

MÉTODO NÃO OSCILATÓRIO PARA EQUAÇÃO DE CONVECÇÃO-DIFUSÃO UNIDIMENSIONAL

César Guilherme Almeida

Universidade Federal de Uberlândia

cesargui@ufu.br

Paulo Roberto C. de Almeida Junior

INSTITUIÇÃO

pholo777@gmail.com

RESUMO

Neste trabalho, nós utilizamos duas técnicas numéricas para aproximar a equação de convecção-difusão unidimensional correspondente ao modelo de escoamento miscível incompressível da mistura de óleo e solvente, em meios porosos. Primeiramente, discretizamos a concentração da mistura, em relação à variável espacial, utilizando o Método dos Elementos Finitos Mistos Híbridos, juntamente com o espaço de Raviart-Thomas de mais baixa ordem (funções escalares serão aproximadas por valores constantes em cada elemento finito). A variável principal do sistema resultante da formulação discreta será a concentração da mistura avaliada no centro de cada elemento finito. Uma outra aproximação dará origem a um Problema de Valor Inicial (PVI), levando-se em consideração a variável temporal nas formulações discretas da equação de convecção-difusão e da velocidade de fluxo de concentração. A solução aproximada do PVI é obtida pelo Método de Adams-Moulton de ordem 2. A solução analítica do problema será comparada com o resultado de simulações numéricas referentes tanto ao método proposto quanto a outros métodos tradicionais. Apresentamos também um código computacional que controla as oscilações espúrias (não genuínas) que podem ocorrer nas soluções numéricas associadas às discretizações da equação de convecção-difusão. Acreditamos que o novo método aqui proposto seja competitivo com outros métodos tradicionais denominados Métodos Euleriano-Lagrangeanos.

ABSTRACT

In this work, we use two numerical techniques to approximate the unidimensional convection-diffusion equation corresponding to the incompressible miscible displacement in porous media. Firstly, we approximate the mixture concentration taking into account the spatial variable and using the mixed-hybridized finite element method together with the lowest Raviart-Thomas space (scalar functions will be approximated by constant values in each finite element). The mixture concentration evaluated at the center of each finite element will be the main variable of the resulting system from the discrete formulation of the convection-diffusion equation. Then, considering the time variable, we obtain an Initial Value Problem (IVP) from the discrete formulation of the concentration velocity flux and the convection-diffusion equation. The approximate IVP solving is based on second-order Adams-Moulton Method. Numerical solutions obtained with the proposed method and other traditional numerical methods for ordinary differential equations will be compared with the analytic solution of the problem. We also present a simple algorithm for removing or reducing spurious oscillations that usually occur in numerical solutions of the convection-diffusion equation. We believe that the new method proposed here is competitive with classical Eulerian-Lagrangian Methods.

Palavras-chave: Convecção-difusão, Métodos Mistos Híbridos, Espaço de Raviart-Thomas de ordem zero.

1 INTRODUÇÃO

O trabalho de Douglas [1] (1982) foi pioneiro no uso do Método dos Elementos Finitos Mistos como uma técnica de aproximação apropriada para o cálculo numérico preciso de campos de velocidades que são fortemente influenciados pelas heterogeneidades geológicas do meio poroso. Esse e outros trabalhos de Douglas são, por essa razão, referências importantes em estudos relacionados a escoamento de fluidos miscíveis (e imiscíveis) em meios porosos heterogêneos. Igualmente importante é o Método Modificado das Características (MMOC) (veja Douglas e Russell [2], 1982), que foi desenvolvido para ser um procedimento computacional eficiente para a discretização da equação de convecção-difusão, permitindo-se o uso de passos grandes de tempo. Porém, o MMOC apresenta uma falha grave que é a falta de conservação de massa dos fluidos envolvidos no estágio de transporte (convecção).

Dentre os métodos que competem com o MMOC podemos citar o Método Euleriano-Lagrangeano Localmente Conservativo (LCELM) ([3], 2002), que segue a mesma metodologia dos dois trabalhos de Douglas mencionados anteriormente, e a classe de métodos denominados Eulerian-Lagrangian Local Adjoint Method (ELLAM [4]).

Os Métodos do tipo Euleriano-Lagrangeano apresentam uma dificuldade computacional. Como as aproximações das equações diferenciais envolvem um domínio espaço-tempo, então os elementos finitos utilizados na discretização podem assumir formas diferentes, em cada passo de tempo. Esse tipo de estrutura não é fácil de ser implementada computacionalmente. Além disso, as integrais que aparecem nas formas discretizadas das equações diferenciais são difíceis de serem calculadas numericamente, por conta da “deformação” dos elementos finitos, a qual pode gerar um domínio de integração complexo.

As técnicas utilizadas, neste trabalho, para aproximar a solução da equação de convecção-difusão e para aproximar a velocidade de fluxo de concentração darão origem a um problema de valor inicial que será resolvido pelo método de Adams-Moulton de ordem 2 ([5], 2015). Tal procedimento evitará as dificuldades computacionais apontadas anteriormente, porque a malha computacional não vai variar com o tempo. Salientamos que a formulação discreta do problema recorre ao espaço de Raviart-Thomas de mais baixa ordem [6] e aos Elementos Finitos Mistos Híbridos [7–9].

A equação de convecção-difusão apresentada a seguir foi adaptada do artigo de Healy e Russell [10]:

$$\varphi \frac{\partial c}{\partial t} - \frac{\partial}{\partial x} \{[\varphi d_m + |u| d_\ell] c_x - u c\} = \tilde{c} q, \quad (1)$$

onde a concentração do solvente é $c = c(x, t)$, $x \in \Omega = [0, 250]$ (o reservatório tem 250 cm de comprimento) e $t \in J = [0, 5]$ (iremos simular um período de 5 horas de escoamento); o termo fonte será considerado nulo, ou seja, $q = 0$; a velocidade de Darcy (velocidade superficial de fluxo convectivo) e a porosidade do meio serão constantes e dadas, respectivamente, por $u = 7.5 \text{ cm/hora}$ e $\varphi = 0.3$; o coeficiente de difusão molecular será nulo, isto é, $d_m = 0$; o coeficiente de dispersão longitudinal, d_ℓ , poderá assumir dois valores, ou $d_\ell = 0.01 \text{ cm}$ ou $d_\ell = 1.00 \text{ cm}$. O termo de dispersão hidrodinâmica será indicado por $D(u) = |u| d_\ell$; a velocidade de fluxo de concentração será indicada por $v = -[\varphi d_m + |u| d_\ell] c_x$ e a velocidade de fluxo total será $\mathbf{V} = v + u c$. Consideraremos as seguintes condições de fronteira:

$$c(0, t) = 1, t > 0, \quad \text{e} \quad (-D(u)c_x)(250, t) = 0, \forall t, t \in J, \quad (2)$$

e a condição inicial será dada por

$$c(x, 0) = c_0(x) = 0, \forall x \in \Omega. \quad (3)$$

A solução analítica deste problema de valor inicial e de fronteira, considerando-se $\Omega =$

$[0, \infty)$, foi obtida no artigo de Ogata ([11], 1970). Tal solução é exibida a seguir:

$$C(x, t) = \frac{1}{2} \left[\operatorname{erfc} \left(\frac{x - u\phi^{-1}t}{2\sqrt{d_\ell u\phi^{-1}t}} \right) + \exp \left(\frac{x}{d_\ell} \right) \operatorname{erfc} \left(\frac{x + u\phi^{-1}t}{2\sqrt{d_\ell u\phi^{-1}t}} \right) \right], \tag{4}$$

onde $\operatorname{erfc}(z) = 1 - \frac{2}{\sqrt{\pi}} \int_0^z \exp(-t^2) dt$.

O domínio Ω será particionado em n subdomínios como mostrado na Figura 1,

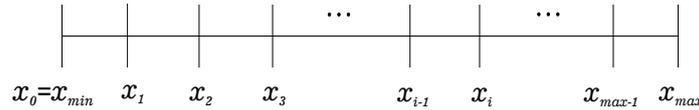


FIGURA 1: Elementos $E = E_i$ da partição do domínio Ω .

onde $\Omega = \bigcup_{i=1}^n \Omega_i$; $\overline{\Omega}_i = [x_{i-1}, x_i] = E_i$ e $h_i = x_i - x_{i-1}$.

Cada problema local de aproximação em $E = [x_L^{(E)}, x_R^{(E)}]$, um elemento qualquer da decomposição de Ω em subdomínios, possuirá 5 incógnitas: 2 multiplicadores ($\ell_{E,L}$ e $\ell_{E,R}$), 2 componentes de fluxo ($v_{E,L}$ e $v_{E,R}$) e 1 valor constante de concentração (c_E), e levará em consideração as seguintes observações:

- $h_E = x_R^{(E)} - x_L^{(E)}$; $\bar{x}_E = (x_L^{(E)} + x_R^{(E)})/2$. Valores de concentração e termo fonte serão considerados constantes por elemento e serão denotados, respectivamente, por: c_E e q_E . Além disso, $W_{E,L}(x) = (x - x_R^{(E)})h_E^{-1}$, $W_{E,R}(x) = (x - x_L^{(E)})h_E^{-1}$ e $Q_E = h_E q_E$.
- Na fronteira de E , ∂E , a concentração será constante e denotaremos seu valor por

$$c(x_L^{(E)}) = \ell_{E,L}^{(c)}, \quad c(x_R^{(E)}) = \ell_{E,R}^{(c)},$$

onde os subscritos L e R fazem menção aos valores de concentração nas fronteiras esquerda e direita, respectivamente. Esses valores são conhecidos como Multiplicadores de Lagrange.

- Porosidade, coeficiente de difusão molecular e coeficiente de dispersão longitudinal serão constantes por elemento e seus valores serão denotados, respectivamente, por: φ_E , $d_{m,E}$ e $d_{\ell,E}$. Além disso, no elemento E , a velocidade de fluxo de concentração será aproximada por $v_E(x) = v_{E,L} W_{E,L}(x) + v_{E,R} W_{E,R}(x)$, onde $v_{E,L}$ e $v_{E,R}$ são escalares (a serem determinados) da combinação linear das funções linearmente independentes $W_{E,L}(x)$ e $W_{E,R}(x)$.

Note que

$$W_{E,L}(x_L^{(E)}) = -1; \quad W_{E,L}(x_R^{(E)}) = 0; \quad W_{E,R}(x_L^{(E)}) = 0; \quad W_{E,R}(x_R^{(E)}) = 1;$$

$$W_{E,L}(\bar{x}_E) = -0.5; \quad W_{E,R}(\bar{x}_E) = 0.5; \quad W'_{E,L}(x) = W'_{E,R}(x) = h_E^{-1}.$$

Além disso, se $x = x_L^{(E)} + h_E X$, então $W_{E,L}(x) = (X - 1)$ e $W_{E,R}(x) = X$.

Seja $c(x)$ uma função derivável em cada elemento E . Usando integração por partes, temos que

$$\int_{x_L^{(E)}}^{x_R^{(E)}} c'(x) W(x) dx = [c(x) W(x)]_{x_L^{(E)}}^{x_R^{(E)}} - \int_{x_L^{(E)}}^{x_R^{(E)}} c(x) W'(x) dx.$$

Na formulação discreta da Equação (1), com condições de fronteira (2) dadas anteriormente, os seguintes resultados serão importantes:

- (I)
$$\int_{x_L^{(E)}}^{x_R^{(E)}} (W_{E,L}(x))^2 dx = h_E \int_0^1 (X - 1)^2 dX;$$
- (II)
$$\int_{x_L^{(E)}}^{x_R^{(E)}} (W_{E,R}(x))^2 dx = h_E \int_0^1 X^2 dX;$$
- (III)
$$\int_{x_L^{(E)}}^{x_R^{(E)}} W_{E,R}(x) W_{E,L}(x) dx = h_E \int_0^1 X (X - 1) dX;$$
- (IV)
$$-\int_{x_L^{(E)}}^{x_R^{(E)}} c'(x) W_{E,L}(x) dx = c_E - \ell_{E,L}^{(c)} \quad \text{e} \quad -\int_{x_L^{(E)}}^{x_R^{(E)}} c'(x) W_{E,R}(x) dx = c_E - \ell_{E,R}^{(c)}.$$

Para finalizar essa seção, vamos mencionar as dificuldades numéricas que surgem ao se formular aproximações para equações diferenciais parciais como as tratada neste trabalho.

A oscilação numérica (gerada por efeitos dispersivos) e a difusão numérica (suavização excessiva da solução numérica em relação à solução física) são dois fenômenos típicos que podem surgir em aproximações de problemas físicos modelados com equações diferenciais parciais (EDP), que têm uma predominância hiperbólica. Como exemplo, citamos as leis de conservação (ver a referência [12]) e a equação de convecção-difusão apresentada nesse trabalho. Em determinados problemas, a solução física é descontínua (ou apresenta, em um ou mais pontos, um perfil que tem a aparência de descontinuidade do tipo salto) e, portanto, não poderia satisfazer uma EDP no sentido clássico. Dessa forma, os esquemas numéricos devem ser desenvolvidos levando-se em conta teorias matemáticas e leis físicas que garantam a existência de uma solução fraca da EDP (solução que pode não ser a clássica). Um estudo rigoroso relacionado ao desenvolvimento de métodos numéricos eficientes para a solução de leis de conservação pode ser encontrado no livro de LeVeque [12].

