

# ANALISIS DE LAS SOLUCIONES NUMERICAS DE LA ECUACION DE CONVECCION - DISPERSION - ADSORCION

PATRICIA M. CARPANO\*  
CARLOS A. GRATTONI\*  
SUSANA C. GABBANELLI\*  
y  
MIRTHA S. BIDNER\*\*

*\*Departamento de Ingeniería Química  
Facultad de Ingeniería  
Universidad Nacional de La Plata  
1 esq. 47, 1900 La Plata, Argentina.*

*\*\*Departamento de Ingeniería Química  
Facultad de Ingeniería  
Universidad de Buenos Aires  
Pabellón de Industrias, Ciudad Universitaria  
1427 Buenos Aires, Argentina*

## RESUMEN

La ecuación diferencial parcial no lineal que describe el flujo bicomponente miscible a través de medios porosos, con dispersión y adsorción del tipo Langmuir, se resuelve numéricamente. Se aplican cuatro métodos diferentes: explícito, Barakat-Clark, Crank-Nicolson y ecuaciones diferenciales ordinarias. Se estima el error de truncación de los distintos métodos. Se obtienen las condiciones de estabilidad de los mismos para el caso de adsorción lineal y se infieren las condiciones de estabilidad para la ecuación no lineal.

A efectos de comparar los cuatro métodos, se siguen dos caminos. Primero, se define un error global que evalúa las diferencias entre cada una de las soluciones numéricas y la solución analítica que representa el caso de adsorción lineal. Utilizando este error se comparan las soluciones numéricas entre sí. Además se estudia la influencia de los parámetros de la ecuación diferencial y de los incrementos espaciales y temporales de la discretización en las soluciones obtenidas. En especial, se discute el método Barakat-Clark. Segundo, para la ecuación con adsorción no lineal, las cuatro soluciones numéricas se comparan contra resultados experimentales, por medio de un error que evalúa las diferencias entre cada solución y los datos experimentales.

## SUMMARY

The partial differential nonlinear equation which describes the bicomponent miscible flow through porous media with dispersion and Langmuir equilibrium adsorption is numerically worked out. Four different methods are applied: explicit, Barakat-Clark, Crank-Nicolson and ordinary differential equations. Truncation error of the methods are estimated.

Recibido: Junio 1987

Conditions of stability are obtained for the linear adsorption case; they are inferred for the non linear adsorption equation.

In order to compare the four methods, two different approaches are followed. First, a global error which evaluates the differences among the analytical solution of the linear adsorption equation and the numerical results, is defined. This error is used to compare numerical solutions to one another. Besides, the influence of the parameters of the PDE and the influence of the space and time increments on the numerical solutions are studied. In particular, the Barakat-Clark method is discussed. Second, the four numerical solutions of the nonlinear differential equation are compared against experimental results, by means of an error which evaluates the differences between each numerical solution and the experimental data.

## INTRODUCCION

La ecuación diferencial parcial no lineal, denominada de convección-dispersión-adsorción del tipo Langmuir, describe muchos procesos físicos. En particular, es de interés en el transporte de un soluto a través de un medio poroso adsorbente.

Algunos autores han resuelto analítica y numéricamente simplificaciones de esta ecuación. Entre otros Coats y Smith<sup>1</sup> presentaron soluciones analíticas de la ecuación de convección - dispersión (sin adsorción) para distintas condiciones de borde. Gupta y Greenkorn<sup>2</sup> la resolvieron por diferencias finitas pero considerando una adsorción bilineal. Satter y otros<sup>3</sup> proponen soluciones numéricas de la ecuación completa, extendiendo el método de Barakat-Clark<sup>4</sup> originalmente utilizado para resolver la ecuación de difusión.

El objetivo de este trabajo es aplicar cuatro métodos para resolver la ecuación mencionada, con su correspondiente análisis del error de truncación. El estudio de la estabilidad se hace sobre el caso de adsorción lineal y se infiere para la ecuación no lineal.

A los efectos de comparar los resultados numéricos entre sí y con la solución analítica correspondiente al caso de adsorción lineal, se calcula un error global<sup>5</sup>. Para los distintos métodos se analiza la influencia de los parámetros de la ecuación diferencial y los parámetros de la discretización en el error global. Se comparan los tiempos de CPU utilizados. Se analizan los resultados obtenidos, en especial los del método de Barakat-Clark.

La convergencia de las cuatro soluciones numéricas de la ecuación no lineal es estudiada empíricamente, comparando dichas soluciones con datos experimentales de laboratorio obtenidos por Szabo<sup>6</sup>.

## MODELO MATEMATICO

La ecuación de transporte que caracteriza los fenómenos de convección, dispersión y adsorción de un soluto que fluye a través de un medio poroso puede ser escrita como

$$\frac{\partial \psi}{\partial \tau} + \frac{\partial \psi_r}{\partial \tau} = K \frac{\partial^2 \psi}{\partial \chi^2} - \nu \frac{\partial \psi}{\partial \chi} \quad (1)$$

siendo  $\psi$ , la concentración de soluto;  $\psi_r$ , la adsorción del soluto en el medio poroso;  $K$ , el coeficiente de dispersión;  $\nu$ , la velocidad intersticial;  $\tau$ , la coordenada temporal; y  $\chi$ , la espacial.

La ecuación (1) supone:

- medio poroso homogéneo con sección transversal y porosidad constantes;
- flujo isotérmico y unidimensional;
- velocidad intersticial (obtenida dividiendo la velocidad Darcy por la porosidad), constante;
- dispersión del soluto sólo en la dirección longitudinal;
- coeficiente de dispersión independiente de la concentración química;
- no hay reacción química entre la solución inyectada y la roca o el fluido in-situ.

El término  $\frac{\partial \psi_r}{\partial \tau}$  en (1) representa la adsorción de soluto en la roca, considerando que ésta es gobernada por la isoterma de Langmuir, que supone equilibrio instantáneo,

$$\psi_r = \frac{a\psi}{1 + \beta\psi} \quad (2)$$

El parámetro de adsorción  $a$  es adimensional y el parámetro  $\beta$  tiene unidades de inversa de la concentración.

Diferenciando la ecuación (2) e introduciéndola en la ecuación (1), resulta:

$$g(\psi) \frac{\partial \psi}{\partial \tau} = K \frac{\partial^2 \psi}{\partial \chi^2} - \nu \frac{\partial \psi}{\partial \chi} \quad (3)$$

donde

$$g(\psi) = 1 + \left[ \frac{a}{(1 + \beta\psi)^2} \right]$$

El medio poroso puede suponerse semi-infinito o finito, dando lugar a distintas condiciones de borde<sup>1</sup>. En nuestra comparación utilizamos la siguiente condición de borde:

$$\begin{cases} \psi(0, \tau) = \psi_0 & ; \tau > 0 \\ \psi(\chi, \tau) \rightarrow 0 & \text{si } \chi \rightarrow \infty ; \tau > 0 \end{cases} \quad (4)$$

donde  $\psi_0$  es la concentración de inyección.

La condición inicial es,

$$\psi(\chi, 0) = 0 \quad (5)$$

Se definen las siguientes variables adimensionales:

$$C = \frac{\psi}{\psi_0} \quad x = \frac{X}{l} \quad t = \frac{\nu\tau}{l} \quad (6)$$

y parámetros adimensionales

$$N_{Pe} = \frac{\nu l}{K} \quad b = \beta\psi_0 \quad (7)$$

siendo  $N_{Pe}$  el número de Péclet;  $l$  la longitud del medio poroso y  $b$  parámetro de adsorción adimensional.

