

# SIMULAÇÃO NUMÉRICA DE TRAÇADORES APLICADOS EM MEIOS POROSOS UTILIZANDO UM MÉTODO DE VOLUMES FINITOS DO TIPO MULTIPOINT FLUX APPROXIMATION QUASI-LOCAL (MPFA-QL)

Uewerton A. de O. Vaz<sup>1</sup>, Alessandro R. E. Antunes<sup>1</sup>, Paulo R. M. Lyra<sup>2</sup>, Darlan K. E. de Carvalho<sup>2</sup>, Fernando R. L. Contreras<sup>1</sup>

<sup>1</sup>*Núcleo de Tecnologia, Centro Acadêmico do Agreste, Universidade Federal de Pernambuco  
Rodovia BR-104, km 59, s/n, 55014-900, Caruaru, PE, Brasil  
uewerton.allolivaz@outlook.com, alessandro.antunes@ufpe.br, fernando.raul@ufpe.br*

<sup>2</sup>*Departamento de Engenharia Mecânica, Universidade Federal de Pernambuco  
Av. Acadêmico Hélio Ramos, s/n, 50670-901, Recife, PE, Brasil  
paulo.lyra@ufpe.br, darlan.carvalho@ufpe.br*

**Abstract.** Numerical simulation of solutes (e.g.: tracers and contaminants) in porous media remain a challenge for numerical analysts, particularly due to the complex geological characteristics of the medium. The use of tracers allows to characterize hydrodynamically the porous media covered by a certain volume of fluid previously marked by these substances. The mathematical model that determines the concentration of tracers in porous medium is given by the advection-dispersion-reaction (ADR) equation. The numerical solution of this equation is usually obtained by the finite difference method, therefore, there are limitations to treat problems with anisotropic tensors, and it is not suitable for the use of unstructured meshes. On the other hand, an alternative solution is the use of Galerkin finite element method, however, this method in the most classical form does not produce locally conservative solutions, which can be a serious problem for numerical modeling involving conservation laws. In this context, the present work presents a finite volume method (FVM) to discretize the ADR equation, where the discretization of the advective-dispersive term is performed using a non-orthodox FVM, known as multipoint flux approximation quasi-local (MPFA-QL), that was originally used to solve diffusion problems with heterogeneous and anisotropic coefficients on unstructured and distorted meshes.

**Keywords:** numerical simulation of solutes, advection-dispersion-reaction (ADR) equation, multipoint flux approximation quasi-local (MPFA-QL).

## 1 Introdução

Zemel [1] define solutos traçadores como substâncias utilizadas para marcar fisicamente um determinado volume de fluido. O traçador que é injetado no fluido, se move ao longo de linhas de corrente e se dispersa simultaneamente, longitudinal e transversalmente, experimentando as propriedades de escoamento do fluido, sendo possível caracterizar hidrodinamicamente o meio poroso através do fluxo, como especificado em Yi et al. [2]. A equação de advecção-dispersão-reação (ADR) descreve o transporte de soluto, que pode representar um traçador injetado num meio poroso, saturado por determinado fluido, conforme retratado em Sun [3]. Devido às complexidades das propriedades existentes no sistema fluido e meio poroso, muitas vezes se impossibilita a aplicação de soluções analíticas para resolver a equação de ADR, portanto, necessita-se desenvolver metodologias numéricas para encontrar soluções discretas para problemas desta natureza, conforme Ertekin et al. [4] e Maliska [5]. Maliska [5] aponta que o método de volumes finitos (FVM) é capaz de conservar propriedades físicas, tanto local quanto globalmente. Neste contexto, o presente artigo tem o objetivo de utilizar um FVM denominado *multipoint flux approximation quasi-local* (MPFA-QL), que aproxima fluxos nas superfícies de

controle (SC) utilizando um estêncil quase local, fundamentado na composição da conormal, em cada volume de controle (VC), descrito em Contreras et al. [6]. Além disso, os autores Contreras et al. [6] mostram que o MPFA-QL é capaz de manter a continuidade do fluxo nas SC e preservar propriedades físicas, como também é um método que pode lidar com tensores completos, malhas não estruturadas e distorcidas. Para discretização do termo advectivo utilizamos um método de primeira ordem usualmente conhecido como *First Order Upwind* (FOU).

