

Volume 96, 2023

Corpo Editorial

Sandra Mara Cardoso Malta (Editor Chefe)

Laboratório Nacional de Computação Científica - LNCC

Petrópolis, RJ, Brasil

Eduardo V. O. Teixeira (Editor Executivo)

University of Central Florida - UCF

Orlando, FL, EUA

Lilian Markenzon

Universidade Federal do Rio de Janeiro - UFRJ

Rio de Janeiro, RJ, Brasil

Marcelo Sobottka

Universidade Federal de Santa Catarina - UFSC

Florianópolis, SC, Brasil

Paulo F. de Arruda Mancera

Universidade Estadual Paulista Júlio de Mesquita Filho- UNESP

Botucatu, SP, Brasil

Sandra Augusta Santos

Universidade Estadual de Campinas - UNICAMP

Campinas, SP, Brasil

Tânia Schmitt

Universidade de Brasília - UnB

Brasília, DF, Brasil

A Sociedade Brasileira de Matemática Aplicada e Computacional - SBMAC publica, desde as primeiras edições do evento, monografias dos cursos que são ministrados nos CNMAC.

Para a comemoração dos 25 anos da SBMAC, que ocorreu durante o XXVI CNMAC em 2003, foi criada a série **Notas em Matemática Aplicada** para publicar as monografias dos minicursos ministrados nos CNMAC, o que permaneceu até o XXXIII CNMAC em 2010.

A partir de 2011, a série passa a publicar, também, livros nas áreas de interesse da SBMAC. Os autores que submeterem textos à série Notas em Matemática Aplicada devem estar cientes de que poderão ser convidados a ministrarem minicursos nos eventos patrocinados pela SBMAC, em especial nos CNMAC, sobre assunto a que se refere o texto.

O livro deve ser preparado em **Latex, com as figuras em .eps, .pdf e etc.** e ter entre **80 e 150 páginas**. O texto deve ser redigido de forma clara, acompanhado de uma excelente revisão bibliográfica e de **exercícios de verificação de aprendizagem** ao final de cada capítulo. O idioma pode ser Português ou Espanhol.

Veja todos os títulos publicados nesta série na página
<http://https://proceedings.science/notas-sbmac>

MÉTODOS DE VOLUMES FINITOS PARA MODELAGEM COMPUTACIONAL DE RESERVATÓRIOS DE PETRÓLEO

Fabricio Simeoni de Sousa
f.s.sousa@usp.br

Franciane Fracalossi Rocha
fr.franciane@gmail.com

Departamento de Matemática Aplicada e Estatística
Instituto de Ciências Matemáticas e de Computação (ICMC)
Universidade de São Paulo



Sociedade Brasileira de Matemática Aplicada e Computacional

São Carlos - SP, Brasil
2023

Coordenação Editorial: Mateus Bernardes

Coordenação Editorial da Série: Sandra M. C. Malta

Editora: SBMAC

Capa: Matheus Botossi Trindade

Patrocínio: SBMAC

Copyright ©2023 by Fabricio Simeoni de Sousa e Franciane Fracalossi Rocha. Direitos reservados, 2023 pela SBMAC. A publicação nesta série não impede o autor de publicar parte ou a totalidade da obra por outra editora, em qualquer meio, desde que faça citação à edição original.

Catálogo elaborado pela Biblioteca do IBILCE/UNESP

Bibliotecária: Maria Luiza Fernandes Jardim Froner

Sousa, Fabricio S.

Métodos de volumes finitos para modelagem computacional
de reservatórios de petróleo - São Carlos, SP :
SBMAC, 2023, 102 p., 21,5 cm - (Notas em Matemática
Aplicada; v. 96)

ISBN 978-65-86388-18-3 e-ISBN 978-65-86388-17-6

1. Volumes Finitos 2. Modelagem Computacional 3. Reservatórios de Petróleo
4. Meios Porosos 5. Escoamentos Monofásicos 6. Transporte Passivo
I. Sousa, Fabricio S. II. Rocha, Franciane F. IV. Título. V. Série

CDD - 51

À minha esposa Tatiane.
Aos meus pais Luiz (*in memoriam*) e Adélia.
– Fabricio

Ao meu noivo Mateus.
Aos meus pais Ademar e Eneide (*in memoriam*).
– Franciane

Agradecimentos

Esta obra não seria possível sem o apoio de algumas pessoas e instituições. Primeiramente, agradecemos Mateus Athaydes Mendes por ter contribuído com a geração das ilustrações dos capítulos iniciais. Grande parte deste texto surgiu das notas dos cursos de graduação e pós-graduação intitulados “Métodos Numéricos em Equações Diferenciais” e “Introdução à Modelagem Computacional na Indústria Petrolífera”, ministrados no ICMC-USP. Agradecemos aos alunos destas disciplinas pelas contribuições e correções ao material que serviu de base para este livro. Agradecemos também aos colegas de nosso grupo de pesquisa, Roberto F. Ausas, Gustavo C. Buscaglia, Felipe Pereira, Rafael T. Guiraldello, Alfredo J. Palma, Stevens P. Sánchez, Camila F. A. Lages, Uebert G. Moreira e Luca Meacci, pelas discussões sobre modelagem matemática e numérica de escoamentos em meios porosos, que contribuíram direta ou indiretamente para a construção do conhecimento contido neste material. Gostaríamos também de agradecer ao Instituto de Ciências Matemáticas e de Computação (ICMC) e ao Centro de Ciências Matemáticas Aplicadas à Indústria (CeMEAI), da USP em São Carlos, pelo apoio e infraestrutura para o desenvolvimento de pesquisas nesta área. Finalmente, agradecemos todo apoio recebido de Petrobras, CNPq, CAPES e FAPESP, especialmente no financiamento de projetos ligados aos temas abordados neste livro.

Conteúdo

| | |
|--|-----------|
| Prefácio | xi |
| 1 Introdução | 1 |
| 1.1 O problema da extração de petróleo | 1 |
| 1.2 Reservatórios de petróleo | 2 |
| 1.3 Processos de recuperação do petróleo | 3 |
| 1.4 Simulação de reservatórios de petróleo | 5 |
| 1.5 Exercícios | 7 |
| 2 Meios Porosos | 9 |
| 2.1 Definição de meio poroso | 9 |
| 2.1.1 Porosidade | 9 |
| 2.1.2 Permeabilidade | 10 |
| 2.2 Introdução à física de um meio poroso | 11 |
| 2.2.1 Propriedades dos fluidos | 12 |
| 2.3 Princípios de homogeneização e <i>upscaling</i> | 14 |
| 2.4 Volumes elementares representativos | 16 |
| 2.5 A lei de Darcy | 16 |
| 2.6 Exercícios | 18 |
| 3 Modelagem de escoamentos monofásicos em meios porosos | 19 |
| 3.1 Equações gerais para escoamentos monofásicos | 19 |
| 3.1.1 Escoamento incompressível | 20 |
| 3.1.2 Compressibilidade constante | 21 |
| 3.1.3 Escoamento levemente compressível | 21 |
| 3.1.4 Condições auxiliares | 22 |
| 3.2 Unidades de medida | 24 |
| 3.2.1 Adimensionalização | 25 |
| 3.3 Meios homogêneos | 26 |
| 3.4 Meios heterogêneos e o projeto SPE10 | 26 |
| 3.5 Exercícios | 28 |
| 4 Método de volumes finitos para equações elípticas | 29 |
| 4.1 O caso unidimensional | 30 |
| 4.1.1 Tratamento das condições de contorno | 32 |