Neste trabalho, utilizamos uma técnica de construção de métodos que são similares aos métodos conservativos apresentados em LeVeque, com um tratamento diferente para a função de fluxo numérico. Os métodos apresentados na referência [12] utilizam diferenças finitas para aproximar a função de fluxo. Já em nosso trabalho, utilizamos o Método dos Elementos Finitos Mistos Híbridos, combinado com Espaço de Raviart-Thomas de ordem zero, para aproximar a função de fluxo. Tal formulação evitou, ou minimizou, os efeitos da difusão numérica; porém em alguns casos as oscilações persistiram, mesmo com o refinamento da malha computacional. Assim, tivemos que recorrer a uma técnica que utiliza interpolação polinomial para diminuir as oscilações numéricas e para ajustar o perfil da solução numérica, evitando-se a falta de sincronismo com a solução física do problema. Uma metodologia diferente da apresentada neste trabalho, para controlar oscilações numéricas, também emprega técnicas de interpolação na reconstrução da função de fluxo numérico. Tal metodologia pode ser encontrada na Dissertação de Mestrado, "Métodos Numéricos não oscilatórios aplicados às leis de conservação hiperbólicas unidimensionais", de Marta Helena Oliveira [13]. Essa dissertação apresenta um estudo introdutório sobre os métodos não oscilatórios: (i) Essentially non-oscillatory schemes (ENO), introduzido, em 1987, por A. Harten e S. Osher (veja as referências citadas em [13]), e (ii) Weighted Essentially non-oscillatory schemes (WENO), introduzido, em 1994, por T. P. Liu, S. Osher e T. Chan (veja as referências citadas em [13]).

2 APROXIMAÇÃO DA EQUAÇÃO DE CONVECÇÃO-DIFUSÃO

Seja $E = [x_L^{(E)}, x_R^{(E)}]$ um elemento qualquer da partição do domínio Ω . A velocidade do fluxo total é dada por $\mathbf{V} = v + uc = -[\varphi d_m + |u| d_\ell] c_x + uc$. No elemento E , essa velocidade será aproximada por $\mathbf{V}_E(x) = v_{E,L} W_{E,L}(x) + v_{E,R} W_{E,R}(x) + c_E u_E(x)$. Embora, neste trabalho, a velocidade u seja constante, vamos utilizar uma formulação discreta mais geral, na qual consideraremos a seguinte aproximação: $|u_E(x)| \approx |u_{E,L} W_{E,L}(\bar{x}_E) + u_{E,R} W_{E,R}(\bar{x}_E)| = 0.5 |u_{E,R} - u_{E,L}| = |\bar{u}_E|$, de acordo com a notação utilizada no final da Seção 1. Assim, a formulação discreta para a velocidade \mathbf{V} , no elemento E , é dada por:

$$\int_{x_L^{(E)}}^{x_R^{(E)}} [v_{E,L} W_{E,L}(x) + v_{E,R} W_{E,R}(x)] W(x) dx = -\varphi_E d_{m,E} \int_{x_L^{(E)}}^{x_R^{(E)}} c_x W(x) dx - d_{\ell,E} \int_{x_L^{(E)}}^{x_R^{(E)}} |u_E(x)| c_x W(x) dx,$$

onde W será dado por $W_{E,L}$ ou $W_{E,R}$.

A integral do lado esquerdo da igualdade anterior é aproximada pela Regra do Trapézio e a do lado direito é resolvida por integração por partes (veja o item IV apresentado no final da Seção 1) e $|u_E(x)|$ será aproximado por $|\bar{u}_E|$. Dessa forma, a expressão para cada uma das componentes ortogonais do fluxo é dada por:

$$v_{E,\beta} = 2 a_E^{(c)} h_E^{-1} (c_E - \ell_{E,\beta}^{(c)}), \tag{5}$$

onde $a_E^{(c)} = \varphi_E d_{m,E} + d_{\ell,E} |\bar{u}_E|$.

Observação: Para não sobrecarregar a notação, denotaremos $\ell_{E,\beta}^{(c)}$ simplesmente por $\ell_{E,\beta}$.

Definição 2.1: Dados um elemento E da partição do domínio e uma extremidade β desse elemento, denotaremos por \tilde{E} o elemento vizinho a E com relação à extremidade β . Além disso, no elemento \tilde{E} , a extremidade equivalente à extremidade β , em E , será denotada por β' . Assim, se $\beta = R$, então $\beta' = L$; se $\beta = L$, então $\beta' = R$. O comprimento do intervalo \tilde{E} será denotado por $h_{\tilde{E}}$.

Da Definição 2.1, considerando-se, por exemplo, $E = [x_{i-1}, x_i]$ e $\beta = L$, então $\tilde{E} = [x_{i-2}, x_{i-1}]$ e $\beta' = R$. Se $\beta = R$, então $\tilde{E} = [x_i, x_{i+1}]$ e $\beta' = L$.

Definição 2.2: Seja x_β uma das extremidades do elemento E (se $\beta = L$, então x_β é o extremo inferior de E ; x_β será o extremo superior, se $\beta = R$). Dizemos que o fluxo relacionado à concentração é contínuo em x_β , se $v_E(x_\beta) = v_{\tilde{E}}(x_{\beta'})$.

Lembrando-se de que $v_E(x_\beta) = v_{E,L} W_{E,L}(x_\beta) + v_{E,R} W_{E,R}(x_\beta)$ e utilizando as observações feitas no final da Seção 1, a relação de continuidade de fluxo é dada por

$$v_{E,\beta} + v_{\tilde{E},\beta'} = 0.$$

Como $\ell_{E,\beta} = \ell_{\tilde{E},\beta'} = \ell$, então, da relação de continuidade do fluxo, obtemos

$$\ell = \frac{a_E^{(c)} c_E h_{\tilde{E}} + a_{\tilde{E}}^{(c)} c_{\tilde{E}} h_E}{a_E^{(c)} h_{\tilde{E}} + a_{\tilde{E}}^{(c)} h_E} = \frac{\frac{a_E^{(c)}}{h_E} c_E + \frac{a_{\tilde{E}}^{(c)}}{h_{\tilde{E}}} c_{\tilde{E}}}{\frac{a_E^{(c)}}{h_E} + \frac{a_{\tilde{E}}^{(c)}}{h_{\tilde{E}}}}. \tag{6}$$

Substituindo tal valor na Equação 5 (expressão da componente ortogonal do fluxo), tem-se que

$$v_{E,\beta} = \frac{2a_E^{(c)} a_E^{(c)}}{a_E^{(c)} h_{\tilde{E}} + a_E^{(c)} h_E} (c_E - c_{\tilde{E},\beta}) \equiv a_{E\tilde{E},\beta} (c_E - c_{\tilde{E},\beta}); \quad (7)$$

$c_{\tilde{E},\beta}$ é a concentração no elemento vizinho a E , com respeito à extremidade β .

A formulação discreta para a equação de convecção-difusão é dada por

$$\int_{x_L^{(E)}}^{x_R^{(E)}} \left[\varphi \frac{\partial c}{\partial t} + \frac{\partial \mathbf{V}(x)}{\partial x} \right] W dx = \int_{x_L^{(E)}}^{x_R^{(E)}} \tilde{c} q W dx, \text{ com } W \text{ constante não nula.}$$

Embora, neste trabalho, consideremos a velocidade de Darcy, u , constante e o termo fonte nulo ($q_E = 0$), vamos apresentar uma discretização um pouco mais geral, que será importante para o desenvolvimento de trabalhos futuros, nos quais a velocidade poderá variar com o tempo e poderá assumir diferentes valores (u_E) em cada elemento E , bem como o termo fonte. Além disso, consideraremos que $u_x = q$ (condição equivalente ao caso bidimensional em que o divergente de u é igual a q). Neste caso mais geral, fazendo-se uso das aproximações no elemento E , obtemos (lembre-se de que $\frac{\partial}{\partial x}(uc) = u_x c + u c_x$):

$$\varphi_E \frac{\partial c_E}{\partial t} h_E + [v_{E,R} + v_{E,L}] + \bar{u}_E (\ell_{E,R} - \ell_{E,L}) = (\tilde{c}_E - c_E) q_E h_E. \quad (8)$$

No poço de injeção (E_1), $\tilde{c}_E = 1$; no poço de produção (E_n), $\tilde{c}_E = c_E$. Nas aproximações envolvendo o tempo, o intervalo $J = [0, T]$ será decomposto em n_t subintervalos de comprimento $\Delta t = T n_t^{-1}$. Seja f uma função dependendo do tempo e definida em E , usaremos a notação: $f_E^{(j)} = f_E(t_j)$, onde $t_j = j \Delta t$. Dados os valores de $f_E^{(j-1)}$ e $f_E^{(j-2)}$, o valor de $f_E^{(j)}$ será calculado por extrapolação linear: $f_E^{(j)} = 2f_E^{(j-1)} - f_E^{(j-2)}$.

Considerando-se elementos que não correspondem nem ao poço de injeção nem ao poço de produção, vamos aplicar o Método de Adams-Moulton de ordem 2 na equação diferencial ordinária anterior (8). Utilizando as seguintes notações: $sgn(R) = 1$, $sgn(L) = -1$, $\mathcal{A}_\beta = \mathcal{A}_{E,\beta} = a_{E\tilde{E},\beta}$ e $\mathcal{C}_E = \tilde{c}_E - c_E$, obtemos

$$\left\{ \varphi_E c_E + \frac{\Delta t}{2h_E} \left[\sum_{\beta} \left(\mathcal{A}_\beta (c_E - c_{\tilde{E},\beta}) + sgn(\beta) \bar{u}_E \ell_{E,\beta} \right) - [\mathcal{C}qh]_E \right] \right\}^{(j)} = \left\{ \varphi_E c_E - \frac{\Delta t}{2h_E} \left[\sum_{\beta} \left(\mathcal{A}_\beta (c_E - c_{\tilde{E},\beta}) + sgn(\beta) \bar{u}_E \ell_{E,\beta} \right) - [\mathcal{C}qh]_E \right] \right\}^{(j-1)}. \quad (9)$$

Esta última equação dependerá apenas de valores de concentração, se utilizarmos a expressão que foi deduzida anteriormente para os multiplicadores de Lagrange (Equação 6). Note que as condições de fronteira (Equação 2) devem ser satisfeitas, portanto, a Equação (9) deve ser reescrita adequadamente no poço de injeção, onde

$$q_E = q_1 > 0, \quad \tilde{c}_E = 1, \quad \ell_{E,L} = 1 \text{ e}$$

$$v_{E,L} = 2 a_E^{(c)} h_E^{-1} (c_E - \ell_{E,L}) \equiv \mathcal{A}_L (c_E - \ell_{E,L});$$

e no poço de produção, onde

$$q_E = -q_1, \quad \tilde{c}_E = c_E \text{ e } v_{E,R} = 0;$$

e nos demais elementos, onde $q_E = 0$.

Com a finalidade de exibirmos os elementos da matriz tridiagonal ($A^{(c)}$) e o vetor de termos independentes ($B^{(c)}$) correspondentes ao sistema linear oriundo do Método de Adams-Moulton (Equação 9), considere os elementos E_i e E_{i-1} . Consultando a Equação (7), é fácil mostrar que

$$\mathcal{A}_{E_i,L} = a_{E_i,E_{i-1}} = a_{E_{i-1},E_i} = \mathcal{A}_{E_{i-1},R}.$$

Sendo assim, denotaremos $\mathcal{A}_{E_i,R}$ simplesmente por \mathcal{A}_i , para $1 \leq i < n$. Além disso, considere $\mathcal{A}_0 = 2 a_1 h_1^{-1}$.

Com as notações anteriores, os elementos da diagonal superior, no tempo $t = t_j$, são dados por

$$A_{i,i+1}^{(c,j)} = -\frac{\Delta t}{2h_i} \left[\mathcal{A}_i - \bar{u}_i \frac{a_{i+1}h_i}{a_i h_{i+1} + a_{i+1}h_i} \right], \quad 1 \leq i < n. \tag{10}$$

Os elementos da diagonal inferior, no tempo $t = t_j$, são dados por

$$A_{i,i-1}^{(c,j)} = -\frac{\Delta t}{2h_i} \left[\mathcal{A}_{i-1} + \bar{u}_i \frac{a_{i-1}h_i}{a_i h_{i-1} + a_{i-1}h_i} \right], \quad 1 < i \leq n. \tag{11}$$

Os elementos da diagonal da matriz de coeficientes, no tempo $t = t_j$, são dados por

$$A_{11}^{(c,j)} = \varphi_1 + \frac{\Delta t}{2h_1} [\mathcal{A}_0 + \bar{u}_1 + q_1 h_1] - A_{1,2}^{(c,j)}, \tag{12}$$

$$A_{ii}^{(c,j)} = \varphi_i - A_{i,i-1}^{(c,j)} - A_{i,i+1}^{(c,j)}, \tag{13}$$

$$A_{nn}^{(c,j)} = \varphi_n - A_{n,n-1}^{(c,j)}. \tag{14}$$

O vetor de termos independentes tem coordenadas dadas por

$$B_1^{(c)} = \left\{ \varphi_1 - \frac{\Delta t}{2h_1} [\mathcal{A}_0 + \bar{u}_1 + q_1 h_1]^{(j-1)} + A_{1,2}^{(c,j-1)} \right\} c_1^{(j-1)} - A_{1,2}^{(c,j-1)} c_2^{(j-1)} \\ + \frac{\Delta t}{2h_1} \left\{ [\mathcal{A}_0 + \bar{u}_1]^{(j-1)} + [\mathcal{A}_0 + \bar{u}_1]^{(j)} \right\} + \frac{\Delta t}{2h_1} [q_1^{(j-1)} + q_1^{(j)}] h_1,$$

$$B_i^{(c)} = -A_{i,i-1}^{(c,j-1)} c_{i-1}^{(j-1)} +$$

$$\left\{ \varphi_j + A_{i,i-1}^{(c,j-1)} + A_{i,i+1}^{(c,j-1)} \right\} c_i^{(j-1)} - A_{i,i+1}^{(c,j-1)} c_{i+1}^{(j-1)}, \quad 1 < i < n,$$

e

$$B_n^{(c)} = -A_{n,n-1}^{(c,j-1)} c_{n-1}^{(j-1)} + \left\{ \varphi_n + A_{n,n-1}^{(c,j-1)} \right\} c_n^{(j-1)}.$$

Agora, o nosso interesse está voltado para a obtenção de condições suficientes que garantam a existência e a unicidade de solução do sistema linear oriundo da discretização da Equação (1), com condições de fronteira apresentadas na Equação 2 e condição inicial dada na Equação 3. Lembramos que a formulação discreta utilizou o Método dos Elementos Finitos Mistos Híbridos, com eliminação dos Multiplicadores de Lagrange, e o Método de Adams-Moulton de ordem 2. A partir dos dois lemas e do teorema, que serão enunciados a seguir, atingimos o nosso propósito. Assim, com as hipóteses apresentadas no Teorema 2.1, garantiremos que a matriz tridiagonal $A^{(c)}$ é diagonal dominante e, portanto, o sistema linear mencionado anteriormente terá uma única solução.

