
Método Misto e Híbrido: equação de convecção-difusão unidimensional¹

César Guilherme de Almeida, Vítor Willian Rodrigues Braga ²

Paulo Roberto Correa de Almeida Junior ³

Universidade Federal de Uberlândia

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 e 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 ou a concentração da mistura avaliada no centro de cada elemento finito ou o Multiplicador de Lagrange (concentração da mistura avaliada nas extremidades de cada elemento finito). Depois, levando-se em consideração a variável temporal, obtemos um Problema de Valor Inicial (PVI) proveniente da formulação discreta da equação de convecção-difusão e da equação 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 dos métodos propostos, utilizando-se um código que controla oscilações espúrias.

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

1 Introdução

O trabalho de Douglas [6] 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 [7]), 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).

¹cesargui@ufu.br

²vitor.braga@ufu.br

³pholo777@gmail.com

Dentre os métodos que competem com o MMOC citamos o método Localmente Conservativo (LCELM) [2], que segue a mesma metodologia dos dois trabalhos de Douglas mencionados anteriormente, e a classe de métodos denominados Eulerian-Lagrangian Local Adjoint Method (ELLAM [11]). Os métodos do tipo Euleriano-Lagrangiano apresentam uma dificuldade computacional. As aproximações das equações diferenciais envolvem um domínio espaço-tempo e os elementos finitos utilizados na discretização podem assumir formas diferentes, em cada passo de tempo. Essa estrutura não é fácil de ser implementada porque as integrais que aparecem nas formas discretizadas das equações possuem domínio de integração complexo e demandam aproximações numéricas complicadas.

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 [3]. Tal procedimento evitará as dificuldades computacionais apontadas anteriormente, porque a malha computacional não vai variar com o tempo. Para isso, faremos uso do espaço de Raviart-Thomas de mais baixa ordem [12] e consideraremos elementos finitos mistos e híbridos [1, 5, 8] para aproximar as referidas equações. A equação de convecção-difusão apresentada a seguir foi retirada do artigo de Healy e Russell [9]:

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

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 porosidade do meio e a velocidade de escoamento serão constantes e dadas, respectivamente, por $\varphi = 0.3$ e $u = 7.5 \text{ cm/hora}$; o coeficiente de difusão molecular será nulo, isto é, $d_m = 0$; o coeficiente de dispersão longitudinal utilizado nas simulações apresentadas neste trabalho é dado por $d_\ell = 0.01 \text{ cm}$.

O termo de dispersão hidrodinâmica será indicado por $D(u) = |u| d_\ell$. Consideraremos as seguintes condições de fronteira:

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

e a condição inicial será dada por $c(x, 0) = c_0(x) = 0, \forall x \in \Omega$.

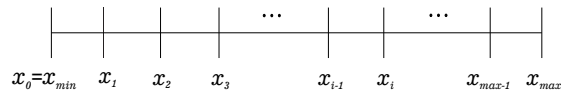


Figura 1: Elementos $E = E_i$ da partição do domínio Ω .

A solução analítica deste problema de valor inicial e de fronteira, considerando-se $\Omega = [0, \infty)$, foi obtida no artigo de Ogata [10]. Tal solução é exibida a seguir:

$$c(x, t) = \frac{1}{2} \left[\operatorname{erfc} \left(\frac{x - u\phi^{-1}t}{2\sqrt{d_\ell u\phi^{-1}t}} \right) + \exp \left(\frac{x}{d_\ell} \right) \operatorname{erfc} \left(\frac{x + u\phi^{-1}t}{2\sqrt{d_\ell u\phi^{-1}t}} \right) \right], \tag{3}$$

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

2 Método Numérico

Os métodos numéricos obtidos com as discretizações mencionadas anteriormente vão dar origem a um sistema linear com matriz tridiagonal. A formulação discreta baseada em elementos finitos mistos e híbridos, juntamente com o espaço de Raviart-Thomas de mais baixa ordem, segue a mesma linha do artigo [5] e os detalhes referentes ao caso unidimensional abordado neste trabalho, incluindo a aproximação que utiliza o Método de Adams-Moulton de ordem 2, podem ser encontrados no artigo [4].