| | | |
|----------|--|-----------|
| 4.2 | O caso bidimensional | 34 |
| 4.3 | Outras malhas e discretizações | 39 |
| 4.4 | Condições de contorno | 40 |
| 4.4.1 | Condição de Neumann | 40 |
| 4.4.2 | Condição de Dirichlet | 41 |
| 4.5 | Consistência, estabilidade e convergência | 42 |
| 4.5.1 | Erro de truncamento local e consistência | 44 |
| 4.5.2 | Estabilidade | 46 |
| 4.6 | Simulação de escoamentos monofásicos | 48 |
| 4.7 | Exercícios | 49 |
| 4.8 | Projetos computacionais | 50 |
| 5 | Modelagem de problemas de transporte passivo em meios porosos | 55 |
| 5.1 | Derivação de leis de conservação hiperbólicas | 56 |
| 5.2 | Leis de conservação hiperbólicas lineares | 58 |
| 5.2.1 | Solução da equação de advecção | 58 |
| 5.2.2 | Curvas características | 60 |
| 5.2.3 | Condições de contorno | 62 |
| 5.2.4 | Problema de Riemann | 63 |
| 5.2.5 | Coefficientes variáveis | 63 |
| 5.2.6 | Funções de fluxo em problemas lineares com coeficientes variáveis | 64 |
| 5.3 | Exercícios | 65 |
| 6 | Método de volumes finitos para leis de conservação hiperbólicas lineares | 67 |
| 6.1 | Esquemas de volumes finitos para leis de conservação hiperbólicas lineares com coeficientes constantes | 69 |
| 6.2 | Volumes finitos para equações com coeficientes variáveis | 72 |
| 6.3 | A condição CFL | 75 |
| 6.4 | Consistência, estabilidade e convergência | 77 |
| 6.4.1 | Erro de truncamento local | 78 |
| 6.4.2 | Estabilidade linear | 80 |
| 6.4.3 | O critério de von Neumann | 81 |
| 6.5 | Problemas multidimensionais | 83 |
| 6.5.1 | Métodos de volumes finitos para leis de conservação hiperbólicas multidimensionais | 84 |
| 6.6 | Simulação numérica de problemas de transporte passivo | 86 |
| 6.6.1 | Modelagem de poços de injeção e produção | 88 |
| 6.6.2 | Adimensionalização | 90 |
| 6.7 | Exercícios | 91 |
| 6.8 | Projetos computacionais | 91 |
| 7 | Considerações finais | 95 |

Prefácio

Aplicações na indústria petrolífera, não raro, utilizam de simulações computacionais como importante ferramenta para tomadas de decisões, auxiliando os profissionais de engenharia de petróleo. Estes profissionais precisam dimensionar e demarcar possíveis campos de reservatórios de petróleo, otimizar a posição dos poços de injeção e extração, tentando maximizar a produção e a vida útil dos reservatórios. É de se esperar que os modelos utilizados para a simulação em escala industrial sejam bastante sofisticados, incorporando a física dos escoamentos em subsuperfície, em meios altamente heterogêneos, combinando a presença de fraturas e *carstes*¹, além de diversos processos químicos que ocorrem na extração dos *hidrocarbonetos*². Enquanto a modelagem precisa dos processos físicos e químicos envolvidos nesses escoamentos requer alto grau de sofisticação, os princípios básicos de conservação que os regem são bastante simples, de forma que o estudante interessado na área pode construir gradativamente o conhecimento básico necessário para compreensão desses fenômenos, para a construção de modelos matemáticos e para o desenvolvimento de métodos numéricos adequados para a solução dos modelos desenvolvidos. Este livro se apresenta como um guia para os primeiros degraus desta escada de conhecimento.

Este livro é fruto de pesquisas realizadas pelo grupo de Mecânica de Fluidos Computacional do Instituto de Ciências Matemáticas e de Computação, da Universidade de São Paulo. O conhecimento contido neste livro foi lapidado por diversos cursos de métodos numéricos para escoamentos de fluidos, oferecidos a alunos de graduação e pós-graduação desta universidade nos últimos anos. Este material é destinado a alunos em final de graduação ou início de pós-graduação, com formação básica em Matemática (Aplicada ou Industrial), Ciência da Computação ou Engenharias, que pretendem se aprofundar no estudo de métodos numéricos, com foco não apenas em aplicações na indústria petrolífera, mas em qualquer aplicação que envolva escoamentos de fluidos em meios porosos. A ideia deste livro é apresentar passo a passo, de forma mesclada, a modelagem física e matemática de escoamentos em meios porosos, com ênfase na indústria de petróleo, com métodos

¹Formações geológicas caracterizadas pela dissolução de rochas carbonáticas, formando estruturas como túneis, vazios e dolinas.

²Compostos químicos formados por carbono e hidrogênio. Petróleo, gás natural e parafina são exemplos de hidrocarbonetos.

de discretização e solução numérica, notadamente métodos de volumes finitos conservativos, para solução dos modelos apresentados. Propusemos ao longo do texto, exercícios teóricos e implementações de problemas práticos, com o intuito fornecer as ferramentas necessárias para treinar o estudante interessado nesta área.

O texto está organizado na seguinte forma: uma introdução ao problema da extração de petróleo é apresentada no Capítulo 1, seguida da apresentação de diversas definições, nomenclatura e conceitos básicos de escoamentos em meios porosos no Capítulo 2. O Capítulo 3 traz uma discussão sobre a modelagem de escoamentos monofásicos (água ou petróleo), baseando-se em princípios de conservação, com discussões sobre condições auxiliares e adimensionalização. O Capítulo 4 introduz o estudante ao método de volumes finitos para discretização do modelo de escoamento monofásico em meios porosos, com discussões sobre princípios de consistência, estabilidade e convergência dos métodos produzidos. O Capítulo 5 introduz o problema de transporte (passivo) em meios porosos, com dedução das leis de conservação hiperbólicas que modelam tais fenômenos. Finalmente no Capítulo 6, o estudante é apresentado ao universo dos métodos de volumes finitos para leis de conservação hiperbólicas, focando-se em problemas lineares com coeficientes variáveis, e aplicações no transporte passivo em meios porosos, incluindo a modelagem de poços de injeção e produção em reservatórios de petróleo. Considerações finais são traçadas no Capítulo 7, concluindo o texto.

Esperamos que este material possa incentivar estudantes entusiasmados a aprofundar seus conhecimentos nesta área tão interessante. Boa leitura!

São Carlos, 03 de fevereiro de 2023.

Fabricio Simeoni de Sousa
Franciane Fracalossi Rocha

Capítulo 1

Introdução

Reservatórios de petróleo são formações rochosas sedimentares que possuem diversos espaços vazios entre seus grãos minerais. Esses espaços vazios formam redes de poros interconectados que armazenam e permitem o escoamento de fluidos derivados de hidrocarbonetos, como é o caso do petróleo. A extração de petróleo, que consiste na retirada desse fluido através de poços de produção, é uma atividade base para vários setores industriais. Diversos fatores interferem nos aspectos da produção de petróleo, como por exemplo, o tipo de rocha que compõe o reservatório e os fluidos envolvidos no escoamento. Estimar características da produção é uma importante etapa na busca por uma utilização ótima dos campos de produção de petróleo. Nesse contexto, as simulações numéricas de escoamentos em reservatórios de petróleo surgem como ferramentas para o auxílio no gerenciamento da produção. Nas próximas seções, os principais aspectos da modelagem de reservatórios de petróleo são discutidos.

1.1 O problema da extração de petróleo

A produção de petróleo é uma atividade industrial extremamente importante para a humanidade, tendo inúmeras aplicações como: no setor energético, transportes, fabricação de plásticos, tintas, cosméticos, produtos de limpeza, produtos farmacêuticos, eletrodomésticos, eletroportáteis, entre outros. O petróleo vem sendo explorado e comercializado desde as civilizações antigas. As técnicas de extração de petróleo evoluíram ao longo dos anos, acompanhando os avanços tecnológicos e fazendo surgir diferentes mecanismos para a extração do mesmo. Por exemplo, desenvolveram-se os simuladores para fornecer previsões quantitativas e qualitativas relacionadas à extração do petróleo, permitindo um melhor planejamento e redução nos custos operacionais.

O problema da extração de petróleo é um problema interdisciplinar atual e relevante, que envolve várias áreas de pesquisa como a física, química, matemática, computação, engenharia, geologia, entre outras. Avanços e novos desenvolvimentos em diversos tópicos ainda se fazem necessários, visando

tanto a utilização otimizada dos campos existentes como a descoberta de novos campos de petróleo. Também existe a necessidade de estudos voltados para a quantificação dos limites de uso sustentável dos recursos, com o objetivo de minimizar os prejuízos ambientais associados à produção de petróleo [20].

1.2 Reservatórios de petróleo

As rochas sedimentares são materiais sólidos constituídos de partículas minerais ou orgânicas que são depositadas e acumuladas na superfície da Terra. Essas rochas são encontradas em reservatórios formados por bacias sedimentares, onde ocorreu um processo de sedimentação em larga escala. Ao longo de milhões de anos, camadas de sedimentos são criadas em águas profundas, águas costeiras rasas ao longo do litoral, lagos, rios e diversos outros lugares.