Lema 2.1: *Dada a matriz $A^{(c)}$, os elementos de sua diagonal principal ($A_{ii}^{(c)}$) são todos positivos e os termos da diagonal inferior ($A_{i,i-1}^{(c)}$) e da diagonal superior ($A_{i,i+1}^{(c)}$) são todos negativos, sempre que $u_i = 0$ ou quando $h_i < \frac{2a_i}{|\bar{u}_i|}$, com i variando de 1 até n .*

Demonstração: De acordo com a Equação (7), tem-se que

$$\mathcal{A}_i = 2 \frac{a_i a_{i+1}}{h_i h_{i+1}} \left(\frac{a_i}{h_i} + \frac{a_{i+1}}{h_{i+1}} \right)^{-1}, \quad 1 \leq i < n.$$

Como os valores de porosidade e de difusão molecular são positivos, então $a_i > 0$ e $\mathcal{A}_i > 0$, $1 \leq i < n$. Também, segue que $\mathcal{A}_0 > 0$ e $a_n > 0$. Agora, observe que

$$\mathcal{A}_i - \bar{u}_i \frac{a_{i+1} h_i}{a_i h_{i+1} + a_{i+1} h_i} = \frac{a_{i+1}}{h_{i+1}} \left(\frac{a_i}{h_i} + \frac{a_{i+1}}{h_{i+1}} \right)^{-1} \left[\frac{2a_i}{h_i} - \bar{u}_i \right],$$

e

$$\mathcal{A}_{i-1} + \bar{u}_i \frac{a_{i-1} h_i}{a_i h_{i-1} + a_{i-1} h_j} = \frac{a_{i-1}}{h_{i-1}} \left(\frac{a_i}{h_i} + \frac{a_{i-1}}{h_{i-1}} \right)^{-1} \left[\frac{2a_i}{h_i} + \bar{u}_i \right], \quad 1 < i \leq n.$$

Se $\bar{u}_i = 0$, então os valores anteriores são positivos. Se $\bar{u}_i \neq 0$, então, por hipótese, segue que

$$\frac{2a_i}{h_i} - \bar{u}_i > |\bar{u}_i| - \bar{u}_i \geq 0, \quad \text{e} \quad \frac{2a_i}{h_i} + \bar{u}_i > |\bar{u}_i| + \bar{u}_i \geq 0.$$

Portanto, utilizando as Equações 10 e 11, concluímos que tanto os elementos da diagonal superior como os da diagonal inferior são negativos. Dessa forma, usando as Equações 12, 13 e 14, observando que o valor da porosidade é sempre positivo e que $\mathcal{A}_0 + \bar{u}_1 = 2a_1 h_1^{-1} + \bar{u}_1 > |\bar{u}_1| + \bar{u}_1 \geq 0$, conseguimos provar que todos os elementos da diagonal principal são positivos. \square

Lema 2.2: Sejam $b_1, b_2, N_1, N_2, \Delta t > 0, \varphi > 0$ e $h > 0$ números reais. Se

$$0 < N_1 < 1, \quad 0 < N_2 < 1, \quad \frac{\Delta t}{h} < \frac{\varphi}{\max\{|b_1|, |b_2|\}} \quad \text{e} \quad b_1 b_2 < 0,$$

então $|\varphi + \frac{\Delta t}{2h}(N_1 b_1 + N_2 b_2)| > \frac{\Delta t}{2h}(|N_1 b_1| + |N_2 b_2|)$.

Demonstração: Inicialmente, observe que

$$\frac{\Delta t}{h} < \frac{\varphi}{\max\{|b_1|, |b_2|\}} \quad \longrightarrow \quad \frac{\Delta t}{h} < \frac{\varphi}{|b_1|} \quad \text{e} \quad \frac{\Delta t}{h} < \frac{\varphi}{|b_2|}.$$

Além disso, como $|N_1 b_1| < |b_1|$, $|N_2 b_2| < |b_2|$ e $\varphi > \frac{\Delta t}{h} \max\{|b_1|, |b_2|\}$, obtemos que

$$\varphi > \frac{\Delta t}{h} |N_1 b_1| \quad \text{e} \quad \varphi > \frac{\Delta t}{h} |N_2 b_2|.$$

Casos a analisar: (i) $N_1 b_1 + N_2 b_2 = 0$, (ii) $N_1 b_1 + N_2 b_2 > 0$ e (iii) $N_1 b_1 + N_2 b_2 < 0$.

(i) Se $N_1 b_1 + N_2 b_2 = 0$, então $|N_1 b_1| = |N_2 b_2|$. Assim

$$|\varphi + \frac{\Delta t}{2h}(N_1 b_1 + N_2 b_2)| > \frac{\Delta t}{2h}(|N_1 b_1| + |N_2 b_2|) \iff \varphi > \frac{\Delta t}{h} |N_1 b_1|.$$

Para a demonstração dos casos restantes, vamos supor que $b_1 > 0$ e $b_2 < 0$ (obtem-se uma demonstração análoga, quando $b_1 < 0$ e $b_2 > 0$).

(ii) Se $N_1 b_1 + N_2 b_2 > 0$, $b_1 > 0$ e $b_2 < 0$, então $|N_1 b_1| = N_1 b_1$, $|N_2 b_2| = -N_2 b_2$ e

$$|\varphi + \frac{\Delta t}{2h}(N_1 b_1 + N_2 b_2)| > \frac{\Delta t}{2h}(|N_1 b_1| + |N_2 b_2|) \iff \varphi > \frac{\Delta t}{h} |N_2 b_2|.$$

(iii) Se $N_1 b_1 + N_2 b_2 < 0$, então $\varphi + \frac{\Delta t}{2h}(N_1 b_1 + N_2 b_2) > 0$, pois

$$\varphi > \frac{\Delta t}{h} \max\{|b_1|, |b_2|\} \quad \longrightarrow \quad 2\varphi > -(N_1 b_1 + N_2 b_2) \frac{\Delta t}{h}.$$

Assim,

$$|\varphi + \frac{\Delta t}{2h} (N_1 b_1 + N_2 b_2)| > \frac{\Delta t}{2h} (|N_1 b_1| + |N_2 b_2|) \iff \varphi > \frac{\Delta t}{h} |N_2 b_2|.$$

Dos argumentos anteriores, o lema fica demonstrado. \square

Teorema 2.1: *A fim de que a matriz $A^{(c)}$ seja diagonal dominante, é suficiente que, para cada linha i , $1 \leq i \leq n$, tenhamos*

$$u_i = 0, \quad \text{ou} \quad h_i < \frac{2a_i}{|\bar{u}_i|}, \quad \text{ou} \quad \frac{\Delta t}{h_i} < \frac{\varphi_i}{\max\{|b_{1,i}|, |b_{2,i}|\}},$$

onde $b_{1,i} = \frac{2a_i}{h_i} - \bar{u}_i$ e $b_{2,i} = \frac{2a_i}{h_i} + \bar{u}_i$.

Demonstração: A demonstração deste teorema é consequência direta dos Lemas 2.1 e 2.2. \square

3 SIMULAÇÕES NUMÉRICAS

Nesta seção, apresentaremos os resultados das simulações numéricas que validarão o procedimento adotado na aproximação da equação de convecção–difusão unidimensional (Equação 1). Os resultados numéricos serão comparados com a solução analítica (Equação 4). O número de subintervalos de tempo sempre será igual a $n_t = 500$, em todas as simulações. O número de subintervalos do domínio Ω será denotado por n_x e poderá assumir os seguintes valores: 20, 100 ou 500.

O cálculo do erro envolvendo a solução numérica $c(i)$ e a solução analítica $C(i)$, $1 \leq i \leq n_x$, será efetuado por meio da média quadrática, ou seja,

$$Erro = \frac{1}{n_x} \sum_{i=1}^{n_x} (c(i) - C(i))^2.$$

A metodologia adotada para a discretização da equação de convecção–difusão (Equação 1) deu origem ao método que chamaremos de Misto–Híbrido/Adams–Moulton (veja a Seção 2). Se existe alguma originalidade nesse método, ela não é devida nem ao Método de Adams–Moulton de 2ª ordem, que é um método clássico para a resolução numérica de equações diferenciais ordinárias (EDO), nem ao Método dos Elementos Finitos Mistos Híbridos, que vem sendo utilizado em equações diferenciais parciais (EDP) desde a sua apresentação (método híbrido), em 1969, conforme está relatado no artigo de Raviart e Thomas [14] (veja as referências lá citadas).

A técnica de aproximação combinando Espaço de Raviart–Thomas de ordem zero; Elementos Finitos Mistos Híbridos, com eliminação dos Multiplicadores de Lagrange; Método de Adams–Moulton e Algoritmo de Correção de Oscilação deu origem a um método simples de ser implementado computacionalmente. Tal simplicidade vem do fato das técnicas empregadas na discretização da EDP nos conduzir, de modo fácil, a um problema envolvendo apenas a solução de uma EDO. Essa EDO é resolvida por um método numérico clássico que vai exigir apenas a solução de um sistema linear tridiagonal. Embora seja simples, o Método Misto–Híbrido/Adams–Moulton apresenta bons resultados de convergência, produzindo aproximações numéricas que não apresentam perfil oscilatório nem efeitos difusivos excessivos. Além disso, o estudo realizado neste trabalho para o caso unidimensional pode ser estendido para o caso bidimensional, sem grandes alterações, se considerarmos, por exemplo, reservatório retangular e malha computacional estruturada com elementos retangulares.

Uma das facilidades mencionadas anteriormente diz respeito à solução numérica da equação de convecção–difusão sem recorrer à técnica de separação de operador (operator

splitting), que trata separadamente o estágio de transporte (convecção) do estágio difusivo. Tal técnica, que pode trazer complicações computacionais (conforme relatamos no início da Seção 1), em geral, é utilizada nos chamados Métodos Eulerianos Lagrangeanos, como o Método Modificado das Características (MMOC).

Baseados nos resultados apresentados nesta seção, acreditamos que o Método Misto-Híbrido/Adams-Moulton seja competitivo com outros métodos tradicionais denominados Métodos Euleriano-Lagrangeanos. As comparações desse método com o MMOC são apresentadas nas próximas subseções. Os dados sobre o MMOC foram retirados do artigo de Healy e Russel [10], considerando-se sempre os melhores resultados.

Observação: Os dois Métodos de Runge-Kutta utilizados neste trabalho foram aplicados em um PVI vetorial (sistema de equações diferenciais ordinárias de primeira ordem) cujo vetor de funções incógnitas tem coordenadas denotadas por c_E . Cada uma das coordenadas satisfaz uma equação diferencial ordinária proveniente da Equação 8. Note que, na construção desse PVI vetorial, devemos levar em consideração as Equações 6 e 7 e a condição inicial $c_E(x, 0) = c_0(x) = 0, \forall x \in \Omega$.

3.1 RESULTADOS NUMÉRICOS PARA $d_\ell = 1,0 \text{ cm}$

As simulações numéricas exibidas nesta seção utilizam o coeficiente de dispersão longitudinal $d_\ell = 1,0 \text{ cm}$. Em tais simulações, o PVI resultante das discretizações apresentadas na Seção 2 é resolvido numericamente utilizando-se três métodos clássicos: Adams-Moulton de 2ª ordem, Runge-Kutta de 4ª ordem e Runge-Kutta-TVD de 3ª ordem. O Método de Runge-Kutta de 4ª ordem é bastante conhecido e o seu algoritmo pode ser encontrado, por exemplo, na referência [5]; o Método de Runge-Kutta-TVD de 3ª ordem utiliza o esquema de diminuição de variação total (Total Variation Diminishing scheme), que foi empregado com sucesso em problemas de captura de choque referentes a escoamentos de fluidos regidos por uma lei de conservação (veja o artigo [15] e as referências lá citadas).