Observações: (i) Seja $[t_{j-1}, t_j]$ um intervalo de tempo, então $\Delta t = t_j - t_{j-1}$ e $f^{(j)}$ representará $f(t_j)$, qualquer que seja a função f definida nesse intervalo. (ii) A notação $f_{E,\beta}$ denotará um valor constante da função f associado à extremidade $\beta = L$ ou $\beta = R$ do elemento E . (iii) $f_{\tilde{E},\beta'}$ denotará um valor constante da função f associado à extremidade β' do elemento \tilde{E} , vizinho do elemento E em relação à extremidade β ; por exemplo, se $\beta = R$ em E , então \tilde{E} será o vizinho da direita e $\beta' = L$. (iv) A função característica de um conjunto Ω_I será denotada por χ_{Ω_I} . (v) Embora, neste trabalho, a velocidade u seja constante e o termo fonte (q) seja nulo, apresentaremos a seguir uma formulação mais geral na qual consideramos a velocidade não constante e o termo fonte não nulo.

Para o caso em que a concentração é avaliada no centro de cada elemento finito, os detalhes para a obtenção do sistema linear podem ser encontrados no artigo [4]. Uma equação do sistema linear envolvendo os Multiplicadores de Lagrange ($\ell_{E,L}$, $\ell_{E,R}$ e $\ell_{\tilde{E},L}$) é exibida abaixo (Eq. 4). Após a resolução desse sistema linear, a concentração, em cada elemento E , será atualizada de acordo com a segunda equação abaixo (5).

$$\begin{aligned} & \ell_{E,L}^{(j)} \frac{1}{h_E} \left\{ A_{R,R}^{-1} d_\ell \left| u_{E,L}^{(j)} \right| - [S_{u,R}]^{(j)} \frac{\Delta t}{2} \frac{1}{\lambda_E^{(j)}} \frac{1}{h_E^2} \left[s_L d_\ell \left| u_{E,L}^{(j)} \right| - h_E u_{E,L}^{(j)} \right] \right\} + \\ & \ell_{E,R}^{(j)} \left\{ \frac{1}{h_E} \left[A_{R,R}^{-1} d_\ell \left| u_{E,R}^{(j)} \right| - [S_{u,R}]^{(j)} \frac{\Delta t}{2} \frac{1}{\lambda_E^{(j)}} \frac{1}{h_E^2} \left[s_R d_\ell \left| u_{E,R}^{(j)} \right| \right] - h_E u_{E,R}^{(j)} \right] + \right. \\ & \left. \frac{1}{h_{\tilde{E}}} \left[A_{L,L}^{-1} d_\ell \left| u_{\tilde{E},L}^{(j)} \right| - [\tilde{S}_{u,L}]^{(j)} \frac{\Delta t}{2} \frac{1}{\lambda_{\tilde{E}}^{(j)}} \frac{1}{h_{\tilde{E}}^2} \left[s_L \cdot d_\ell \left| u_{\tilde{E},L}^{(j)} \right| - h_{\tilde{E}} u_{\tilde{E},L}^{(j)} \right] \right] \right\} + \\ & \ell_{\tilde{E},R}^{(j)} \frac{1}{h_{\tilde{E}}} \left\{ A_{L,R}^{-1} d_\ell \left| u_{\tilde{E},R}^{(j)} \right| - [\tilde{S}_{u,L}]^{(j)} \frac{\Delta t}{2} \frac{1}{\lambda_{\tilde{E}}^{(j)}} \frac{1}{h_{\tilde{E}}^2} \left[s_L d_\ell \left| u_{\tilde{E},R}^{(j)} \right| - h_{\tilde{E}} u_{\tilde{E},R}^{(j)} \right] \right\} = \\ & \frac{1}{h_E} [S_{u,R}]^{(j)} \frac{1}{\lambda_E^{(j)}} \left(\frac{\Delta t}{2} \chi_{\Omega_I}(x) q_E^{(j)} + F_E^{(j-1)} \right) + \\ & \frac{1}{h_{\tilde{E}}} [\tilde{S}_{u,L}]^{(j)} \frac{1}{\lambda_{\tilde{E}}^{(j)}} \left(\frac{\Delta t}{2} \chi_{\Omega_I}(x) q_{\tilde{E}}^{(j)} + F_{\tilde{E}}^{(j-1)} \right), \quad (4) \end{aligned}$$