Cada ambiente sedimentar possui diferentes características em relação a forma e ao tipo de sedimento. Por exemplo, os arenitos são formados por partículas minerais que são perdidas de um material sólido por intemperismo e erosão, sendo transportadas pela água até o local em que são depositadas. Já as rochas carbonáticas são formadas por esqueletos de organismos marinhos que possuem um alto teor de cálcio, como os corais. Outros exemplos são as rochas formadas por lama, argila e limo, que possuem pequenos poros e capacidade limitada de transmitir fluidos, além das rochas químicas, formadas por minerais que precipitam de uma solução, como é o caso dos sais impermeáveis que ocorrem através da evaporação dos oceanos [33].

Em geral, as camadas sedimentares são constituídas de areia, lama, pequenas partículas de rochas, plânctons, algas e outros organismos que vivem na água e morreram cobertos por lama. Esses organismos consistem de celulose, gorduras, proteínas, açúcar e muitos outros produtos formando o querogênio, que ao longo de milhões de anos se transforma em petróleo e gás natural, os quais ficam aprisionados e acumulados nessas rochas porosas, formando os reservatórios de petróleo. O petróleo e o gás natural podem ser aprisionados por diferentes estruturas [42], como as seguintes:

- Anticlinais: dobras produzidas devido à pressão lateral nos estratos;
- Armadilhas estratigráficas: acumulam hidrocarbonetos devido as alterações no tipo de rocha;
- Armadilhas de falhas: são formadas quando os estratos são movidos em direções opostas ao longo de uma linha, fazendo com que as rochas permeáveis entrem em contato com rochas impermeáveis;
- Cúpulas de sal impermeáveis: são criadas por depósitos de sal.

Na estrutura dos reservatórios de petróleo existem várias camadas de diferentes misturas de partículas rochosas com variações nos tipos minerais, teor

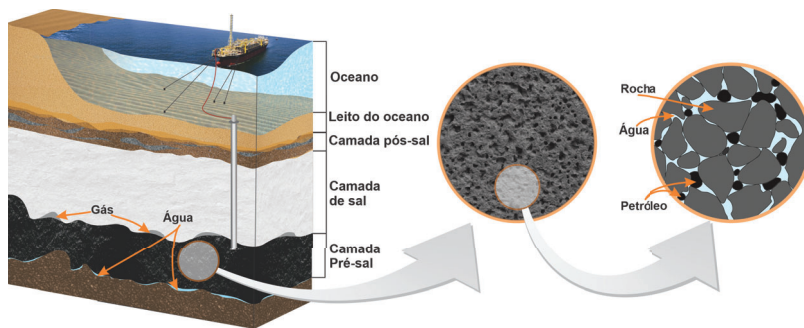


Figura 1.1: Esquema ilustrando a estrutura de um reservatório marinho profundo, como os reservatórios do pré-sal brasileiro. Nota-se a presença dos poros contendo água e petróleo na representação à direita.

de argila e tamanho dos grãos. Também existem alternâncias de camadas grossas e finas de material, camadas impermeáveis, fraturas e falhas. Todas essas variações interferem na movimentação dos hidrocarbonetos que estão confinados nas redes de poros da rocha. A figura 1.1 apresenta um esquema ilustrando a estrutura de um reservatório marinho profundo, como os reservatórios do pré-sal brasileiro. É possível notar a presença dos poros contendo água e petróleo na representação à direita. Existe uma diferença significativa nas escalas: os reservatórios possuem escala em quilômetros, enquanto os poros da rocha são da ordem de centenas de micrômetros.

1.3 Processos de recuperação do petróleo

Várias técnicas para deslocar o óleo até poços de produção são utilizadas para a extração do mesmo. O tipo natural de recuperação de óleo, chamado de *recuperação primária*, consiste no deslocamento do óleo por diferença de pressão. Nesse tipo de recuperação, quando o poço é furado gera-se uma diferença de pressão que permite o óleo fluir naturalmente para fora do reservatório, veja uma ilustração desse processo na figura 1.2. A medida que o óleo vai sendo produzido, a pressão no reservatório decai gradativamente, e, conseqüentemente, a taxa de produção. Este processo de recuperação de petróleo é responsável por cerca de 15% a 30% da produção do reservatório [12, 18].

Para aumentar a produção e recuperar parte do óleo que ficou retido no reservatório, surgem os processos de *recuperação secundária*, que injetam um fluido como água ou gás para manter a pressão no reservatório e as taxas de escoamento. Nesse processo, o fluido injetado nos poços de injeção empurra o óleo até os poços de produção, conforme ilustração na figura 1.3. Esse tipo de recuperação é um dos mais utilizados atualmente devido ao baixo custo quando comparado com outras estratégias mais complexas. No entanto, a

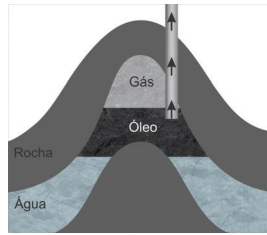


Figura 1.2: Recuperação primária: o óleo retido no meio poroso flui naturalmente pelo poço de produção por diferença de pressão.

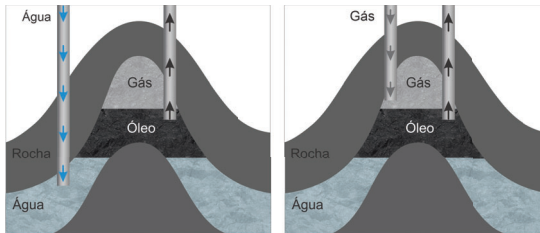


Figura 1.3: Recuperação secundária: um fluido como água ou gás é injetado no meio poroso para empurrar o óleo até os poços de produção.

recuperação secundária nem sempre é eficiente, por exemplo, a água injetada pode varrer o reservatório muito rapidamente e deixar parte significativa do óleo para trás. Isso ocorre pois a água, geralmente, se move com maior facilidade através do meio poroso, formando caminhos preferenciais e avançando diretamente para os poços de produção. Este fenômeno é comum quando o óleo apresenta alta viscosidade com relação à água, sendo conhecido como formação de dedos viscosos (em inglês, *viscous fingering*). Cerca de 50% do óleo ainda é deixado no reservatório após o processo de recuperação secundária [12, 18].

Para recuperar mais do óleo residual, técnicas de *recuperação terciária* são aplicadas, as quais são processos especiais de recuperação escolhidos para atuarem nos pontos onde os processos anteriores falharam. Essas estratégias envolvem efeitos químicos e térmicos para facilitar o movimento do óleo dentro do meio poroso [12, 18]. Por exemplo, a injeção de um solvente (dióxido de carbono, nitrogênio ou o próprio gás natural produzido no poço) ou surfactante que se misture ao óleo e faça-o fluir mais facilmente. Outra possibilidade é a adição de polímeros à água para aumentar a sua viscosidade e alcançar uma mobilidade próxima a do óleo, evitando-se assim que a mesma percorra caminhos preferenciais rapidamente. Também é possível aumentar a mobilidade do óleo através da injeção de vapor ou algum outro método térmico que diminua a viscosidade do mesmo. A figura 1.4 apresenta esquemas exemplificando algumas das estratégias utilizadas na recuperação terciária.

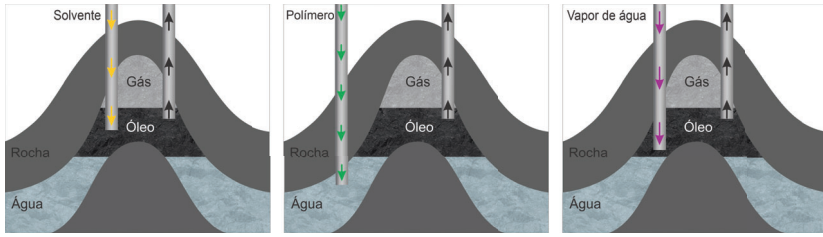


Figura 1.4: Recuperação terciária: efeitos químicos e termais como a injeção de solventes, polímeros ou vapor de água são utilizados para facilitar o movimento do óleo até os poços produtores.

Existem ainda outros métodos e mecanismos menos convencionais tais como a injeção de microorganismos, que através de processos biológicos produzem substâncias que ajudam a aumentar a mobilidade do óleo, e o uso de ondas eletromagnéticas para aquecer o reservatório, também com o objetivo de aumentar a mobilidade do óleo [17].