## 2 Formulação matemática

A seguir será apresentada a equação governante da concentração no meio poroso, considerando-se algumas hipóteses simplificadoras: o fluido e o meio são incompressíveis, isotérmicos e não interagem entre si, o fluido é newtoniano com viscosidade dinâmica unitária e ocupa todo espaço de vazios, o fluido é miscível (água e traçador) e, por fim, são desconsiderados os efeitos da gravidade e capilaridade no sistema.

A lei de Darcy é fundamental para descrever o transporte de solutos em meios porosos, segundo os autores Bear e Cheng [7] e Chen et al. [8]. Numerosos experimentos mostram que esta lei indica uma relação linear entre velocidade de escoamento do fluido e o gradiente de pressão do mesmo, como expresso em Chen et al. [8], Ewing [9] e Helming [10] pela seguinte equação:

$$\vec{v} = -\frac{\mathbf{K}}{\mu} \nabla p, \quad (1)$$

onde  $\vec{v}$  é a velocidade do fluido no meio poroso,  $\mu$  é a viscosidade do fluido,  $p$  é a pressão do fluido, e  $\mathbf{K}$  representa o tensor de permeabilidade.

Utilizando-se a velocidade de Darcy, eq. (1), aplicando-se a conservação de massa, e considerando as hipóteses simplificadoras mencionadas, representa-se a equação da pressão no meio poroso, como sugerido por Ewing [9], da seguinte maneira:

$$\nabla \cdot (-\mathbf{K} \nabla p) = Q_T, \quad (2)$$

onde  $Q_T = Q/\rho$  representa a vazão volumétrica.

O modelo de advecção-dispersão-reação (ADR) é capaz de descrever a evolução espacial e temporal de substâncias químicas ou biológicas dentro de um fluido, e, pode ser representado através do campo de concentração, que segundo os autores Sun [3] e Hundsdorfer e Verwer [11], é descrito pela seguinte equação:

$$\frac{\partial C}{\partial t} = \nabla \cdot (\mathbf{D}_H \nabla C) - \nabla \cdot (\vec{v} C) + S(\vec{x}) \text{ em } \vec{x} = (x, y) \in \Omega \subset \mathbb{R}^2, \quad (3)$$

onde  $\Omega$  é um domínio aberto subconjunto de  $\mathbb{R}^2$  com  $\partial\Omega$  sendo seu contorno,  $C$  é a concentração do soluto na solução,  $t$  é o tempo em que o fenômeno acontece,  $\vec{v}$  é a velocidade do fluxo, e  $S(\vec{x})$  representa o termo de fonte (ou sumidouro). O coeficiente de dispersão hidrodinâmica é dado por:  $\mathbf{D}_H$  e pode ser obtido pela soma dos tensores de dispersão mecânica ( $\mathbf{D}_{mec}$ ) e difusão molecular ( $\mathbf{D}_{dif}$ ), que de acordo com a lei de Fick, assim como descrito em Bear e Cheng [7], Chivata [12] e Kovarik [13], pode ser expresso como:

$$\mathbf{D}_H = \mathbf{D}_{mec} + \mathbf{D}_{dif} = \alpha_{ijmn} \frac{v_m v_n}{|\vec{v}|} f(Pe, r) + D_o \boldsymbol{\tau} \text{ com } i, j, m, n = 1, 2 \text{ para } \mathbb{R}^2, \quad (4)$$

onde  $\alpha_{ijmn}$  é um tensor de quarta ordem denominado coeficiente de dispersividade no meio poroso,  $v_m$  e  $v_n$  são componentes da velocidade no meio poroso,  $D_o$  é o coeficiente de difusão molecular, e  $\boldsymbol{\tau}$  é um tensor de tortuosidade do meio poroso. Sun [3] expressa a função  $f(Pe, r)$  como:

$$f(Pe, r) = \frac{Pe}{Pe + 4r^2 + 2}, \quad (5)$$

onde  $r$  é um parâmetro que descreve as formas dos canais no meio poroso, conforme Bear e Bachmat [14] e Sun [3]. O número de Peclet ( $Pe$ ) estabelece a relação entre a taxa de transporte por advecção e por difusão molecular em um meio poroso e pode ser definido, Bear [15] e Bear e Cheng [7], pela seguinte equação:

$$Pe = \frac{\vec{v} d}{D_{dif}}, \quad (6)$$

onde  $d$  representa o comprimento característico dos canais no meio poroso.

