pelos métodos FOU-MPFA-QL, MUSCL-MPFA-QL e MUSCL-Woodfield-MPFA-QL, empregando-se a malha refinada (M12) e mesmo período de tempo ($t = 4$ d). No Gráfico 45 são mostrados os perfis de concentrações obtidos por esses métodos numéricos e a solução numérica apresentada em Carvalho (2005), pelo método MUSCL-TVD, para este mesmo tipo de problema e malha semelhante a que foi empregada pelo autor (com 2772 VC

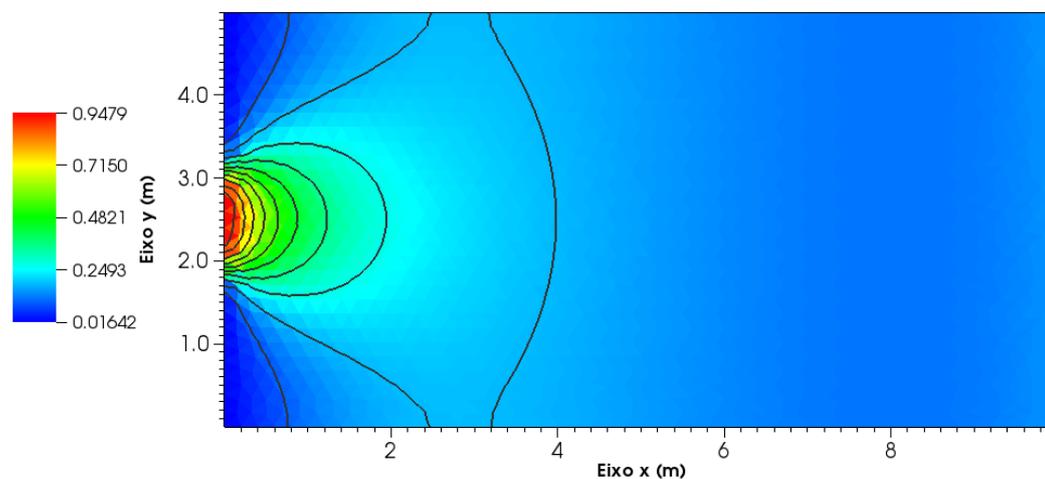
triangulares), ao longo do eixo x (em $y = 2,5$ m). Os dados extraídos de Carvalho (2005) foram obtidos por meio do software GetData Graph Digitizer® (2013).

Figura 30 – Campo de concentração do traçador e suas isolinhas obtidos pelo FOU-MPFA-QL para o transporte bidimensional com uma fonte contínua a montante e malha M12. Dados os seguintes valores: $t = 4$ d, $CFL = 0,2$, $Pe = 0,05$



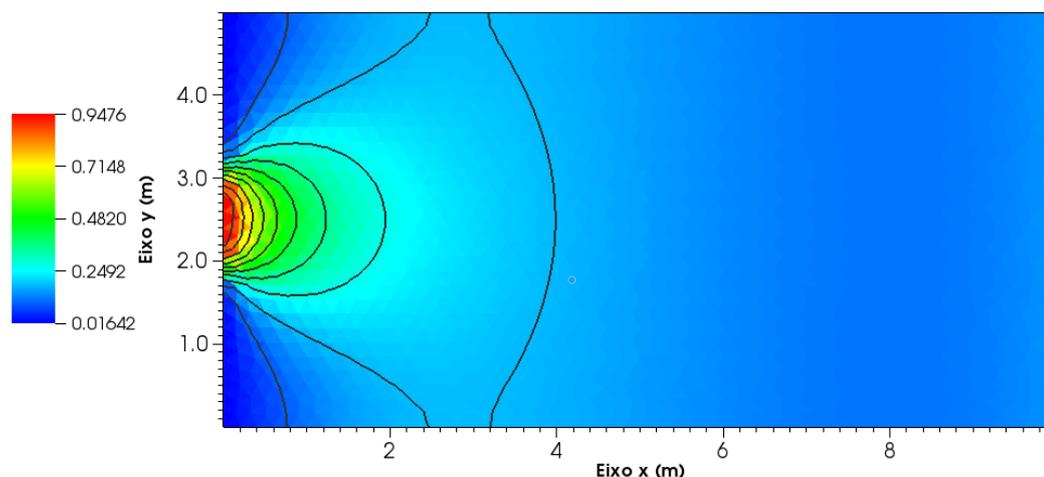
Fonte: O Autor (2021).

Figura 31 – Campo de concentração do traçador e suas isolinhas obtidos pelo MUSCL-MPFA-QL para o transporte bidimensional com uma fonte contínua a montante e malha M12. Dados os seguintes valores: $t = 4$ d, $CFL = 0,2$, $Pe = 0,05$



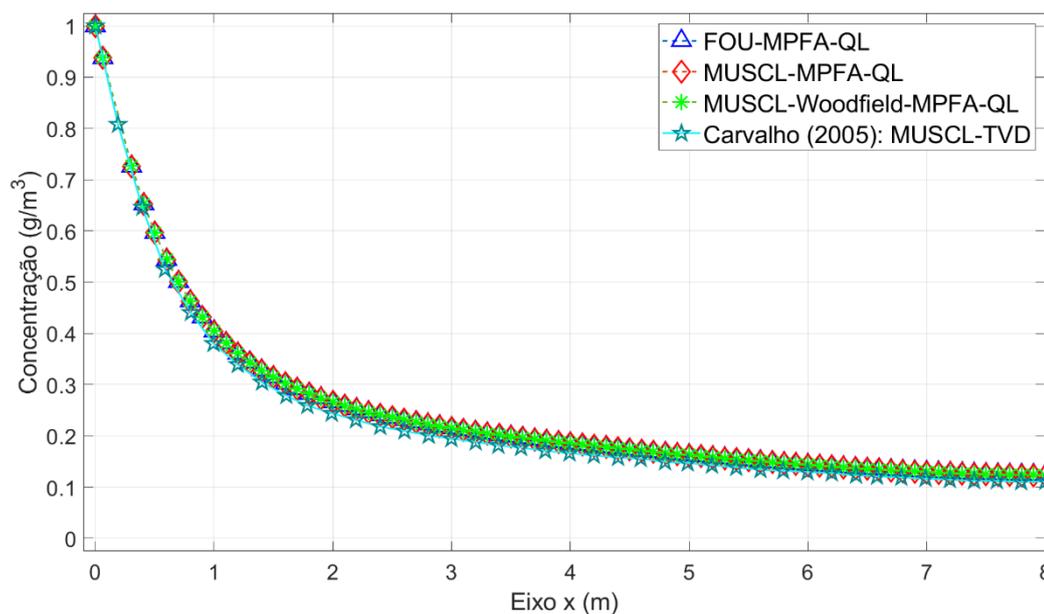
Fonte: O Autor (2021).

Figura 32 – Campo de concentração do traçador e suas isolinhas obtidos pelo MUSCL-Woodfield-MPFA-QL para o transporte bidimensional com uma fonte contínua a montante e malha M12. Dados os seguintes valores: $t = 4$ d, $CFL = 0,2$, $Pe = 0,05$



Fonte: O Autor (2021).

Gráfico 45 – Perfis de concentração obtidos para o transporte bidimensional de soluto traçador com uma fonte contínua a montante e malha M12. Dados os seguintes valores: $t = 4$ d, $CFL = 0,2$, $Pe = 0,05$



Fonte: O Autor (2021).

Assim como aconteceu quando $t = 1$ d (ver Gráfico 42), quando $t = 4$ d (ver Gráfico 44), as soluções dos métodos FOU-MPFA-QL, MUSCL-MPFA-QL e MUSCL-Woodfield foram semelhantes entre si, e distintas da solução proposta em Carvalho (2005), no entanto, identifica-se que apresentam características de curvas com assíntota horizontal. Apesar disso, com o refinamento da malha, obteve-se soluções numéricas similares entre si, tanto para as propostas neste trabalho quanto as

apresentadas em Carvalho (2005), e, também, os campos de concentração e isolinhas mostraram-se mais contínuos e suaves.

Com o avanço do tempo, em $t = 4$ d, observa-se que a concentração do soluto no domínio, em $x = 8$ m, não permanece 0 g/m^3 , como estava na condição inicial e também quando $t = 1$ d, indicando-se um avanço da concentração do soluto traçador ao longo do domínio, principalmente pela malha mais fina.

4.2.2 Transporte de Solute Traçador em Reservatório com Razão de Dispersão Hidrodinâmica não Unitária

Estuda-se o mesmo domínio da seção anterior com suas respectivas condições de contorno e iniciais. Contudo, investiga-se diferentes tensores de permeabilidade até o seu comportamento anisotrópico ($k_{xx} \neq k_{yy}$) e, conseqüentemente, também, considera-se diferentes relações entre os coeficientes de dispersão longitudinal e transversal ($D_{xx} \neq D_{yy}$). Esta anisotropia é representada pela razão entre os coeficientes de dispersão hidrodinâmica, dada por (CARVALHO, 2005):

$$r = \frac{D_{xx}}{D_{yy}}. \quad (139)$$

Os tensores de permeabilidade do reservatório, para este problema, são:

$$\mathbf{K} = \begin{bmatrix} 10 & 0 \\ 0 & 10 \end{bmatrix}, \mathbf{K} = \begin{bmatrix} 10 & 0 \\ 0 & 1 \end{bmatrix} \text{ e } \mathbf{K} = \begin{bmatrix} 10 & 0 \\ 0 & 1 \cdot 10^{-1} \end{bmatrix}. \quad (140)$$

Os tensores de dispersão hidrodinâmica do reservatório, para este problema, são:

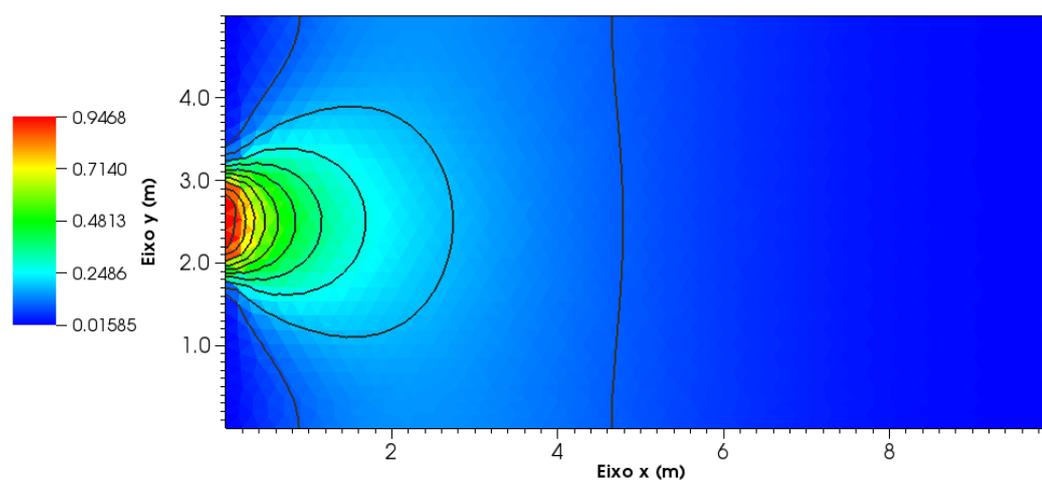
$$\mathbf{D}_H = \begin{bmatrix} 4 & 0 \\ 0 & 4 \end{bmatrix}, \mathbf{D}_H = \begin{bmatrix} 4 & 0 \\ 0 & 4 \cdot 10^{-1} \end{bmatrix} \text{ e } \mathbf{D}_H = \begin{bmatrix} 4 & 0 \\ 0 & 4 \cdot 10^{-2} \end{bmatrix}. \quad (141)$$

Com tais características, a razão entre os coeficientes de dispersão hidrodinâmica estudados são: $r = 1$, $r = 10$ e $r = 100$. A malha empregada na discretização, em todos os casos estudados, foi a malha M12 da Figura 20. O fluxo no reservatório ao longo do eixo x tem velocidade $v = 1 \text{ m/d}$ e o número de Péclet aplicados nas simulações numéricas mantém-se inalterado com valor $Pe = 0,05$.