Com respeito aos resultados obtidos pelo Método Misto-Híbrido/Adams-Moulton (veja o início desta Seção 3), o qual se mostrou mais preciso do que os outros dois métodos utilizados nesse trabalho, salientamos que a única simulação apresentando perfil oscilatório considerou uma partição grossa do domínio, com $n_x = 20$ subdomínios. Com o refinamento da malha computacional ($n_x = 100$ e $n_x = 500$), o fenômeno oscilatório foi eliminado. Porém, tais oscilações espúrias podem ser corrigidas por meio de um algoritmo, o qual será exibido na Subseção 3.1.3. Os resultados dos outros dois métodos estão exibidos na Seção 3.1.1, na qual enfatizamos os resultados insatisfatórios desses métodos, para uma malha computacional com $n_x = 500$ elementos. Nos outros casos, $n_x = 20$ e $n_x = 100$, os resultados das simulações foram similares aos obtidos com o Método de Adams-Moulton.

3.1.1 MÉTODOS QUE APRESENTARAM RESULTADOS INSATISFATÓRIOS

Os Métodos de Runge-Kutta-TVD de 3ª ordem e Runge-Kutta de 4ª ordem não convergiram para a solução analítica, quando consideramos $n_x = 500$ e $d_\ell = 1,0 \text{ cm}$. Para visualizar o comportamento desse caso específico, envolvendo uma solução divergente, fizemos uma simulação considerando $d_\ell = 0,7 \text{ cm}$. Para os demais casos, $n_x = 20$ e $n_x = 100$, consideramos $d_\ell = 1,0 \text{ cm}$.

As Tabelas 1 e 2 e as Figuras 2-4 e Figuras 5-7 correspondem às simulações realizadas com os Métodos de Runge-Kutta, para os casos em que $n_x = 20$ e $n_x = 100$ ($d_\ell = 1,0 \text{ cm}$) e $n_x = 500$ ($d_\ell = 0,7 \text{ cm}$), considerando-se $T = 5$ horas.

Nas Figuras 2 e 5, é possível perceber o comportamento oscilatório incorreto da solução numérica correspondente ao perfil de concentração no caso em que o domínio foi particionado em $n_x = 20$ subintervalos. Apresentaremos um algoritmo para minimizar as oscilações espúrias, na Subseção 3.1.3.

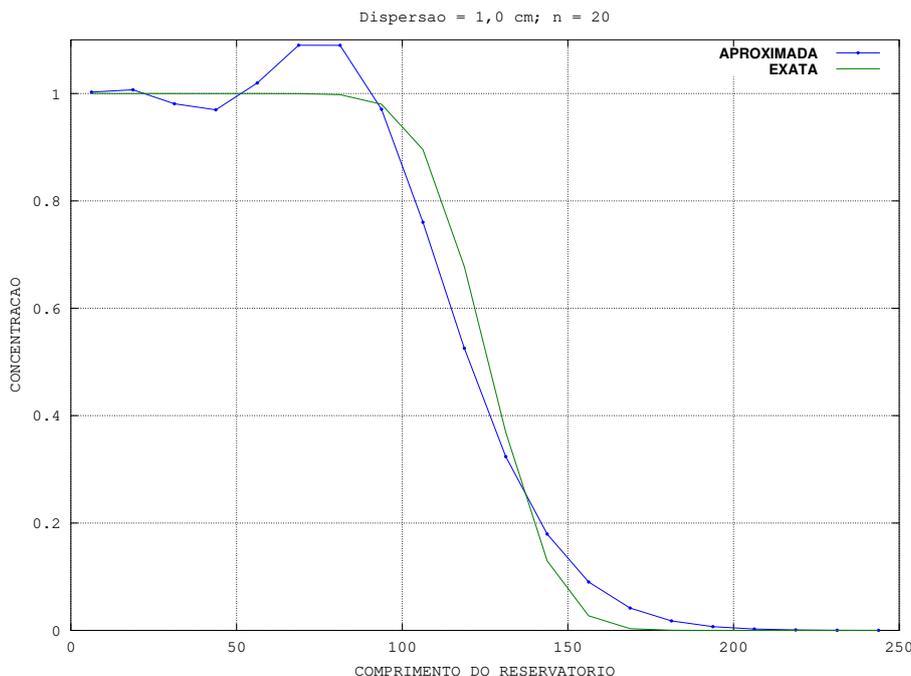


FIGURA 2: Runge-Kutta; $n_x = 20$; $d_\ell = 1.0$; $T = 5$ - referente à Tabela 1.

O perfil de concentração, no caso em que o domínio foi subdividido em $n_x = 100$ subdomínios, obtido com o Método de Runge-Kutta-TVD de 3ª ordem, ou com o Método de Runge-Kutta de 4ª ordem, está bastante similar ao perfil da concentração da solução analítica. Este fato pode ser comprovado pelas Tabelas 1 e 2, as quais exibem um erro da ordem de 10^{-4} , quando comparamos a solução numérica com a solução analítica.

d_ℓ	n_x	Erro
1.0	20	0.351×10^{-2}
1.0	100	0.141×10^{-4}
0.70	500	0.3842×10^9

TABELA 1: Método de Runge-Kutta de 4ª ordem; $T = 5$ horas.

d_ℓ	n_x	Erro
1.0	20	0.351×10^{-2}
1.0	100	0.141×10^{-4}
0.70	500	0.12×10^{187}

TABELA 2: Método de Runge-Kutta-TVD de 3ª ordem; $T = 5$ horas.

Conclusão: De acordo com as Tabelas 1 e 2 e de acordo com as Figuras 3 e 4, e Figuras 6 e 7, podemos concluir que ambos os métodos, Runge-Kutta TVD de 3ª ordem e Runge-Kutta de 4ª ordem, convergiram para a solução analítica, quando foi considerado $n_x = 100$, e que ambos os métodos divergiram, quando considerou-se $n_x = 500$. Além disso, observando as Figuras 2 e 5, notamos um comportamento oscilatório no caso em que $n_x = 20$.

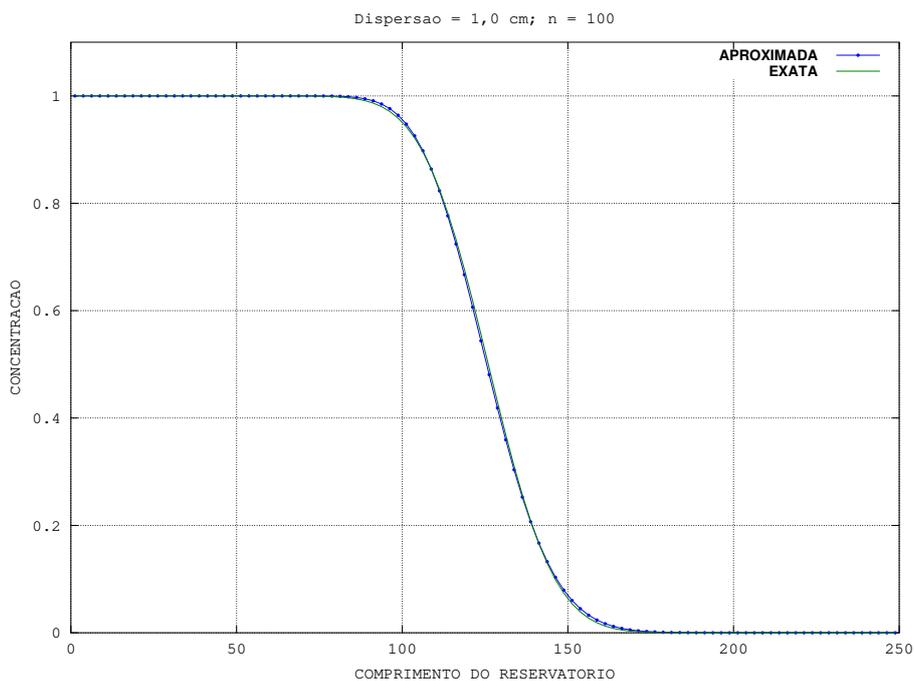


FIGURA 3: Runge-Kutta; $n_x = 100$; $d_\ell = 1.0$; $T = 5$ - referente à Tabela 1.

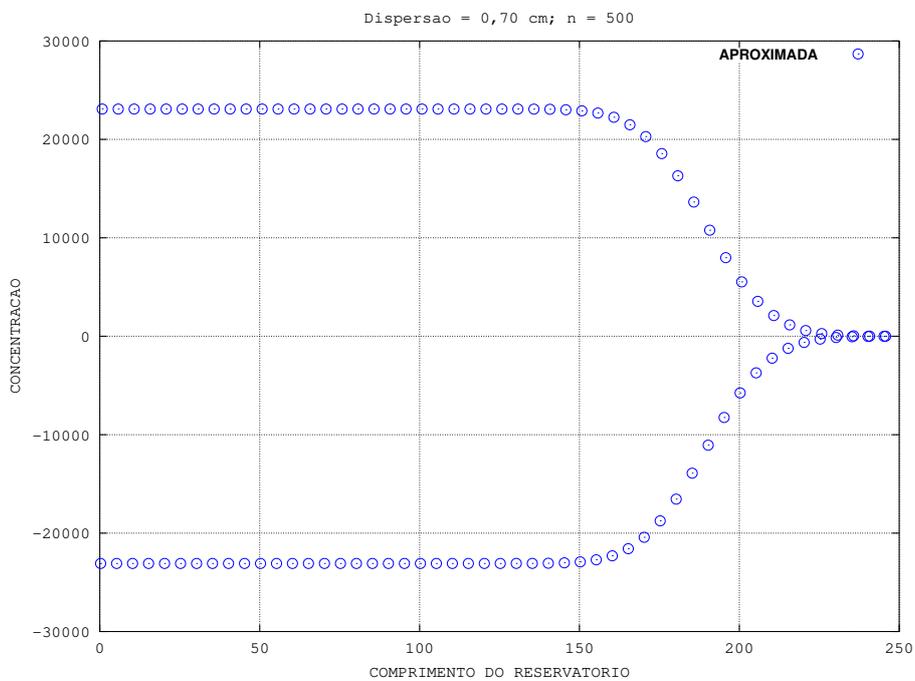


FIGURA 4: Runge-Kutta; $n_x = 500$; $d_\ell = 0.70$; $T = 5$ - referente à Tabela 1.

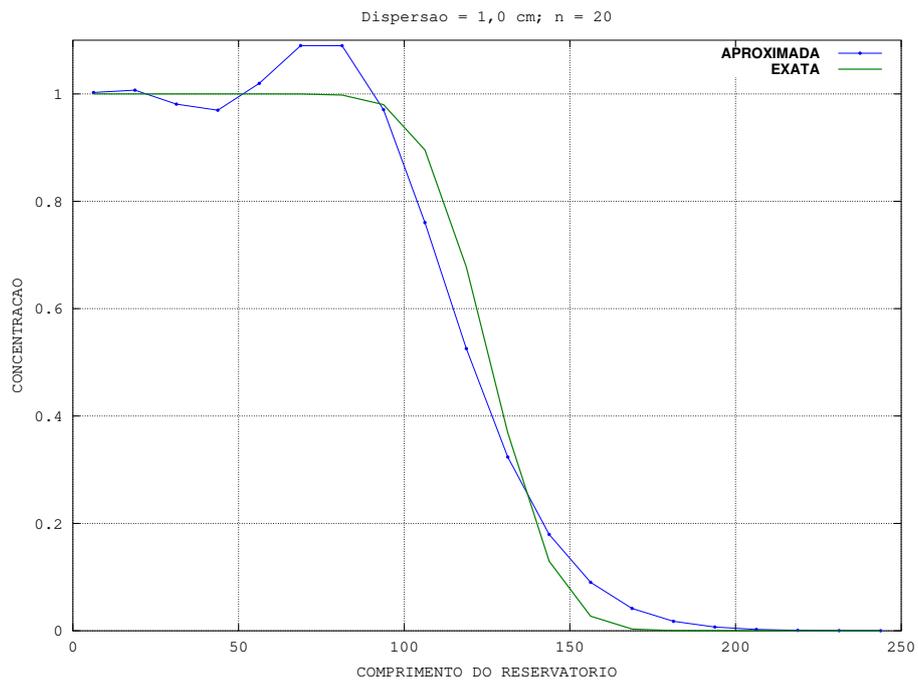


FIGURA 5: TVD; $n_x = 20$, $d_\ell = 1.0$, $T = 5$ - referente à Tabela 2.