Las ecuaciones (3), (4) y (5) resultan

$$g(C) \frac{\partial C}{\partial t} = \frac{1}{N_{Pe}} \frac{\partial^2 C}{\partial x^2} - \frac{\partial C}{\partial x} \quad (8)$$

donde

$$g(c) = 1 + \left[ \frac{a}{(1 + bC)^2} \right]$$

$$\begin{cases} C(0, t) = 1 & ; t > 0 \\ C(x, t) \rightarrow 0 \text{ si } x \rightarrow \infty & ; t > 0 \end{cases} \quad (9)$$

$$C(x, 0) = 0 \quad (10)$$

### SOLUCIONES ANALITICAS

Las soluciones analíticas para la ecuación de convección-dispersión ( $g(C) = 1$ ) y distintas condiciones de borde están dadas en la bibliografía<sup>1</sup>. Considerando las ecs. (8), (9) y (10), la solución está representada por

$$C = \frac{1}{2} \left[ \operatorname{erfc} \left( \frac{\sqrt{N_{Pe}}}{2} \frac{x-t}{\sqrt{t}} \right) + e^{N_{Pe}x} \operatorname{erfc} \left( \frac{\sqrt{N_{Pe}}}{2} \frac{x+t}{\sqrt{t}} \right) \right] \quad (11)$$

que puede ser extendida al caso de adsorción lineal ( $g(C) = 1 + a$ ) con sólo cambiar  $t$  por  $t/(1 + a)$ .

## SOLUCIONES NUMERICAS

La ecuación (8) fue resuelta numéricamente, considerando  $x = 5$  como infinito, en una computadora IBM 4361 por los métodos que se describen a continuación, donde  $c, u$  y  $w$  representan las aproximaciones numéricas de  $C$ .

1. Método explícito<sup>5</sup>, (E): aproxima la ecuación (8) de una manera simple, en forma centrada alrededor del punto  $(i, n)$ :

$$\frac{c_i^{n+1} - c_i^n}{\Delta t} \left[ 1 + \frac{a}{(1 + bc_i^n)^2} \right] = \frac{1}{N_{Pe}} \left[ \frac{c_{i+1}^n - 2c_i^n + c_{i-1}^n}{\Delta x^2} \right] - \left[ \frac{c_{i+1}^n - c_{i-1}^n}{2\Delta x} \right] \quad (12)$$

2. Método de Barakat-Clark<sup>4</sup>, (BC): la ecuación es aproximada por las siguientes expresiones en diferencias finitas.

- "Forward", (F)

$$\begin{aligned} & \frac{u_i^{n+1} - u_i^n}{\Delta t} \left[ 1 + \frac{a}{(1 + bu_i^n)^2} \right] = \\ & = \frac{1}{N_{Pe}} \left[ \frac{u_{i+1}^n - u_i^n - u_i^{n+1} + u_{i-1}^{n+1}}{\Delta x^2} \right] - \left[ \frac{u_i^{n+1} - u_{i-1}^{n+1}}{2\Delta x} + \frac{u_{i+1}^n - u_i^n}{2\Delta x} \right] \end{aligned} \quad (13)$$

- "Backward", (B)

$$\begin{aligned} & \frac{w_i^{n+1} - w_i^n}{\Delta t} \left[ 1 + \frac{a}{(1 + bw_i^n)^2} \right] = \\ & = \frac{1}{N_{Pe}} \left[ \frac{w_{i+1}^{n+1} - w_i^{n+1} - w_i^n + w_{i-1}^n}{\Delta x^2} \right] - \left[ \frac{w_i^n - w_{i-1}^n}{2\Delta x} + \frac{w_{i+1}^{n+1} - w_i^{n+1}}{2\Delta x} \right] \end{aligned} \quad (14)$$

La concentración  $c_i^{n+1}$  puede ser evaluada por:

$$c_i^{n+1} = \frac{(u_i^{n+1} + w_i^{n+1})}{2} \quad (15)$$

$u_i^{n+1}$ , la solución de (F), se calcula explícitamente a partir de la ecuación (13) desde  $x = 0$  en una sucesión de  $i$  crecientes. De la misma manera,  $w_i^{n+1}$ , la solución

de (B), se calcula de la ecuación (14) comenzando en  $x = 5$  en una sucesión de  $i$  decrecientes.

3. Método de Crank-Nicolson<sup>5</sup>, (CN): al aplicarlo a la ecuación (8) resulta

$$\begin{aligned} & \frac{c_i^{n+1} - c_i^n}{\Delta t} \left[ 1 + \frac{a}{\left(1 + b \frac{(c_i^{n+1} + c_i^n)}{2}\right)^2} \right] = \\ & = \frac{1}{N_{Pe}} \left[ \frac{c_{i+1}^{n+1} - 2c_i^{n+1} + c_{i-1}^{n+1}}{2\Delta x^2} + \frac{c_{i+1}^n - 2c_i^n + c_{i-1}^n}{2\Delta x^2} \right] - \\ & \quad - \left[ \frac{c_{i+1}^{n+1} - c_{i-1}^{n+1}}{4\Delta x} + \frac{c_{i+1}^n - c_{i-1}^n}{4\Delta x} \right] \end{aligned} \quad (16)$$

La solución es obtenida resolviendo ecuaciones algebraicas simultáneamente e iterando en cada paso de tiempo debido a la no linealidad de la ecuación.

4. Método de las Ecuaciones Diferenciales Ordinarias<sup>7</sup>, (ODE): se discretiza la parte espacial para reducirla a una ecuación ordinaria. Aproximando las derivadas parciales espaciales y el término de adsorción como en el método explícito, se obtiene

$$\frac{\partial c}{\partial t} \Big|_i^{n+1} \left[ 1 + \frac{a}{(1 + bc_i^n)^2} \right] = \frac{1}{N_{Pe}} \left[ \frac{c_{i+1}^n - 2c_i^n + c_{i-1}^n}{\Delta x^2} \right] - \left[ \frac{c_{i+1}^n - c_{i-1}^n}{2\Delta x} \right] \quad (17)$$

Para realizar la integración numérica se probaron varios métodos: Milne (5o. orden, paso variable), Runge-Kutta (4o. orden, paso fijo y variable), Stiff (paso variable), Adams (2o. orden, paso fijo). Entre ellos se eligió el de Runge-Kutta debido a que produce iguales errores que los de Milne y Stiff pero utiliza menor cantidad de pasos. El de Adams tiene mayores errores que el de Runge-Kutta de paso fijo para el mismo  $\Delta t$ . Ante la necesidad de comparar con los otros métodos (E, BC, CN) se utilizó el de Runge-Kutta de paso fijo, sacrificando la estabilidad incondicional que presenta el de paso variable.

Para comparar la exactitud de los distintos métodos frente a las diferentes situaciones se usó la siguiente expresión del error,

$$e = \frac{1}{IN} \sum_{i=1}^I \sum_{n=1}^N |C(x_i, t_n) - c_i^n| \quad (18)$$

debido a que es la más representativa del comportamiento global de la solución, donde  $I$  es el número de pasos en el espacio y  $N$  el número de pasos en el tiempo.

### Error de truncación

Para la ecuación no lineal por expansiones en serie de Taylor se estima el error de truncación  $(\varepsilon_i^n)^5$  de los métodos utilizados; con la excepción del método ODE, para el que se estima el error de truncación en forma empírica.

- Explícito:

$$\begin{aligned}\varepsilon_i^n &= \left[ \frac{\partial^2 c_i^n}{\partial t^2} \frac{g(c_i^n)}{2} \right] \Delta t + \left[ \frac{\partial^3 c_i^n}{\partial x^3} \frac{1}{6} - \frac{\partial^4 c_i^n}{\partial x^4} \frac{1}{12 N_{Pe}} \right] \Delta x^2 + \dots \\ &= 0(\Delta t) + 0(\Delta x^2) + \dots\end{aligned}\quad (19)$$

Se observa que la no linealidad de la ecuación (8) no influye sobre el orden de aproximación.