Da Figura 33 até a Figura 38 são apresentados os campos de concentração e isolinhas do soluto traçador, considerando-se a razão entre os coeficientes de

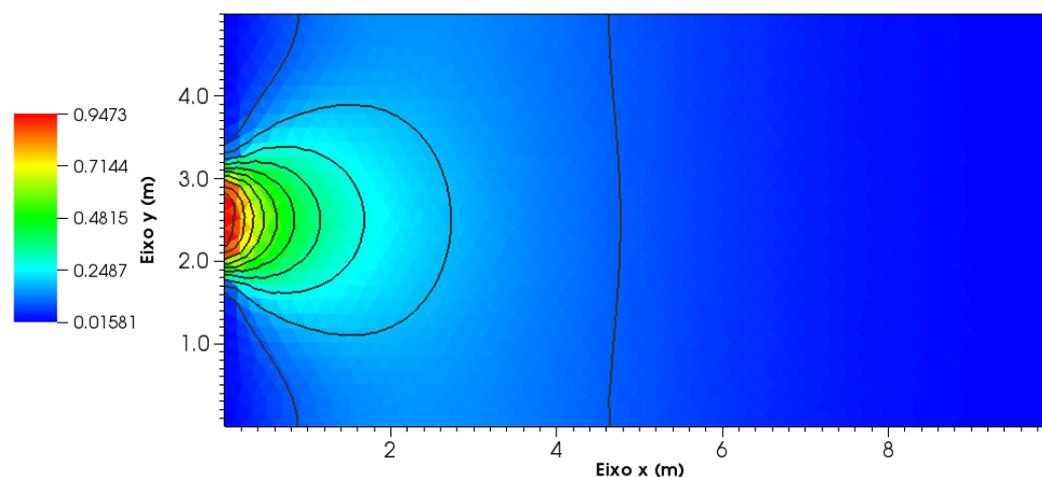
dispersão $r = 1$ e $r = 100$. Os métodos numéricos empregados nas simulações, nos três casos com variações na razão de dispersão hidrodinâmica, foram o FOU-MPFA-QL e o MUSCL-MPFA-QL, pois como discutido na seção anterior, os mesmos apresentaram resultados semelhantes com o MUSCL-Woodfield-MPFA-QL, de modo que, as análises se restringiram apenas para um método de primeira ordem e outro de segunda ordem.

Figura 33 – Campo de concentração do traçador e suas isolinhas obtidos pelo FOU-MPFA-QL para o transporte bidimensional com uma fonte contínua a montante, malha M12 e razão de anisotropia $r = 1$. Dados os seguintes valores: $t = 2$ d, $CFL = 0,2$, $Pe = 0,05$



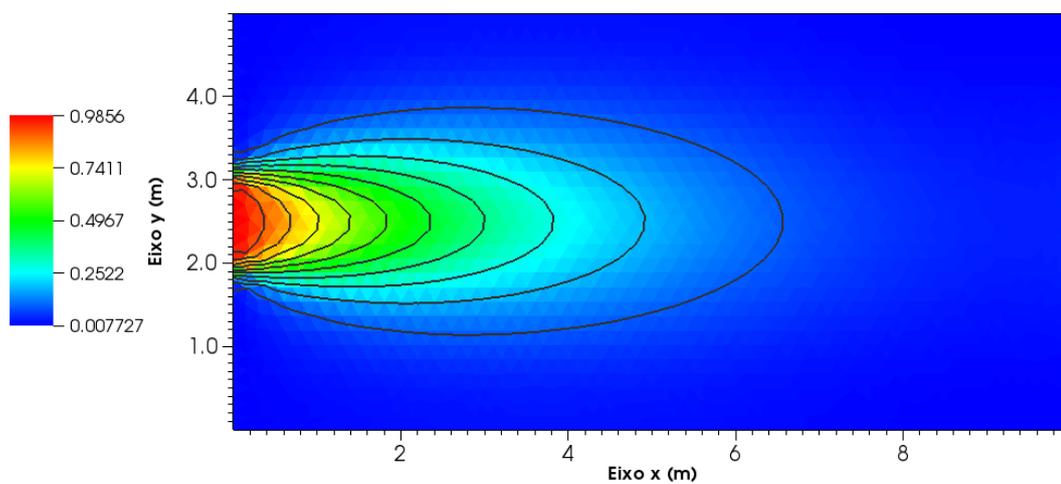
Fonte: O Autor (2021).

Figura 34 – Campo de concentração do traçador e suas isolinhas obtidos pelo MUSCL-MPFA-QL para o transporte bidimensional com uma fonte contínua a montante, malha M12 e razão de anisotropia $r = 1$. Dados os seguintes valores: $t = 2$ d, $CFL = 0,2$, $Pe = 0,05$



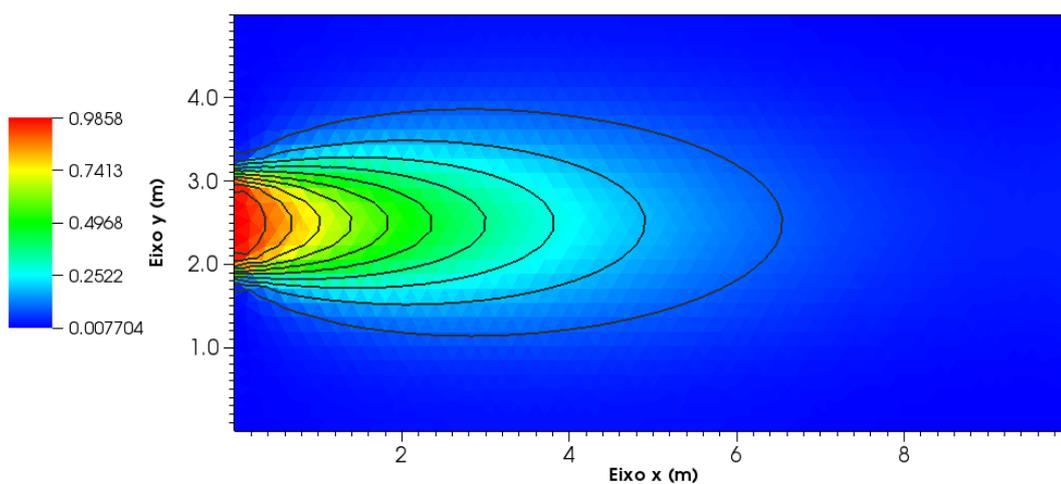
Fonte: O Autor (2021).

Figura 35 – Campo de concentração do traçador e suas isolinhas obtidos pelo FOU-MPFA-QL para o transporte bidimensional com uma fonte contínua a montante, malha M12 e razão de anisotropia $r = 10$. Dados os seguintes valores: $t = 2$ d, $CFL = 0,2$, $Pe = 0,05$



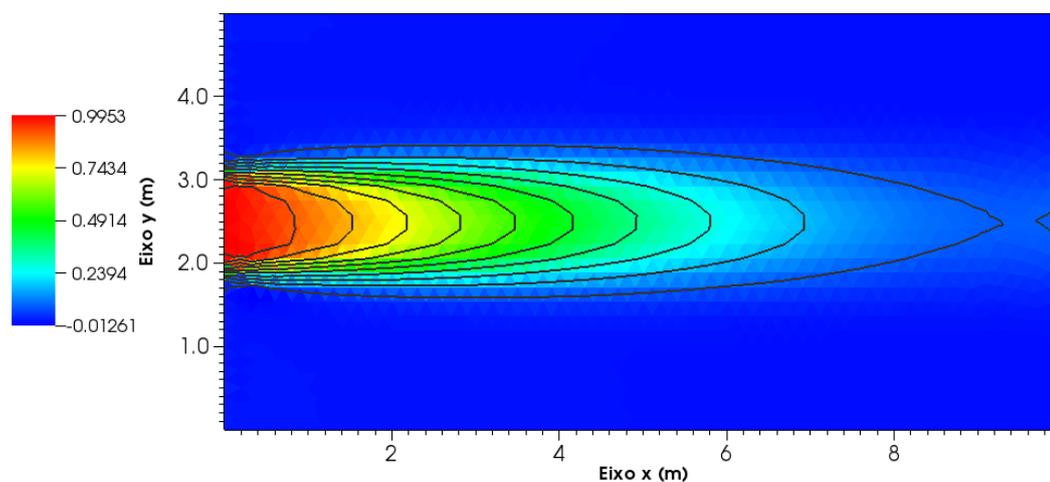
Fonte: O Autor (2021).

Figura 36 – Campo de concentração do traçador e suas isolinhas obtidos pelo MUSCL-MPFA-QL para o transporte bidimensional com uma fonte contínua a montante, malha M12 e razão de anisotropia $r = 10$. Dados os seguintes valores: $t = 2$ d, $CFL = 0,2$, $Pe = 0,05$



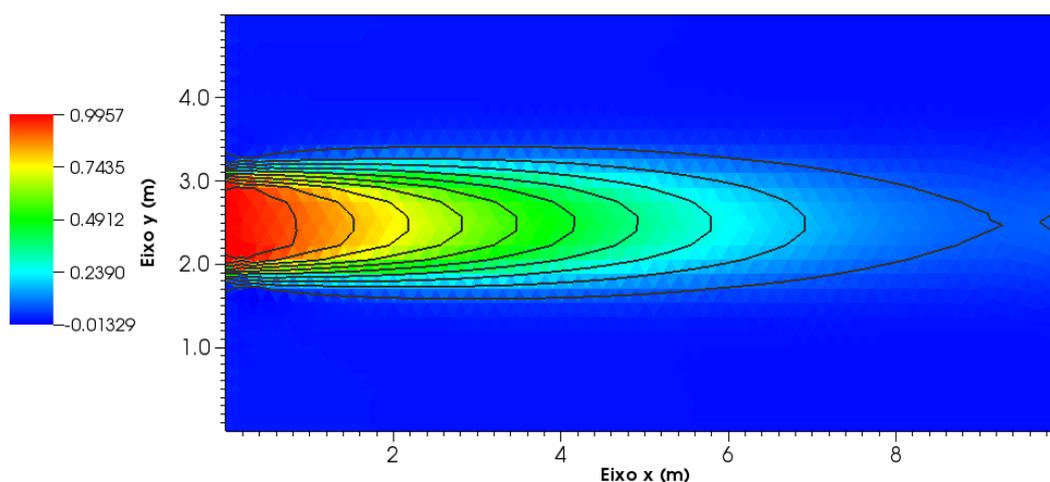
Fonte: O Autor (2021).

Figura 37 – Campo de concentração do traçador e suas isolinhas obtidos pelo FOU-MPFA-QL para o transporte bidimensional com uma fonte contínua a montante, malha M12 e razão de anisotropia $r = 100$. Dados os seguintes valores: $t = 2$ d, $CFL = 0,2$, $Pe = 0,05$



Fonte: O Autor (2021).

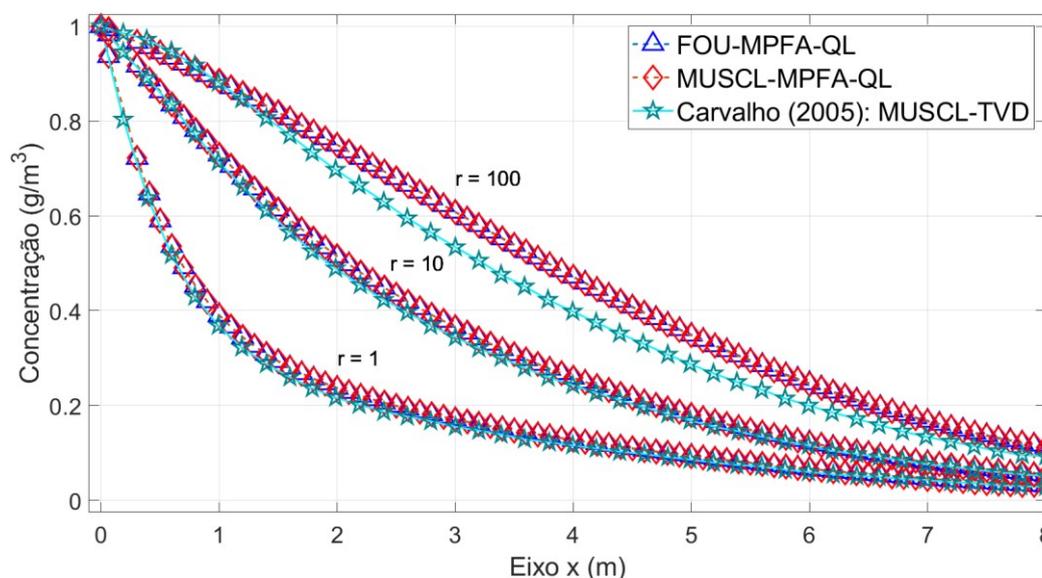
Figura 38 – Campo de concentração do traçador e suas isolinhas obtidos pelo MUSCL-MPFA-QL para o transporte bidimensional com uma fonte contínua a montante, malha M12 e razão de anisotropia $r = 100$. Dados os seguintes valores: $t = 2$ d, $CFL = 0,2$, $Pe = 0,05$



Fonte: O Autor (2021).