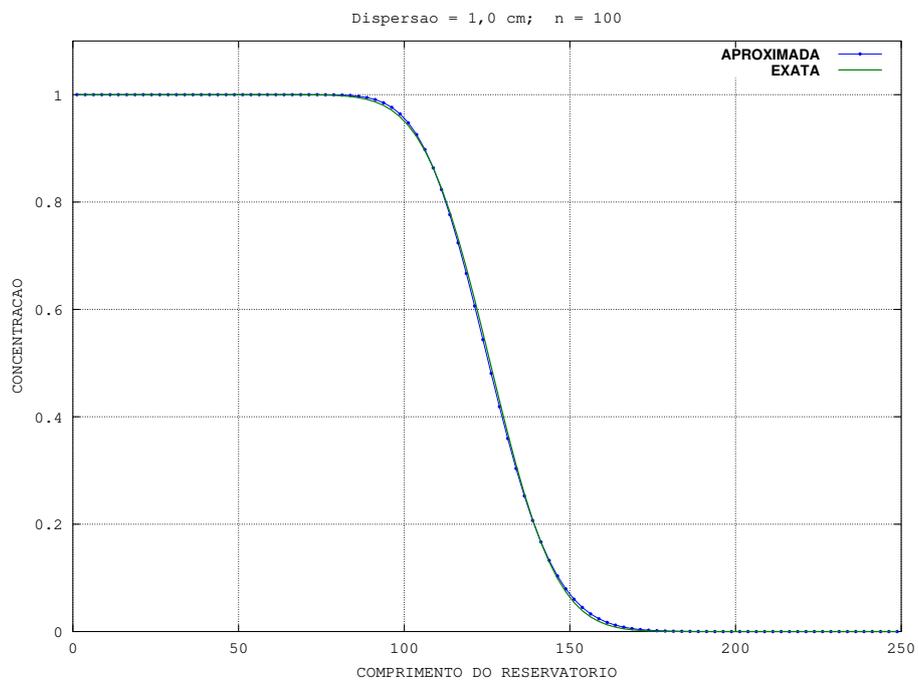


FIGURA 6: TVD; $n_x = 100$, $d_\ell = 1.0$, $T = 5$ - referente à Tabela 2.

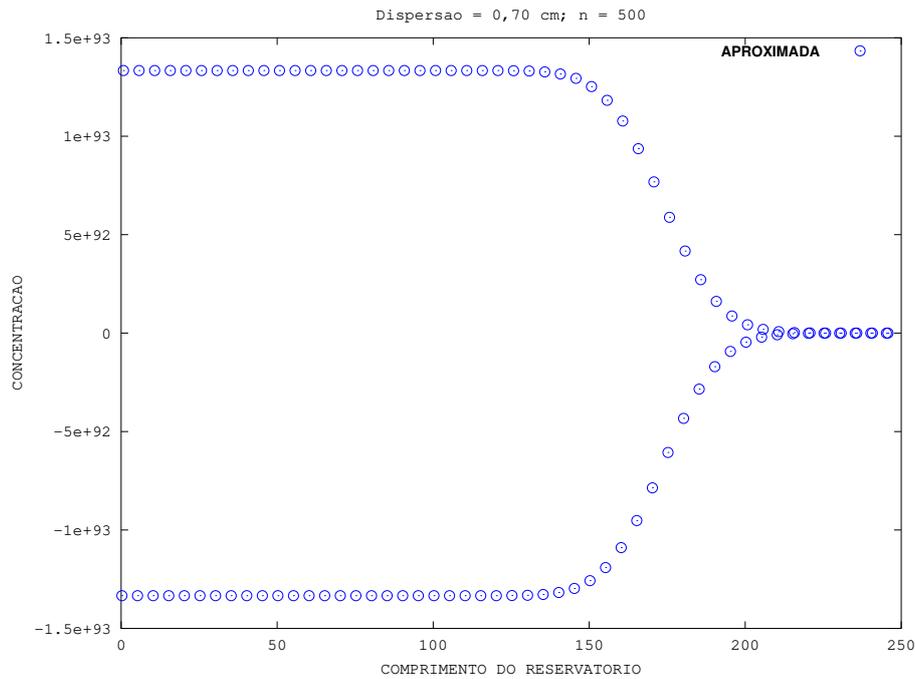


FIGURA 7: TVD; $n_x = 500$, $d_\ell = 0.70$, $T = 5$ - referente à Tabela 2.

3.1.2 MÉTODO QUE APRESENTOU RESULTADOS SATISFATÓRIOS

Em relação à análise das simulações numéricas referentes ao estudo aqui proposto, o método que apresentou resultados mais robustos do que o Runge–Kutta TVD de 3ª ordem e o Runge–Kutta de 4ª ordem foi o Método de Adams–Moulton de 2ª ordem, combinado com o Método dos Elementos Finitos Mistos Híbridos. Chegamos a essa conclusão porque tal método apresentou convergência em todas as simulações realizadas neste trabalho. As Tabelas 3 e 4 e as Figuras 8, 9, 10 e 11 apresentadas a seguir comprovam a eficiência do Método Misto–Híbrido/Adams–Moulton. As tabelas e as figuras mencionadas anteriormente correspondem às simulações dos casos em que $n_x = 20$, $n_x = 100$ e $n_x = 500$, considerando-se $d_\ell = 1,0\text{ cm}$ e $T = 5$ horas.

d_ℓ	n_x	Erro MMOC	Erro
1,0	20	0.234×10^{-2}	0.351×10^{-2}
1,0	100	0.710×10^{-5}	0.142×10^{-4}
1,0	500	0.321×10^{-6}	0.288×10^{-7}

TABELA 3: Método de Adams-Moulton sem correção de oscilações; $T = 5$ horas.

Observação: O método Misto–Híbrido/Adams–Moulton, em todos os casos estudados nesta seção, convergiu para a solução analítica e não foi acometido por difusão numérica. Isso pode ser constatado pelas Figuras 9 e 10. Note que os perfis das soluções numéricas são similares aos perfis das soluções analíticas. Porém, apresentou um comportamento oscilatório indesejado, quando $n_x = 20$. É interessante ressaltar que, para $n_x = 500$, o erro gerado por esse método foi menor do que o obtido no trabalho de Healy e Russell [10], que utilizou o Método Modificado das Características (MMOC), de acordo com a Tabela 3.

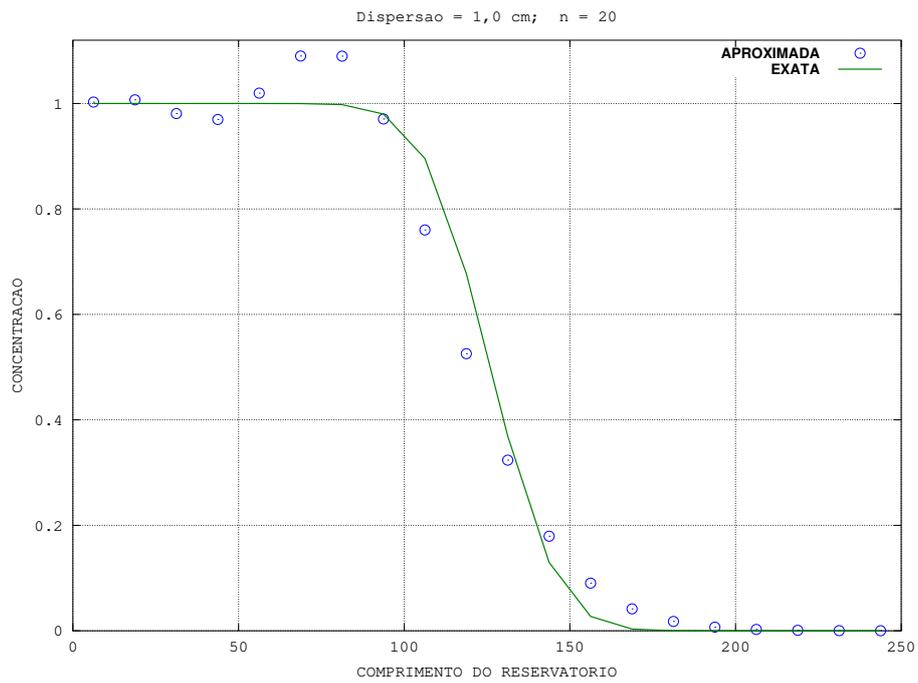


FIGURA 8: Adams; $n_x = 20$, $d_\ell = 1$, $T = 5$ - referente à Tabela 3.

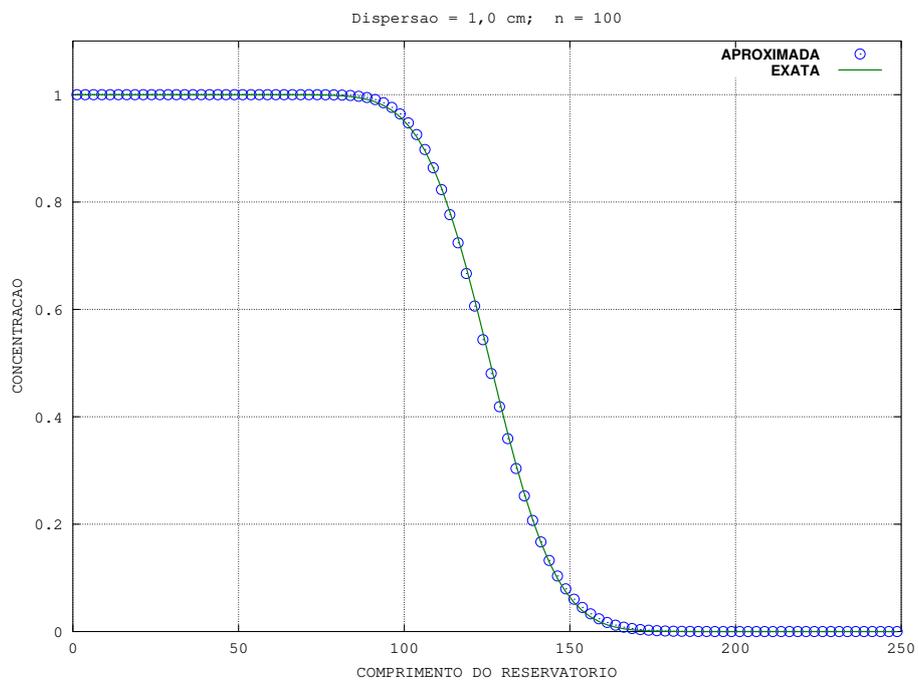


FIGURA 9: Adams; $n_x = 100$, $d_\ell = 1$, $T = 5$ - referente à Tabela 3.

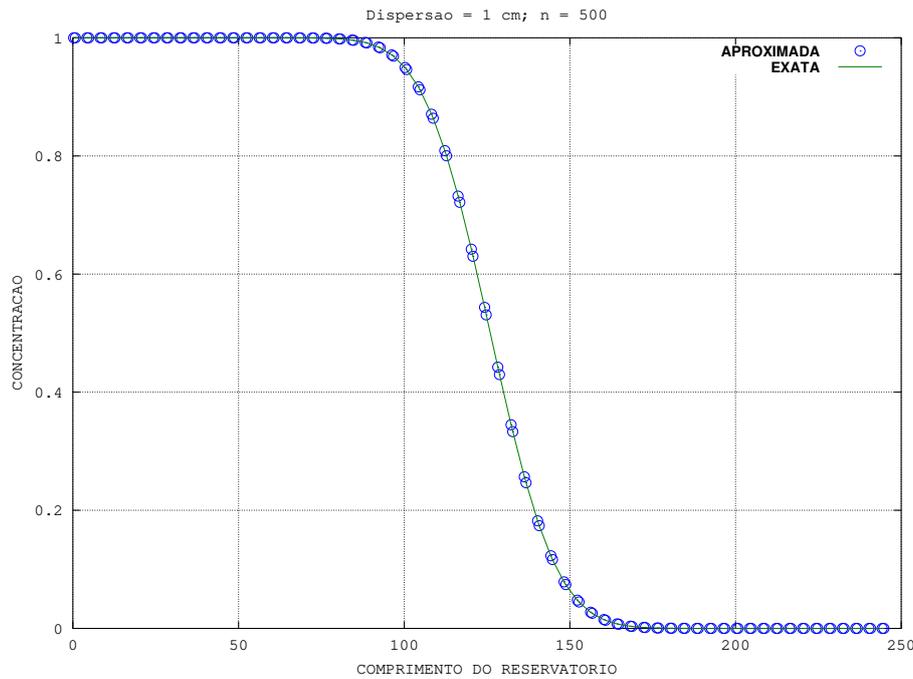


FIGURA 10: Adams; $n_x = 500$, $d_\ell = 1$, $T = 5$ - referente à Tabela 3.

3.1.3 CORREÇÃO DA OSCILAÇÃO

Como vimos no final da Seção 1, a oscilação numérica é um fenômeno que pode surgir em aproximações de problemas físicos modelados com equações diferenciais parciais que têm uma predominância hiperbólica. Para corrigir o surgimento de oscilações espúrias causadas por erros numéricos, utilizamos um algoritmo de pós-processamento ao final de cada passo de tempo. Isto é, após a aplicação do método numérico para se obter os valores de concentração em um dado instante de tempo, o código de correção de oscilação é utilizado para garantir que valores de concentração, correspondentes a elementos vizinhos, não sejam discrepantes.

A avaliação de discrepância é realizada na região próxima da fronteira de transição, na qual os valores da concentração variam de 1 (ou próximo de 1) até valores próximos de zero (veja, por exemplo as Figuras 2, 5 e 8, para valores no eixo horizontal entre 50 e 100). Para isso, estabelecemos um valor limite, que será denotado por L_c , de modo que a média entre dois valores consecutivos de concentração não exceda tal limite. Caso essa média seja superior ao limite estabelecido, o algoritmo utiliza uma interpolação com polinômios constantes para atribuir um valor adequado para a concentração em questão.

A motivação para tal procedimento está relacionada ao tipo de aproximação espacial considerada em nossa formulação discreta, a qual utiliza Espaço de Raviart-Thomas de ordem zero. Assim, funções escalares devem ser aproximadas por valores constantes, em cada elemento finito. As etapas do algoritmo são exibidas a seguir.

