# Equação do transporte do CO2

No transporte de espécies dissolvida em meio aquoso pode-se considerar o CO2 sendo o soluto e água solvente. Assim o transporte de CO2 é dado por dois fenômenos físico, a difusão molecular causa pelo movimento browniano molecular e o transporte de massa causado pelo escoamento da massa de água. Esse fenômeno físico representado pela seguinte equação [1],



Onde é número de mols, é fluxo convectivo de CO2 e *Q* o termo fonte. O fluxo convectivo por sua vez é:



Onde é é coeficiente de difusão molecular efetivo, é a concentração molar de CO2, é permeabilidade intrínseca do meio poroso, é a viscosidade dinâmica do fluido (solvente) e a poro pressão do fluido . Ambos os termos do lado direito da equação são relações constitutivas fenomenológicas. A primeira parcela, o fluxo difusivo, é conhecida como lei de *Fick.* Já a segunda parcela, o fluxo advectivo, é conhecida como lei de *Darcy*.

A lei de *Darcy* fornece a velocidade de infiltração do fluido no meio poroso, podendo assim se escrita como:



A concentração molar se relaciona com o número de mols através da porosidade do meio poroso através de:



Considerando as equações , e pode escrever a seguinte equação de transporte em sua forma mais usual:



Fornecidos ,  e  aliados com as condições de contorno e inicias adequadas pode-se resolver o problema de transporte de CO2. É importante salientar ,  vem diretamente da resolução do problema poro mecânico. Já o coeficiente de difusão pode ser considerado constante ou em função da porosidade .

Para definir as condições de contorno e iniciais é preciso primeiramente definir o domínio de validade da equação . Na Figura 1 o domínio genérico  é delimitado por duas superfícies  e . No contorno é onde são prescritos os valores de. Já no contorno  é onde são prescritos os fluxos.







Figura 1- Domínio de solução

Matematicamente as condições de contorno podem ser escritas como:





As condições iniciais por sua vez são:



# Implementação em elementos finitos

Para aplicação do método dos elementos finitos a equação precisa ser levemente modificada. A duas derivadas do lado esquerdo precisam ser desenvolvidas, utilizando regras básicas de derivação pode-se escrever que: 



Onde



Para aplicação do método dos resíduos ponderados, primeiros definimos as variáveis aproximadas:





Além de uma função peso dada por,



Nas equações acima são as funções de ponderação. Os coeficiente , e  são constantes, o coeficiente é arbitrários e os eserão calculados.

Devido ao termo advectivos o método de *Galerkin* pode produzir produzindo oscilações espúrias, para contornar este problema existe a formulação *Streamline upwind Petrov-Galerkin* (*SUPG*) [2].

# Formulaçãode *Galerkin*

O primeiro passo para se obter a formulação de *Galerkin* é utilizar o resíduos ponderados utilizando as aproximações na equação obtém-se o resíduo,



O resíduo será utilizado posteriormente no método dos resíduos ponderados,



Utilizando a integração por partes do termo difusivo e as condições de contorno chega-se à:



Substituindo as aproximações e chega-se a formulação semi-discreta matricial,



Os coeficientes são dados por,













# Formulação SUPG

Para se obter a formulação SUPG basta adicionar o termo  à formulação de *Galerkin*. Os termos novos são atribuídos ao resíduo a nível de elemento. A formulação variacional se escreve,



O símbolo indica a acumulação dos coeficientes das matrizes de elementos nos graus de liberdade globais. Matricialmente pode-se escrever,



As matrizes ,  e  são exatamente as mesmas da formulação do *Galerkin*, vindos do primeiro termo da equação . A integração por partes não é aplicada no segundo que geral as matrizes ,  e . Para elementos lineares isso implica que o termo difusivo é nulo pois . As contribuições dos elementos para esses termos novos são dadas por,











O parâmetro de *upwind* é calculado através



Onde é calculado através,



onde é a tangente hiperbólica de x eé número de *Peclet* da malha dado por,



O número de *Peclet* mede a relação entre o fluxo advectivos e difusivo. Valores menores que um indicam que o problema é predominantemente difusivo. Já valores maiores que um indica que o problema é predominantemente advectivos. Por sua vez valores próximos de um indicam que ambos os fluxos são importantes.

# Integração temporal

A equação integrada temporal é,



Onde *n* indica o nível temporal. Utilizou-se a e por comodidade de notação apenas.

O primeiro passo é aproximar a derivada temporal pela regra do trapézio, ou seja,



Com o sendo uma constante que varia entre 0 e 1. O valor  para um intervalo de tempo  pode ser escrito como,



Utilizando agora a equação na equação escreve-se,



Onde é dado por,



Agora a equação pode ser escrita como,



Definido a matriz de massa equivalente como,



Assim o algoritmo de solução pode ser resumido como,



Onde e  são as condições iniciais.

# Elemento de barra linear

Para o elemento de linear unidimensional tem-se que as funções de interpolação são dadas por:





onde  são as coordenadas locais do elemento. A Figura 2 mostra o elemento nas coordenadas globais -e locais -.

Figura 2 - Elemento uniaxial linear.