No Gráfico 46 são mostrados os perfis de concentração dos métodos anteriores e a solução numérica apresentada em Carvalho (2005), pelo método MUSCL-TVD, para este mesmo tipo de problema e malha semelhante a que foi empregada pelo autor (com 2772 VC triangulares), ao longo do eixo x (em $y = 2,5$ m). Os dados extraídos de Carvalho (2005) foram obtidos por meio do software GetData Graph Digitizer[®] (2013).

Gráfico 46 – Perfis de concentração obtidos para o transporte bidimensional de soluto traçador com uma fonte contínua a montante, malha M12 e diferentes razões de anisotropia. Dados os seguintes valores: $t = 2$ d, $CFL = 0,2$, $Pe = 0,05$



Fonte: O Autor (2021).

Para as razões de anisotropias com valores $r = 1$ e $r = 10$, obteve-se bons resultados comparando-se os métodos empregados, FOU-MPFA-QL e MUSCL-MPFA-QL, bem como a solução apresentada por Carvalho (2005). No entanto, percebe-se um sutil transpasse do valor de contorno, tornando-se negativo, quando o problema tem uma alta anisotropia ($r = 100$), de modo que não obedece ao princípio do máximo discreto⁹, assim como também foi observado na solução proposta por Carvalho (2005). Além disso, identifica-se pelas Figuras 37 e 38, o efeito de reflexão de onda, causada pela condição de contorno do problema (ver Eq. (135)) imposta no lado B-C (ver Figura 19), tal como foi relatado por Zhang, Zou e Greaves (2012), a presença de um corpo sólido dentro de um domínio computacional gera uma reflexão de onda, a qual é refletida no sentido inverso de sua propagação interferindo, portanto, no contorno de entrada onde as ondas são geradas, assim, a reflexão de onda secundária será gerada a partir do influxo e afetará o cálculo. Salvo esta observação, os métodos de primeira e segunda ordem foram bastante semelhantes entre si,

⁹ Visto que não há termo de fonte (ou sumidouro) – nesse problema estudado – através do princípio do máximo conhecido como lema de Hopf (PROTTER; WEINBERGER, 1967) declarado para cada volume de controle, determina-se que não pode haver algum valor dentro do domínio menor que o menor valor do contorno (NORDBOTTEN; AAVATSMARK; EIGESTAD, 2007).

PROTTER, M. H.; WEINBERGER, H. F. **Maximum principles in differential equations**. New York: Springer-Verlag, 1967. 261 p. ISBN: 0-387-96068-6.

NORDBOTTEN, J. M.; AAVATSMARK, I.; EIGESTAD, G. T. Monotonicity of control volume methods. **Numer. Math.**, [S.l.], v. 106, n. 2, p. 255-288, apr. 2007. DOI: 10.1007/s00211-006-0060-z.

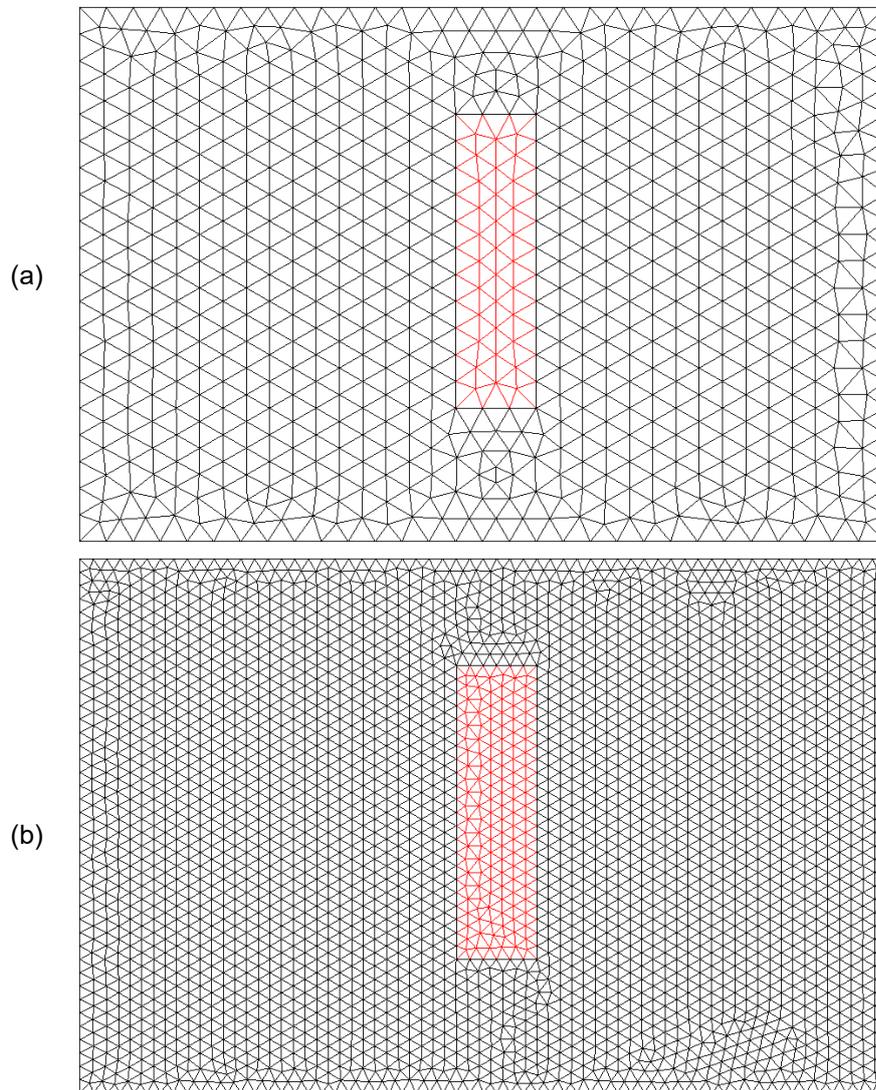
principalmente por se tratar de um problema com difusão dominante ($Pe = 0,05$), e, observa-se uma diferença maior de acurácia nos perfis de concentração (ver Gráfico 46), em relação ao método MUSCL-TVD, relacionando-se a razão de anisotropia com valor $r = 100$. Verifica-se, também, que conforme se aumentar a razão de anisotropia, há uma tendência em se estreitar o espalhamento do soluto traçador transversalmente e se concentrar, em maior quantidade, no sentido longitudinal (direção x), causando um efeito denominado pluma hidrodinâmica¹⁰.

4.2.3 Transporte de Solute Traçador em Reservatórios Heterogêneos: presença de barreira

O problema apresentado a seguir é adaptado de Chivata (2016). Considera-se um reservatório com duas regiões de permeabilidades distintas (\mathbf{K}_1 e \mathbf{K}_2) ao longo do domínio, com dimensões de comprimento indicadas na Figura 39 e injeção constante de concentração C_o em todo o lado A-D, sem a existência do termo de fonte (ou sumidouro). Essa heterogeneidade pode ser análoga à presença de barreira, desse modo, produz-se alguma influência no campo de pressão e no escoamento determinado pelo soluto traçador, resultante da equação geral de ADR (Eq. (25)), tal como relatado em Chivata (2016).

¹⁰ A razão de anisotropia é fundamental para controlar a forma da pluma e, em um transporte de massa, sua concentração máxima é encontrado no centro de massa da mesma (FETTER; BOVING; KREAMER, 2018).
FETTER, C. W.; BOVING, T.; KREAMER, D. **Contaminant hydrogeology**. 3rd ed. Long Grove: Waveland Press, 2018. 647 p. ISBN: 978-1-4786-3279-5.

Figura 40 – Malhas não estruturadas usadas na discretização espacial para o problema de transporte bidimensional em um reservatório isotrópico e heterogêneo: (a) malha M13, com 1424 VC triangulares; e (b) malha M14, com 5584 VC triangulares



Fonte: O Autor (2021).

As informações complementares para solucionar este problema são: $p_o = 2$ Pa, $C_o = 10$ g/m³, $D_o = 2 \cdot 10^{-9}$ m²/d, $v = 1$ m/d com os seguintes tensores de permeabilidade e tortuosidade, respectivamente:

$$\mathbf{K}_1 = \begin{bmatrix} 10 & 0 \\ 0 & 10 \end{bmatrix}, \mathbf{K}_2 = \begin{bmatrix} 1 \cdot 10^{-6} & 0 \\ 0 & 1 \cdot 10^{-6} \end{bmatrix} \text{ e } \boldsymbol{\tau} = \begin{bmatrix} 5 \cdot 10^{-1} & 0 \\ 0 & 5 \cdot 10^{-1} \end{bmatrix}, \quad (144)$$

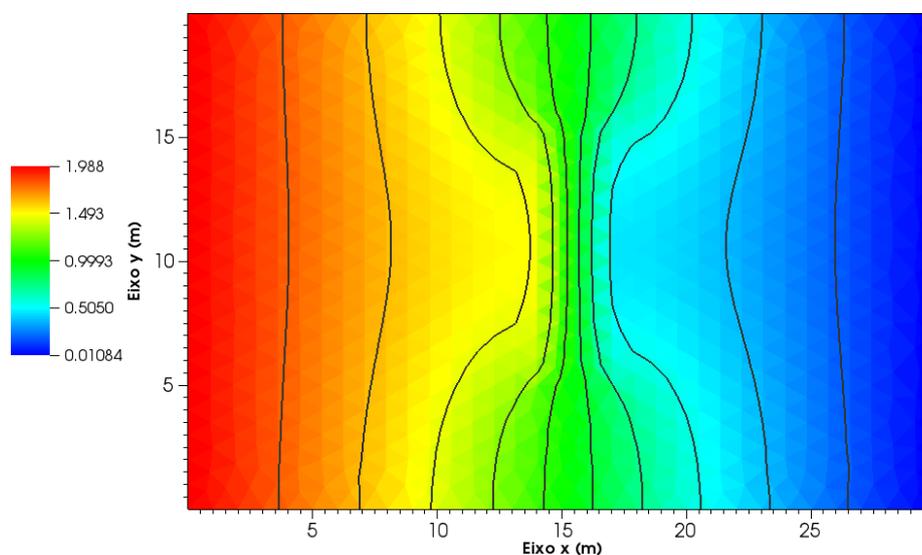
e os tensores de dispersão hidrodinâmica utilizados para se manter o mesmo número de Péclet ($Pe = 0,25$) estudado na malha M13 e na malha M114, por essa ordem, são dados por:

$$\mathbf{D}_H = \begin{bmatrix} 4 & 0 \\ 0 & 4 \end{bmatrix} \text{ e } \mathbf{D}_H = \begin{bmatrix} 2 & 0 \\ 0 & 2 \end{bmatrix}. \quad (145)$$

O tempo das simulações numéricas avaliadas acontece em $t = 12$ d e o número de Courant aplicado é $CFL = 0,2$.

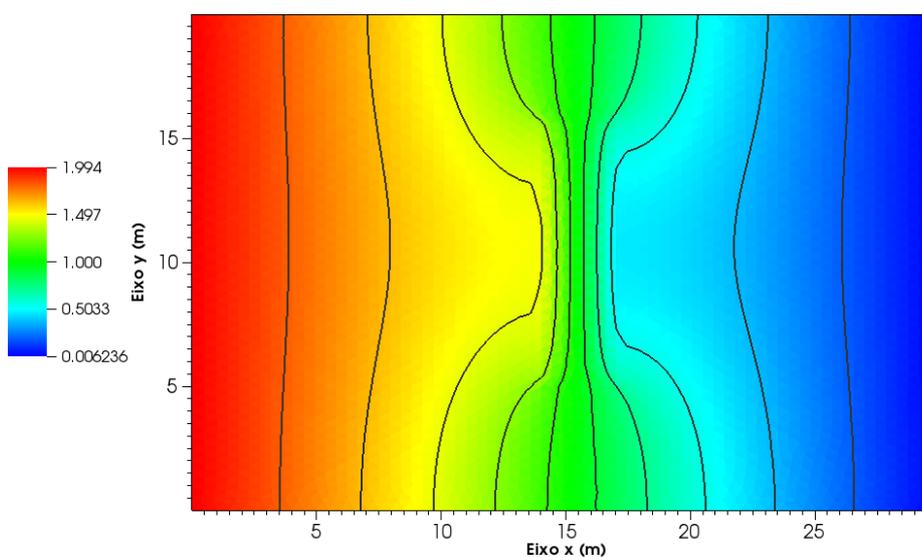
Na Figura 41 é identificado o campo de pressão e suas isolinhas calculado numericamente pelo MPFA-QL, para o problema de transporte de soluto traçador no reservatório estudado, empregando-se a malha M13. Já na Figura 42, identifica-se o campo de pressão e suas isolinhas após realizar o refinamento da malha, ou seja, com a malha M14.