- Etapa 1: Partindo-se da extremidade superior do domínio, onde os valores de concentração estão próximos de zero, e indo em direção à extremidade inferior, onde os valores de concentração estão próximos de 1, pretende-se obter o primeiro elemento, denotado por E_{imax} , no qual a concentração assume valor maior do que 1.
- Etapa 2: Correção do valor da concentração no elemento E_{imax} , por meio de interpolação linear. Para isso, são considerados os valores de concentração correspondentes aos elementos E_{imax+1} e E_{imax+2} .
- Etapa 3: Seja $c(i)$ o valor da concentração no elemento E_i , $1 \leq i \leq imax$. O procedi-

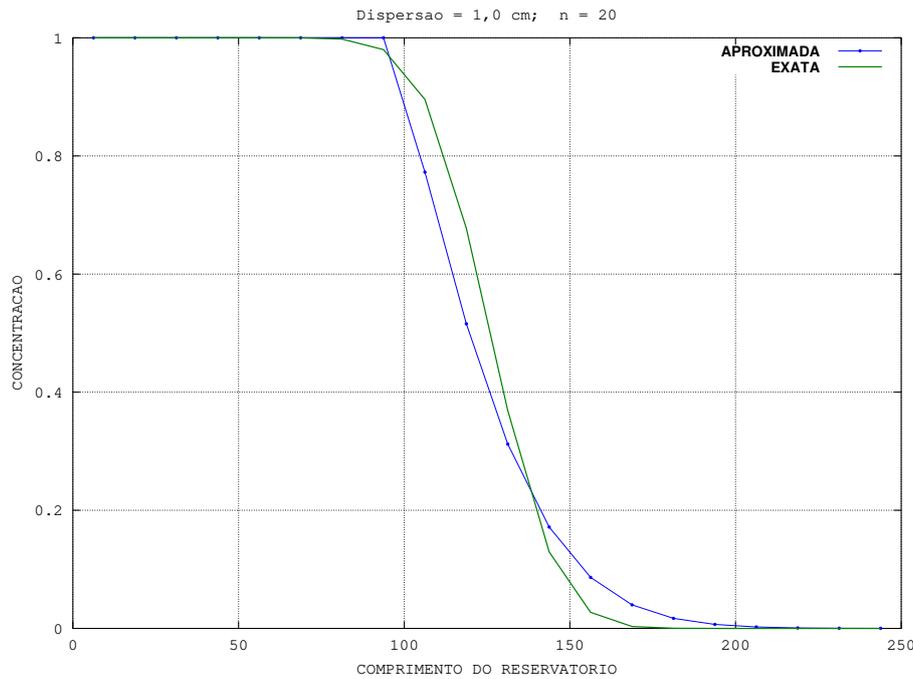


FIGURA 11: Adams sem oscilação; $n_x = 20$, $d_\ell = 1$, $T = 5$ - referente à Tabela 4.

mento adotado para a correção das oscilações, por meio de interpolação com valores constantes, é o seguinte: (I) calcula-se o valor médio: $M = (c(i) + c(i + 1))/2$; (II) se $M > L_c$, então devemos calcular $m_1 = |1 - c(i)|$ e $m_2 = |1 - c(i + 1)|$, para identificar qual valor de concentração está mais próximo de 1; (III) se $m_1 < m_2$, então $c(i + 1) = c(i)$; senão $c(i) = c(i + 1)$.

Observação: O valor de L_c , $0,93 < L_c \leq 1$, usado no algoritmo anterior, foi obtido experimentalmente. Observamos, nas simulações apresentadas neste trabalho, que existe uma relação do valor de L_c com o valor do coeficiente de dispersão longitudinal e, portanto, com a amplitude máxima das oscilações: $O_{max} = \text{máximo}\{|c(i) - c(i + 1)|, 1 \leq i \leq imax - 1\}$. Quando consideramos $d_\ell = 1 \text{ cm}$, usamos $L_c = 0,94$. Lembramos que, nesse caso, o perfil oscilatório somente ocorreu quando foi utilizada uma malha computacional com $n_x = 20$ elementos. Para $d_\ell = 0,01 \text{ cm}$, nós utilizamos $L_c = 0,97$. Dessa forma, a relação observada em nossos experimentos é a seguinte: "Quanto menor o valor de d_ℓ , maior deve ser o valor de L_c ".

Nas simulações referentes à Tabela 4, utilizamos o Método Misto-Híbrido/Adams-Moulton sem oscilação e consideramos $T = 5$ horas. Os dados apresentados nessa Tabela são comparações referentes aos erros obtidos com o Método de Adams-Moulton e com o Método Modificado das Características (MMOC).

d_ℓ	n_x	Erro MMOC	Erro
1,0	20	0.234×10^{-2}	0.260×10^{-2}

TABELA 4: Método de Adams-Moulton sem oscilação; $T = 5$ horas.

De acordo com a Tabela 4 e com a Figura 11, o Algoritmo de Correção da Oscilação melhorou o perfil de concentração e manteve a mesma ordem do erro (10^{-2}) obtido com o método oscilatório, quando $n_x = 20$.

Observação: As simulações que foram apresentadas anteriormente nesta seção, com

d_ℓ	n_x	Erro
1,0	20	0.408×10^{-2}
1,0	100	0.195×10^{-4}
1,0	500	0.399×10^{-7}

TABELA 5: Método de Adams–Moulton sem oscilação e $T = 2,5$ horas.

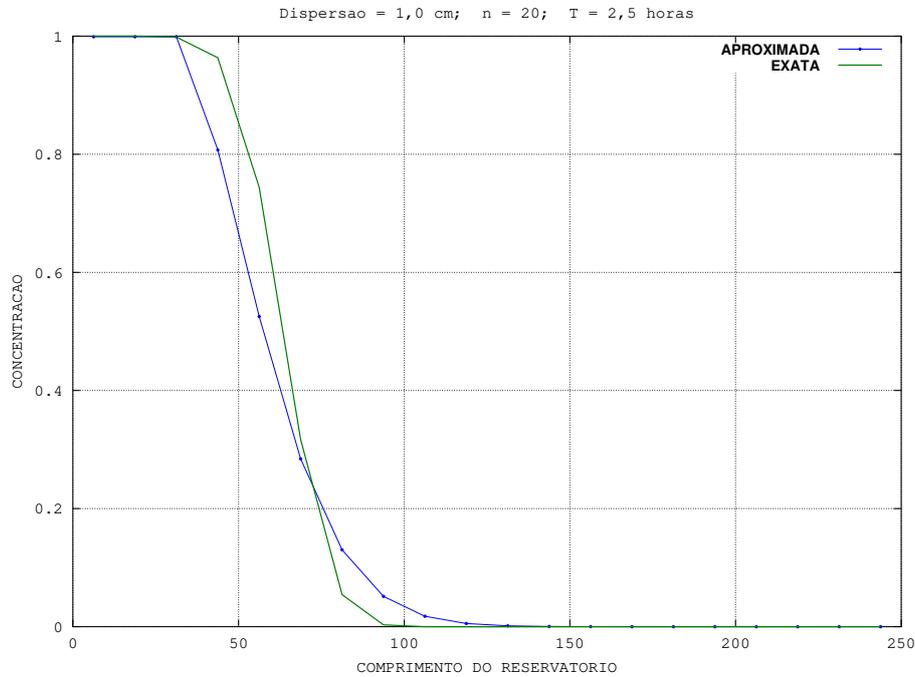


FIGURA 12: Adams sem oscilação; $n_x = 20$, $d_\ell = 1$, $T = 2,5$ - referente à Tabela 5.

o Método Misto–Híbrido/Adams–Moulton, serão repetidas considerando-se $T = 2,5$ horas. Consultando as Figuras 12, 13 e 14, para $T = 2,5$ horas, observamos que o perfil das concentrações das soluções numéricas não apresentam oscilações e são análogos aos obtidos nas simulações que consideraram o tempo final $T = 5$ horas. Além disso, de acordo com a Tabela 5, observamos que as ordens dos erros foram preservadas.

3.2 RESULTADOS NUMÉRICOS PARA $d_\ell = 0,01$

As simulações numéricas exibidas nesta seção utilizam o coeficiente de dispersão longitudinal $d_\ell = 0,01$ cm. Assim como na Subseção 3.1, em tais simulações, o PVI resultante das discretizações apresentadas na Seção 2 é resolvido numericamente utilizando-se os métodos: Runge-Kutta-TVD de 3ª ordem, Runge–Kutta de 4ª ordem e Adams–Moulton de 2ª ordem. Os três métodos convergiram para a solução analítica. Porém, nos casos avaliados, tanto em malha grossa ($n_x = 20$) quanto em malha fina ($n_x = 500$), todos eles geraram soluções numéricas com perfil oscilatório.

Os resultados apresentados na Subseção 3.2.1 referem-se às simulações realizadas com $n_x = 100$, utilizando os três métodos, e com $n_x = 500$, utilizando apenas o Método Misto–Híbrido/Adams–Moulton. Demos preferência por esse último método, devido aos bons resultados exibidos para o caso em que $d_\ell = 1$ cm. Além disso, consultando as Tabelas 6, 7, 8 e 9, observamos que, para os casos abordados, não existe diferença na ordem de grandeza dos erros associados aos três métodos.

Para corrigir o comportamento oscilatório das soluções numéricas, usamos um algoritmo análogo ao apresentado na Subseção 3.1.3. Os resultados obtidos após a correção

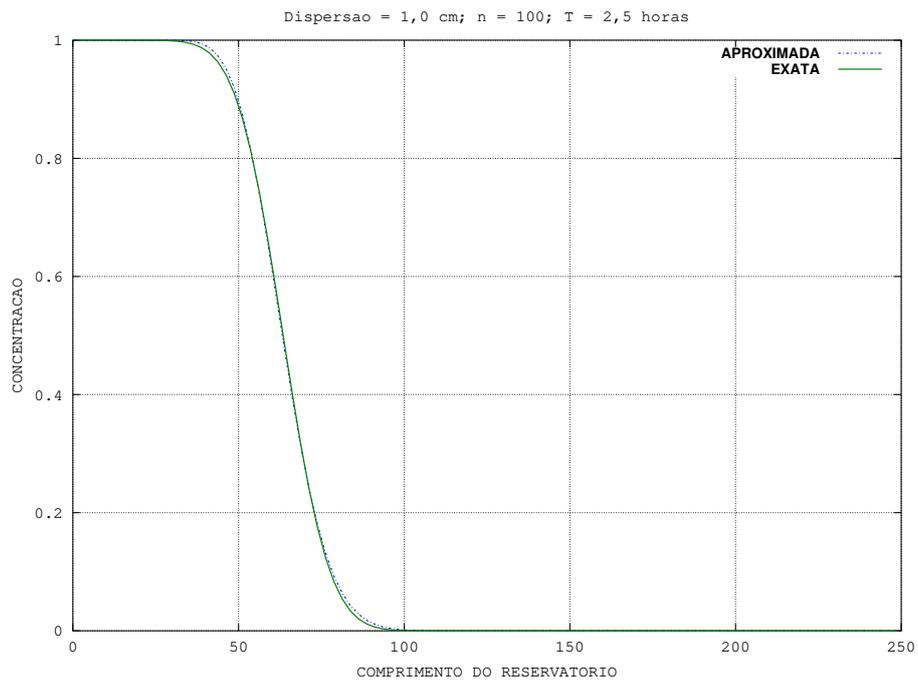


FIGURA 13: Adams sem oscilação; $n_x = 100$, $d_\ell = 1$, $T = 2,5$ - Gráfico referente à Tabela 5.

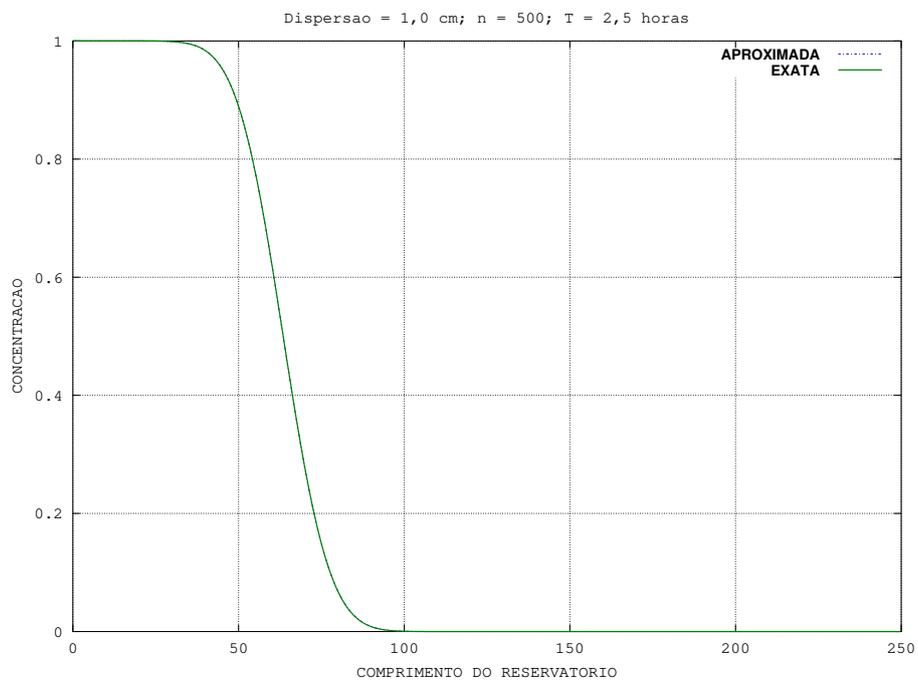


FIGURA 14: Adams sem oscilação; $n_x = 500$, $d_\ell = 1$, $T = 2,5$ - referente à Tabela 5.