- Barakat-Clark: el error de truncación se estima examinando cada una de las ecuaciones (13) y (14),

“Forward”

$$\begin{aligned}\varepsilon_i^n(u) &= - \left[ \left( \frac{\partial u_i^n}{\partial t} \right)^2 \frac{\partial g(u_i^n)}{\partial u_i^n} \frac{1}{2g(u_i^n)} \right] \Delta t + \\ &+ \left[ \frac{\partial^3 u_i^n}{\partial t^3} \frac{1}{6} g(u_i^n) - \frac{\partial^4 u_i^n}{\partial x^2 \partial t^2} \frac{1}{4 N_{Pe}} + \frac{\partial^3 u_i^n}{\partial x \partial t^2} \frac{1}{4} \right] \Delta t^2 + \\ &+ \left[ \frac{\partial^2 u_i^n}{\partial x \partial t} \frac{1}{N_{Pe}} \right] \frac{\Delta t}{\Delta x} + \left[ \frac{\partial^4 u_i^n}{\partial x^3 \partial t} \frac{1}{6 N_{Pe}} - \frac{\partial^3 u_i^n}{\partial x^2 \partial t} \frac{1}{4} \right] \Delta x \Delta t + \\ &+ \left[ \frac{\partial^3 u_i^n}{\partial x^3} \frac{1}{6} - \frac{\partial^4 u_i^n}{\partial x^4} \frac{1}{12 N_{Pe}} \right] \Delta x^2 + \dots\end{aligned}\quad (20)$$

“Backward”

$$\varepsilon_i^n(w) = - \left[ \left( \frac{\partial w_i^n}{\partial t} \right)^2 \frac{\partial g(w_i^n)}{\partial w_i^n} \frac{1}{2g(w_i^n)} \right] \Delta t +$$

$$\begin{aligned}
& + \left[ \frac{\partial^3 w_i^n}{\partial t^3} \frac{1}{6} g(w_i^n) - \frac{\partial^4 w_i^n}{\partial x^2 \partial t^2} \frac{1}{4 N_{Pe}} + \frac{\partial^3 w_i^n}{\partial x \partial t^2} \frac{1}{4} \right] \Delta t^2 - \\
& - \left[ \frac{\partial^2 w_i^n}{\partial x \partial t} \frac{1}{N_{Pe}} \right] \frac{\Delta t}{\Delta x} - \left[ \frac{\partial^4 w_i^n}{\partial x^3 \partial t} \frac{1}{6 N_{Pe}} - \frac{\partial^3 w_i^n}{\partial x^2 \partial t} \frac{1}{4} \right] \Delta x \Delta t + \\
& + \left[ \frac{\partial^3 w_i^n}{\partial x^3} \frac{1}{6} - \frac{\partial^4 w_i^n}{\partial x^4} \frac{1}{12 N_{Pe}} \right] \Delta x^2 + \dots
\end{aligned} \tag{21}$$

Debido a que cada una de las ecuaciones (13) y (14) puede ser usada para aproximar la solución de la ecuación (8), cada uno de los términos en las expresiones (20) y (21) tiene aproximadamente la misma magnitud. Por lo tanto al calcular los perfiles de concentración según la ecuación (15), aquellos términos que tienen signos opuestos tenderían a cancelarse y como consecuencia el error de truncación sería

$$\varepsilon_i^n \simeq 0(\Delta t) + 0(\Delta x^2) \tag{22}$$

Nótese que para el caso de flujo sin adsorción ( $g(C) = 1$ ) el término de  $0(\Delta t)$  en las ecuaciones (20) y (21) se anula y por lo tanto el error de truncación sería

$$\varepsilon_i^n \simeq 0(\Delta t^2) + 0(\Delta x^2) \tag{23}$$

- Crank-Nicolson

$$\begin{aligned}
\varepsilon_i^{n+\frac{1}{2}} & = \left[ \frac{\partial^3 c_i^{n+\frac{1}{2}}}{\partial t^3} \frac{g(c_i^{n+\frac{1}{2}})}{24} + \frac{\partial^2 c_i^{n+\frac{1}{2}}}{\partial t^2} \frac{\partial c_i^{n+\frac{1}{2}}}{\partial t} \frac{\partial g(c_i^{n+\frac{1}{2}})}{\partial c_i^{n+\frac{1}{2}}} \frac{1}{4} - \right. \\
& \quad \left. - \frac{\partial^4 c_i^{n+\frac{1}{2}}}{\partial x^2 \partial t^2} \frac{1}{8 N_{Pe}} + \frac{\partial^3 c_i^{n+\frac{1}{2}}}{\partial x \partial t^2} \frac{1}{8} \right] \Delta t^2 + \\
& + \left[ \frac{\partial^3 c_i^{n+\frac{1}{2}}}{\partial x^3} \frac{1}{6} - \frac{\partial^4 c_i^{n+\frac{1}{2}}}{\partial x^4} \frac{1}{12 N_{Pe}} \right] \Delta x^2 + \dots \\
& = 0(\Delta t^2) + 0(\Delta x^2)
\end{aligned} \tag{24}$$

La expresión anterior muestra como en el caso explícito que la adsorción no modifica el error de truncación.



- Ecuaciones Diferenciales Ordinarias: se puede decir que a causa de la discretización espacial el error es de  $0(\Delta x^2)$ . El método de Runge-Kutta para la integración temporal tiene un error de  $0(\Delta t^5)$ . Por lo tanto:

$$\varepsilon_i^n \simeq 0(\Delta t^5) + 0(\Delta x^2) \quad (25)$$

Con respecto al orden de aproximación el método más conveniente es el ODE.

### Análisis de estabilidad

La estabilidad de un esquema en diferencias queda determinada por la no amplificación de los errores de un cierto nivel de tiempo sobre el siguiente, según Peaceman<sup>5</sup>, Aziz<sup>7</sup> y otros<sup>8,9</sup>.

Para comenzar el análisis de la estabilidad se toma el caso sin adsorción con lo cual la ecuación (8) resulta ser una ecuación lineal a coeficientes constantes. En este tipo de ecuaciones es condición necesaria y suficiente para que un esquema bien planteado resulte estable<sup>8,9</sup> que se verifique el criterio de von Neuman<sup>5,10</sup>. De la aplicación de dicho criterio se obtuvieron las condiciones siguientes, salvo para el ODE, cuyo análisis se hace empíricamente:

- Explícito

$$\frac{2}{N_{Pe}} \frac{\Delta t}{\Delta x^2} \leq 1 \quad \frac{1}{N_{Pe}} \geq \frac{\Delta t}{2} \quad (26)$$

- Barakat-Clark y "Backward"

$$\frac{\Delta t}{\Delta x} \leq 1 \quad (27)$$

- Ecuaciones diferenciales ordinarias

$$\frac{3}{2 N_{Pe}} \frac{\Delta t}{\Delta x^2} \leq 1 \quad (28)$$

Las condiciones anteriores pueden ser generalizadas al caso de adsorción lineal ( $b = 0$ ) con sólo reemplazar  $\Delta t$  por  $\Delta t/(1 + a)$ . De esta manera la elección de  $\Delta t$  y  $\Delta x$  es menos restrictiva que en el caso de flujo sin adsorción.