As tecnologias desenvolvidas para aumentar a quantidade de óleo produzido, e conseqüentemente, aumentar a vida produtiva do reservatório, consideram os diferentes métodos de recuperação e também a combinação de mais de um desses processos. Basicamente as fases da vida de um campo de petróleo consistem na descoberta, projeto exploratório, declaração de comercialidade, operação e abandono, sendo que a fase de operação ou produção pode ser composta por uma, duas, ou as três etapas de recuperação discutidas acima. Um gerenciamento baseado em aspectos técnicos e econômicos pode possibilitar o aumento da vida útil de um reservatório através da aplicação das técnicas mais adequadas para cada estágio da produção. Neste contexto, os simuladores utilizados para fazer previsões da produção são fundamentais.

1.4 Simulação de reservatórios de petróleo

Os diferentes métodos de recuperação são considerados por diversos simuladores de escoamentos em meios porosos para estimar aspectos da produção de petróleo. O objetivo da simulação é o entendimento dos complexos processos químicos, físicos e de escoamentos de fluidos que ocorrem dentro do reservatório [37]. Tais simulações complementam as observações de campo, testes de laboratório, testes em poços e modelos analíticos, sendo utilizadas para estimar características de produção, calibrar parâmetros de reservatórios, identificar padrões nos escoamentos, etc. Existem diferentes técnicas que são utilizadas para simular tais processos, as quais compreendem modelos geológicos, físicos, matemáticos, computacionais, entre outros [3].

A simulação numérica é essencial para a obtenção de previsões acuradas sobre a performance do reservatório de petróleo [11]. Após uma etapa de modelagem, onde é feita a caracterização do meio poroso, os simuladores

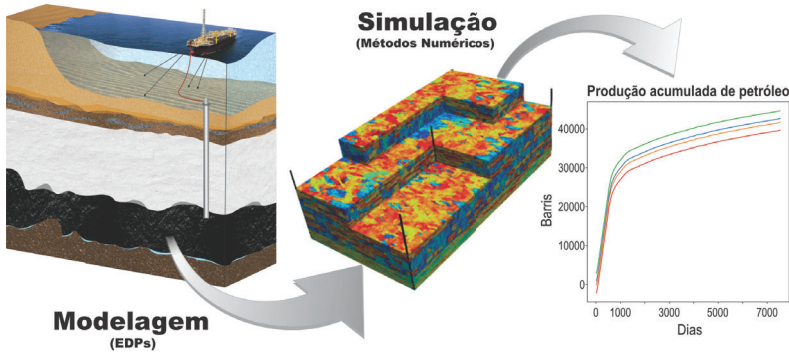


Figura 1.5: Etapas de modelagem e simulação de um reservatório de petróleo. Tem-se inicialmente apenas informações geológicas do reservatório, as quais são modeladas numericamente e em seguida utilizadas por simuladores para gerar informações sobre a produção do petróleo.

são alimentados com os dados obtidos e fornecem importantes estimativas sobre o escoamento, como por exemplo, as curvas de produção [41]. O esquema mostrado na figura 1.5 fornece uma ideia da importância das etapas de modelagem e simulação de um reservatório de petróleo. Tem-se inicialmente apenas informações geológicas do reservatório, as quais são modeladas numericamente e, em seguida, utilizadas por simuladores para gerar informações sobre a produção do petróleo.

A caracterização do reservatório pode ser feita de diferentes maneiras, por exemplo, através de modelos baseados na análise da sísmica. Neste caso, são feitos estudos de dados geofísicos e geológicos das bacias sedimentares através de ondas acústicas ou elásticas produzidas artificialmente, seguindo as etapas de

- Aquisição sísmica: as ondas acústicas ou elásticas são geradas e propagadas na sub-superfície, sendo refletidas nas interfaces das camadas e registradas em receptores posicionados na superfície;
- Processamento sísmico: os dados obtidos passam por inúmeros tratamentos com a finalidade de gerar imagens da sub-superfície;
- Interpretação sísmica: os atributos sísmicos do meio são obtidos, permitindo a caracterização do reservatório.

Enquanto os reservatórios de petróleo possuem escala em quilômetros, os poros da rocha são da ordem de centenas de micrômetros. Levar em conta essa diferença nas escalas é um desafio para a simulação de reservatórios em meios heterogêneos, principalmente quando se trata de reservatórios grandes como, por exemplo, os descobertos no pré-sal brasileiro. Simular reservatórios

como esses, com resolução razoável, leva a problemas computacionais gigantes que atingem facilmente a ordem de bilhões de células computacionais. Além das condições computacionais, outra dificuldade enfrentada na simulação de reservatórios é a obtenção de uma caracterização precisa e completa dos parâmetros da rocha que influenciam no escoamento. O conhecimento sobre o modelo geológico do reservatório e as principais propriedades dos fluidos envolvidos no escoamento é essencial para o manejo dos dados que alimentam os simuladores [1]. Os simuladores, por sua vez, devem fazer uso de métodos numéricos inovadores, capazes de tirar proveito de arquiteturas de última geração do tipo *multicore* na simulação eficiente de reservatórios de grande porte. Existe, portanto, uma necessidade constante de desenvolvimentos nesta área, buscando métodos avançados que combinem precisão, estabilidade e desempenho, além de uma gestão de dados eficaz.

As técnicas desenvolvidas para a simulação de reservatórios de petróleo também podem ser aplicadas para resolver outros modelos como os reservatórios subterrâneos de água [45], visando o uso e gerenciamento sustentável dos mesmos. Por exemplo, esta modelagem pode ser utilizada para o monitoramento do espalhamento de contaminantes em aquíferos subterrâneos. Outra necessidade essencial para a manutenção sustentável da atividade humana que pode se beneficiar dessas técnicas é a redução na emissão dos gases do efeito estufa. Nesse sentido, o desafio é o estudo sobre o sequestro do gás carbônico em meios porosos como o solo. Além disso, a modelagem utilizada para reservatórios de petróleo também pode ser útil na simulação de outros tipos de meios porosos, como por exemplo tecidos biológicos, plantas, filtros, células de combustível, concreto, etc.

1.5 Exercícios

1. Faça uma pesquisa sobre quanto tempo, em média, demora cada fase da vida de um campo de petróleo (descoberta, projeto exploratório, declaração de comercialidade, operação e abandono) no Brasil.
2. Liste as principais questões que um modelo computacional para a simulação de reservatórios de petróleo deve ser capaz de responder.

Capítulo 2

Meios Porosos

Cada ambiente sedimentar possui diferentes características em relação a forma e ao tipo de sedimento, o que influencia diretamente no movimento dos fluidos dentro do meio poroso. Para modelar escoamentos em rochas sedimentares é necessário descrever a geometria e as propriedades físicas das rochas e dos fluidos envolvidos [1]. As propriedades da rocha refletem a capacidade que a mesma tem em transmitir e acumular fluidos em seus poros. Já as propriedades dos fluidos são aquelas que geralmente dependem da pressão do reservatório, como as massas específicas, viscosidades e compressibilidade. Neste capítulo as referidas propriedades são discutidas juntamente com alguns conceitos básicos na modelagem de meios porosos.

2.1 Definição de meio poroso

Um meio poroso é caracterizado por sua porosidade, que consiste na habilidade de armazenar fluidos, sendo determinada pela fração do volume de poros (volume vazio da formação). Outra propriedade importante na modelagem de meios porosos é a permeabilidade, que representa a capacidade do meio poroso em transmitir fluidos. A seguir essas propriedades são detalhadas.

2.1.1 Porosidade

A porosidade ϕ de um meio é a fração do volume que é ocupada por espaços vazios, isto é

$$\phi = \frac{V_p}{V_t}, \quad (2.1)$$

onde V_p é o volume de vazios da rocha e V_t é o volume total da mesma [41]. Portanto, a porosidade é uma grandeza adimensional que assume valores entre 0 e 1, sendo que $1 - \phi$ representa a fração do reservatório que é ocupada pela rocha.

Os espaços vazios são divididos em duas partes: poros interconectados, onde há escoamento, e poros desconectados. A fração de espaços vazios que são interconectados é chamada de porosidade efetiva. A porosidade é medida

geralmente em laboratório a partir de pequenas amostras de rocha. O valor da porosidade do reservatório é então estimado estatisticamente a partir dos resultados de análises de uma grande quantidade de amostras.