1

2

 1

 1





A transformação geométrica entre as variáveis locais e globais é dada por:



O jacobiano da transformação pode ser calculado pela seguinte diferenciação



onde L é a dimensão real do elemento. As derivadas da função de interpolação em relação a pode ser calculada como,



Os coeficientes ficam:



Considerando as integrações analíticas,



Pode-se escrever os coeficientes finalmente como,



Os coeficientes ficam:



A velocidade pode ser interpolada como se segue:



Assim tem-se que:



Portanto,



Considerando as integrações analíticas,



Os coeficientes ficam definidos como,



Os coeficientes ficam,



Pode-se escrever os coeficientes como,



O valor  é dado por,



Os coeficientes ficam,



Pode-se escrever os coeficientescomo,



Os coeficientes ficam,



Pode-se escrever os coeficientes finalmente como,



Os coeficientes ficam,



A integral é dada por,



Pode-se escrever os coeficientes finalmente como,



# Verificação numérica

# Caso 1

A Figura 3 apresenta do problema de transporte convectivo a ser resolvido. No lado esquerdo temos a entrada e no lado direito a saída. A concentração nos extremos é dada. Para o caso onde a porosidade, velocidade e o coeficientes de difusão são constantes existem uma solução exata para o regime permanente. O problema será tratado como adimensional, por isso foi utilizada a notação .

|  |
| --- |
|  |
| Figura 3- Domínio e condições do caso 1 de verificação. |

A solução exata para o regime permanente é dada por [3]:



Onde  é a concentração de desejada, é a condição de contorno do lado esquerdo e é a condição de contorno do lado direito. Dois casos serão considerados: para a velocidade de 0.5 e para velocidade de 1.0. A porosidade () é considerada como 1 e a difusividade efetiva () como 0.04 para ambos os casos. A dimensão do domínio é 1 e foi discretizado em 10 elementos de mesmo tamanho.

A Figura 4 apresenta o resultado para velocidade 0.5. Nota-se que tanto o resultado do método de *Galerkin* quanto o *SUPG* aproximam-se extremamente bem na curva analítica. Os bons resultados do método de *Galerkin* deve ao fato do número baixo de *Peclet* da malha, este fato ficar claro no para o próximo caso.

|  |
| --- |
|  |
| Figura 4 - Solução do caso 1 para velocidade de 0.5. |

A Figura 5 apresenta o resultado para velocidade 1.0. Nota-se o resultado do método de *Galerkin* apresentou oscilações espúrias. Já o *SUPG* aproximou-se extremamente bem na curva analítica novamente. O resultado do método de *Galerkin* pode ser melhorado com o refinamento. Porém quase sempre são necessários um grande número de elementos para estabilizar método de *Galerkin*. Portanto, sempre é melhor utilizar a formulação *SUPG.*

|  |
| --- |
|  |
| Figura 5 - Solução do caso 1 para velocidade de 1.0. |

# Caso 2

A Figura 6 apresenta do problema de transporte convectivo a ser resolvido. No lado esquerdo temos a entrada e no lado direito a saída. A concentração no extremo esquerdo é dada. No extremo direito o fluxo difusivo é nulo, porém advectivos não, portanto o é advectado para fora do domino pelo campo de velocidade. O problema será tratado como adimensional, por isso foi utilizada a notação .

|  |
| --- |
|  |
| Figura 6- Domínio e condições do caso 2 de verificação. |

Apenas um caso será considerado, as propriedades são: a velocidade () é 1.0; a porosidade () é 1 o 1 e a difusividade efetiva () é 0.01. A dimensão do domínio é 1 e foi discretizado em 100 elementos de mesmo tamanho. O foi de 0.01. A integração temporal foi efetuada com  0.5 e 1.0, portanto existem duas soluções. Para a comparação dos resultados oi utilizado o software *OpenFOAM*.

A Figura 7 apresenta o resultado para o tempo 0.25. A frente de e bastante similar nas tês curvas. Para os resultados ficaram extremamente próximos do *OpenFOAM.* Já para  há uma leve diferença, a diferença e causada pele difusividade numérica característica do método de *Euler.*

|  |
| --- |
|  |
| Figura 7 - Solução do caso 2 no tempo 0.25. |

A Figura 8 apresenta o resultado para o tempo 0.50. Todas as considerações feitas na Figura 7 se aplica novamente.

|  |
| --- |
|  |
| Figura 8 - Solução do caso 2 no tempo 0.5 |

Referencias:

[1] - Fabbri, A., Jacquemet, N., & Sevedi, D. M. (2012). A chemo-poromechanical model of oilwell cement carbonatation under CO2 geological storage conditions. *Cement and Concrete Research vol. 42*, pp. 8-19.

[2] - Brooks, A N and Hughes, T J (1982). Streamline upwind Petrov-Galerkin formulation for  
convection-dominated flows with particular emphasis on the incompressible NavierStokes equations. *Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering*, vol.  
32, pp. 199-259.

[3] - Versteeg, H. K., and W. Malalasekera. 2007. *An introduction to computational fluid dynamics: the finite volume method*. Harlow, England: Pearson Education Ltd.