Figura 41 – Campo de pressão e suas isolinhas obtidos pelo MPFA-QL para o transporte bidimensional de soluto traçador em um reservatório isotrópico e heterogêneo, com a malha M13



Fonte: O Autor (2021).

Figura 42 – Campo de pressão e suas isolinhas obtidos pelo MPFA-QL para o transporte bidimensional de soluto traçador em um reservatório isotrópico e heterogêneo, com a malha M14

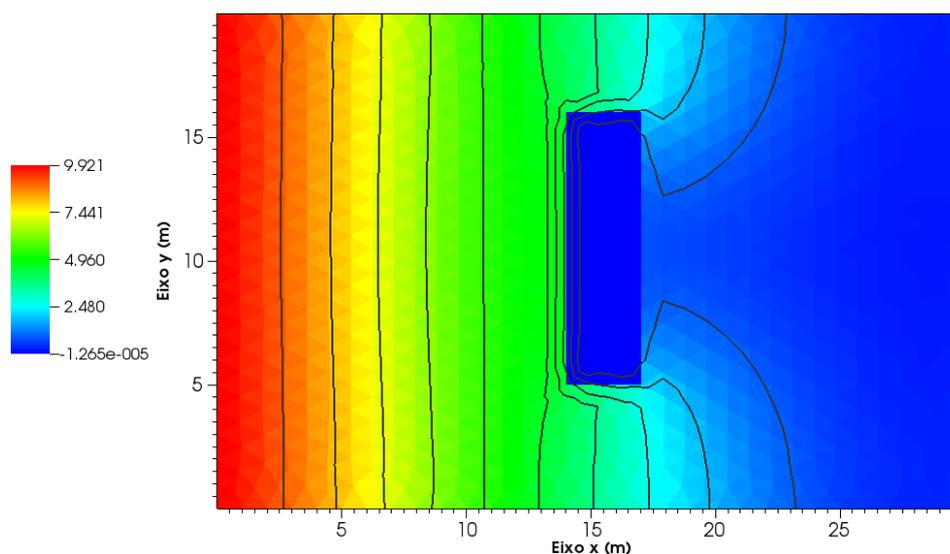


Fonte: O Autor (2021).

Através das figuras anteriores, verifica-se que a heterogeneidade presente no domínio modificou o campo de pressão do reservatório, e, conseqüentemente, isto se manifesta no campo de velocidade de escoamento do fluido no meio. Logo, a velocidade é máxima, quando associada ao tensor K_1 , e quase nula quando associada a K_2 , assim, os coeficientes de dispersão hidrodinâmica também sofrem alguma influência proporcional ao campo de velocidade no reservatório (ver Eq. (21)). Portanto, nota-se que essa mudança de permeabilidade influencia diretamente causando uma alteração abrupta no campo de pressão. Além disso, também, observa-se que ao se realizar o refinamento na malha não se obteve uma contribuição significativa nos resultados apresentados.

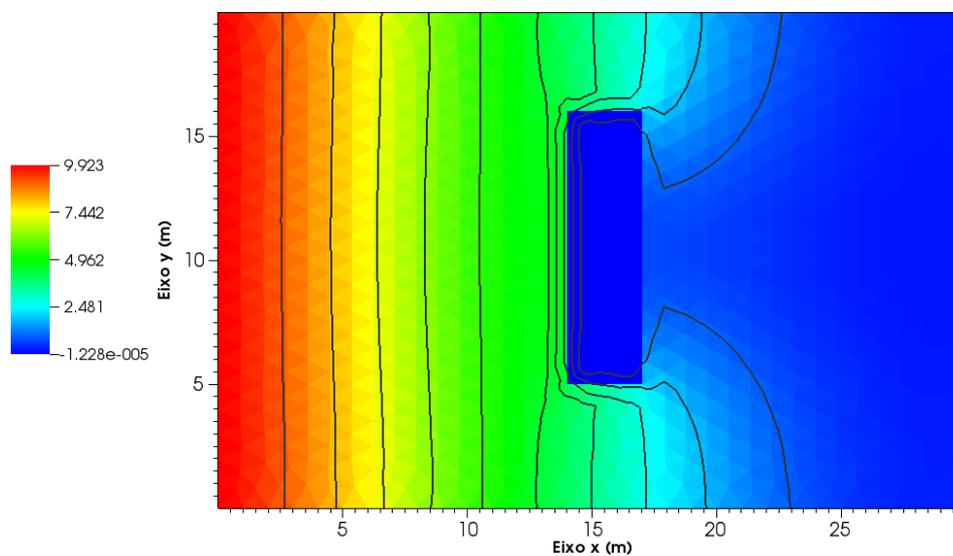
Da Figura 43 até a Figura 45 são apresentados os campos de concentração referentes ao transporte de soluto traçador no reservatório, através dos métodos FOU-MPFA-QL, MUSCL-MPFA-QL e MUSCL-Woodfield-MPFA-QL, com o emprego da malha M13. Da Figura 46 até a Figura 48, realiza-se as mesmas análises com o objetivo de estudar a influência do refinamento da malha (convergência), utilizando-se a malha M14. Nos Gráficos 47 e 48 são traçados os perfis de concentração – ao longo do eixo x (em $y = 10,5$ m) – dos métodos analisados por intermédio da malha M13 e da malha M14, respectivamente.

Figura 43 – Campo de concentração obtido pelo FOU-MPFA-QL para o transporte bidimensional de soluto traçador em um reservatório isotrópico e heterogêneo. Dados os seguintes valores: $t = 12$ d, $CFL = 0,2$, $Pe = 0,25$, malha M13



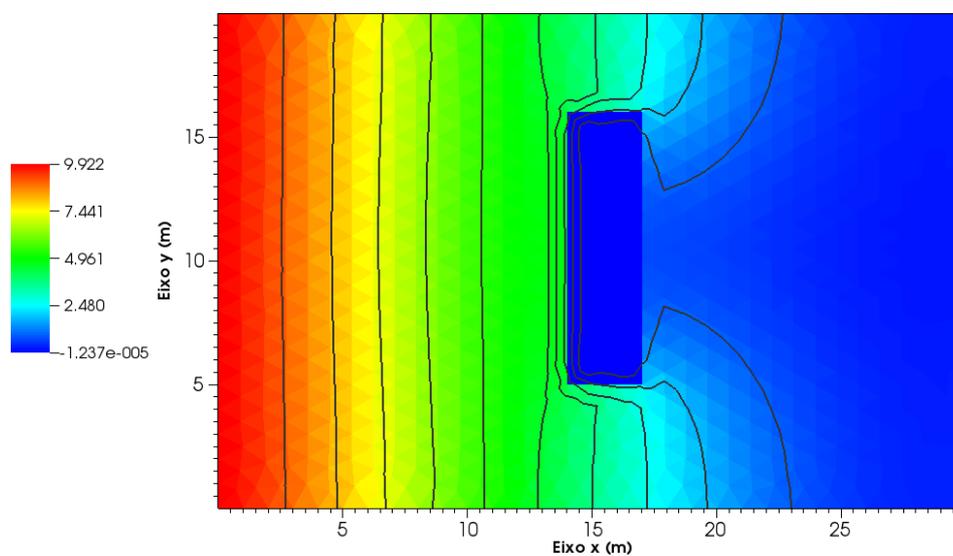
Fonte: O Autor (2021).

Figura 44 – Campo de concentração obtido pelo MUSCL-MPFA-QL para o transporte bidimensional de soluto traçador em um reservatório isotrópico e heterogêneo. Dados os seguintes valores: $t = 12$ d, $CFL = 0,2$, $Pe = 0,25$, malha M13



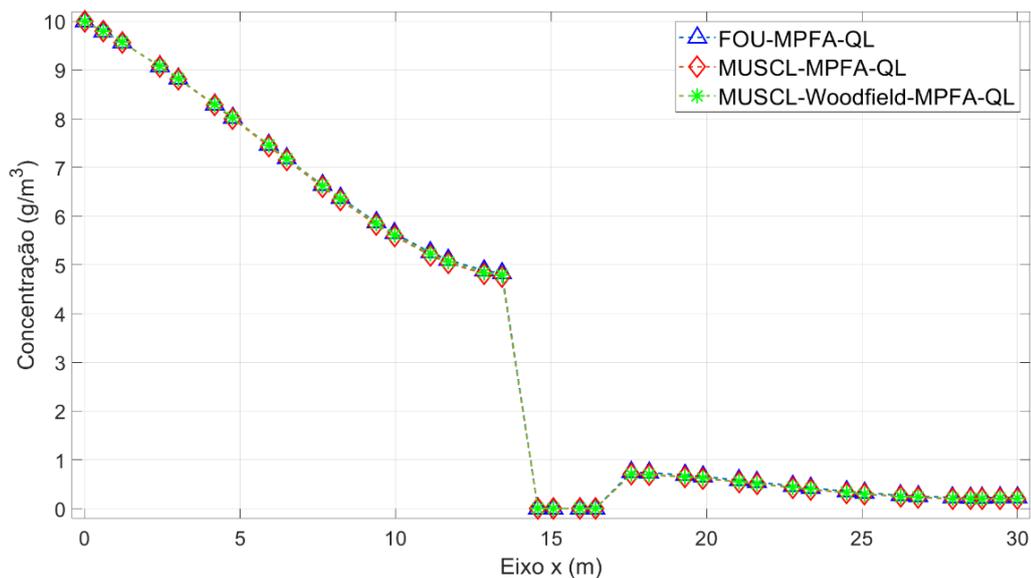
Fonte: O Autor (2021).

Figura 45 – Campo de concentração obtido pelo MUSCL-Woodfield-MPFA-QL para o transporte bidimensional de soluto traçador em um reservatório isotrópico e heterogêneo. Dados os seguintes valores: $t = 12$ d, $CFL = 0,2$, $Pe = 0,25$, malha M13



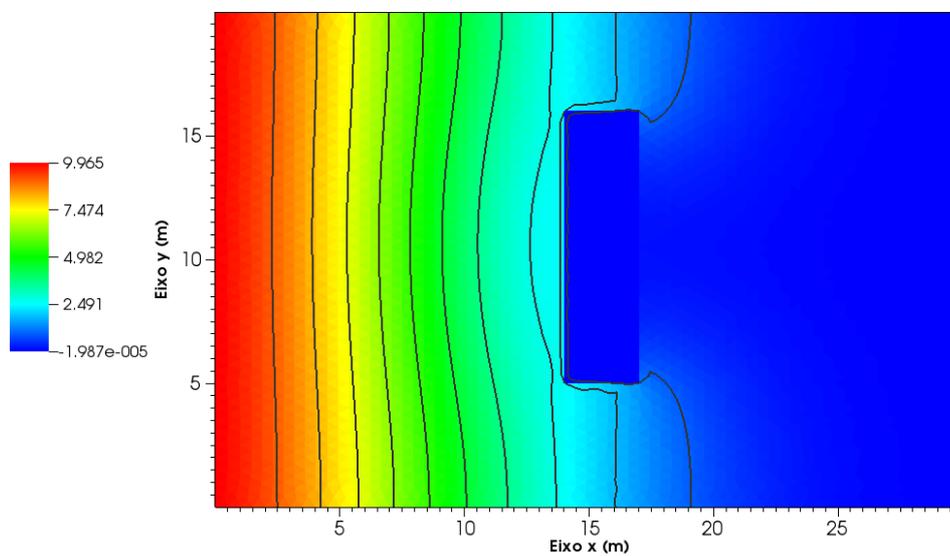
Fonte: O Autor (2021).