En base a pruebas computacionales, considerando adsorción tipo Langmuir se observó que las condiciones de estabilidad están comprendidas entre las determinadas para los dos casos: sin adsorción y con adsorción lineal. Entonces, para el caso no lineal, si se satisfacen las ecuaciones (26), (27) y (28) respectivamente, las soluciones son estables.

Finalmente, del análisis de von Neuman para el caso sin adsorción se obtuvo que el CN y F son incondicionalmente estables. Esta estabilidad fue comprobada empíricamente, mediante pruebas numéricas, en la ecuación con adsorción tipo Langmuir.

Cabe señalar que aunque se satisfagan las condiciones de estabilidad para cada esquema si no se cumple con la condición<sup>11,12</sup>

$$\frac{2}{N_{Pe}\Delta x} \geq 1 \quad (29)$$

las soluciones presentan pequeñas oscilaciones que se van amortiguando en los sucesivos pasos del tiempo. Éste hecho fue comprobado en las pruebas computacionales.

A efectos de comparar los distintos métodos se utilizó un error global, definido por la ecuación (18). Se evaluaron los casos sin adsorción y con adsorción lineal, para los cuales no se dispone de solución analítica.

### Comparación del tiempo de CPU

En la Tabla I se muestra la influencia en el tiempo de CPU del número de Péclet y de la adsorción lineal. Los parámetros discretos  $\Delta x$  y  $\Delta t$  fueron elegidos del modo siguiente: se fija un  $\Delta x$  y se disminuye  $\Delta t$ , calculándose para cada  $\Delta t$  el error global que también decrecerá. Al no observarse disminuciones sustanciales en el error global, al disminuir  $\Delta t$ , entonces se cambia el  $\Delta x$  fijado por uno menor y se vuelve a repetir el procedimiento hasta lograr un error global de aproximadamente 0.005, para el caso de flujo sin adsorción. Para adsorción lineal se utilizaron los valores ya elegidos de dichos parámetros. Los resultados de la tabla se calcularon hasta un tiempo adimensional final de 1.5.

De la Tabla I, para la cota del error elegida se concluye que:

- el BC es el que menos tiempo requiere para ambos valores de  $N_{Pe}$ ;
- el CN es el que más tiempo requiere para  $N_{Pe} = 50$ , por ser implícito;
- al crecer  $N_{Pe}$  el tiempo de CPU requerido aumenta, pero en mayor proporción en el E. Esto se debe a que el E necesita un  $\Delta t$  muy pequeño para satisfacer la cota del error;
- para el caso de adsorción lineal, el tiempo de CPU aumenta cuando se mantienen los incrementos en el espacio y en el tiempo. El error no tiene la misma tendencia para todos los métodos y su comportamiento se tratará más adelante.

### Influencia del coeficiente de dispersión

En la Figura 1 se representan las curvas de variación del error en función de  $N_{Pe}$  para los distintos métodos, considerando flujo sin adsorción y con adsorción lineal. En la obtención de las mismas se eligieron  $\Delta x = 0.015625$  y  $\Delta t = 0.005$ , que satisfacen las condiciones de estabilidad para los valores de  $N_{Pe}$  utilizados en el análisis. El error fue evaluado hasta un tiempo adimensional final de 1.5.

TABLA I $N_{Pe} = 50$			$a = 0$		$a = 1$	
METODO	$\Delta x$	$\Delta t$	error $\times 10^2$	tiempo	error $\times 10^2$	tiempo
EXPLICITO	0.040000	0.006000	0.510	3.43	0.446	4.08
BARAKAT-CLARK	0.050000	0.030000	0.511	2.48	0.759	2.59
EC. DIF. ORDIN.	0.040000	0.050000	0.429	5.85	0.567	5.93
CRANK-NICOLSON	0.040000	0.008000	0.511	11.26	0.635	13.08

TABLA I $N_{Pe} = 100$			$a = 0$		$a = 1$	
METODO	$\Delta x$	$\Delta t$	error $\times 10^2$	tiempo	error $\times 10^2$	tiempo
EXPLICITO	0.012500	0.002000	0.471	20.79	0.357	21.98
BARAKAT-CLARK	0.020000	0.015000	0.468	6.21	0.722	6.42
EC. DIF. ORDIN.	0.015625	0.033333	0.441	9.30	0.548	9.48
CRANK-NICOLSON	0.015625	0.008000	0.499	20.02	0.620	20.33

TABLA I. Incrementos de espacio-tiempo utilizados y el error producido. Influencia de  $N_{Pe}$  y de la adsorción en el tiempo de CPU (segundos).

En la Figura 1-A, sin adsorción, vemos que en todos los métodos el error crece al aumentar  $N_{Pe}$  salvo en el BC que presenta un mínimo. El E presenta los errores más grandes y la mayor pendiente. Por razones de espacio se cortaron las curvas en  $N_{Pe} = 300$ . Para  $N_{Pe}$  grandes, el error de todos los métodos tiende a asintotizarse.

En la Figura 1-B, para adsorción lineal, se observa que CN, BC y ODE tienen mayores errores respecto al caso sin adsorción; variando los mismos más rápidamente con  $N_{Pe}$ . Por el contrario, el error global y la pendiente del E disminuyen. Obsérvese que el error de truncación del E es de  $O(\Delta t)$ . Para adsorción lineal, aparece el factor  $\Delta t/(1+a)$ , lo cual numéricamente es equivalente a disminuir  $\Delta t$ .

A efectos de analizar el mínimo en la curva correspondiente al BC, en la Figura 2 se muestran los errores de las soluciones de "forward" (F), ecuación (13); "backward" (B), ecuación (14) y de su promedio, ecuación (15). En las Figuras 2-A y 2-B puede inferirse un comportamiento típico del BC: promediando las soluciones de F y B, se obtiene la solución de BC, que presenta un error menor que cada una de ellas por separado. Además, puede verse en las mismas que las curvas del error global en función de  $N_{Pe}$  presentan mínimos aún en las soluciones de F y B.

Satter<sup>3</sup> sostiene que eligiendo adecuadamente los incrementos  $\Delta x$  y  $\Delta t$ , la

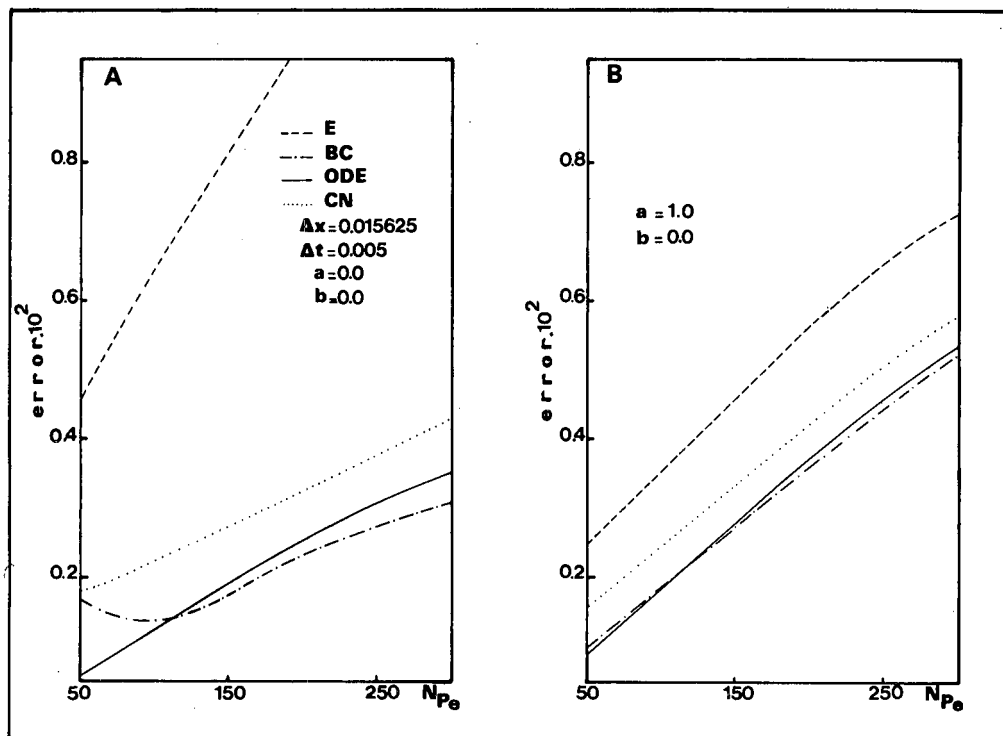


Figura 1. Influencia de  $N_{Pe}$  en el error global para todos los métodos. A: Flujo sin adsorción. B: Flujo con adsorción lineal