No sistema de coordenadas no plano cartesiano, os tensores de tortuosidade, de permeabilidade e de

dispersão mecânica, respectivamente, podem ser denotados por:

$$\boldsymbol{\tau} = \begin{bmatrix} \tau_{xx} & \tau_{xy} \\ \tau_{yx} & \tau_{yy} \end{bmatrix}, \mathbf{K} = \begin{bmatrix} k_{xx} & k_{xy} \\ k_{yx} & k_{yy} \end{bmatrix}, \mathbf{D}_{mec} = \begin{bmatrix} D_{xx} & D_{xy} \\ D_{yx} & D_{yy} \end{bmatrix} \text{ em } \vec{x} = (x, y) \in \Omega \subset \mathbb{R}^2. \quad (7)$$

Os componentes do tensor de dispersão mecânica são definidos, Sun [3], pela seguinte expressão:

$$D_{xx} = \frac{\alpha_T v_y^2 + \alpha_L v_x^2}{\phi |v|}, D_{yy} = \frac{\alpha_T v_x^2 + \alpha_L v_y^2}{\phi |v|}, D_{xy} = D_{yx} = \frac{\alpha_L - \alpha_T}{\phi |v|} |v_x v_y|, \quad (8)$$

onde  $\phi$ ,  $\alpha_L$ ,  $\alpha_T$ ,  $v_x$ ,  $v_y$ , são, nesta ordem: a porosidade, os coeficientes de dispersividade longitudinal e transversal, e as contribuições da velocidade nas direções  $x$  e  $y$ .

As condições de contorno e iniciais aplicadas na equação de ADR, permitem particularizar a equação para o problema analisado, Carvalho [16], Chen [17] e Peaceman [18], assim se obtém a distribuição de concentração e o fluxo de dispersão conhecidos ao longo do contorno do domínio. Tem-se, conforme descrito em Sun [3] as seguintes expressões para as condições de contorno:

$$C(\vec{x}_B, t) = g_1(\vec{x}_B, t) \text{ com } 0 < t < T \text{ e } \vec{x}_B = (x, y) \in \Gamma_D \subset \mathbb{R}^2, \quad (9)$$

$$-D_{ij} \frac{\partial C}{\partial x_j} \vec{n}_i \Big|_{\vec{x}_B} = g_2(\vec{x}_B, t) \text{ com } 0 < t < T \text{ e } \vec{x}_B = (x, y) \in \Gamma_N \subset \mathbb{R}^2, \quad (10)$$

onde  $\Gamma_D$  é o contorno de Dirichlet,  $\vec{x}_B$  representa as coordenadas associadas ao contorno,  $g_1(\vec{x}_B, t)$  é uma função escalar prescrita, e  $\Gamma_N$  é o contorno de Neumann,  $\vec{n}_i$  ( $i = 1, 2$ ) são componentes do vetor normal unitário de  $\Gamma_N$ , e  $g_2(\vec{x}_B, t)$  é uma função conhecida. A condição inicial deve ser satisfeita para todo os pontos do domínio ( $\Omega$ ), e representa a distribuição de concentração em um tempo inicial arbitrário,  $t = 0$ , que pode ser expressa, Bear [15] e Sun [3], como:

$$C(\vec{x}, 0) = C_o(\vec{x}) \text{ com } \vec{x} = (x, y) \in \Omega \subset \mathbb{R}^2, \quad (11)$$

onde  $C_o(\vec{x})$  é uma função (concentração) conhecida na posição  $\vec{x}$ .

### 3 Formulação numérica

O método, denominado *multipoint flux approximation quasi-local* (MPFA-QL) foi, inicialmente, desenvolvido para resolver fluxos difusivos em meios porosos e, neste trabalho, aplica-se para o transporte de soluto em meios porosos. Nesta seção, será apresentada a formulação numérica utilizada para discretizar os termos da equação de ADR, eq. (3), onde o MPFA-QL é utilizado para determinar a velocidade de escoamento do fluido, e o fluxo de dispersão hidrodinâmico. Associadamente, o fluxo advectivo será resolvido utilizando-se o FOU (*First Order Upwind*). Detalhes desta formulação podem ser encontrado em Contreras et al. [6] e Chivata [12].