Gráfico 47 – Perfis de concentração obtidos numericamente pelos métodos FOU-MPFA-QL, MUSCL-MPFA-QL, MUSCL-Woodfield-MPFA-QL, considerando-se a malha M13, para o transporte bidimensional de soluto traçador em um reservatório isotrópico e heterogêneo. Conforme os seguintes valores: $t = 12$ d, $CFL = 0,2$ e $Pe = 0,25$



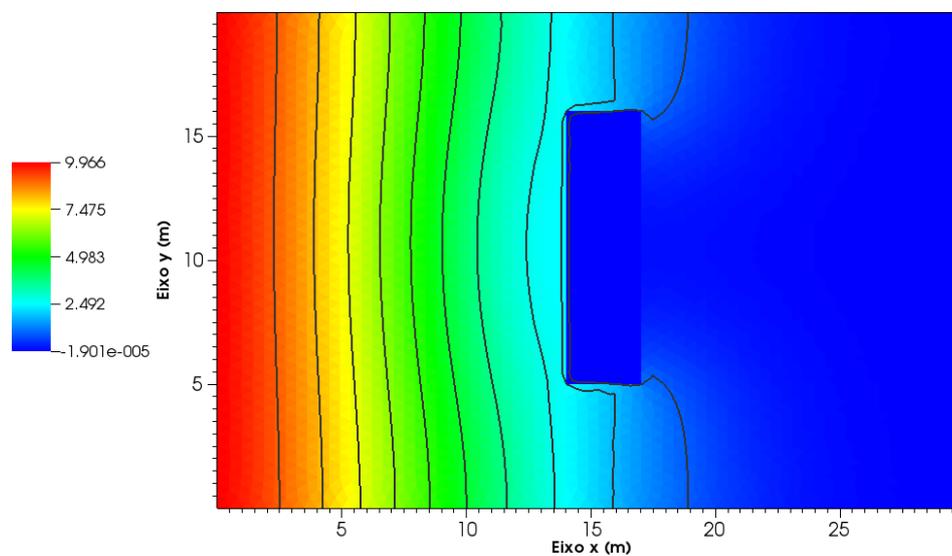
Fonte: O Autor (2021).

Figura 46 – Campo de concentração obtido pelo FOU-MPFA-QL para o transporte bidimensional de soluto traçador em um reservatório isotrópico e heterogêneo. Dados os seguintes valores: $t = 12$ d, $CFL = 0,2$, $Pe = 0,25$, malha M14



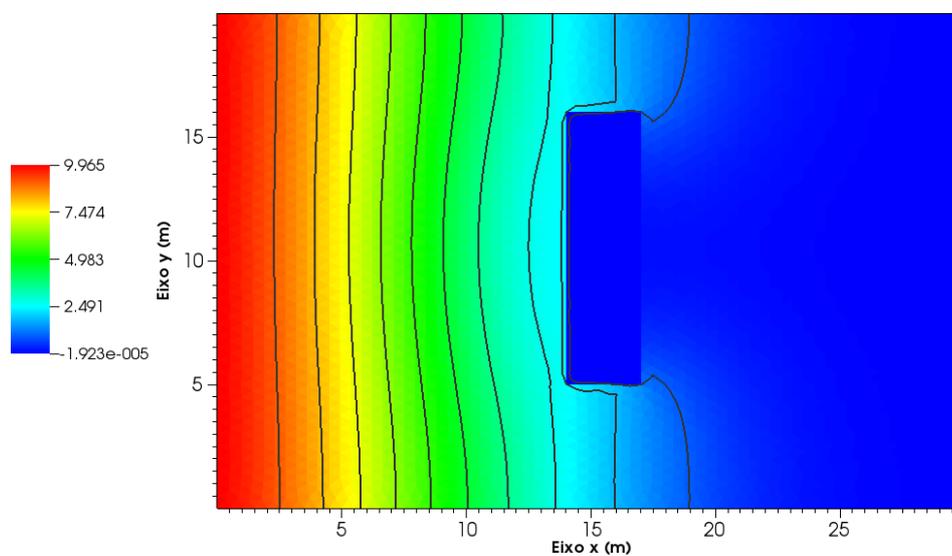
Fonte: O Autor (2021).

Figura 47 – Campo de concentração obtido pelo MUSCL-MPFA-QL para o transporte bidimensional de soluto traçador em um reservatório isotrópico e heterogêneo. Dados os seguintes valores: $t = 12$ d, $CFL = 0,2$, $Pe = 0,25$, malha M14



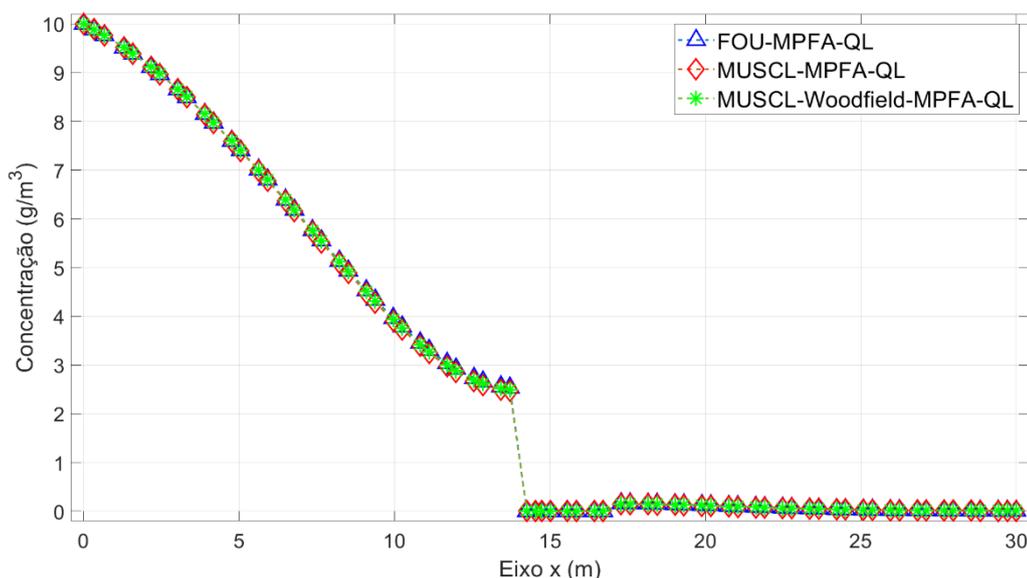
Fonte: O Autor (2021).

Figura 48 – Campo de concentração obtido pelo MUSCL-Woodfield-MPFA-QL para o transporte bidimensional de soluto traçador em um reservatório isotrópico e heterogêneo. Dados os seguintes valores: $t = 12$ d, $CFL = 0,2$, $Pe = 0,25$, malha M14



Fonte: O Autor (2021).

Gráfico 48 – Perfis de concentração obtidos numericamente pelos métodos FOU-MPFA-QL, MUSCL-MPFA-QL, MUSCL-Woodfield-MPFA-QL, considerando-se a malha M14, para o transporte bidimensional de soluto traçador em um reservatório isotrópico e heterogêneo. Conforme os seguintes valores: $t = 12$ d, $CFL = 0,2$ e $Pe = 0,25$



Fonte: O Autor (2021).

Como esperado, devido à alteração abrupta no campo de pressão causado pela heterogeneidade, verifica-se que a distribuição de concentração do soluto traçador aconteceu na região de maior permeabilidade (em K_1), enquanto na região de baixa permeabilidade (em K_2) é possível considerar o escoamento quase nulo (ver Gráficos 47 e 48), assim, esta região se comporta como uma barreira natural ao escoamento através do reservatório. Por consequência, essa distribuição de concentração permite observar como ocorre a distribuição de velocidade de escoamento no reservatório, e determinar quali-quantitativamente os efeitos causados pela barreira no meio.

Observa-se que os campos de concentração e suas isolinhas são praticamente idênticos entre si, quando se aplica os métodos FOU-MPFA-QL, MUSCL-MPFA-QL e MUSCL-Woodfield-MPFA-QL, na malha M13. No entanto, essas soluções são alteradas, mais visivelmente, quando é realizado o refinamento da malha, utilizando-se a malha M14. Posto isto, com o número de Péclet baixo ($Pe = 0,25$), identifica-se que o transporte de soluto é governado pelo fenômeno de difusão, logo, as soluções numéricas associadas ao fluxo advectivo (FOU, MUSCL e MUSCL-Woodfield) influenciam insuficientemente neste tipo de fluxo, sendo mais significativo o fluxo numérico hidrodinâmico calculado pelo MPFA-QL. Assim, neste caso, pode-se aplicar praticamente qualquer um dos métodos apresentados.

5 CONCLUSÕES E TRABALHOS FUTUROS

No presente trabalho, foi desenvolvida uma metodologia alternativa – fundamentada em formulações de volumes finitos – para resolver a equação de ADR que é responsável por descrever o transporte de solutos traçadores em reservatórios de petróleo. Assim, cada termo da referida equação foi discretizado com a aplicação dos métodos expostos no presente trabalho (MPFA-QL, FOU, MUSCL e MUSCL-Woodfield), considerando-se separadamente cada fenômeno físico envolvido (advecção, dispersão, reação). De maneira geral, a metodologia obteve resultados satisfatórios quanto aos problemas aqui abordados.

Outrossim, os resultados numéricos apresentados convergiram para a solução analítica, nos casos que se tinha tal solução, principalmente ao se realizar o refinamento das malhas. Logo, permite-se constatar que a metodologia desenvolvida é tida como consistente, ou seja, as soluções numéricas podem atender adequadamente as equações governantes. Em especial, a principal contribuição desta dissertação de mestrado acontece com a implementação do MPFA-QL, onde o mesmo se mostrou bastante promissor calculando-se o campo de pressões no reservatório e, conseqüentemente, as velocidades de Darcy do fluido. Da mesma maneira, o MPFA-QL se mostrou capaz de calcular o fluxo hidrodinâmico, apresentando-se características de monotonicidade, inclusive em meios heterogêneos e anisotrópicos.

De outra parte, o método FOU se mostrou capaz de representar a concentração do traçador nas interfaces dos volumes de controle, e para melhorar sua acurácia foi necessário realizar o refinamento da malha até certo ponto, pois até mesmo que se consiga representar os valores da concentração nas interfaces, o método ainda apresenta características de difusão numérica. Desse modo, encontra-se necessário a aplicação de métodos de mais alta ordem. Nesse sentido, observa-se que a implementação do método MUSCL consegue suprir esta deficiência. No entanto, quando se tem um problema fortemente advectivo, alguns cuidados devem ser observados para evitar o surgimento de oscilações numérica que ocorrem próximo às regiões de choque nos perfis de concentração. Em tal situação, também, foi estudado a variação dos parâmetros que definem a ordem de aproximação do método MUSCL ($\lambda = 1/3$, $\lambda = -1$, e $\lambda = 0$) e constatou que $\lambda = -1$ se torna mais adequado, pois as

oscilações numéricas não se mostraram presentes independente do refinamento realizado na malha, mas como o propósito desta dissertação de mestrado é validar a metodologia através de *benchmarks*, logo foi mantido o valor $\lambda = 1/3$ na maioria dos casos. E, apesar das pequenas oscilações em problema fortemente advectivo encontradas neste parâmetro, o mesmo se mostrou bastante satisfatório na maioria dos casos estudados, e com o intuito de aumentar a estabilidade do método, acrescentou-se o limitador de Woodfield. À vista disso, identifica-se que tal limitador foi capaz de suprimir as oscilações numéricas que se tinha no método MUSCL, porém ao custo de tornar a solução numérica mais difusiva.

Ao se aplicar traçadores radioativos, verifica-se que quanto mais baixo for o valor da constante de decaimento radioativo mais rigor deve ser levado em conta ao tipo de método aplicado em sua representação. Pois, observa-se mais claramente que nesta situação o método FOU é mais difusivo que o método MUSCL-Woodfield. Por outro lado, quanto maior for o valor da constante de decaimento radioativo, ambos os métodos conseguem representar satisfatoriamente o transporte de traçadores radioativos. Tal efeito, deve-se ao fato deste traçador perder massa mais rapidamente devido à elevada taxa de decaimento radioativo, assim, o mesmo não há como ser transportado pelo fluido ao longo de todo o domínio. Logo, num reservatório que seu fluxo é dominado por advecção é mais adequado utilizar traçadores com baixo valores de decaimento radioativo, assim como escolher o método MUSCL-Woodfield.

Novas pesquisas são necessárias para melhorar a representação do fenômeno de transporte em reservatórios, pois necessita-se considerar problemas com maiores apelos físicos. Em consequência e continuação do presente trabalho, pode-se indicar os seguintes temas de pesquisas futuras:

- a) a fim de aumentar a robustez da metodologia desenvolvida, indica-se a consideração de outras físicas integradas ao modelo, tal como: gravidade, capilaridade, viscosidade, interação do traçador com a matriz porosa, porosidade variável ao longo do reservatório (i.e., deformável), transporte não isotérmico, entre outras;
- b) estudo de vários tipos de traçadores, como: energia (calor), vírus, esporos, micróbios, traçadores para a fase gasosa, entre outros;
- c) aplicação de traçadores em rochas fraturadas;
- d) aprimoramento do termo reativo (ou termo de fonte) da equação de ADR;

- e) aplicação de poços e, também, estudar o efeito de orientação de malha (GOE – *Grid Orientation Effect*) na modelagem e simulação de transporte em reservatórios com a metodologia apresentada nesta dissertação de mestrado;
- f) extensão da metodologia apresentada neste trabalho para malhas tridimensionais;
- g) desenvolvimento de estratégias de malha para problemas estacionários ou dinâmicos, tal como: sobreposição de malha, movimentação de malha, adaptação de malha, técnicas *multigrid*, entre outras;
- h) extensão da metodologia apresentada neste trabalho para computação paralela de memória distribuída (em *cluster*), com o propósito de simular problemas complexos e de grande magnitude;
- i) substituição do método MPFA-QL por outros métodos do tipo MPFA, bem como, outros métodos não lineares capazes de satisfazer ao critério do DMP;
- j) desenvolvimento de técnicas de discretização temporal de mais alta ordem, como, por exemplo, os métodos de Runge-Kutta de 2ª e 3ª ordem.