Quando os sedimentos são depositados na água, eles tem porosidade de aproximadamente 0.5. Entretanto, a medida que eles vão sendo enterrados, os minerais depositados, e a água saindo, os espaços entre os sedimentos diminuem consolidando-os como rochas. Quanto mais compacto for o meio poroso, menor é sua porosidade. Grãos com tamanhos não uniformes implicam em menor porosidade, pois os grãos menores ocupam os poros formados por grãos maiores. Por outro lado, rochas com grãos uniformes tem maior porosidade. Arenito e calcário tem porosidade de 0.05 a 0.5, sendo que a porosidade do arenito depende principalmente do processo de sedimentação com que a rocha foi formada, enquanto que a porosidade do calcário depende das mudanças que ocorrem após o depósito de sedimentos.

Meios incompressíveis tem porosidade estática, enquanto que rochas compressíveis possuem porosidade dinâmica. No caso compressível, a porosidade das rochas depende da pressão do reservatório devido à compressibilidade c_r , a qual relaciona a variação de volume com a variação de pressão p em um meio poroso:

$$c_r = \frac{1}{\phi} \frac{d\phi}{dp} = \frac{d \ln(\phi)}{dp}. \quad (2.2)$$

Considerando-se uma compressibilidade constante, e integrando a equação acima temos

$$\phi(p) = \phi_0 e^{c_r(p-p_0)}, \quad (2.3)$$

onde p_0 é uma pressão de referência para a qual a porosidade é ϕ_0 [17]. Usando expansão em séries de Taylor em (2.3) temos

$$\phi(p) = \phi_0 \left[1 + c_r (p - p_0) + \frac{1}{2!} c_r^2 (p - p_0)^2 + \dots \right]. \quad (2.4)$$

Normalmente assume-se a aproximação linear:

$$\phi(p) \approx \phi_0 [1 + c_r (p - p_0)]. \quad (2.5)$$

2.1.2 Permeabilidade

A permeabilidade representa a habilidade do meio poroso em transmitir fluidos através dos seus poros interconectados. É um parâmetro definido em função do fluxo para medir a capacidade de transmissão do fluido quando o meio poroso está completamente saturado com o mesmo. Quando existe um único fluido no meio poroso, esta propriedade recebe o nome de permeabilidade absoluta.

Em termos das equações que modelam escoamentos em meios porosos, a permeabilidade é um fator de proporcionalidade entre a taxa de escoamento e a pressão. Sua unidade no Sistema Internacional de Unidades (SI) é m^2 , sendo mais comumente expressa em unidade de Darcy (D) ou mili-Darcy

(mD), onde $1\text{D} \approx 0.987 \times 10^{-12}\text{m}^2$. Tipicamente, reservatórios tem permeabilidade variando de 0.1mD a 20D para líquidos e menos de 10mD para gases.

Rochas com poros grandes e bem conectados resultam em uma permeabilidade alta, como é o caso dos arenitos. Por outro lado, rochas com poros menores e não tão conectados possuem baixa permeabilidade e são conhecidas como rochas impermeáveis. Normalmente a permeabilidade é altamente heterogênea devido às diferentes partículas existentes numa rocha, grau de cimentação e transição entre diferentes formações rochosas. Portanto, em locais próximos pode haver uma grande variação na permeabilidade.

Geralmente denotada por K , a permeabilidade é dada por um tensor simétrico positivo definido

$$K = \begin{bmatrix} K_{xx} & K_{xy} & K_{xz} \\ K_{yx} & K_{yy} & K_{yz} \\ K_{zx} & K_{zy} & K_{zz} \end{bmatrix}, \quad (2.6)$$

onde os termos da diagonal representam como a vazão em uma direção axial depende do gradiente de pressão na mesma direção, e os demais termos mostram a dependência entre a vazão em uma direção axial e o gradiente de pressão em direções perpendiculares [18]. Se a permeabilidade é isotrópica, então K se torna um escalar. Quando K é espacialmente constante, tem-se um meio homogêneo, caso contrário o meio poroso é heterogêneo. Na maioria dos usos em simulações de reservatórios de petróleo assume-se K como sendo diagonal.

2.2 Introdução à física de um meio poroso

Em geral, água, óleo e gás existem simultaneamente em um reservatório de petróleo e deslocam-se por diferentes processos [11]. A seguir destacamos os principais tipos de deslocamentos que ocorrem dentro de um reservatório.

- **Embebição:** Um deslocamento por embebição ocorre quando a fase molhante aumenta. Por exemplo, em um meio poroso com água, a embebição fará com que a água desloque o óleo.
- **Drenagem:** Um processo de deslocamento por drenagem ocorre quando a fase não molhante aumenta. Por exemplo, em um meio poroso com água, a drenagem fará com que o óleo desloque a água.
- **Embebição espontânea:** Um processo de embebição espontâneo ocorre quando uma fase molhante invade um meio poroso sob a ação de forças superficiais e ausência de qualquer outra força externa.
- **Métodos de recuperação de óleo:** Os métodos de recuperação de óleo incluem os processos de recuperação primária, secundária e terciária vistos anteriormente.

Independentemente do processo de deslocamento, é esperado que um reservatório em operação produza óleo, gás natural e água.

2.2.1 Propriedades dos fluidos

As propriedades dos fluidos presentes em um reservatório devem ser consideradas para o entendimento do comportamento do escoamento. Geralmente uma amostra representativa do reservatório é retirada e as propriedades dos fluidos são medidas em laboratório. Quando dados de laboratório não estão disponíveis, fórmulas empíricas são utilizadas para descrever as propriedades dos fluidos. A seguir, as definições de compressibilidade e viscosidade de fluidos são introduzidas.

Compressibilidade

A compressibilidade (c_f)¹ relaciona a variação do volume (V) ou massa específica (ρ) com a variação de pressão p :

$$c_f = -\frac{1}{V} \frac{\partial V}{\partial p} \Big|_T = \frac{1}{\rho} \frac{\partial \rho}{\partial p} \Big|_T, \quad (2.7)$$

em uma temperatura T fixa. Integrando-se a equação acima temos

$$\rho = \rho_0 e^{c_f(p-p_0)}, \quad (2.8)$$

onde p_0 é uma pressão de referência para a qual a massa específica é ρ_0 [11]. Usando expansão em séries de Taylor temos

$$\rho = \rho_0 \left[1 + c_f(p - p_0) + \frac{1}{2!} c_f^2 (p - p_0)^2 + \dots \right], \quad (2.9)$$

e pode-se obter a aproximação

$$\rho \approx \rho_0 [1 + c_f(p - p_0)]. \quad (2.10)$$

A expressão acima também pode ser utilizada para descrever a relação entre a compressibilidade e densidade da rocha. Para o caso de gases, a lei dos gases, que relaciona pressão, volume e temperatura, pode ser utilizada:

$$pV = nRTZ, \quad (2.11)$$

onde p é a pressão, V é o volume, n é o número de mols, R é a constante universal dos gases ($R \approx 8,3144$ nas unidades do SI), T é a temperatura e Z é o fator de compressibilidade do gás. Note que um gás tende a se comportar como ideal quando $Z \approx 1$. A equação (2.11) pode ainda ser expressa em

¹Formalmente, a compressibilidade é uma propriedade do escoamento, e não do fluido. Assim a propriedade c_f associada a um fluido deve ser entendida como um parâmetro para caracterizar o escoamento daquele fluido.

termos da massa específica, para isto basta multiplicar o número de mols por volume pelo peso molecular W , obtendo-se assim:

$$\rho = \frac{pW}{RTZ}. \quad (2.12)$$

Portanto, utilizando a equação (2.12) em (2.7) tem-se:

$$c_g = c_f = \frac{1}{p} - \frac{1}{Z} \left. \frac{\partial Z}{\partial p} \right|_T. \quad (2.13)$$

Os escoamentos presentes no reservatório podem ser classificados como incompressíveis, levemente compressíveis ou compressíveis. Um escoamento incompressível possui compressibilidade zero, o que implica uma massa específica constante independentemente da pressão. Um escoamento levemente compressível possui uma compressibilidade baixa e constante, tendo a sua massa específica variando linearmente com a pressão. Um escoamento compressível, por sua vez, possui compressibilidade alta e sua massa específica cresce com a pressão, tendendo a se estabilizar em altas pressões. Em modelagens de escoamentos multifásicos em reservatórios de petróleo, o escoamento da água é tratado como incompressível e o do gás é considerado compressível. Já o do óleo é considerado levemente compressível quando a pressão do reservatório é maior que a pressão de ponto de bolha, e compressível quando a pressão do reservatório é menor que a pressão de ponto de bolha. A pressão de ponto de bolha é a pressão em que a primeira bolha de gás é liberada do óleo. Ou seja, para uma pressão acima do ponto de bolha o óleo está insaturado e possui gás dissolvido que pode ser liberado, enquanto que para uma pressão abaixo do ponto de bolha o óleo está completamente saturado com gás.