#### 3.1 Formulação numérica da equação de advecção-dispersão-reação

A equação de ADR, descrita na eq. (3), pode ser resolvida na sua forma integral para todo o domínio  $\Omega$  ou pela união finita dos VC. Aplicando-se o teorema do divergente, tem-se:

$$\sum_{\hat{L} \in \mathcal{M}} \int_{\hat{L}} \frac{\partial C}{\partial t} d\hat{L} = \sum_{\hat{L} \in \mathcal{M}} \int_{\partial \hat{L}} \mathbf{D}_H \nabla C \cdot \vec{n} d\partial \hat{L} - \sum_{\hat{L} \in \mathcal{M}} \int_{\partial \hat{L}} \vec{v} C \cdot \vec{n} d\partial \hat{L} + \sum_{\hat{L} \in \mathcal{M}} \int_{\hat{L}} S(\vec{x}) d\hat{L}, \quad (12)$$

onde  $\vec{n}$  é o vetor normal unitário da SC  $\partial \hat{L}$ , o volume infinitesimal das integrais no VC é representado por  $d\hat{L}$ ,  $d\partial \hat{L}$  é a área infinitesimal nas SC.  $\mathcal{M}$  é o conjunto de volumes de controle, onde cada VC é representado por  $\hat{L}$ , em que  $\cup_{\hat{L} \in \mathcal{M}} \hat{L} = \Omega$ .

#### 3.2 Formulação numérica do fluxo hidrodinâmico

O fluxo hidrodinâmico é calculado em cada VC para uma dada discretização e valores do tensor de dispersão hidrodinâmico. Portanto, em cada VC  $\hat{L}$ , se tem um fluxo numérico hidrodinâmico dado em sua forma compacta pela seguinte expressão:

$$\int_{\partial\hat{L}} \mathbf{D}_H \nabla C \cdot \vec{n} d\partial\hat{L} \cong \sum_{IJ \in \mathcal{E}_{\hat{L}}} \vec{\mathcal{F}}_{H(IJ)} \cdot \vec{N}_{(IJ)} = \|\vec{IJ}\| \left( \psi_{\hat{L},IJ} C_{\hat{L}} - \sum_{\gamma=i,j} \alpha_{\hat{L},\gamma(IJ)} C_{\hat{L},\gamma(IJ)} \right), \quad (13)$$

onde  $\vec{\mathcal{F}}_{H(IJ)}$  representa o fluxo numérico hidrodinâmico,  $\vec{N}_{(IJ)}$  é o vetor área normal da face  $IJ$ , os pontos que limitam a face são representados por  $I$  e  $J$ .  $\mathcal{E}_{\hat{L}}$  consiste num conjunto de arestas do VC  $\hat{L}$ , de tal modo que  $\cup_{IJ \in \mathcal{E}_{\hat{L}}} IJ = \partial\hat{L}$ . Os parâmetros  $\psi$  e  $\alpha$ , assim como os detalhes desta formulação numérica, são descritos em Contreras et al. [6].

O método é construído de forma que se mantém a continuidade do fluxo na face  $IJ$  de VC adjacentes. O fluxo único ( $\vec{\mathcal{F}}_{H(IJ)}$ ) é resultado desta continuidade, e, Contreras et al. [6] propõem que seja expresso como:

$$\vec{\mathcal{F}}_{H(IJ)} \cdot \vec{N}_{(IJ)} = \vec{\mathcal{F}}_{H(IJ)}^{\hat{L}} \cdot \vec{N}_{(IJ)} = -\vec{\mathcal{F}}_{H(IJ)}^{\hat{R}} \cdot \vec{N}_{(IJ)} = w_{\hat{L},IJ} \vec{\mathcal{F}}_{H(IJ)}^{\hat{L}} \cdot \vec{N}_{(IJ)} - w_{\hat{R},IJ} \vec{\mathcal{F}}_{H(IJ)}^{\hat{R}} \cdot \vec{N}_{(IJ)}, \quad (14)$$

em que  $\hat{R}$  representa o VC adjacente ao VC  $\hat{L}$ . Os valores de  $w_{\hat{L},IJ}$  e  $w_{\hat{R},IJ}$ , são pesos positivos de contribuição dos fluxos hidrodinâmicos para cada VC adjacente.