REFERÊNCIAS

- AAVATSMARK, I.; BARKVE, T.; BØE, Ø.; MANNSETH, T. Discretization on unstructured grids for inhomogeneous, anisotropic media. Part I: derivation of the methods. **SIAM J. Sci. Comput.**, [S.l.], v. 19, n. 5, p. 1700-1716, sep. 1998a. DOI: 10.1137/S1064827595293582.
- AAVATSMARK, I.; BARKVE, T.; BØE, Ø.; MANNSETH, T. Discretization on unstructured grids for inhomogeneous, anisotropic media. Part II: discussion and numerical results. **SIAM J. Sci. Comput.**, [S.l.], v. 19, n. 5, p. 1717-1736, sep. 1998b. DOI: 10.1137/S1064827595293594.
- AAVATSMARK, I. An introduction to multipoint flux approximations for quadrilateral grids. **Comput. Geosci.**, [S.l.], v. 6, n. 3-4, p. 405-432, sep. 2002. DOI: 10.1023/A:1021291114475.
- AAVATSMARK, I. Interpretation of a two-point flux stencil for skew parallelogram grids. **Comput. Geosci.**, [S.l.], v. 11, n. 3, p. 199-206, sep. 2007. DOI: 10.1007/s10596-007-9042-1.
- ABBASZADEH-DEHGHANI, M.; BRIGHAM, W. E. Analysis of well-to-well tracer flow to determine reservoir layering. **J. Pet. Technol.**, [S.l.], v. 36, n. 10, SPE-10760-PA, p. 1753-1762, oct. 1984. DOI: 10.2118/10760-PA.
- AGÉLAS, L.; DI PIETRO, D. A.; DRONIOU, J. The G method for heterogeneous anisotropic diffusion on general meshes. **ESAIM: M2AN**, [S.l.], v. 44, n. 4, p. 597-625, jul.-aug. 2010. DOI: 10.1051/m2an/2010021.
- AL-QASIM, A.; KOKAL, S.; HARTVIG, S.; HUSEBY, O. Reservoir description insights from inter-well gas tracer test. In: ABU DHABI INTERNATIONAL PETROLEUM EXHIBITION & CONFERENCE, 2019, Abu Dhabi. **Proceedings...** Abu Dhabi: Society of Petroleum Engineers, 2019. p. 1-13. DOI: 10.2118/197967-MS.
- BATU, V. **Applied flow and solute transport modeling in aquifers: fundamental principles and analytical and numerical methods**. Boca Raton: Taylor & Francis, 2006. 667 p. ISBN: 978-0-8493-3574-7.
- BEAR, J. **Dynamics of fluids in porous media**. New York: Dover Publications, 1972. 783 p. ISBN: 978-0-486-65675-5.
- BEAR, J.; BACHMAT, Y. **Introduction to modeling of transport phenomena in porous media**. Dordrecht: Kluwer Academic Publishers, 1990. 553 p. ISBN-13: 978-0-7923-1106-5.
- BEAR, J.; CHENG, A. H.-D. **Modeling groundwater flow and contaminant transport**. London: Springer, 2010. 834 p. ISBN: 978-1-4020-6681-8.
- BEAR, J.; VERRUIJT, A. **Modeling groundwater flow and pollution**. Dordrecht: D. Reidel Publishing Company, 1987. 414 p. ISBN: 978-1-55608-015-9.

BECKNER, B. L.; HUTFILZ, J. M.; RAY, M. B.; TOMICH, J. F. EM^{power}: new reservoir simulation system. In: SPE MIDDLE EAST OIL SHOW, 2001, Manama. **Annals...** Manama: Society of Petroleum Engineers, 2001. p. 1-13. DOI: 10.2118/68116-MS.

BODIN, J. MFIT 1.0.0: multi-flow inversion of tracer breakthrough curves in fractured and karst aquifers. **Geosci. Model Dev.**, [S.l.], v. 13, n. 6, p. 2905-2924, jul. 2020. DOI: 10.5194/gmd-13-2905-2020.

BRIGHAM, W. E.; SMITH, D. H. Prediction of tracer behavior in five-spot flow. In: CONFERENCE ON PRODUCTION RESEARCH AND ENGINEERING, 1965, Tulsa. **Proceedings...** Dallas: Society of Petroleum Engineers of AIME, 1965. p. 103-112. DOI: 10.2118/1130-MS.

BROWN, G. O. Henry Darcy and the making of a law. **Water Resources Research**, [S.l.], v. 38, n. 7, p. 1-12, jul. 2002. DOI: 10.1029/2001WR000727.

CAMPANA, M. E. **Finite-state models of transport phenomena in hydrologic systems**. 1975. 252 f. Tese (Doutorado em Hidrologia) – Departamento de Hidrologia e Recursos Hídricos, Universidade do Arizona, Tucson, 1975.

CANNON, S. **Reservoir modelling: a practical guide**. Hoboken: Wiley, 2018. 312 p. ISBN: 978-1-119313-43-4.

CARVALHO, D. K. E. de. **Uma formulação do método dos volumes finitos com estrutura de dados por aresta para a simulação de escoamentos em meios porosos**. 2005. 185 f. Tese (Doutorado em Ciências de Engenharia Civil) – Centro de Tecnologia e Geociências, Universidade Federal de Pernambuco (UFPE), Recife, 2005.

CHAI, T.; DRAXLER, R. R. Root mean square error (RMSE) or mean absolute error (MAE)? – Arguments against avoiding RMSE in the literature. **Geosci. Model Dev.**, [S.l.], v. 7, n. 3, p. 1247-1250, jun. 2014. DOI: 10.5194/gmd-7-1247-2014.

CHANG, H. K.; ASSINE, M. L.; CORRÊA, F. S.; TINEN, J. S.; VIDAL, A. C.; KOIKE, L. Sistemas petrolíferos e modelos de acumulação de hidrocarbonetos na Bacia de Santos. **Revista Brasileira de Geociências**, [S.l.], v. 38, n. 2, p. 29-46, jun. 2008. DOI: 10.25249/0375-7536.2008382S2946.

CHAPRA, S. C. **Applied numerical methods with MATLAB for engineers and scientists**. 4th ed. New York: McGraw-Hill Education, 2018. 697 p. ISBN: 978-0-073397-96-2.

CHEN, Q.-Y.; WAN, J.; YANG, Y.; MIFFLIN, R. T. Enriched multi-point flux approximation for general grids. **Journal of Computational Physics**, [S.l.], v. 227, n. 3, p. 1701-1721, jan. 2008. DOI: 10.1016/j.jcp.2007.09.021.

CHEN, Z. **Reservoir simulation: mathematical techniques in oil recovery**. Philadelphia: Siam, 2007. 219 p. ISBN: 978-0-898716-40-5.

CHEN, Z.; HUAN, G.; MA, Y. **Computational methods for multiphase flows in porous media**. Philadelphia: SIAM, 2006. 551 p. ISBN: 0-89871-606-3.

CHIVATA, N. Y. B. **Simulação numérica da equação de advecção-dispersão-reação para um traçador em meios porosos heterogêneos e anisotrópicos por um método dos volumes finitos, utilizando malhas poligonais**. 2016. 129 f. Dissertação (Mestrado em Engenharia Mecânica) – Centro de Tecnologia e Geociências, Universidade Federal de Pernambuco (UFPE), Recife, 2016.

CHOY, B.; REIBLE, D. D. **Diffusion models of environmental transport**. Boca Raton: CRC Press LLC, 2000. 183 p. ISBN: 1-56670-414-6.

CLOUGH, R. W. Original formulation of the finite element method. **Finite Elements in Analysis and Design**, [S.l.], v. 7, n. 2, p. 89-101, nov. 1990. DOI: 10.1016/0168-874X(90)90001-U.

COCKBURN, B.; GOPALAKRISHNAN, J.; WANG, H. Locally conservative fluxes for the continuous Galerkin method. **SIAM J. Numer. Anal.**, [S.l.], v. 45, n. 4, p. 1742-1776, aug. 2007. DOI: 10.1137/060666305.

COMSOL Multiphysics, version 5.4.0.388. Stockholm: COMSOL Inc., 2019. Disponível em: <<https://br.comsol.com/product-download/5.4/windows>>. Acesso em: 12 abr. 2021.

CONTRERAS, F. R. L. **Um método dos volumes finitos centrado na célula para a simulação de escoamento bifásico em reservatório de petróleo heterogêneos e anisotrópicos**. 2012. 108 f. Dissertação (Mestrado em Engenharia Mecânica) – Centro de Tecnologia e Geociências, Universidade Federal de Pernambuco (UFPE), Recife, 2012.

CONTRERAS, F. R. L. **Métodos de volumes finitos robustos para a simulação de escoamentos bifásicos de água e óleo em reservatórios de petróleo**. 2017. 118 f. Tese (Doutorado em Ciências de Engenharia Mecânica) – Centro de Tecnologia e Geociências, Universidade Federal de Pernambuco (UFPE), Recife, 2017.

CONTRERAS, F. R. L.; LYRA, P. R. M.; CARVALHO, D. K. E. de. A new Multi-Point Flux Approximation method with a quasi-local stencil (MPFA-QL) for the simulation of diffusion problems in anisotropic and heterogeneous media. **Applied Mathematical Modelling**, [S.l.], v. 70, p. 659-676, jun. 2019. DOI: 10.1016/j.apm.2019.01.033.

CONTRERAS, F. R. L.; LYRA, P. R. M.; SOUZA, M. R. A.; CARVALHO, D. K. E. A cell-centered Multi-Point Flux Approximation method with a diamond stencil coupled with a higher order finite volume method for the simulation of oil-water displacements in heterogeneous and anisotropic petroleum reservoirs. **Computers and Fluids**, [S.l.], v. 127, p. 1-16, mar. 2016. DOI: 10.1016/j.compfluid.2015.11.013.

COURANT, R.; ISAACSON, E.; REES, M. On the solution of nonlinear hyperbolic differential equations by finite differences. **Commun. Pure Appl. Math.**, [S.l.], v. 5, n. 3, p. 243-255, aug. 1952. DOI: 10.1002/cpa.3160050303.

CRANK, J. **The mathematics of diffusion**. 2nd ed. Glasgow: Oxford University Press, 1975. 414 p. ISBN: 0-19-853344-6.

CRUMPTON, P. I.; SHAW, G. J.; WARE, A. F. Discretization and multigrid solution of elliptic equations with mixed derivative terms and strongly discontinuous coefficients. **Journal of Computational Physics**, [S.I.], v. 116, n. 2, p. 343-358, feb. 1995. DOI: 10.1006/jcph.1995.1032.

DELLEUR, J. W. **The handbook of groundwater engineering**. Boca Raton: CRC Press LLC, 1999. 949 p. ISBN: 3-540-64745-7.

DENNY, D. A converse of the mean value theorem for integrals of functions of one or more variables. **MSME**, [S.I.], v. 9, n. 2, p. 1-12, set. 2014.

DIAS, N. L. Obtenção de uma solução analítica da equação de difusão-advecção com decaimento de 1ª ordem pelo método da transformação de similaridade generalizada. **RBRH**, [S.I.], v. 8, n. 1, p. 181-188, mar. 2003. DOI: 10.21168/rbrh.v8n1.p181-188.

DU, Y.; GUAN, L. Interwell tracer tests: lessons learned from past field studies. **Society of Petroleum Engineers**, Jakarta, SPE-93140-MS, p. 1-9, apr. 2005. DOI: 10.2118/93140-MS.

DUGSTAD, Ø.; VIIG, S.; KROGNES, B.; KLEVEN, R.; HUSEBY, O. Tracer monitoring of enhanced oil recovery projects. **EPJ Web of Conferences**, [S.I.], v. 50, n. 02002, p. 1-7, may 2013. DOI: 10.1051/epjconf/20135002002.