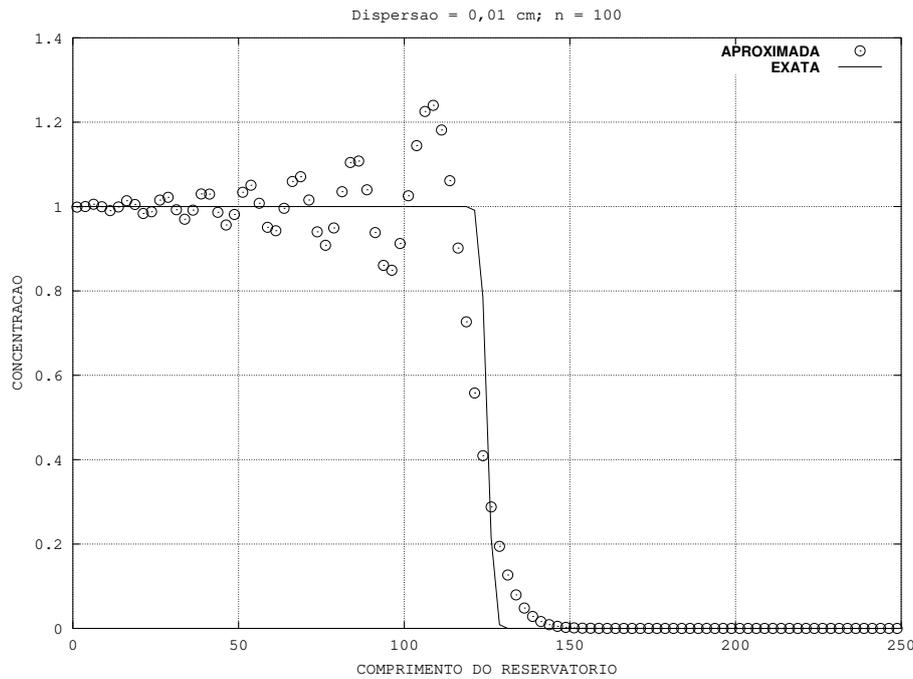


FIGURA 15: Runge-Kutta; $n_x = 100$, $d_\ell = 0.01$, $T = 5$ - referente à Tabela 6.

das oscilações estão contidos na Subseção 3.2.2, na qual exibimos as simulações no tempo $T = 5$ horas, considerando-se apenas o Método Misto-Híbrido/Adams-Moulton.

3.2.1 MÉTODOS OSCILATÓRIOS

Os métodos de Runge-Kutta-TVD de 3ª ordem, Runge-Kutta de 4ª ordem e Adams-Moulton de 2ª ordem, combinados com o Método dos Elementos Finitos Mistos Híbridos, convergiram para a solução analítica; porém todos apresentaram comportamento oscilatório para $n_x = 20$, $n_x = 100$ e $n_x = 500$ e $T = 5$ horas. Os resultados das simulações realizadas com os métodos de Runge-Kutta de 4ª ordem e Runge-Kutta-TVD de 3ª ordem, referentes ao caso no qual $n_x = 100$ e $T = 5$ horas, estão apresentados na Tabela 6, na qual podemos observar a mesma ordem de grandeza dos erros de ambos os métodos; além disso, os perfis das soluções numéricas são exibidos nas Figuras 15 e 16.

A Tabela 7 fornece uma comparação entre os erros referentes às simulações que utilizaram o Método Misto-Híbrido/Adams-Moulton e o Método Modificado das Características. Tais simulações utilizaram $d_\ell = 0,01$ cm, $T = 5$ horas e malhas computacionais com 20, 100 e 500 elementos. As Figuras 17 e 18 correspondem a tais simulações com $n_x = 100$ e $n_x = 500$.

d_ℓ	n_x	Método	Erro
0.01	100	RK	0.7642×10^{-2}
0.01	100	TVD	0.7640×10^{-2}

TABELA 6: Runge-Kutta e TVD, com oscilação e $T = 5$ horas.

3.2.2 CORREÇÃO DA OSCILAÇÃO

Utilizamos o mesmo algoritmo descrito na Subseção 3.1.3, para conseguir corrigir os efeitos oscilatórios dos perfis das soluções numéricas. Como dissemos anteriormente naquela subseção, o valor de L_c , utilizado na Etapa 3 do Algoritmo de Correção de Oscilação, tem que ser alterado para 0,97, neste caso em que $d_\ell = 0,01$ cm.

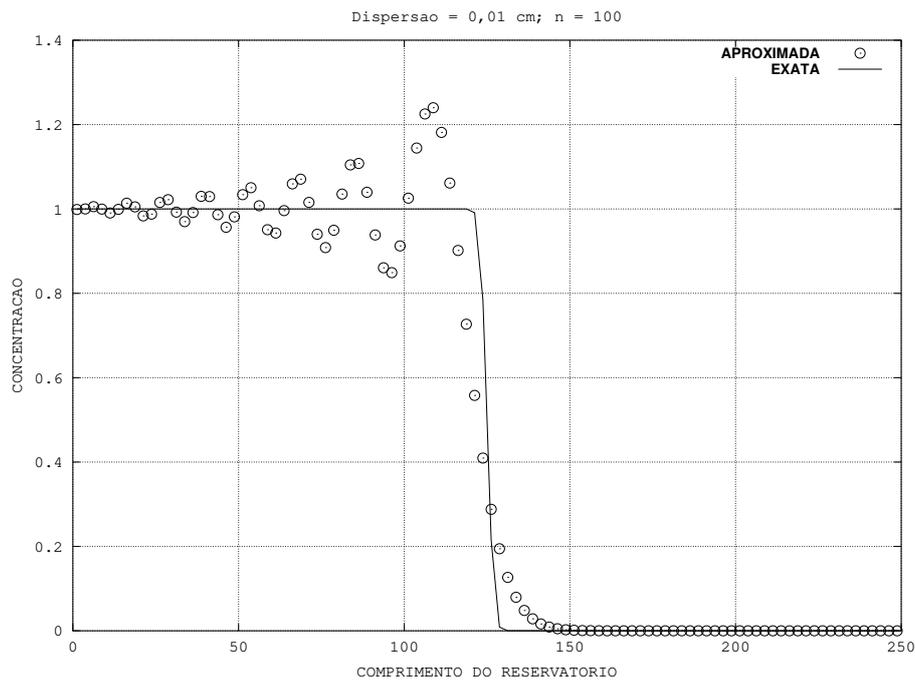


FIGURA 16: TVD; $n_x = 100$, $d_\ell = 0.01$, $T = 5$ - referente à Tabela 6.

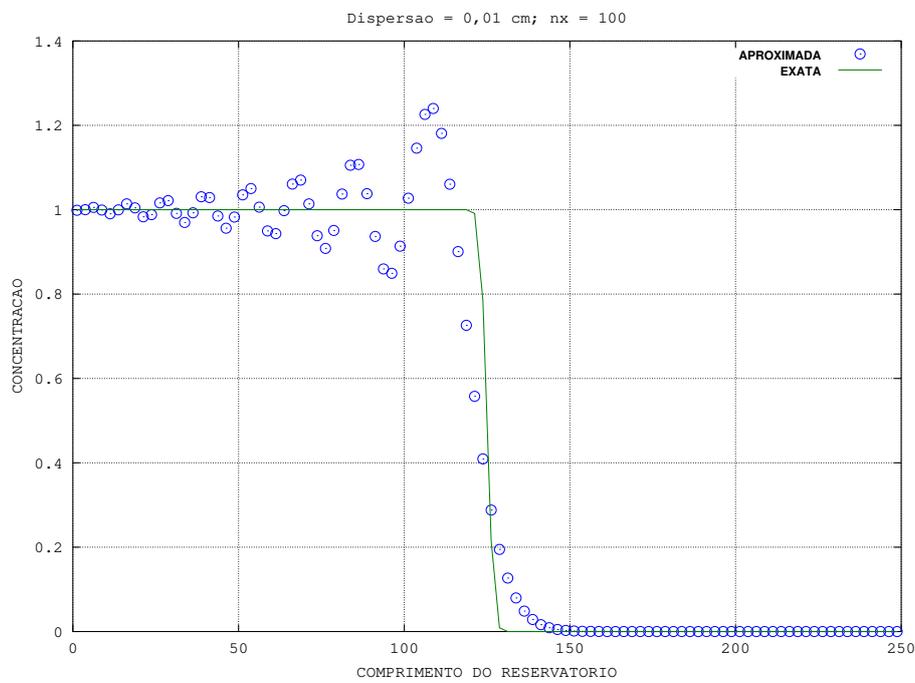


FIGURA 17: Adams; $n_x = 100$, $d_\ell = 0.01$, $T = 5$ - referente à Tabela 7.

d_ℓ	n_x	Erro MMOC	Erro
0,01	20	0.247×10^{-1}	0.261×10^{-1}
0,01	100	0.521×10^{-2}	0.766×10^{-2}
0,01	500	0.12×10^{-3}	0.883×10^{-3}

TABELA 7: Adams-Moulton oscilatório; $d_\ell = 0.01$, $T = 5$ horas.

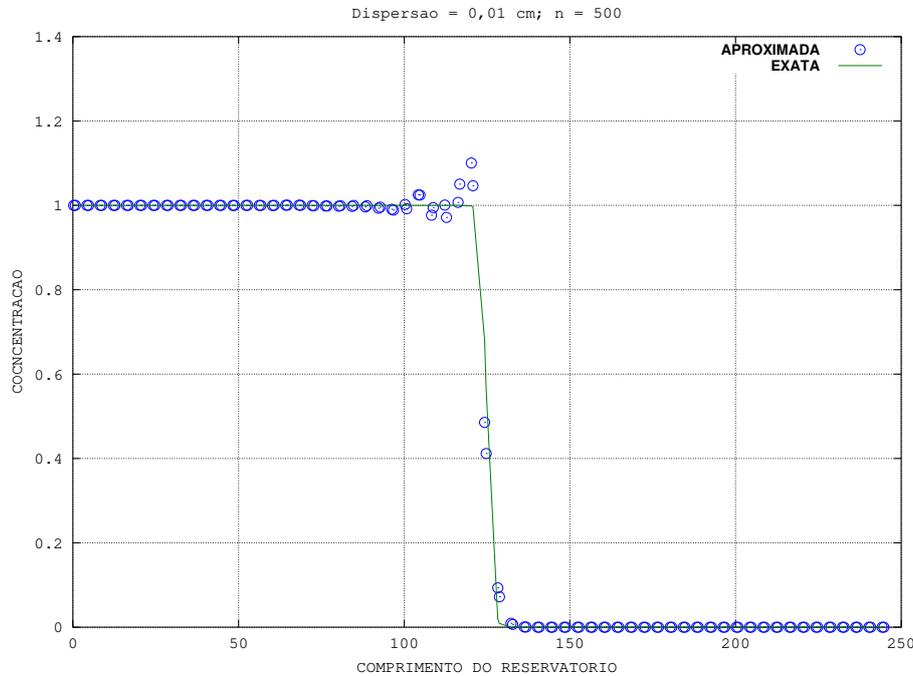


FIGURA 18: Adams; $n_x = 500$, $d_\ell = 0.01$, $T = 5$ - referente à Tabela 7.

Para esse caso em que os efeitos dispersivos são mais intensos, obtemos bons resultados numéricos com um novo algoritmo que deve ser utilizado depois do Algoritmo de Correção de Oscilação (ACO). O procedimento de pós-processamento é aplicado na solução numérica obtida no tempo final T (ou $T = 5$ horas ou $T = 2,5$ horas). Depois da correção da oscilação, usamos interpolação linear, na vizinhança da região de transição, para obter um perfil de solução numérica que esteja em sincronia com a solução analítica (nem atrasado, nem adiantado em relação ao perfil da solução analítica). A seguir, apresentamos esse novo algoritmo. A notação é a mesma utilizada na Etapa 3 do ACO.

- Interpolação linear, na vizinhança da região de transição, para obter um perfil adequado da curva de concentração: consideramos os valores de concentração $c(p)$ e $c(p+2)$ e a interpolação linear modificará o valor de $c(p+1)$, com $p = imax - i$ e $0 \leq i \leq imin$, onde $imin$ é um número natural dado. (*)

(*) **Observação:** Utilizamos $imin = 4$, nas simulações apresentadas nesta subseção.

A Tabela 8 corresponde aos resultados das simulações referentes aos métodos de Runge-Kutta de 4ª ordem e Runge-Kutta-TVD de 3ª ordem, com aplicação do Algoritmo de Correção de Oscilação. Nessas simulações, consideramos $n_x = 100$, $d_\ell = 0,01$ cm e $T = 5$ horas. Comparando-se os erros obtidos pelos dois métodos, observamos que eles possuem a mesma ordem de grandeza.