solución promediada de BC no es muy diferente de la solución de F. Entonces, considera a esta última como solución de la ecuación de convección-dispersión-adsorción. Nosotros no hemos encontrado el juego de incrementos mencionados por Satter. En realidad, hallamos ciertas discrepancias entre las soluciones de F, B y BC, que volveremos a mostrar más adelante en la Figura 6.

#### Variación del error en función de los incrementos $\Delta x$ y $\Delta t$

Tomando  $N_{Pe} = 50$  y  $\Delta t = 0.005$  para todos los métodos se estudió el comportamiento de la solución al variar  $\Delta x$ , para  $a = 0, 1$  y  $2$ , hasta un tiempo adimensional final de 4. Estos resultados se muestran en la Figura 3. En ODE y CN el error disminuye al aumentar el número de puntos, en cambio, E y BC presentan un mínimo. Con las mismas condiciones que en la Figura 3, pero variando  $\Delta t$  para un  $\Delta x = 0.02$ , se obtuvieron las curvas de la Figura 4. En ODE el error permanece constante al variar  $\Delta t$ . Para los otros métodos el error decrece al disminuir  $\Delta t$  hasta un cierto valor. En CN sigue decreciendo más lentamente. El E y el BC presentan mínimos suaves.

En la Figura 5-A se muestra el error global en función del incremento espacial para las soluciones de F, B y BC. En la Figura 5-B aparece el error de las tres soluciones pero en función del incremento temporal. Nuevamente se visualiza que el

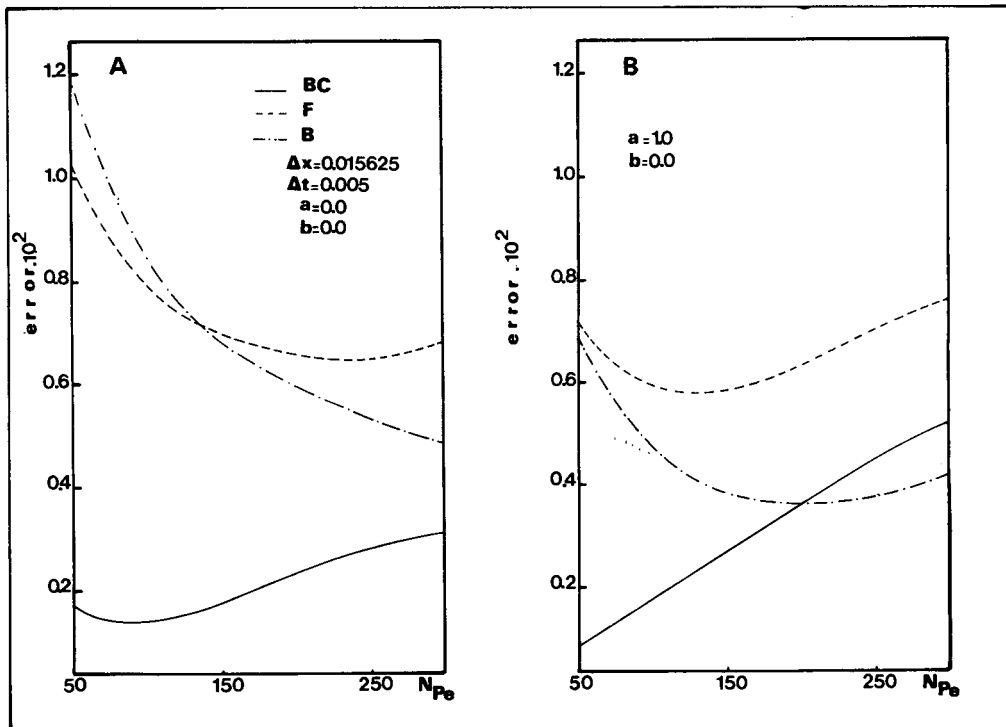


Figura 2. Influencia de  $N_{pe}$  en el error global para las soluciones "forward", (F), "backward", (B), y su promedio (BC). A: Flujo sin adsorción. B: Flujo con adsorción lineal.

error de BC es menor que el de F y el de B y que las tres soluciones son distintas. Por otra parte, las soluciones de F y B en la Figura 5-A presentan mínimos.

Entendemos que los mínimos presentados por B, F y BC en los errores globales en función de los incrementos, se deben a la influencia relativa de  $\Delta t$  frente a  $\Delta x$ .

Los errores de truncación de los métodos "forward", ecuación (20) y "backward", ecuación (21) tienen términos en  $\Delta t/\Delta x$  y en  $\Delta x \Delta t$  (si bien este último pierde importancia frente al  $\Delta t$  para el caso con adsorción). Estos términos tienen distintos signos e idénticos factores donde aparecen  $u$  en la ecuación (20) y  $w$  en la ecuación (21). Ahora bien, las soluciones de F y B difieren levemente, en consecuencia, al promediar las ecuaciones (20) y (21), los términos en  $\Delta t/\Delta x$  y en  $\Delta x \Delta t$  no se cancelan.

### Influencia de la adsorción

En las Figuras 3 y 4 se observa que las curvas del error global en función de  $a$  dependerán de la elección de  $\Delta x$  y  $\Delta t$ . Para los rangos estudiados, ODE y CN presentarán curvas crecientes. Los otros dos métodos, E y BC, tendrán valores crecientes o decrecientes del error al aumentar  $a$ . Las curvas de las Figuras 3 y 4 para E y BC se entrecruzan debido al corrimiento del mínimo con  $a$ , ya que un

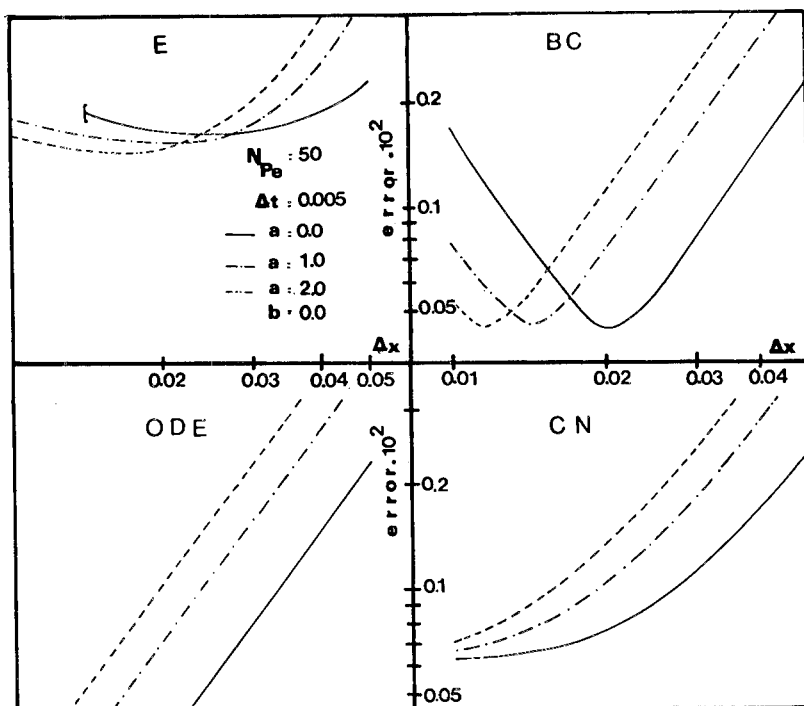


Figura 3. Variación del error global vs. el incremento espacial para diferentes coeficientes de adsorción. ([- límite de estabilidad).