ECLIPSE, version 4.16. [S.I.]: Schlumberger Limited, 2020. Disponível em: <<https://www.software.slb.com/products/eclipse>>. Acesso em: 12 abr. 2021.

EDWARDS, M. G.; ROGERS, C. F. Finite volume discretization with imposed flux continuity for the general tensor pressure equation. **Computational Geosciences**, [S.I.], v. 2, p. 259-290, dec. 1998. DOI: 10.1023/A:1011510505406.

EIGESTAD, G. T.; KLAUSEN, R. A. On the convergence of the multi-point flux approximation O-method: numerical experiments for discontinuous permeability. **Numer. Methods Partial Differ. Equ.**, [S.I.], v. 21, n. 6, p. 1079-1098, ap. 2005. DOI: 10.1002/num.20079.

ERTEKIN, T.; ABOU-KASSEM, J. H.; KING, G. R. **Basic applied reservoir simulation**. 406p. Richardson: Society of Petroleum Engineers, 2001. ISBN: 1-55563-089-8.

EWING, R. E. **The mathematics of reservoir simulation**. Philadelphia: Siam, 1983. 198 p. ISBN: 0-89871-192-4.

FANCHER, G. Henry Darcy – engineer and benefactor of mankind. **Journal of Petroleum Technology**, [S.I.], v. 8, n. 10, p. 12-14, oct. 1956. DOI: 10.2118/762-G.

FANCHI, J. R. **Principles of applied reservoir simulation**. 2nd ed. Amsterdam: Gulf Professional Publishing, 2001. ISBN: 0-88415-372-X.

FEFLOW. Version 7.0.10. [S.l.]: DHI Group, 2017. Disponível em: <<http://releasenotes.dhigroup.com/2016/FEFLOWrelinf.htm>>. Acesso em: 30 maio 2019, 06:20:55.

FERRONI, J. G. **Aplicação do método da integral de contorno na modelagem do transporte de traçadores radioativos em meios porosos**. 1996. 123 f. Dissertação (Mestrado em Engenharia de Petróleo) – Universidade Estadual de Campinas, Faculdade de Engenharia Mecânica, Campinas, 1996.

FERZIGER, J. H.; PERIĆ, M. **Computational methods for fluid dynamics**. 3rd ed. Berlin: Springer, 2002. 423 p. ISBN: 3-540-42074-6.

FICK, A. Ueber Diffusion. **Annalen der Physik**, [S.l.], v. 170, n. 1, p. 59-86, jan. 1855. DOI: 10.1002/andp.18551700105.

FOURIER, J. B. J (1822). **Théorie analytique de la chaleur** [Versão digital]. New York: Cambridge University Press, 2009. 639 p. ISBN: 978-1-108-00180-9.

FUNG, L. S.-K.; HIEBERT, A. D.; NGHIEM, L. X. Reservoir simulation with a control-volume finite-element method. **SPE Res. Eng.**, [S.l.], v. 7, n. 03, p. 349-357, aug. 1992. DOI: 10.2118/21224-PA.

GAO, Z.; WU, J. A linearity-preserving cell-centered scheme for the heterogeneous and anisotropic diffusion equations on general meshes. **International Journal for Numerical Methods in Fluids**, [S.l.], v. 67, n. 12, p. 2157-2183, dez. 2011. DOI: 10.1002/fld.2496.

GAO, Z.; WU, J. A small stencil and extremum-preserving scheme for anisotropic diffusion problems on arbitrary 2D and 3D meshes. **Journal of Computational Physics**, [S.l.], v. 250, p. 308-331, oct. 2013. DOI: 10.1016/j.jcp.2013.05.013.

GARCIA, E. L. M. **Formulações bi e tridimensional do método dos elementos finitos para a simulação paralela de escoamentos em reservatórios de petróleo**. 1997. Tese (Doutorado em Engenharia Civil) – Universidade Federal do Rio de Janeiro (UFRJ), Rio de Janeiro, 1997.

GDAWIEC, K. Star-shaped set inversion fractals. **Fractals**, [S.l.], v. 22, n. 4, 1450009, jul. 2014. DOI: 10.1142/S0218348X14500091.

GEORGE, P. L.; BOROUCHAKI, H.; ALAUZET, F.; LAUG, P.; LOSEILLE, A.; MARÉCHAL, L. **Meshing, geometric modeling and simulation 2**: metrics, meshes and mesh adaptation. Londres: ISTE, 2019. 2 v. ISBN: 978-1-78630-117-8.

GetData Graph Digitizer, version 2.26.0.20. [S.l.]: S. Fedorov, 2013. Disponível em: <<http://getdata-graph-digitizer.com/>>. Acesso em: 01 jan. 2021.

GHOSH, S. K. **Visibility algorithms in the plane**. Cambridge: Cambridge University Press, 2007. ISBN: 978-0-521-87574-5.

GILMAN, J. R.; OZGEN, C. **Reservoir simulation: history matching and forecasting**. Richardson: Society of Petroleum Engineers, 2013. 120 p. ISBN: 978-1-61399-292-0.

Gmsh, version 4.6.0. Boston: Free Software Foundation Inc., 2020. Disponível em: <<https://gmsh.info/>>. Acesso em: 31 out. 2020.

GODUNOV, S. K. A difference method for numerical calculation of discontinuous solutions of the equations of hydrodynamics. **Mat. Sb.**, [S.I.], v. 47, n. 3, p. 271-306, 1956.

GOULART, M. M.; GOMES, A. P.; ROCHA, L. A. O.; SANTOS, E. D. dos; ISOLDI, L. A.; MARTINS, J. C.; GOMES, M. das N. Verificação e validação de um modelo numérico para abordagem do escoamento em um canal de ondas. **Revista Cereus**, [S.I.], v. 10, n. 4, p. 226-239, nov. 2018. DOI: 10.18605/2175-7275/cereus.v10n4p226-239.

GUAN, L.; DU, Y. Will tracer move the same velocity as it's carrier? **Society of Petroleum Engineers**, Houston, SPE-89956-MS, p. 1-6, sep. 2004. DOI: 10.2118/89956-MS.

GUIDORIZZI, H. L. **Um curso de cálculo**. 5. ed. Rio de Janeiro: LTC, 2001. 2 v. ISBN: 978-8-521-61280-3.

HÁLEK, V.; ŠVEC, J. **Groundwater hydraulics**. Amsterdam: Elsevier Scientific Publishing Company, 1979. 618 p. ISBN: 0-444-99820-9.

HEALY, R. W. **Simulation of solute transport in variably saturated porous media with supplemental information on modifications to the U.S. Geological Suvery's computer program VS2D**. Denver: U.S. Geological Survey, 1990. 125 p. Water-Resources Investigations Report 90-4025.

HELMING, R. **Multiphase flow and transport processes in the surface: a contribution to the modeling of hydrosystems**. New York: Springer-Verlag, 1997. 367 p. ISBN: 3-540-62703-0.

HIRSCH, C. **Numerical computation of internal and external flows: fundamentals of computational fluid dynamics**. 2nd ed. Amsterdam: Butterworth-Heinemann, 2007. 680 p. ISBN: 978-0-7506-6594-0.

HIRSCH, C. **Numerical computation of internal and external flows**. Volume 1: fundamentals of numerical discretization. Chichester: John Wiley & Sons, 1988. 515 p. ISBN: 0471-91762-0.

HIRSCH, C. **Numerical computation of internal and external flows**. Volume 2: computational methods for inviscid and viscous flows. Chichester: John Wiley & Sons, 1990. 691 p. ISBN: 0471-92351-6.

HOSSAIN, M. A.; YONGE, D. R. Linear finite-element modeling of contaminant transport in ground water. **Journal of Environmental Engineering**, [S.I.], v. 123, n. 11, nov. 1997. DOI: 10.1061/(ASCE)0733-9372(1997)123:11(1126).

HUGHES, T. J. R.; ENGEL, G.; MAZZEI, L.; LARSON, M. G. The continuous Galerkin method is locally conservative. **Journal of Computational Physics**, [S.I.], v. 163, n. 2, p. 467-488, sep. 2000. DOI: 10.1006/jcph.2000.6577.

HUNSDORFER, W.; VERWER, J. **Numerical solution of time-dependent advection-diffusion-reaction equations**. Berlin: Springer-Verlag, 2003. 471 p. ISBN: 978-3-642-05707-6.

HYMAN, J.; SHASHKOV, M.; STEINBERG, S. The numerical solution of diffusion problems in strongly heterogeneous non-isotropic materials. **Journal of Computational Physics**, [S.I.], v. 132, n. 1, p. 130-148, mar. 1997.

ISLAM, M. R.; HOSSAIN, M. E.; MOUSSAVIZADEGAN, S. H.; MUSTAFIZ, S.; ABOU-KASSEM, J. H. **Advanced petroleum reservoir simulation**. 2nd ed. Hoboken: Scrivener Publishing, 2016. 572 p. ISBN: 978-1-119-03851-1.

JAYANTI, S. **Computational fluid dynamics for engineers and scientists**. Dordrecht: Springer Science+Business Media B.V., 2018. 402 p. ISBN: 978-94-024-1217-8.

KOREN, B. A robust upwind discretization method for advection, diffusion and source terms. In: VREUGDENHIL, C. B.; KOREN, B. **Numerical methods for advection-diffusion problems**. Braunschweig: Vieweg, 1993. p. 117-138.

KOVARIK, K. **Numerical models in groundwater pollution**. Berlin: Springer-Verlag, 2000. 224 p. ISBN: 978-3-642-63098-9.

LEE, D. T. Visibility of a simple polygon. **Computer Vision, Graphics, and Image Processing**, [S.I.], v. 22, n. 2, p. 207-221, maio 1983. DOI: 10.1016/0734-189X(83)90065-8.

LEVEQUE, R. J. **Finite volume methods for hyperbolic problems**. Cambridge: Cambridge University Press, 2004. 558 p. ISBN: 0-511-04219-1.

LEWIS, R. W.; MASTERS, I.; REES, I. Coupled and uncoupled contaminant transport using advanced finite volume methods. **Computational Mechanics**, [S.I.], v. 37, n. 4, p. 292-310, mar. 2006. DOI: 10.1007/s00466-005-0671-8.

LI, C. W. Modelling variably saturated flow and solute transport into sandy soil. **Journal of Hydrology**, [S.I.], v. 186, n. 1-4, p. 315-325, nov. 1996. DOI: 10.1016/S0022-1694(96)03024-7.

LIE, K.-A. **An introduction to reservoir simulation using MATLAB/GNU Octave: user guide for the MATLAB reservoir simulation toolbox (MRST)**. Cambridge: Cambridge University Press, 2019. 660 p. ISBN: 978-1-108-49243-0.

LINDFIELD, G.; PENNY, J. **Numerical methods using MATLAB**. 4th ed. London: Academic Press, 2019. 582 p. ISBN: 978-0-123-86942-5.

LIPNIKOV, K.; SHASHKOV, M.; SVYATSKIY, D.; VASSILEVSKI, Y. Monotone finite volumes schemes for diffusion equations on unstructured triangular and shape-regular

polygonal meshes. **Journal of Computational Physics**, [S.I.], v. 227, n. 1, p. 492–512, nov. 2007. DOI: 10.1016/j.jcp.2007.08.008.

LÖHNER, R. **Applied computational fluid dynamics techniques**: an introduction based on finite element methods. 2nd ed. Chichester: John Wiley & Sons, 2008. 519 p. ISBN: 978-0-470-51907-3.

LUCIA, F. J. **Carbonate reservoir characterization**: an integrated approach. 2nd ed. Berlin: Springer-Verlag, 2007. 336 p. ISBN: 978-3-540-72740-8.

LYRA, P. R. M. **Unstructured grid adaptive algorithms for fluid dynamics and heat conduction**. 1994. 358 f. Tese (Doutorado em Engenharia Civil) – University of Wales, Swansea, 1994.

MALISKA, C. R. **Transferência de calor e mecânica dos fluidos computacional**. 2. ed. Rio de Janeiro: Livros Técnicos e Científicos, 2004. 453 p. ISBN: 9788521613961.

MARINO, M. A. Distribution of contaminants in porous media flow. **Water Resources Research**, [S.I.], v. 10, n. 5, p. 1013-1018, oct. 1974. DOI: 10.1029/WR010i005p01013.

MATLAB, version R2019b (9.7.0.1190202). [S.I.]: The MathWorks Inc., 2019. Disponível em: <https://www.mathworks.com/products/new_products/release2019b.html>. Acesso em: 08 dez. 2020.

MATOUŠEK, J.; SHARIR, M.; WELZL, E. A subexponential bound for linear programming. **Algorithmica**, [S.I.], v. 16, n. 4, p. 498-516, set. 1996. DOI: 10.1007/BF01940877.