Apresentamos na Tabela 9 e nas Figuras 19, 20 e 21 os resultados referentes ao método Adams-Moulton de 2ª ordem, para os casos em que $n_x = 20$, $n_x = 100$ e $n_x = 500$, $d_\ell = 0,01$ cm e $T = 5$ horas. Os erros obtidos pelo método de Adams-Moulton são da mesma

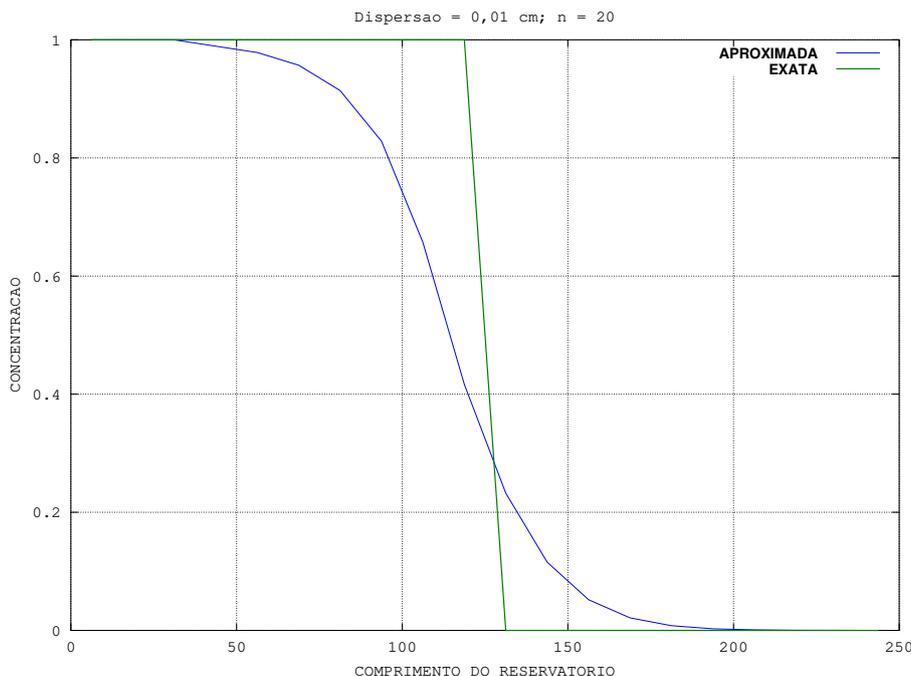


FIGURA 19: Adams sem oscilação; $n_x = 20$, $d_\ell = 0.01$, $T = 5$ - referente à Tabela 9.

ordem dos erros obtidos no trabalho de Healy e Russell, que utilizou o Método Modificado das Características.

d_ℓ	n_x	Método	Erro
0.01	100	RK	0.605×10^{-2}
0.01	100	TVD	0.604×10^{-2}

TABELA 8: Runge-Kutta e TVD, sem oscilação, $n_x = 100$ e $T = 5$ horas.

d_ℓ	n_x	Erro MMOC	Erro
0,01	20	0.284×10^{-1}	0.23×10^{-1}
0,01	100	0.521×10^{-2}	0.589×10^{-2}
0,01	500	0.12×10^{-3}	0.137×10^{-3}

TABELA 9: Adams-Moulton sem oscilação, $d_\ell = 0.01$ e $T = 5$ horas.

Observação: Não iremos mostrar as figuras relacionadas às simulações realizadas com o Método de Adams-Moulton considerando $T = 2,5$ horas. Porém, os perfis continuam similares aos obtidos para um intervalo de tempo de 5 horas. As informações sobre os erros numéricos estão na Tabela 10. Observe que tais erros possuem a mesma ordem de grandeza daqueles apresentados na Tabela 9.

4 CONCLUSÃO E TRABALHO FUTURO

Considerando-se os resultados exibidos na Seção 3 obtidos pelos 3 métodos, Runge-Kutta-TVD de 3ª ordem, Runge-Kutta de 4ª ordem e Adams-Moulton de 2ª ordem, podemos afirmar que este último é a opção mais adequada, porque foi o mais robusto de todos, com boa performance em todas as simulações, sem apresentar discrepâncias entre os

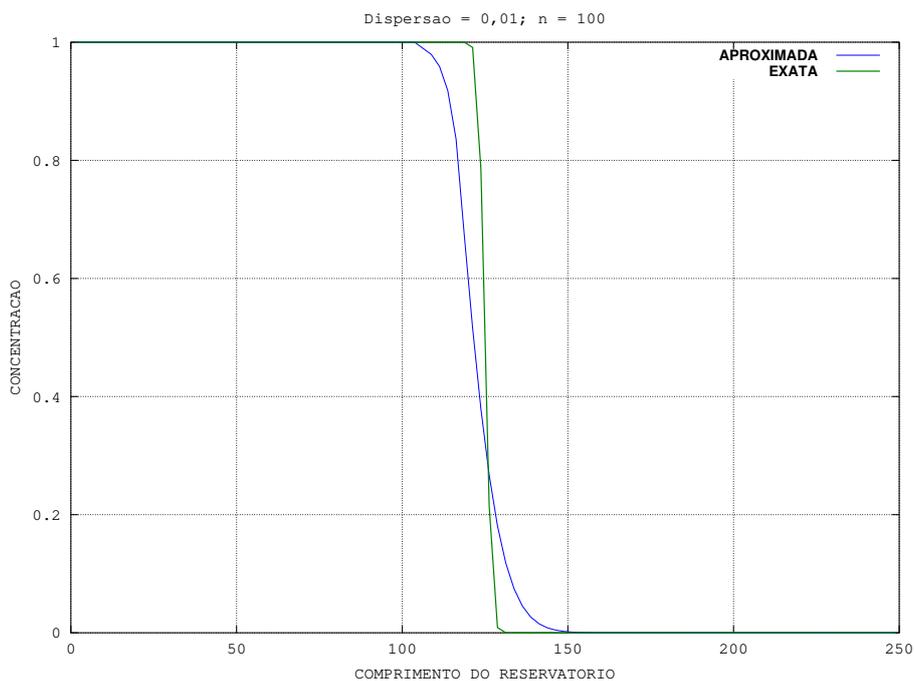


FIGURA 20: Adams sem oscilação; $n_x = 100$, $d_\ell = 0.01$, $T = 5$ - referente à Tabela 9.

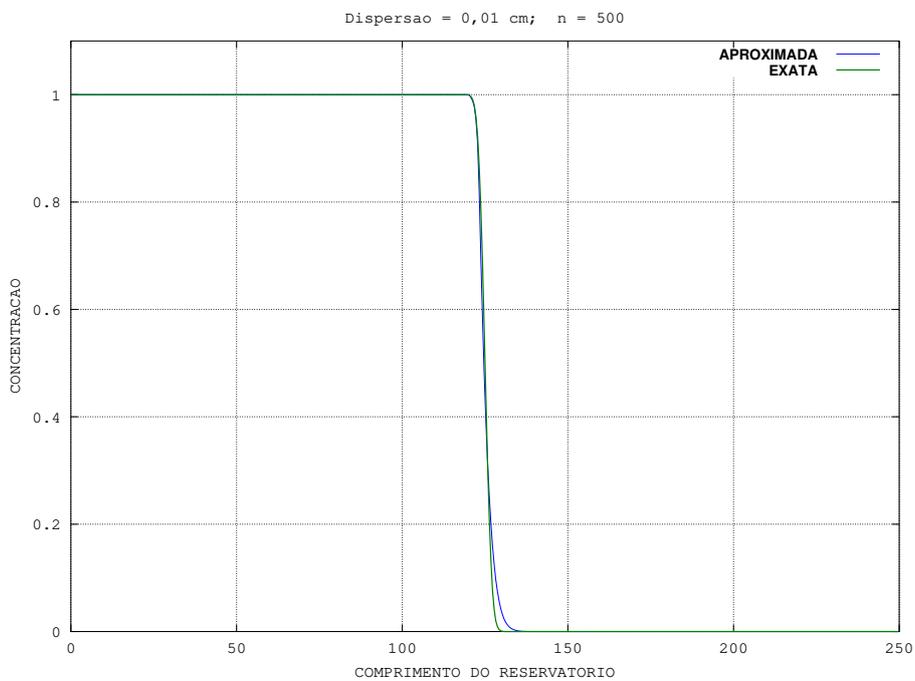


FIGURA 21: Adams sem oscilação; $n_x = 500$, $d_\ell = 0.01$, $T = 5$ - referente à Tabela 9.

d_ℓ	n_x	Erro
0.01	20	0.206×10^{-1}
0.01	100	0.525×10^{-2}
0.01	500	0.372×10^{-3}

TABELA 10: Adams-Moulton sem oscilação, $d_\ell = 0.01$ cm e $T = 2,5$ horas

valores dos erros, quando comparado aos demais métodos; inclusive quando comparado ao Método Modificado das Características. Por essa razão e pela simplicidade de programação computacional, acreditamos que o Método Misto-Híbrido/Adams-Moulton é competitivo com os tradicionais métodos denominados Métodos Euleriano-Lagrangeanos.

Em um trabalho futuro, pretendemos divulgar os resultados de um projeto de pesquisa que vem sendo desenvolvido com outros colaboradores. Nesse projeto, a variável principal do sistema resultante da formulação discreta da equação de convecção-difusão (mesma equação apresentada neste trabalho) é o Multiplicador de Lagrange. Além disso, consideraremos o modelo de escoamento miscível incompressível em meios porosos heterogêneos unidimensionais. Neste caso, obteremos um sistema acoplado não linear envolvendo uma equação elíptica, para a velocidade de Darcy, e uma equação de convecção-difusão, para a concentração da mistura.

Acreditamos que o sistema acoplado (unidimensional), mencionado anteriormente, possa ser útil para modelar escoamento de fluido em meio tridimensional fraturado com múltiplas porosidades. Visto que, por meio de uma técnica de homogeneização, assim como foi apresentada no artigo de Tien D. Le e Marcio A. Murad [16], determinadas fraturas podem ser tratadas como interfaces unidimensionais imersas em um domínio tridimensional.

REFERÊNCIAS

- [1] J. Douglas Jr., *Simulation of miscible displacement in porous media by a modified method of characteristic procedure*, vol. 912 of *Lecture Notes in Mathematics*. Berlin: Springer-Verlag, 1982.
- [2] J. Douglas Jr. and T. F. Russell, "Numerical methods for convection-dominated diffusion problems based on combining the method of characteristics with finite element or finite difference procedures," *SIAM J. Numer. Anal.*, vol. 19(5), pp. 871–885, 1982.
- [3] C. G. Almeida, J. Douglas Jr., F. Pereira, L. C. Roman, and L. M. Yeh, "Algorithmic aspects of a locally conservative Eulerian-Lagrangian method for transport-dominated diffusive systems," *Contemporary Mathematics, American Mathematical Society*, vol. 295, pp. 37–48, 2002.
- [4] F. Ramasomanana and A. Younes, "Efficiency of the Eulerian-Lagrangian localized adjoint method for solving advection-dispersion equations on highly heterogeneous media," *Int. J. Numer. Meth. Fluids*, vol. 69, pp. 639–652, doi:10.1002/flid.2578, 2012.
- [5] C. G. de Almeida, *Cálculo Numérico*. Curso de Licenciatura em Matemática – PARFOR, CEaD, Universidade Federal de Uberlândia, 2015.
- [6] P. A. Raviart and J. M. Thomas, *A mixed finite element method for second order elliptic problems*, *Mathematical Aspects of the Finite Element Method*, vol. 606 of *Lecture Notes in Mathematics*. Berlin, New York: Springer-Verlag, 1977.
- [7] C. G. Almeida, J. Douglas Jr., and F. Pereira, "A new characteristics-based numerical method for miscible displacement in heterogeneous formations," *Computational and Applied Mathematics*, vol. 21, pp. 573–605, 2002.

- [8] G. Chavent and J. E. Roberts, “A unified physical presentation of mixed, mixed-hybrid finite element and standard finite difference approximations for the determination of velocities in waterflow problems,” *Adv. Water Resources*, vol. 14, pp. 329–348, 1991.
- [9] J. Douglas Jr., F. Furtado, and F. Pereira, “On the numerical simulation of water-flooding of heterogeneous petroleum reservoirs,” *Computational Geosciences*, vol. 2, pp. 155–190, 1997.
- [10] R. W. Healy and T. F. Russell, “Efficient implementation of the modified method of characteristics in finite-difference models of solute transport,” in *Proceedings of the Fourth International Conference on Solving Ground Water Problems with Models*, pp. 483–492, Association of Ground Water Scientists and Engineers, National Water Well Association, 1989.
- [11] A. Ogata, “Theory of dispersion in a granular medium,” *U.S. Geological Survey Professional Paper*, pp. 411–I, 1970.
- [12] R. J. LeVeque, *Numerical methods for conservation laws*. Lectures in Mathematics, ETH Zürich, Basel; Boston; Berlin: Birkhäuser Verlag, 1992.
- [13] M. H. de Oliveira, “Métodos numéricos não oscilatórios aplicados às leis de conservação hiperbólicas unidimensionais,” Master’s thesis, Dissertação de Mestrado da Universidade Federal de Uberlândia, 2010.
- [14] P. A. Raviart and J. M. Thomas, “Primal Hybrid Finite Element Methods for 2nd Order Elliptic Equations,” *MATHEMATICS OF COMPUTATION*, vol. 31, pp. 391–413, 1977.
- [15] S. Gottlieb and C.-W. Schu, “Total variation diminishing Runge–Kutta schemes,” *Mathematics of Computation*, vol. 67(221), pp. 73–85, 1998.
- [16] T. D. Le and M. A. Murad, “A new multiscale model for flow and transport in unconventional shale oil reservoirs,” *Applied Mathematical Modelling*, vol. 64, pp. 453–479, 2018.