### 3.3 Formulação numérica do fluxo advectivo

O fluxo advectivo pode ser aproximado da seguinte maneira, conforme sugerido pelo autor Chivata [12]:

$$\int_{\partial\hat{L}} \vec{v} C \cdot \vec{n} d\partial\hat{L} \cong \sum_{IJ \in \mathcal{E}_{\hat{L}}} C_{(IJ)\hat{L}} (\vec{v} \cdot \vec{N})_{(IJ)\hat{L}}, \quad (15)$$

onde o termo  $\vec{v} \cdot \vec{N}$  é discretizado de modo análogo ao fluxo numérico hidrodinâmico, eq. (13), com a utilização do MPFA-QL, ver detalhes desta formulação em Chivata [12] e Contreras et al. [6]. Aproxima-se a concentração nas faces, eq. (15), com a utilização do FOU para o termo advectivo, conforme descrito em Chivata [12].

### 3.4 Discretização do termo de fonte

A integral do termo de fonte da eq. (12) pode ser expressa adequadamente utilizando o teorema do valor médio no VC  $\hat{L}$ , de maneira que o fluxo é representado em um ponto médio, segundo os autores Contreras [19] e Koren [20] da seguinte forma:

$$\int_{\hat{L}} S(\vec{x}) d\hat{L} = \bar{S}_{\hat{L}} V_{\hat{L}}, \quad (16)$$

em que  $\bar{S}_{\hat{L}}$  e  $V_{\hat{L}}$  representam, respectivamente, o valor médio e o volume do VC  $\hat{L}$ .

## 4 Resultados e discussões

Nesta seção, alguns problemas de *benchmark* são resolvidos para avaliar a robustez e acurácia da formulação numérica proposta. Os problemas são adaptados de Carvalho [16], Chivata [12] e Sun [3]. Considera-se o transporte de um soluto traçador, injetado constantemente à montante, e com concentração  $C$  num meio poroso, homogêneo e isotrópico e com dimensões de 120 x 15 m. Nos exemplos apresentados a seguir, as condições de contorno são impostas de maneira a ter uma solução unidimensional, com isto, a variável  $y$  será temporariamente suprimida.

Para estes problemas não será considerado a existência do termo de fonte, eq. (3), e se tem as seguintes condições inicial e de contorno para a concentração:

$$\begin{aligned} C(\vec{x}, 0) &= 0.00 \text{ (g/m}^3\text{)}, \text{ para } 0 \leq x \leq 120 \text{ m,} \\ C_0 = C(0, t) &= 10.00 \text{ (g/m}^3\text{)}, \text{ para } t \geq 0, \\ C(120, t) &= 0.00 \text{ (g/m}^3\text{)}, \text{ para } t \geq 0. \end{aligned} \quad (17)$$

A solução analítica para este problema é encontrada em Sun [3] e é dada pela seguinte expressão:

$$C(x, t) = \frac{C_0}{2} \left\{ \operatorname{erfc} \left[ \frac{x-vt}{2\sqrt{D_L t}} \right] + \exp \left( \frac{vx}{D_L} \right) \cdot \operatorname{erfc} \left[ \frac{x+vt}{2\sqrt{D_L t}} \right] \right\}, \quad (18)$$

onde  $\exp$  é a função exponencial de base natural, sendo  $D_L = D_{xx}$ , enquanto  $\operatorname{erfc}$  é a função erro complementar e pode ser expressa, de acordo com Dias [21], pela seguinte equação:

$$erf(x) = \frac{2}{\sqrt{\pi}} \int_0^x \exp(-\xi^2) d\xi \text{ e } erfc(x) = 1 - erf(x), \quad (19)$$

onde  $erf$  é a função de erro. O valor de  $\xi$  para o caso em que se ocorre difusão e advecção, sem o termo de decaimento, em meio poroso e unidimensional, segundo Dias [21], pode ser representado por:

$$\xi = \frac{-x+vt}{2\sqrt{D_L t}}. \quad (20)$$

Dados complementares para resolver este problema são encontrados em Carvalho [16] e Chivata [12]. Considera-se, então:  $p(0, t) = 10 \text{ Pa}$ ,  $p(120, t) = 0 \text{ Pa}$ , logo a velocidade média do escoamento para os seguintes problemas é  $v = 1.0 \text{ m/d}$ ,  $D_o = 2 \cdot 10^{-9} \text{ m}^2/\text{d}$ , onde  $D_o$  é coeficiente de difusão molecular,  $CFL = 0.7$ .