aumento de  $a$  es equivalente a utilizar un  $\Delta t$  menor. En consecuencia, el mínimo se corre a menores valores de  $\Delta x$  en la Figura 3 o a mayores valores de  $\Delta t$  en la Figura 4. Empíricamente se encontró que el mínimo error se produce cuando:

$$0.10 \leq \frac{\Delta t}{(1+a)\Delta x^2 N_{Pe}} \leq 0.25 \quad \text{si}$$

$$50 \leq N_{Pe} \leq 300 \quad \text{y} \quad 0 \leq a \leq 2 \quad (30)$$

### Distribuciones de concentración

En la Figura 6, se representan los perfiles de concentración de la solución analítica de la ecuación de convección-dispersión y de las soluciones numéricas de F y B. Los dos perfiles  $u$  y  $w$  difieren considerablemente entre sí y con la solución verdadera. Sin embargo, su promedio,  $c$  (BC), se ajusta más a esta última.

En la Figura 7 se muestran perfiles de concentración para los cuatro métodos: E, ODE, BC y CN, cuando se resuelve la ecuación completa de convección-dispersión-adsorción del tipo Langmuir. Nótese que no se aprecian grandes diferencias entre las distintas soluciones.

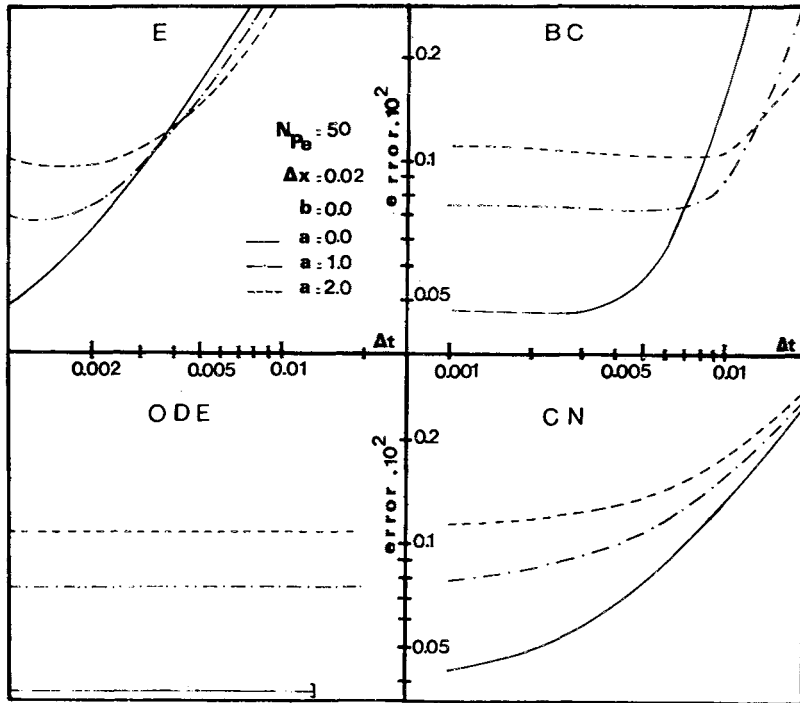


Figura 4. Variación del error global vs. el incremento temporal para diferentes coeficientes de adsorción. (-) límite de estabilidad).

**Comparación con datos experimentales**

Para la ecuación no lineal (8) no se dispone de la solución analítica, por eso las soluciones numéricas de dicha ecuación (por los cuatro métodos presentados) se comparan con datos experimentales.

Szabo<sup>6</sup> realizó experimentos de barrido en el laboratorio con soluciones de polímeros y agua salada en un testigo rocoso. Sus resultados: concentración de polímero ( $C_{exp}$ ) a la salida del testigo ( $x = 1$ ) en función del tiempo se muestran en la Figura 8. En la misma Figura se dibuja la solución numérica obtenida por el método de CN, utilizando  $\Delta x = \Delta t = 0.01$ . Los parámetros físicos utilizados son:

$$N_{Pe} = 254 \quad a = 0.172 \quad b = -0.499$$

Estos no fueron determinados independientemente, sino que fueron obtenidos ajustando la solución numérica a los resultados experimentales aplicando un método de cuadrados mínimos con una regresión no lineal (algoritmo de Levenberg-Marquardt).

A los efectos de comparar las soluciones numéricas de los cuatro métodos entre sí, se define un error local,

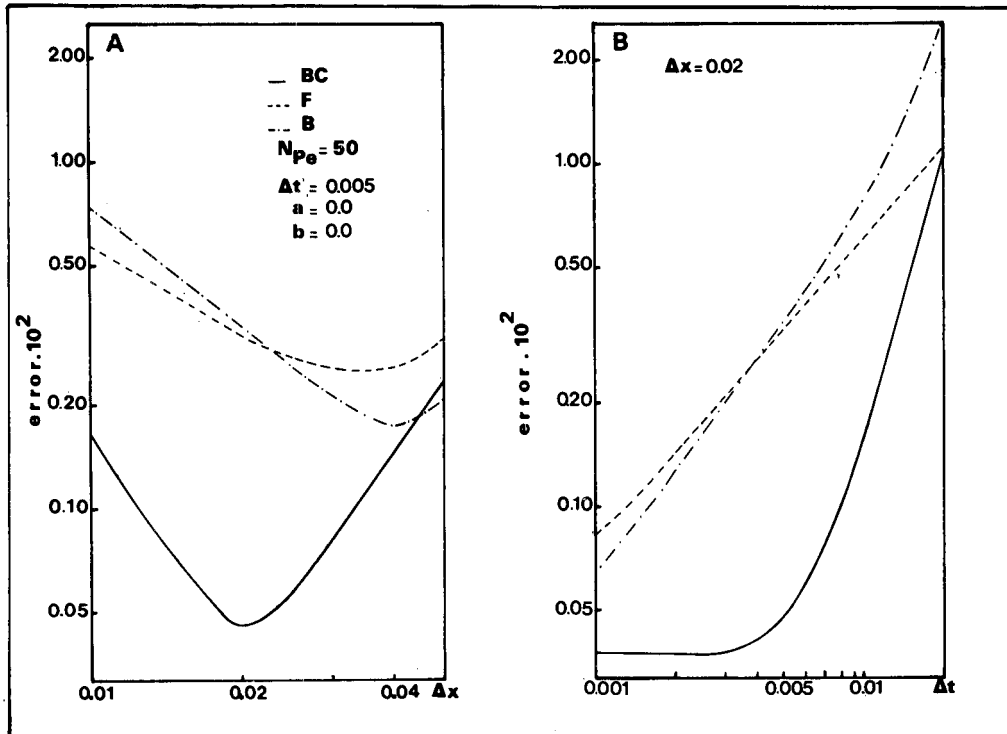


Figura 5. Variación del error global para las soluciones "forward", (F), "backward", (B), y su promedio, (BC). A: en función del incremento espacial. B: en función del incremento temporal.

$$e_l = \frac{1}{N} \sum_{n=1}^N |c(1, t_n) - C_{exp}^n| \quad (31)$$

La variación del error local con los parámetros de discretización en el espacio se muestra en la Figura 9-A y en el tiempo en la Figura 9-B, para los cuatro métodos. Cualitativamente el comportamiento es similar al de las Figuras 3 y 4, respectivamente.