Viscosidade

A viscosidade é a medida da resistência de um fluido ao próprio escoamento. Os gases, que possuem moléculas distanciadas, apresentam baixa resistência ao escoamento e portanto, baixa viscosidade. Por outro lado, fluidos mais densos apresentam alta resistência ao escoamento, e conseqüentemente alta viscosidade.

É possível medir a variação da viscosidade com relação à pressão do reservatório considerando o efeito da pressão nas massas específicas dos fluidos. Por exemplo, o escoamento da água é incompressível e, portanto, quando a pressão aumenta a viscosidade da água não varia. Já o escoamento do gás é compressível e sua viscosidade é baixa quando a pressão é baixa, aumentando quando a pressão aumenta, mas tendendo ao equilíbrio em altas pressões. Para o caso do óleo, a relação entre a pressão do reservatório e a viscosidade deve considerar que o óleo pode transferir massa para a fase gás. Quando a pressão é maior que a pressão de ponto de bolha, a massa específica do óleo diminui com a queda de pressão, fazendo com que a viscosidade do

óleo decresça a medida que a pressão cai. No caso da pressão no reservatório ser menor que a pressão do ponto de bolha, ocorre a vaporização na mistura à medida que a pressão diminui, ou seja, o gás diluído no óleo se desenvolve e forma bolhas de gás em expansão, deixando o óleo menos diluído e causando o encolhimento progressivo do mesmo devido à transferência de massa para a fase gasosa. Ao mesmo tempo, ocorre uma expansão do óleo e do gás, no entanto, o efeito da liberação de gás é dominante e responsável por um aumento significativo na viscosidade do óleo à medida que a pressão do reservatório cai.

O conhecimento sobre a relação entre as viscosidades dos fluidos envolvidos no escoamento é extremamente importante para a tomada de decisões. Por exemplo, como vimos anteriormente, os processos de recuperação secundária apresentam dificuldades quando o óleo possui alta viscosidade, pois o mesmo permite a formação de dedos viscosos que facilitam o avanço de fluidos menos viscosos para os poços de produção. Nesse caso, os processos de recuperação terciária são alternativas a serem consideradas para facilitar o movimento do óleo, os quais procuram deixar mais próximas as mobilidades dos fluidos envolvidos no escoamento, seja diminuindo a viscosidade do óleo ou aumentando a viscosidade dos outros fluidos.

2.3 Princípios de homogeneização e *upscaling*

Existe uma diferença significativa nas escalas envolvidas nos problemas de extração de petróleo. Os reservatórios possuem escala em quilômetros, enquanto que os poros da rocha são da ordem de centenas de micrômetros. Simulações de reservatórios raramente são feitas diretamente no nível de resolução dos parâmetros geofísicos. Utiliza-se, em vez disso, algum tipo de *upscaling* ou homogeneização, onde é feito um processo de propagação de propriedades e parâmetros de um modelo de uma determinada resolução para um modelo de resolução inferior [13]. Vale ressaltar que a malha computacional utilizada na simulação deve ter resolução igual ou superior do que a malha geológica, na qual os parâmetros são representados.

Ao aplicar as técnicas de *upscaling*, diferentes escalas de malha geológica são introduzidas para conseguir levar em conta a heterogeneidade do meio. Neste processo, regiões heterogêneas de um modelo detalhado de reservatório são substituídas por regiões homogêneas, gerando um modelo mais grosso do mesmo reservatório [21]. O novo modelo deve ser equivalente ao anterior, porém com muito menos parâmetros. As propriedades efetivas das novas regiões homogêneas são definidas de modo que preservem os efeitos das variações em pequena escala em um sentido médio. Na figura 2.1 temos uma representação do *upscaling* das propriedades petrofísicas, sendo que a permeabilidade absoluta foi a propriedade considerada. A forma como essa média deve ser calculada depende do tipo de propriedade a ser ampliada.

A tarefa de aplicar *upscaling* não é trivial e constitui uma das áreas de pes-

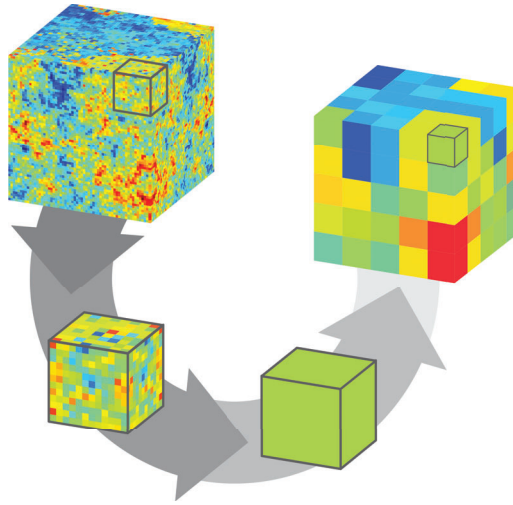


Figura 2.1: *Upscaling* das propriedades petrofísicas, sendo que a permeabilidade absoluta foi a propriedade considerada.

quiza mais ativas na indústria de petróleo [2]. Representar sistematicamente a heterogeneidade de uma escala fina e detalhada do reservatório requer métodos matemáticos especializados [48]. Além disso, preservar a geometria dos modelos geológicos complexos fornecidos na caracterização do reservatório é um grande desafio. Como esses procedimentos de média não consideram o acoplamento além do domínio local, eles também possuem dificuldades em levar em consideração o efeito das correlações de longo alcance e padrões de escoamento em grande escala no reservatório. Nesse sentido, técnicas que utilizam algum tipo de informação global são recomendadas para preservar as tendências de escala global e as estruturas de heterogeneidade de escala fina [9, 10, 26, 46].

Na modelagem multiescala para rochas permeáveis podemos destacar os seguintes modelos:

- Modelos microscópicos: usados para determinar a porosidade, permeabilidade, propriedades elétricas e elásticas das rochas através de estudos de amostras usando microscópio eletrônico com resolução de micrômetros ou imagens geradas por tomografia (*CT-scans*).
- Modelos mesoscópicos: fazem *upscaling* das propriedades básicas da rocha para uma escala intermediária (ordem de milímetros e centímetros), representando uma média do escoamento na escala do poro.
- Modelos macroscópicos: representam a geologia do reservatório no nível de detalhe necessário para a simulação. Dados sobre a geometria e a

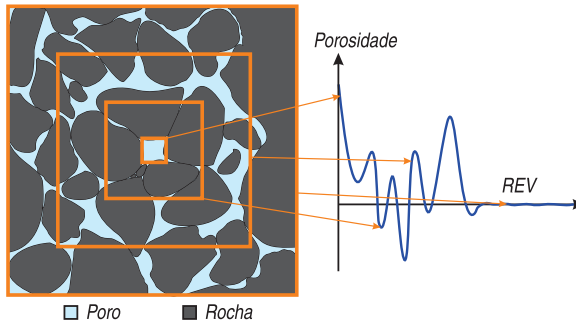


Figura 2.2: Escolha de um REV considerando a propriedade de porosidade, a qual vale um na parte correspondente a um poro e zero na parte correspondente à rocha.

distribuição das propriedades petrofísicas são utilizados numa descrição volumétrica que decompõe o reservatório num conjunto de células.

Cada modelo representa diferentes aplicações no estudo de escoamentos multifásicos em meios porosos.

2.4 Volumes elementares representativos

Considerando que as propriedades do fluxo petrofísico são constantes em alguns intervalos de escala, é possível destacar volumes representativos. Os Volumes Elementares Representativos, do inglês *Representative Elementary Volumes* (REVs), são os menores volumes sobre os quais uma medida pode ser feita para representar o todo [5]. Tais volumes encontram-se entre a escala dos poros da rocha (de 10^{-6} à 10^{-3} metros) e a escala de Darcy (tipicamente entre 10^{-2} e 10^1 metros). Isso significa que o tamanho de um REV varia entre milímetros cúbicos e centímetros cúbicos [36]. Na figura 2.2 temos uma ilustração de como escolhe-se um REV considerando a propriedade de porosidade, a qual vale um na parte correspondente a um poro e zero na parte correspondente à rocha. Note que o REV é definido onde a propriedade considerada torna-se constante.