MELO, M. A. de; HOLLEBEN, C. R. de; ALMEIDA, A. R. Using tracers to characterize petroleum reservoirs: application to Carmopolis field, Brazil. **Society of Petroleum Engineers**, Buenos Aires, SPE-69474-MS, p. 1-7, mar. 2001. DOI: 10.2118/69474-MS.

MODFLOW 6: USGS Modular Hydrologic Model. Version 6.0.4. [S.I.]: United States Geological Survey, 2019. Disponível em: <<https://www.usgs.gov/software/modflow-6-usgs-modular-hydrologic-model>>. Acesso em: 30 maio 2019, 06:23:47.

MORAIS, J. M. de. **Petróleo em águas profundas**: uma história tecnológica da Petrobras na exploração e produção offshore. Brasília: Ipea: Petrobras, 2013. 424 p. ISBN: 978-85-7811-159-5.

MOUKALLED, F.; MANGANI, L.; DARWISH, M. **The finite volume method in computational fluid dynamics**: an advanced introduction with OpenFOAM® and Matlab®. Cham: Springer International Publishing, 2016. 791 p. ISBN: 978-3-319-16874-6.

Nexus, version 5000.4.13. Houston: Halliburton-Landmark, 2018. Disponível em: <<https://www.landmark.solutions/Nexus-Reservoir-Simulation>>. Acesso em: 12 abr. 2021.

NOFZIGER, D. L.; RAJENDER, K.; NAYUDU, S. K.; SU, P.-Y. **CHEMFLO**: one-dimensional Water and chemical movement in unsaturated soils. Washington, D.C.: U.S. Environmental Protection Agency, 1989. 106 p. National Center for Ground Water Research CR-812808.

NUNEZ, Y. R.; FARIA, C. O.; LOULA, A. F. D.; MALTA, S. M. C. A mixed-hybrid finite element method applied to tracer injection processes. **International Journal of Modeling and Simulation for the Petroleum Industry**, [S.l.], v. 6, n. 1, p. 51-59, 2012.

O'ROURKE, J. **Computational geometry in C**. 2nd. ed. Cambridge: Cambridge University Press, 1998. ISBN: 0521640105.

PATANKAR, S. V. **Numerical heat transfer and fluid flow**. New York: Hemisphere Publishing Corporation, 1980. 197 p. ISBN: 0-07-048740-5.

PEACEMAN, D. W. **Fundamentals of numerical reservoir simulation**. Amsterdam: Elsevier Scientific Publishing Company, 1977. 176 p. ISBN: 0-444-41578-5.

PREPARATA, F. P.; SHAMOS, M. I. **Computational geometry**: an introduction. New York: Springer-Verlag, 1985. 398 p. ISBN: 0-387-96131-3.

RAMIREZ, G. G. **Numerical simulation of two-phase flow in petroleum reservoirs using high-order CPR method coupled to a non-orthodox MPFA-D finite volume scheme**. 2018. 100 f. Tese (Doutorado em Engenharia Mecânica) – Centro de Tecnologia e Geociências, Universidade Federal de Pernambuco, Recife, 2018.

RAO, B. K.; HATHAWAY, D. L. A three-dimensional mixing cell solute transport model and its application. **Ground Water**, [S.l.], v. 27, n. 4, p. 509-516, jul. 1989. DOI: 10.1111/j.1745-6584.1989.tb01971.x.

REES, I. **Development of an edge-based finite volume solver for porous media flow applications**. 2004. 243 f. Tese (Doctor of Philosophy) – Centro de Engenharia Civil e Computacional, Universidade de Swansea, Sketty, 2004.

REES, I.; MASTERS, I.; MALAN, A. G.; LEWIS, R. W. An edge-based finite volume scheme for saturated-unsaturated groundwater flow. **Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering**, [S.l.], v. 193, n. 42-44, p. 4741-4759, set. 2004. DOI: 10.1016/j.cma.2004.04.003.

RICCOMINI, C.; SANT'ANNA, L. G.; TASSINARI, C. C. G. Pré-sal: geologia e exploração. **Revista USP**, São Paulo, n. 95, p. 33-42, nov. 2012. DOI: 10.11606/issn.2316-9036.v0i95p33-42.

ROSA, A. J.; CARVALHO, R. de S.; XAVIER, J. A. D. **Engenharia de reservatórios de petróleo**. Rio de Janeiro: Interciência, 2006. 808 p. ISBN: 8-57193-135-6.

RUBIO, A. D.; ZALTS, A.; EI HASI, C. D. Numerical solution of the advection-reaction-diffusion equation at different scales. **Environmental Modelling and Software**, [S.l.], v. 23, n. 1, p. 90-95, jan. 2008. DOI: 10.1016/j.envsoft.2007.05.009.

SHARMA, A. **Introduction to computational fluid dynamics**: development, application and analysis. [S.l.]: John Wiley & Sons, 2017. 393 p. ISBN: 978-1-1190-0299-4.

SIEGEL, P.; MOSÉ, R.; ACKERER, Ph.; JAFFRE, J. Solution of the advection-diffusion equation using a combination of discontinuous and mixed finite elements. **International Journal for Numerical Methods in Fluids**, [S.l.], v. 24, n. 6, p. 595-613, mar. 1997. DOI: 10.1002/(SICI)1097-0363(19970330)24:6<595::AID-FLD512>3.0.CO;2-I.

SIMMONS, C. T. Henry Darcy (1803-1858): immortalized by his scientific legacy. **Hydrogeology Journal**, [S.l.], v. 16, n. 6, p. 1023-1038, set. 2008. DOI: 10.1007/s10040-008-0304-3.

SOHLER, C. Generating random star-shaped polygons. In: CANADIAN CONFERENCE ON COMPUTATIONAL GEOMETRY, 11., 1999, Vancouver. **Proceedings...** Vancouver: UBC, ago. 1999, p. 174-177.

SOUZA, M. R. de A. **Simulação numérica de escoamento bifásico em reservatórios de petróleo heterogêneos e anisotrópicos utilizando um método dos volumes finitos “verdadeiramente” multidimensional com aproximação de alta ordem**. 2015. 257 f. Tese (Doutorado em Ciências de Engenharia Civil) – Centro de Tecnologia e Geociências, Universidade Federal de Pernambuco, Recife, 2015.

STALGOROVA, E.; BABADAGLI, T. Field-scale modeling of tracer injection in naturally fractured reservoirs using the random-walk particle-tracking simulation. **SPE Journal**, [S.l.], v. 17, n. 02, p. 580-592, jun. 2012. DOI: 10.2118/144547-PA.

SUN, N.-Z. **Mathematical modeling of groundwater pollution**. New York: Springer-Verlag, 1996. 377 p. ISBN: 978-1-4757-2560-5.

SUN, S.; LIU, J. A locally conservative finite element method based on piecewise constant enrichment of the continuous Galerkin method. **SIAM J. Sci. Comput.**, [S.l.], v. 31, n. 4, p. 2528-2548, jun. 2009. DOI: 10.1137/080722953.

THOMAS, J. E. **Fundamentos de engenharia de petróleo**. Rio de Janeiro: Interciência: PETROBRAS, 2001. 271 p. ISBN: 85-7193-046-5.

tNavigator, version 17.1. Moscow: Rock Flow Dynamics, LLC, 2017. Disponível em: <<https://rfdyn.com/news/tnavigator-17-1-released/>>. Acesso em: 12 abr. 2021.

VAN LEER, B. MUSCL, a new approach to numerical gas dynamics. In: EUROPEAN CONFERENCE ON COMPUTATIONAL PHYSICS, 2., 1976, Garching. **Proceedings...** [S.l.: s.n., s.d.]. p. 1-4. Disponível em: <https://www.researchgate.net/publication/291971922_MUSCL_A_New_Approach_to_Numerical_Gas_Dynamics>. Acesso em: 14 maio 2021.

VAN LEER, B. Towards the ultimate conservative difference scheme. I. The quest of monotonicity. In: INTERNATIONAL CONFERENCE ON NUMERICAL METHODS IN FLUID MECHANICS, 3., 1972, Paris. **Proceedings...** Berlin: Springer-Verlag, 1973. p. 163-168.

VAN LEER, B. Towards the ultimate conservative difference scheme. II. Monotonicity and conservation combined in a second-order scheme. **Journal of Computational Physics**, [S.I.], v. 14, n. 4, p. 361-370, mar. 1974. DOI: 10.1016/0021-9991(74)90019-9.

VAN LEER, B. Towards the ultimate conservative difference scheme. V. A second-order sequel to Godunov's method. **Journal of Computational Physics**, [S.I.], v. 32, n. 1, p. 101-136, jul. 1979. DOI: 10.1016/0021-9991(79)90145-1.

VERSTEEG, H. K.; MALALASEKERA, W. **An introduction to computational fluid dynamics: the finite volume method**. 2nd ed. Harlow: Pearson Education Limited, 2007. 503 p. ISBN: 978-0-13-127498-3.

VISIT, version 3.1.4. [S.I.]: Lawrence Livermore National Security, LLC, 2020. Disponível em: <<https://wci.llnl.gov/simulation/computer-codes/visit/executables>>. Acesso em: 25 fev. 2021.

VOSS, C. I. **A finite-element simulation model for saturated-unsaturated, fluid-density-dependent ground-water flow with energy transport or chemically-reactive single-species solute transport**. Reston: U.S. Geological Survey, 1984. 409 p. Water-Resources Investigations Report 84-4369.

WENDT, J. F. (ed.). **Computational fluid dynamics: an introduction**. 3rd ed. Berlin: Springer-Verlag, 2009. 332p. ISBN: 978-3-540-85055-7.

WOODFIELD, P. L.; SUZUKI, K.; NAKABE, K. A simple strategy for constructing bounded convection schemes for unstructured grids. **Int. J. Numer. Meth. Fluids**, [S.I.], v. 46, n. 10, p. 1007-1024, dec. 2004. DOI: 10.1002/flid.784.

WU, Y.-S.; PRUESS, K. Numerical simulation of non-isothermal multiphase tracer transport in heterogeneous fractured porous media. **Advances in Water Resources**, [S.I.], v. 23, n. 7, p. 699-723, maio 2000. DOI: 10.1016/S0309-1708(00)00008-7.

YEH, G. T. An orthogonal-upstream finite element approach to modeling aquifer contaminant transport. **Water Resources Research**, [S.I.], v. 22, n. 6, p. 952-964, jun. 1986. DOI: 10.1029/WR022i006p00952.

YEH, T.-C. J.; SRIVASTAVA, R.; GUSZMAN, A.; HARTER, T. A numerical model for water flow and chemical transport in variably saturated porous media. **Ground Water**, v. 31, n. 4, p. 634-644, jul. 1993. DOI: 10.1111/j.1745-6584.1993.tb00597.x.

YI, T.; DALTABAN, T. S.; DAWE, R. A. Prediction of interwell tracer flow behaviour in heterogeneous reservoirs. **Transport in Porous Media**, Netherlands, v. 17, n. 1, p. 59-75, jan. 1994. DOI: 10.1007/BF00624050.

YU, D.; JACKSON, K.; HARMON, T. C. Dispersion and diffusion in porous media under supercritical conditions. **Chemical Engineering Science**, [S.l.], v. 54, n. 3, p. 357-367, fev. 1999. DOI: 10.1016/S0009-2509(98)00271-1.

YU, F. X.; SINGH, V. P. Improved finite-element method for solute transport. **Journal of Hydraulic Engineering**, [S.l.], v. 121, n. 2, p. 145-158, fev. 1995. DOI: 10.1061/(ASCE)0733-9429(1995)121:2(145).

YUAN, G.; SHENG, Z. Monotone finite volume schemes for diffusion equations on polygonal meshes. **Journal of Computational Physics**, [S.l.], v. 227, n. 12, p. 6288–6312, jun. 2008. DOI: 10.1016/j.jcp.2008.03.007.

ZEMEL, B. **Tracers in the oil field**. Amsterdam: Elsevier Science, 1995. 487 p. ISBN: 0-444-88968-X.

ZHANG, Y.; ZOU, Q.-P.; GREAVES, D. Air-water two-phase flow modelling of hydrodynamic performance of an oscillating water column device. **Renewable Energy**, v. 41, p. 159-170, may 2012. DOI: 10.1016/j.renene.2011.10.011.

APÊNDICE A – FLUXOGRAMA DO ALGORITMO UTILIZADO PARA RESOLVER
A EQUAÇÃO DE ADVECÇÃO-DISPERSÃO-REAÇÃO ATRAVÉS DA
ESTRATÉGIA IMPEC