En la Figura 9-A se visualiza que todos los métodos tienen un comportamiento similar para  $\Delta x \geq 0.015625$ . A menores  $\Delta x$ , los métodos E y BC presentan mínimos y aumentos suaves del error. Los otros dos, CN y ODE mantienen el error casi constante.

En la Figura 9-B se muestra que para todos los métodos el error disminuye con  $\Delta t$  tendiendo a un valor común. El mínimo que muestra el método de CN se debe a que éste fue utilizado para la optimización antes mencionada para hallar los parámetros  $N_{Pe}$ ,  $a$ ,  $b$ .



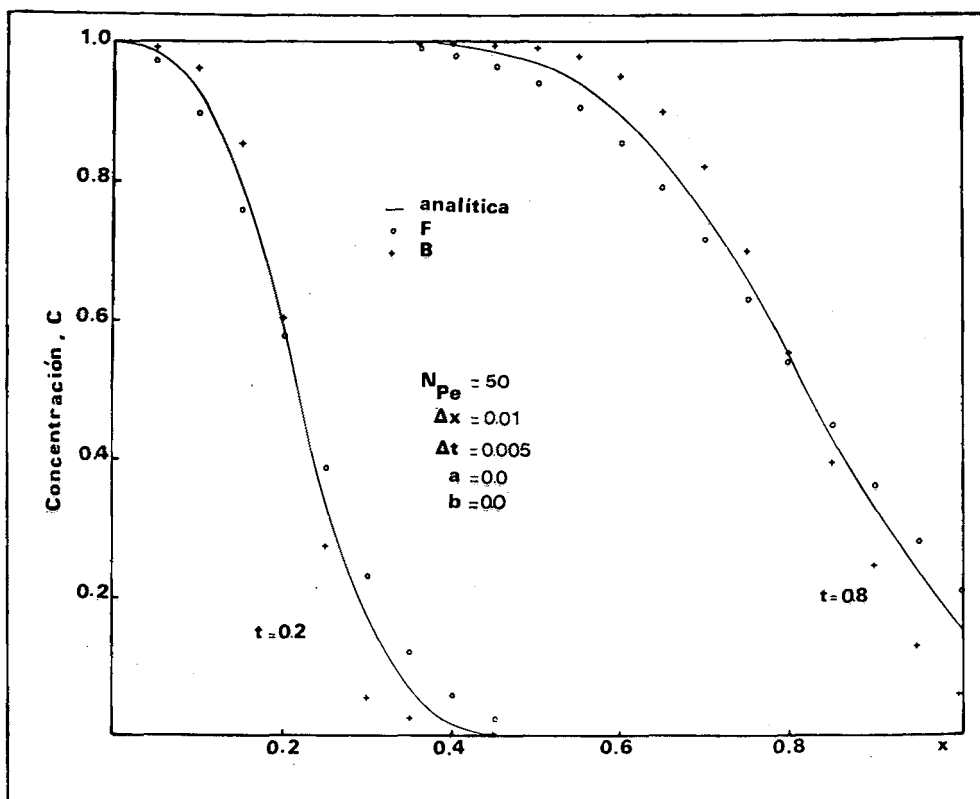


Figura 6. Perfiles de concentración, para flujo sin adsorción, de las soluciones analítica, "forward", (F), y "backward", (B).

### CONCLUSIONES

Para resolver la ecuación de convección-dispersión-adsorción se han utilizado cuatro métodos numéricos. Estos fueron comparados con la solución diferencial (para el caso de adsorción lineal) y con datos experimentales (para el caso de adsorción no lineal). De esta comparación surge:

- . CN es el de menor riesgo, por ser el único incondicionalmente estable, si bien bajo ciertas condiciones puede presentar pequeñas oscilaciones que se amortiguan con el tiempo, al igual que los demás métodos. Muestra un buen comportamiento frente a los parámetros físicos ( $N_{Pe}, a$ ) y de discretización ( $\Delta x, \Delta t$ ). Lamentablemente requiere mayor tiempo de CPU y en general tiene un error global grande.
- . ODE tiene como ventajas sobre el CN su mayor orden de aproximación, menor error global y menor tiempo de cálculo, aunque es condicionalmente estable.
- . BC es un método explícito, muy superior al explícito tradicional. Requiere menor tiempo de cómputo que los demás. Su principal inconveniente es el comportamiento anómalo frente a los parámetros con la aparición de mínimos pronunciados, lo cual puede causar errores mayores que los previsibles, aunque

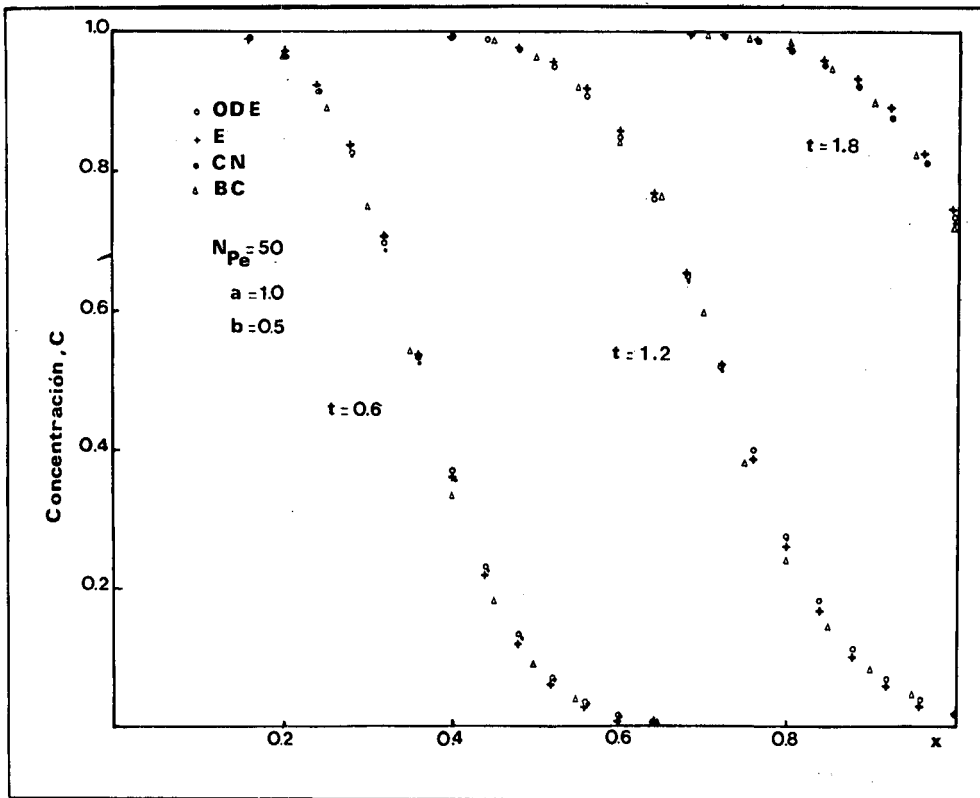


Figura 7. Perfiles de concentración, para flujo con adsorción tipo Langmuir. Los incrementos espacial y temporal utilizados para cada método son los de la Tabla I para  $N_{Pe} = 50$ .