4

$$c_E^{(j)} = \frac{\Delta t}{2\lambda_E^{(j)} h_E^2} \left[d_\ell \left(s_L |u_{E,L}^{(j)}| \ell_{E,L}^{(j)} + s_R |u_{E,R}^{(j)}| \ell_{E,R}^{(j)} \right) - h_E U_{E,R,L}^{(j)}(\ell) + h_E^2 \chi_{\Omega_I}(x) q_E^{(j)} \right] + \frac{1}{\lambda_E^{(j)}} F_E^{(j-1)}, \quad (5)$$

onde $A_E^{-1} = \begin{pmatrix} 4 & 2 \\ 2 & 4 \end{pmatrix} = A^{-1}$ (a matriz não se modifica de um elemento para o outro),

$$\lambda_E = \varphi_E + \frac{\Delta t}{2h_E^2} d_\ell (s_L |u_{E,L}| + s_R |u_{E,R}|) - \frac{\Delta t}{2} \chi_{\Omega_P}(x) q_E;$$

s_R é a soma dos elementos da linha 1 de A^{-1} ; s_L é a soma dos elementos da linha 2 de A^{-1} ; Ω_P representa o poço de produção; Ω_I representa o poço de injeção;

$$[S_{u,\beta}] = d_\ell \left[A_{\beta,\beta}^{-1} |u_{E,\beta}^{(j)}| + A_{\beta,\beta'}^{-1} |u_{E,\beta'}^{(j)}| \right],$$

se $\beta = R \Rightarrow \beta' = L$, se $\beta = L \Rightarrow \beta' = R$, $\tilde{S}_{u,\beta}$ está associado ao elemento \tilde{E} ;

$$F_E^{(j-1)} = \varphi_E c_E^{(j-1)} - \frac{\Delta t}{2h_E} \left(V_{E,R,L}^{(j-1)} + U_{E,R,L}^{(j-1)}(\ell) - h_E \tilde{c}_E^{(j-1)} q_E^{(j-1)} \right);$$

$$V_{E,R,L} = \frac{1}{h_E} \left[d_\ell \left(s_L |u_{E,L}| (c_E - \ell_{E,L}) + s_R |u_{E,R}| (c_E - \ell_{E,R}) \right) \right] \text{ e } U_{E,R,L}(\ell) = \ell_{E,R} u_{E,R} + \ell_{E,L} u_{E,L}.$$

3 Métodos não-oscilatórios

Para corrigir o surgimento de oscilações espúrias (não genuínas) 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. Para isso, estabelecemos um valor limite ($L_c = 0,97$) 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 primeiramente um tipo de interpolação com polinômios constantes para atribuir um valor adequado para a concentração em questão (código exibido a seguir).

Depois da correção da oscilação, usamos interpolação linear, na vizinhança da região de transição, para obter um perfil adequado da curva de concentração. O algoritmo apresentado a seguir não contém informações relacionadas ao estágio posterior à correção da oscilação; porém todos os resultados das simulações foram obtidos executando-se o algoritmo completo de pós-processamento. Devido à limitação de números de páginas, não exibiremos as figuras que contêm perfis de concentração oscilatórios.