A malha utilizada para a discretização espacial é não estruturada, triangular, com espaçamentos regulares médios:  $\Delta x = 7.5000 \text{ m}$ ,  $\Delta x = 3.7500 \text{ m}$ ,  $\Delta x = 1.8750 \text{ m}$ ,  $\Delta x = 0.9375 \text{ m}$ , assim também será analisado o estudo de vários casos de número de Peclet.

#### 4.1 Transporte de soluto traçador com difusão dominante

Estudando o fenômeno com difusão dominante, o coeficiente de dispersividade longitudinal utilizado será  $\alpha_L = 10 \text{ m}$ , e o coeficiente de dispersão longitudinal será  $D_L = 10 \text{ m}^2/\text{d}$ . O tempo de simulação considerado é  $t = 30 \text{ d}$ . Portanto, aplicando os dados para este problema, na formulação proposta se obtém os gráficos da Figura 1 e resultados da Tabela 1, onde é possível verificar a convergência para a solução analítica com o refinamento da malha.

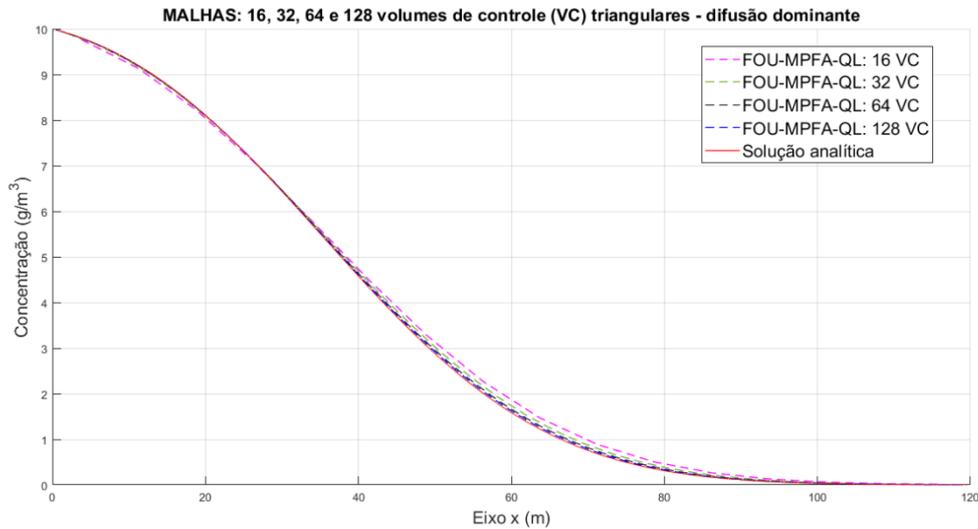


Figura 1. Perfil de concentração obtido para problema de transporte de soluto no meio poroso unidimensional, com difusão dominante, para as malhas:  $\Delta x = 7.5000 \text{ m}$ ,  $\Delta x = 3.7500 \text{ m}$ ,  $\Delta x = 1.8750 \text{ m}$ ,  $\Delta x = 0.9375 \text{ m}$ , e solução analítica

Tabela 1. Análise de acurácia para o problema de transporte unidimensional, do problema com difusão dominante, e variação do número de Peclet ( $Pe$ )

$\Delta x$ (m)	N.º de divisões	$Pe$	$\ E\ _\infty$	$\ E\ _2$	$\ E\ _{RMS}$
7.5000	16	0.75000	0.258958	1.503229	0.034306
3.7500	32	0.37500	0.149923	0.861871	0.013908
1.8750	64	0.18750	0.079155	0.452514	0.005163
0.9375	128	0.09375	0.041164	0.230621	0.001868

Os valores de  $\|E\|_\infty$ ,  $\|E\|_2$  e  $\|E\|_{RMS}$  são, respectivamente, normas  $\infty$ , 2 e  $RMS$  dos erros numéricos

absolutos nos centroides dos VC analisados, descritos em Carvalho [16]. Observa-se que a formulação é convergente e, portanto, a solução numérica tende para o resultado analítico com o refinamento da malha.