2.5 A lei de Darcy

O fluxo físico de água em um filtro vertical de areia foi estudado, experimentalmente, por Henry Darcy em 1856 [15]. O filtro de areia foi inicialmente preenchido com água, sendo as taxas de fluxo de entrada e saída iguais e os parâmetros hidráulicos de entrada e saída medidos com manômetros de coluna de mercúrio, veja a ilustração do conceito utilizado na figura 2.3.

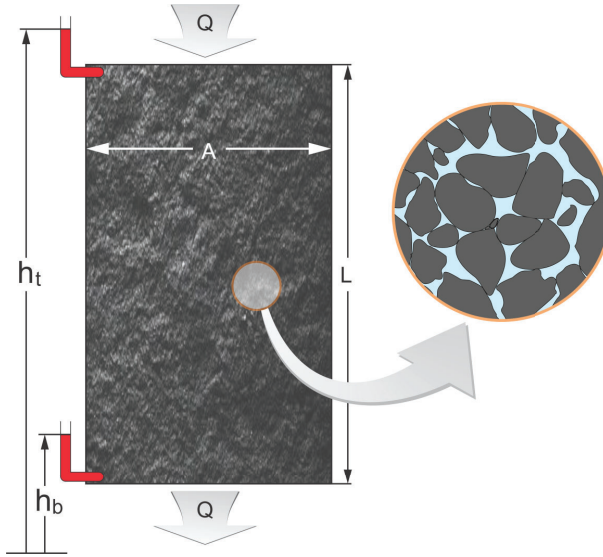


Figura 2.3: Conceito utilizado experimentalmente por Darcy.

A altura hidráulica em relação a um valor fixo z é dada por

$$h = -\frac{p}{\rho g} + z, \quad (2.14)$$

onde p é a pressão da água, ρ é a massa específica da água e g é a magnitude da aceleração da gravidade. Com a água fluindo no meio poroso, Darcy mostrou que para o mesmo filtro de areia a taxa de fluxo Q é proporcional à área da seção transversal A e à diferença na altura hidráulica $h_t - h_b$, e inversamente proporcional ao tamanho do tanque L . Matematicamente temos:

$$\frac{Q}{A} = k \frac{h_t - h_b}{L} \tilde{\mathbf{e}}, \quad (2.15)$$

onde $\tilde{\mathbf{e}}$ é o vetor direção do escoamento e k é a condutividade hidráulica, que para o esquema considerado é dada por $k = \frac{\rho g K}{\mu}$, sendo μ é a viscosidade do fluido e K é a permeabilidade absoluta do meio.

O fluxo de Darcy $\mathbf{u} = \frac{Q}{A}$ ao longo do filtro de areia representa o volume total de fluido pela área total por tempo, sendo também é conhecido como velocidade de Darcy. No entanto, como apenas uma fração da área da seção transversal é considerada para o fluxo devido a presença dos grãos de areia, \mathbf{u} é uma velocidade macroscópica média dos fluxos microscópicos que ocorrem dentro de REV's, dada por

$$\mathbf{u} = \frac{Q}{A} = k \frac{h_t - h_b}{L} \tilde{\mathbf{e}} = \frac{\rho g K}{\mu} \nabla h = \frac{\rho g K}{\mu} \nabla \left(-\frac{p}{\rho g} + z \right) = -\frac{K}{\mu} (\nabla p - \rho g \nabla z), \quad (2.16)$$

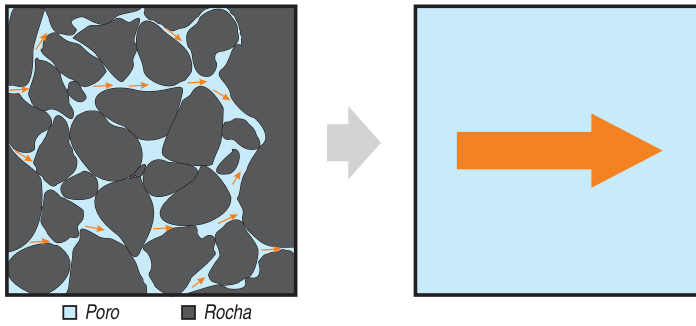


Figura 2.4: Representação para a velocidade dada pela Lei de Darcy em um REV. A velocidade é composta pela média dos fluxos que ocorrem dentro do REV.

onde z é a profundidade. A equação anterior é conhecida como Lei de Darcy e representa a conservação de quantidade de movimento, na qual duas forças governam o fluxo: a pressão e a gravidade. O fluxo dado pela Lei de Darcy é estudado na escala de Darcy e é composto por médias dos fluxos que ocorrem dentro dos REV. Na figura 2.4 temos uma representação para a velocidade média dada pela Lei de Darcy em um REV.

2.6 Exercícios

1. De acordo com as definições apresentadas, é possível identificar uma correlação entre porosidade e permeabilidade? Explique.
2. Encontre uma expressão para a densidade da rocha ρ_r , sabendo que a compressibilidade da mesma é dada por

$$c_r = \frac{1}{\rho_r} \left. \frac{\partial \rho_r}{\partial p} \right|_T.$$

Capítulo 3

Modelagem de escoamentos monofásicos em meios porosos

Escoamentos monofásicos em meios porosos são induzidos devido à aplicação de pressão ou fluxo no domínio saturado por apenas um fluido [12]. Os princípios fundamentais que descrevem este tipo de escoamento refletem a conservação de massa e a relação entre pressão e velocidade em um meio poroso, que é dada pela Lei de Darcy [18]. Neste capítulo apresentamos como o escoamento monofásico em meios porosos é modelado.

3.1 Equações gerais para escoamentos monofásicos

O escoamento de um fluido em um meio poroso é o fluxo que ocorre nos espaços vazios interconectados do reservatório. As equações que modelam esse fenômeno consideram as propriedades do fluido e as características do meio poroso [33].

Se considerarmos um volume elementar representativo V , a conservação de massa do fluido implica que a massa acumulada em V deve ser igual a taxa de fluxo pelas bordas de V mais a quantidade de massa injetada em V , ou seja

$$\underbrace{\frac{\partial}{\partial t} \int_V \phi \rho \, d\mathbf{x}}_{\text{Massa em } V} + \underbrace{\int_{\partial V} \rho \mathbf{u} \cdot \mathbf{n} \, ds}_{\text{Fluxo pelas bordas}} = \underbrace{\int_V q \, d\mathbf{x}}_{\text{Massa injetada}}. \quad (3.1)$$

Aplicando-se o teorema da divergência temos

$$\frac{\partial}{\partial t} \int_V \phi \rho \, d\mathbf{x} + \int_V \nabla \cdot (\rho \mathbf{u}) \, d\mathbf{x} = \int_V q \, d\mathbf{x} \quad (3.2)$$

e alternando $\frac{\partial}{\partial t}$ com a integração espacial podemos escrever

$$\int_V \left(\frac{\partial}{\partial t} (\phi \rho) + \nabla \cdot (\rho \mathbf{u}) \right) \, d\mathbf{x} = \int_V q \, d\mathbf{x}. \quad (3.3)$$

Como a equação (3.3) vale para qualquer volume elementar V , obtém-se a equação diferencial parcial

$$\frac{\partial}{\partial t}(\phi\rho) + \nabla \cdot (\rho\mathbf{u}) = q. \quad (3.4)$$

Escrevendo a Lei de Darcy em (3.4), obtemos a seguinte equação diferencial parcial com incógnitas p e ρ :

$$\frac{\partial}{\partial t}(\phi\rho) - \nabla \cdot \left(\frac{\rho K}{\mu} (\nabla p - \rho g \nabla z) \right) = q, \quad (3.5)$$

que através da regra do produto pode ser escrita como

$$\phi \frac{\partial \rho}{\partial t} + \rho \frac{\partial \phi}{\partial t} - \nabla \cdot \left(\frac{\rho K}{\mu} (\nabla p - \rho g \nabla z) \right) = q, \quad (3.6)$$

ou seja,

$$\phi \frac{\partial \rho}{\partial p} \frac{\partial p}{\partial t} + \rho \frac{\partial \phi}{\partial p} \frac{\partial p}{\partial t} - \nabla \cdot \left(\frac{\rho K}{\mu} (\nabla p - \rho g \nabla z) \right) = q. \quad (3.7)$$

Utilizando as relações entre pressão e porosidade, e pressão e massa específica, dadas respectivamente pelas equações (2.2) e (2.7), temos

$$\phi \rho c_f \frac{\partial p}{\partial t} + \rho \phi c_r \frac{\partial p}{\partial t} - \nabla \cdot \left(\frac{\rho K}{\mu} (\nabla p - \rho g \nabla z) \right) = q, \quad (3.8)$$

ou, equivalentemente,

$$\rho \phi c_t \frac{\partial p}{\partial t} - \nabla \cdot \left(\frac{\rho K}{\mu} (\nabla p - \rho g \nabla z) \right) = q, \quad (3.9)$$

onde $c_t = c_f + c_r$ representa a compressibilidade total.