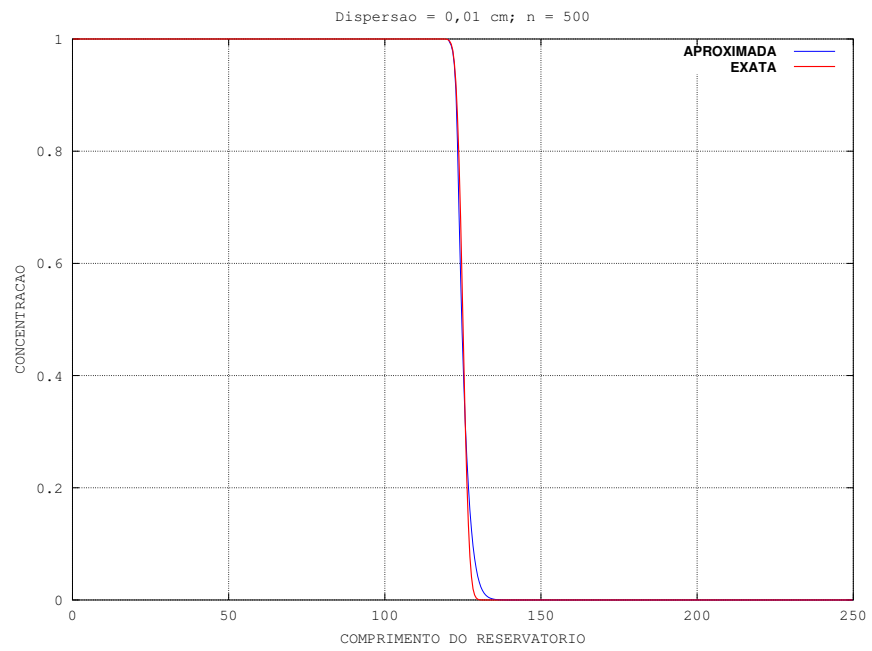


Figura 2: Adams–Moulton, concentraç~ao.

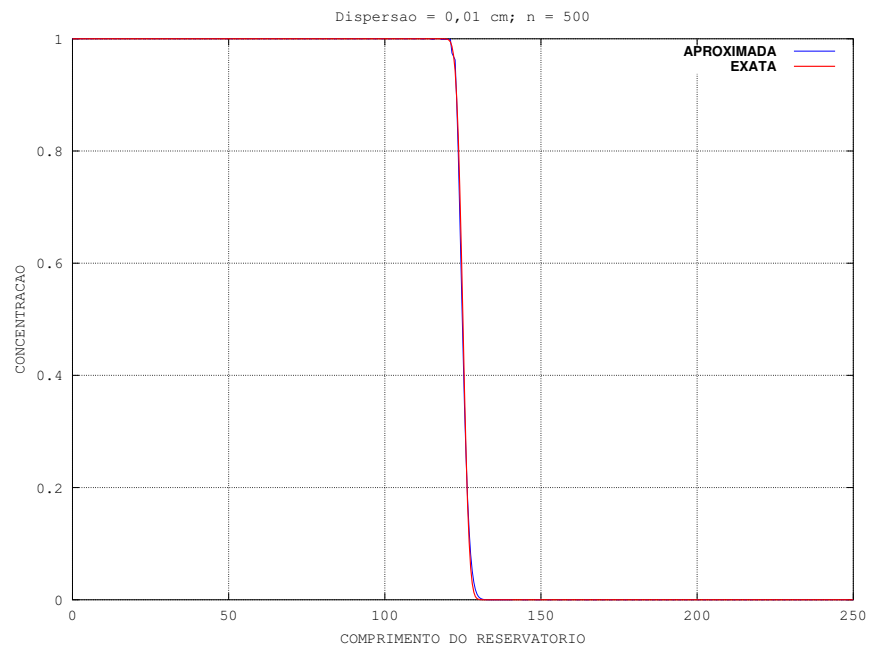


Figura 3: Adams–Moulton, Multiplicador de Lagrange.

A etapa inicial do algoritmo consiste em obter o primeiro elemento no qual a con-

contração assume valor maior do que 1, partindo-se da extremidade superior do domínio, onde os valores de contração estão próximos de zero, e indo em direção à extremidade inferior, onde os valores de contração estão próximos de 1.

- Primeira etapa do Algoritmo

```

Imax = nx; flag = 1;
para k variando de 1 até nx-1
    se (flag < 0)
        se (cj(nx-k) > 1.0)
            Imax = nx-k;
            flag = -1;
fim.
    
```

A segunda parte do Algoritmo consiste em corrigir as oscilações provenientes de erros numéricos. Usamos interpolação linear para obter o valor da contração no ponto médio do elemento $E_{I_{max}}$.