#### 4.2 Transporte de soluto traçador com advecção dominante

Estudando o fenômeno com advecção dominante, considera-se que o coeficiente de dispersividade longitudinal utilizado será  $\alpha_L = 0.075 m$ , e o coeficiente de dispersão longitudinal será  $D_L = 0.075 m^2/d$ . O tempo de simulação considerado é  $t = 50 d$ . Portanto, aplicando os dados para este problema, na formulação proposta se obtém os gráficos da Figura 2 e resultados da Tabela 2. Neste caso observa-se a convergência para a solução analítica com o refinamento da malha, porém sendo observada uma difusão numérica provocada pelo FOU, e acentuada pelo carácter advectivo dominante, e como esperado não há oscilações espúrias. Soluções mais acuradas podem ser obtidas considerando-se esquemas de interpolação de ordem mais alta para o termo advectivo, o que será implementado, e apresentado em trabalhos futuros.

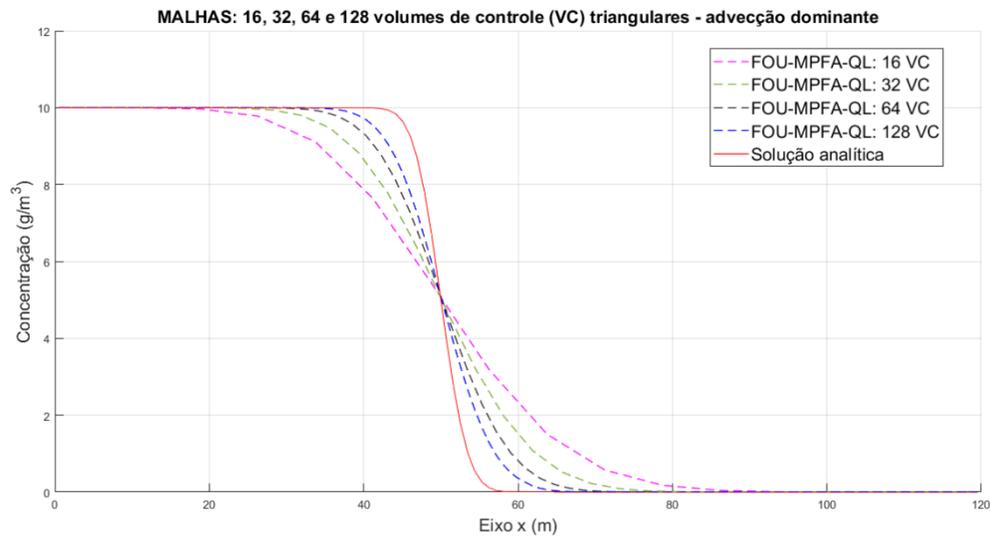


Figura 2. Perfil de concentração obtido para problema de transporte de soluto no meio porosos unidimensional, com advecção dominante, para as malhas:  $\Delta x = 7.5000 m$ ,  $\Delta x = 3.7500 m$ ,  $\Delta x = 1.8750 m$ ,  $\Delta x = 0.9375 m$ , e solução analítica

Tabela 2. Análise de acurácia para o problema de transporte unidimensional, do problema com advecção dominante, e variação do número de Peclet ( $Pe$ )

$\Delta x$ (m)	N.º de divisões	$Pe$	$\ E\ _{\infty}$	$\ E\ _2$	$\ E\ _{RMS}$
7.5000	16	100.00000	3.074286	12.328639	0.281361
3.7500	32	50.00000	2.691980	9.682640	0.156252
1.8750	64	17.00000	2.132363	6.965522	0.079482
0.9375	128	12.50000	1.638309	4.830153	0.039125

Observa-se que com o refinamento da malha, a solução numérica se aproxima da solução analítica, aumentando a acurácia da solução. Além disso, verifica-se que quando a advecção é dominante, os erros apresentados são maiores de que os erros do problema fortemente difusivo, o que é esperado visto que o termo advectivo é discretizado por um esquema de primeira ordem.