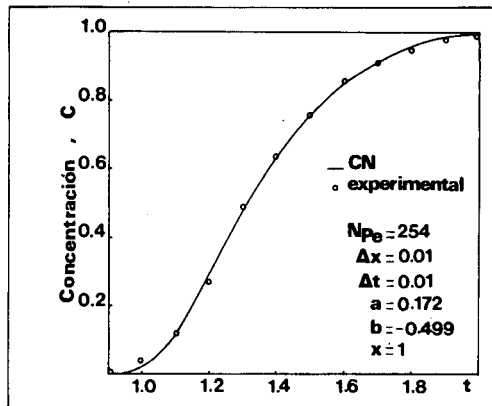


Figura 8. Concentración en función del tiempo a la salida del medio poroso. Datos experimentales de un barrido con polímeros (Szabo<sup>e</sup>) y solución numérica de CN.

éstos sean siempre menores que los de las soluciones "Forward" y "Backward" que lo componen.

E es el más desventajoso en todo sentido.

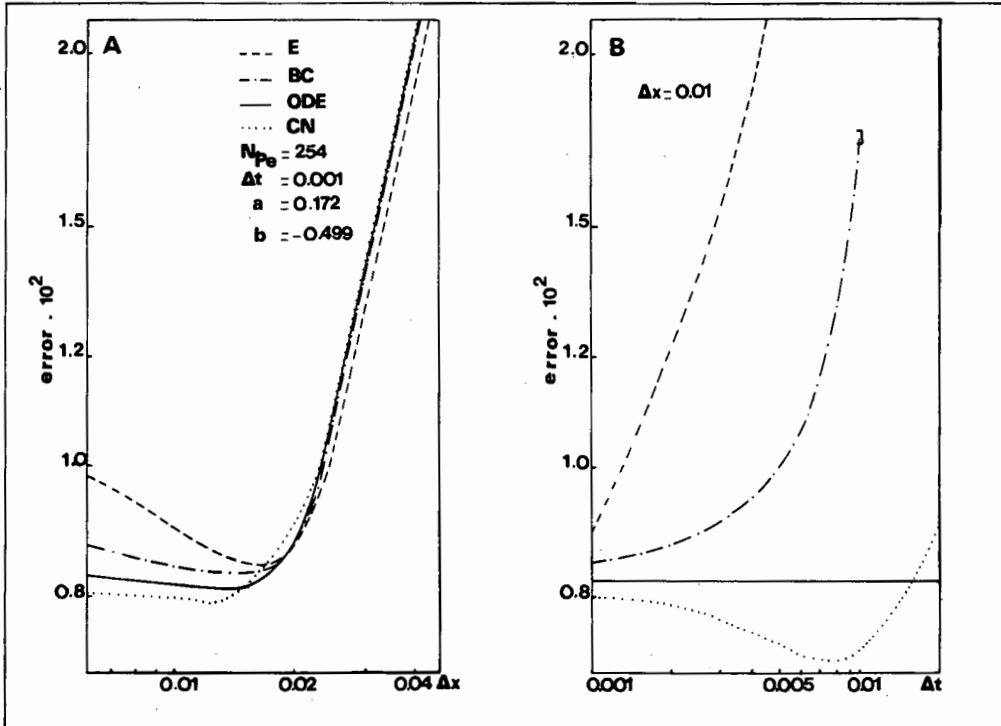


Figura 9. Variación del error local para todos los métodos. A: en función del incremento espacial. B: en función del incremento temporal.

## NOMENCLATURA

- $a, b$  parámetros para el modelo de adsorción de Langmuir, [adimensionales]
- $C$  concentración de soluto, [adimensional]
- $C_{exp}$  concentración de soluto experimental, [adimensional]
- $c, u, w$  aproximaciones numéricas de  $C$ , [adimensional]
- $K$  coeficiente de dispersión longitudinal, [ $L^2 / T$ ]
- $e$  error global definido por la ecuación (18)
- $e_l$  error local definido por la ecuación (31)
- $g$  coeficiente de las ecuaciones (3) y (8)
- $I$  número de bloques en el espacio
- $l$  longitud del medio poroso, [L]
- $N$  número de pasos en el tiempo
- $N_{Pe}$  coeficiente de dispersión, definido por la ecuación (7), [adimensional]

- $t$  tiempo, [adimensional]  
 $v$  velocidad intersticial, [L/T]  
 $x$  distancia, [adimensional]

### Letras Griegas

- $\varepsilon$  error de truncación  
 $\Delta$  incremento de la variable  
 $\beta$  parámetro para el modelo de adsorción de Langmuir, [L<sup>3</sup>/ M]  
 $\psi$  concentración de soluto, [M/L<sup>3</sup>]  
 $\psi_r$  cantidad de soluto adsorbido/volumen de fluido [M/L<sup>3</sup>]  
 $\tau$  tiempo, [T]  
 $X$  distancia, [L]

### Sub y Supraíndices

- $i$  índice de la coordenada espacial  
 $n$  índice de la coordenada temporal  
 $o$  de inyección,  $\chi = 0$

### AGRADECIMIENTOS

Los autores agradecen la colaboración brindada por el Señor Juan Ramón Melendi en la realización de las figuras de este trabajo.

### REFERENCIAS

1. K.H. Coats. y B.D. Smith, "Dead-End Pore Volume and Dispersion in Porous Media", *Soc. Pet. Eng. J.*, Vol. 4, pp. 73-84, (1964).
2. S.P. Gupta y R.A. Greenkorn, "Dispersion During Flow in Porous Media with Bilinear Adsorption", *Water Resour. Res.*, Vol. 9, pp. 1357-1368, (1973).
3. A. Satter, Y.M. Shum, W.T. Adams y L.A. Davis, "Chemical Transport in Porous Media with Dispersion and Rate-Controlled Adsorption", *Soc. Pet. Eng. J.*, Vol. 20, pp. 129-138, (1980).
4. H.Z. Barakat y J.A. Clark, "On the Solution of the Diffusion Equations by Numerical Methods", *J. Heat Transfer*, Vol. 88, pp. 421-427, (1966).
5. D.W. Peaceman, "Fundamentals of Numerical Reservoir Simulation", Elsevier Scientific Pub. Co., Amsterdam, The Netherlands, (1978).
6. M.T. Szabo, "Some Aspects of Polymer Retention in Porous Media Using a C<sub>14</sub>-Tagged Hydrolyzed Polyacrylamide", *Soc. Pet. Eng. J.*, Vol. 15, pp. 323-337, (1975).
7. K. Aziz Y A. Settari, "Petroleum Reservoir Simulation", Elsevier Scientific Pub. Co., Amsterdam, The Netherlands, (1979).
8. A.R. Mitchell, "Computational Methods in Partial Differential Equations", John Wiley and Sons, London, Great Britain (1969).

9. R.D. Richtmeyer y K.W. Morton, "*Difference Methods for Initial-Value Problems*", John Wiley and Sons, New York, U.S.A., (1967).
10. J. von Neuman y R.D. Richtmeyer, "A Method for the Numerical Calculation of Hydrodynamic Shocks", *J. of Appl. Phys.*, Vol. **21**, pp.232-237, (1950).
11. D.U. von Rosenberg, "*Methods for the Numerical Solution of Partial Differential Equations*", Gerald L. Farrar and Associates, Oklahoma, U.S.A., (1977).
12. H.S. Price, R.S. Varga y J.E. Warren, "Application of Oscillation Matrices to Diffusion-Convection Equations", *J. Math. Phys.*, Vol. **45**, pp. 301-311, (1966).
13. C.A. Grattoni, P.M. Carpano y M.S. Bidner, "*Analysis of the Nonlinear Adsorption Parameters*", (En preparación).