- Segunda etapa do Algoritmo

```

se (Imax < nx) % Interpol. linear para obter a contração na posição Imax
    fX0 = cj(Imax+1); X0 = xpm(Imax+1); % xpm(i) é o ponto médio do elemento  $E_i$ 
    fX1 = cj(Imax + 2); X1 = xpm(Imax + 2); X = xpm(Imax);
    cj(Imax) = fX0*( (X - X1)/(X0 - X1) ) + fX1*( (X - X0)/(X1 - X0) );
para i variando de 1 até Imax
    Med = (cj(i) + cj(i+1))/2;
    se (Med > 0.97)
        mx = abs(1 - cj(i)); mxr = abs(1 - cj(i+1));
        se (mx < mxr)
            cj(i+1) = cj(i);
        senão
            cj(i) = cj(i+1).
fim.
    
```

4 Simulações Numéricas

A Tabela 1 contém os resultados referentes às simulações com $d_\ell = 0,01 \text{ cm}$, $n_x = 500$, $T = 5$ horas e dois tipos diferentes de discretizações. Em uma delas, veja a Figura 2, utilizamos a contração (**C**) como variável principal e na outra, veja a Figura 3, utilizamos os Multiplicadores de Lagrange (**ML**). O erro (média quadrática) entre a solução numérica e a solução analítica (Eq. 3) foram comparados com o erro obtido por Russell [9], utilizando o Método Modificado das Características (MMOC). Observe que a simulação realizada com os Multiplicadores de Lagrange gerou um erro menor do que o erro obtido com o MMOC.

Tabela 1: Simulações utilizando o Método de Adams-Moulton com $n_x = 500$, para $T = 5$ horas.

n_x	Erro MMOC	Erro C	Erro ML
500	0.12×10^{-3}	0.13675×10^{-3}	0.24228×10^{-4}

5 Conclusões

Devido ao bom desempenho do Método de Adams–Moulton, agregado à discretização por elementos finitos mistos e híbridos, acreditamos que o estudo realizado para o caso unidimensional possa ser estendido para o bidimensional, sem grandes alterações, desde que sejam utilizados reservatório retangular e malha computacional estruturada com elementos retangulares. Os resultados apresentados para o caso unidimensional indicam que os novos métodos são competitivos com os já conhecidos métodos Euleriano-Lagrangeanos.

Referências

- [1] 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*, **21**: 573–605, 2002. ISSN: 0101–8205.
- [2] 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*, **295**: 37–48, 2002.
- [3] C. G. Almeida. *Cálculo Numérico, Curso de Licenciatura em Matemática – PARFOR*. Universidade Federal de Uberlândia, CEaD, Uberlândia/MG, 219 p., 2015.
- [4] C. G. Almeida, A. A. Santana e S. A. Enriquez-Remigio. Aspectos teóricos da modelagem de fluxos contínuos em meios porosos 1D, *Proceeding Series of the Brazilian Society of Computational and Applied Mathematics*, volume 5, N. 1, 2017. DOI: 10.5540/03.2017.005.01.0387.
- [5] 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*, volume 14, 6: 329–348, 1991.
- [6] J. Douglas, Jr.. Simulation of miscible displacement in porous media by a modified method of characteristic procedure, *Numerical Analysis, Lecture Notes in Mathematics*, Springer-Verlag, Berlin, volume 912, páginas 64–70, 1982.
- [7] 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.*, **19(5)**: 871–885, 1982.
- [8] J. Douglas Jr., F. Furtado and F. Pereira. On the numerical simulation of waterflooding of heterogeneous petroleum reservoirs, *Computational Geosciences*, volume 2, 1: 155-190, 1997. ISSN: 1420-0597.
- [9] R. W. Healy and T. F. Russell. Efficient implementation of the modified method of characteristics in finite-difference models of solute transport, *Proceedings of the Fourth International Conference on Solving Ground Water Problems with Models*, 483–492, 1989.
- [10] A. Ogata. Theory of dispersion in a granular medium, *U.S. Geological Survey Professional Paper*, **411–I**, 1970.
- [11] 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*, 2012. DOI:10.1002/fld.2578.
- [12] P. A. Raviart and J. M. Thomas. A Mixed Finite Element Method for Second Order Elliptic Problems. In *Mathematical Aspects of the Finite Element Method*, Lecture Notes in Mathematics. Springer-Verlag, Berlin, New York, 1977. DOI:10.1007/BFb0064470.