## 5 Conclusões

Como esperado, os resultados numéricos obtidos convergiram para a solução analítica à medida que se realizou o refinamento da malha, com o MPFA-QL se apresentando potencialmente eficiente na simulação de

traçadores em meios porosos, apresentando características de monotonicidade, que são importantes em meios heterogêneos e anisotrópicos. Porém, é necessário utilizar métodos de alta ordem para a discretização do termo advectivo para melhorar a acurácia da solução, sem aumentar excessivamente o refinamento da malha, principalmente nas regiões de elevados gradientes, devido à existência de choques (descontinuidades). Com relação aos resultados obtidos até o momento, observou-se que a metodologia apresentada, comporta-se bem ao tratar o problema de transporte em meios porosos, mostrando-se promissora para tratar escoamentos em meios porosos altamente heterogêneos e anisotrópicos.

**Authorship statement.** *The authors hereby confirm that they are the sole liable persons responsible for the authorship of this work, and that all material that has been herein included as part of the present paper is either the property (and authorship) of the authors, or has the permission of the owners to be included here.*

## 6 Referências

- [1] B. Zemel. *Tracers in the oil field*. Elsevier Science, 1995.
- [2] T. Yi et al, “Prediction of interwell tracer flow behaviour in heterogeneous reservoirs”. *Transport in Porous Media*, vol. 17, n. 1, pp. 59–75, 1994.
- [3] N.-Z. Sun. *Mathematical modeling of groundwater pollution*. Springer-Verlag, 1995.
- [4] T. Ertekin et al. *Basic applied reservoir simulation*. Society of Petroleum Engineers, 2001.
- [5] C. R. Maliska. *Transferência de calor e mecânica dos fluidos computacional*. Livros Técnicos e Científicos, 2004.
- [6] F. R. L. Contreras et al, “A new multipoint flux approximation method with a quasi-local stencil (MPFA-QL) for the simulation of diffusion problems in anisotropic and heterogeneous media”. *Applied Mathematical Modelling*, vol. 70, pp. 659–676, 2019.
- [7] J. Bear and A. H.-D. Cheng. *Modeling groundwater flow and contaminant transport*. Springer, 2010.
- [8] Z. Chen et al. *Computational methods for multiphase flows in porous media*. Society for Industrial and Applied Mathematics, 2006.
- [9] R. E. Ewing. *The mathematics of reservoir simulation*. Siam, 1983.
- [10] R. Helming. *Multiphase flow and transport processes in the surface: a contribution to the modeling of hydrosystems*. Springer-Verlag, 1997.
- [11] W. Hundsdorfer and J. Verwer. *Numerical solution of time-dependent advection-diffusion-reaction equations*. Springer-Verlag, 2003.
- [12] N. Y. B. Chivata. *Simulação numérica da equação de advecção-dispersão-reação para um traçador em meios porosos heterogêneos e anisotrópicos por um método de volumes finitos, utilizando malhas poligonais*. MSc thesis, Federal University of Pernambuco, 2016.
- [13] K. Kovarik. *Numerical models in groundwater pollution*. Springer-Verlag, 2000.
- [14] J. Bear and Y. Bachmat. *Introduction to modeling of transport phenomena in porous media*. Kluwer Academic Publishers, 1990.
- [15] J. Bear. *Dynamics of fluids in porous media*. Dover Publications, 1972.
- [16] D. K. E. de. Carvalho. *Uma formulação do método dos volumes finitos com estrutura de dados por aresta para a simulação de escoamentos em meios porosos*. PhD thesis, Federal University of Pernambuco, 2005.
- [17] Z. Chen. *Reservoir simulation: mathematical techniques in oil recovery*. Siam, 2007.
- [18] D. W. Peacemad. *Fundamentals of numerical reservoir simulation*. Elsevier Scientific Publishing Company, 1977.
- [19] F. R. L. Contreras. *Métodos de volumes finitos robustos para a simulação de escoamentos bifásicos de água e óleo em reservatórios de petróleo*. PhD thesis, Federal University of Pernambuco, 2017.
- [20] B. Koren, “A robust upwind discretization method for advection, diffusion and source terms”. In: C. B. Vreugdenhil and B. Koren (ed.), *Numerical methods for advection-diffusion problems*, pp. 117–138.
- [21] N. L. Dias, “Obtenção de uma solução analítica da equação de difusão-advecção com decaimento de 1ª ordem pelo método da transformação de similaridade generalizada”. *RBRH*, vol. 8, n. 1, pp. 181–188, 2003.