Note que a equação (3.9) é não linear, pois ρ e c_t podem depender de p . No entanto, essas variáveis podem ser expressas de maneira explícita ou implícita como uma função da pressão [18]. A seguir apresentamos alguns casos especiais para a equação (3.9), os quais produzem diferentes tipos de escoamentos monofásicos [12].

3.1.1 Escoamento incompressível

Quando a rocha e o fluido são incompressíveis, ρ e ϕ são independentes de p , e portanto $c_t = 0$. Com isso, temos que a equação (3.9) torna-se uma equação elíptica com coeficientes variáveis:

$$-\nabla \cdot \left(\frac{\rho K}{\mu} (\nabla p - \rho g \nabla z) \right) = q. \quad (3.10)$$

Introduzindo o potencial do fluido $\Phi = p - \rho g z$, temos uma equação de Poisson dada por

$$-\nabla \cdot \left(\frac{\rho K}{\mu} \nabla \Phi \right) = q, \quad (3.11)$$

ou ainda uma equação de Laplace para os casos em que o termo fonte é nulo:

$$-\nabla \cdot \left(\frac{\rho K}{\mu} \nabla \Phi \right) = 0. \quad (3.12)$$

3.1.2 Compressibilidade constante

Se a compressibilidade do fluido é constante e independente da pressão, podemos considerar que a porosidade do meio e a viscosidade do fluido não dependem da pressão. Além disso, da equação (2.7), temos que

$$\nabla p = \frac{1}{\rho c_f} \nabla \rho, \quad (3.13)$$

permitindo escrever a equação (3.5) em função da massa específica

$$\phi \frac{\partial \rho}{\partial t} - \frac{1}{\mu c_f} \nabla \cdot (K(\nabla \rho - c_f \rho^2 g \nabla z)) = q. \quad (3.14)$$

A equação acima é uma equação parabólica, que no caso particular em que não existem efeitos gravitacionais e de termos fonte, transforma-se numa equação linear para a massa específica do fluido, similar à equação do calor com coeficientes variáveis:

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} = \frac{1}{\phi \mu c_f} \nabla \cdot (K \nabla \rho). \quad (3.15)$$

3.1.3 Escoamento levemente compressível

Quando a compressibilidade do fluido é pequena, pode-se assumir que a porosidade depende apenas de \mathbf{x} e que μ é constante, então a equação (3.9) pode ser reescrita como

$$\rho \phi c_t \frac{\partial p}{\partial t} - \frac{1}{\mu} \left(\rho \nabla \cdot (K \nabla p) + (K \nabla p) \cdot \nabla \rho \right) + \frac{1}{\mu} \nabla \cdot (\rho^2 g K \nabla z) = q. \quad (3.16)$$

De (3.13) temos que $\nabla \rho = \rho c_f \nabla p$. Usando essa relação, e desprezando os efeitos gravitacionais e de termos fonte por simplificação, temos

$$\rho \phi c_t \frac{\partial p}{\partial t} = \frac{\rho}{\mu} \left(\nabla \cdot (K \nabla p) + c_f \nabla p \cdot (K \nabla p) \right). \quad (3.17)$$

Quando c_f é suficientemente pequeno, tem-se que $c_f \nabla p \cdot (K \nabla p) \ll \nabla \cdot (K \nabla p)$, e assim, o termo $c_f \nabla p \cdot (K \nabla p)$ pode ser negligenciado, resultando em uma equação linear para a pressão do fluido, similar à equação (3.15)

$$\frac{\partial p}{\partial t} = \frac{1}{\phi \mu c_t} \nabla \cdot (K \nabla p). \quad (3.18)$$

Se o fluido é um gás ideal temos que

$$\rho = \frac{pW}{RT}, \quad (3.19)$$

e, como visto na equação (2.13), $c_f = 1/p$. Considerando que os efeitos da gravidade são insignificantes para os gases, e assumindo que ϕ é uma função apenas de \mathbf{x} e $q = 0$, a equação (3.9) pode ser escrita como:

$$\frac{pW}{RT} \phi \frac{1}{p} \frac{\partial p}{\partial t} = \nabla \cdot \left(\frac{pW}{RT} \frac{K}{\mu} \nabla p \right), \quad (3.20)$$

resultando em

$$\frac{\partial p}{\partial t} = \frac{1}{\phi\mu} \nabla \cdot (pK\nabla p), \quad (3.21)$$

que é equivalente à seguinte expressão simplificada:

$$\frac{\partial p^2}{\partial t} = \frac{1}{\phi\mu c_f} \nabla \cdot (K\nabla p^2). \quad (3.22)$$

3.1.4 Condições auxiliares

Para completar as equações diferenciais parciais que modelam escoamentos monofásicos em meios porosos são necessárias condições de contorno, sendo também requerida uma condição inicial nos casos das equações de natureza parabólica [33].

É comum nas simulações de reservatórios considerar um sistema fechado, isto é, sem escoamento nas bordas externas, modelada por uma condição de fluxo nulo, ou seja, uma condição de contorno de Neumann homogênea:

$$\mathbf{u} \cdot \mathbf{n} = 0 \quad \text{em } \partial\Omega_u, \quad (3.23)$$

onde $\partial\Omega_u$ representa as partes da borda do domínio Ω que recebem condições de contorno do tipo Neumann. Nesse caso $\partial\Omega_u = \partial\Omega$.

Também é comum que parte do reservatório esteja em contato com um grande sistema aquífero, cuja pressão é conhecida e pode ser modelada em termos de uma condição de contorno de Dirichlet:

$$p(\mathbf{x}) = p_b \quad \text{em } \partial\Omega_p, \quad (3.24)$$

onde $\partial\Omega_p$ representa as partes da borda do domínio que recebem condições de contorno do tipo Dirichlet e p_b é o valor da condição de contorno.

Alternativamente, partes da borda podem ter fluxo de entrada prescrito, modelado em termos de uma condição de contorno de Neumann não homogênea:

$$\mathbf{u} \cdot \mathbf{n} = u_b \quad \text{em } \partial\Omega_u, \quad (3.25)$$

onde u_b é o valor da condição de contorno.

A borda do domínio pode ser dividida entre condições de Neumann e Dirichlet, desde que $\partial\Omega = \partial\Omega_p \cup \partial\Omega_u$ e $\partial\Omega_p \cap \partial\Omega_u = \emptyset$. Considerando, por exemplo, um domínio bidimensional $\Omega = [0, L_x] \times [0, L_y]$, é comum impor condições chamadas de tipo *slab*: $\partial\Omega = \partial\Omega_{in} \cup \partial\Omega_{no} \cup \partial\Omega_{out}$, onde

$$\begin{aligned} \partial\Omega_{in} &= \{(0, y) : y \in [0, L_y]\} \\ \partial\Omega_{no} &= \{(x, 0) \text{ e } (x, L_y) : x \in [0, L_x]\} \\ \partial\Omega_{out} &= \{(L_x, y) : y \in [0, L_y]\} \end{aligned}$$

sendo impostas as condições de contorno:

- Fluxo imposto $\mathbf{u} \cdot \mathbf{n} = u_b$, na borda de entrada $\partial\Omega_{in}$ (esquerda);

3.2 Unidades de medida

Nesta seção descrevemos as unidades de medida para as variáveis utilizadas em escoamentos monofásicos e a relação entre elas através das equações governantes. A tabela 3.1 apresenta cada parâmetro e seus respectivos símbolos e unidades no SI.

| Parâmetro | Símbolo | Unidade no SI |
|-------------------------|-----------------|-----------------------|
| Tempo | t | s |
| Comprimento | L, x, y, z | m |
| Porosidade | ϕ | - |
| Massa específica | ρ | kg/m ³ |
| Permeabilidade | K | m ² |
| Viscosidade | μ | Pa · s |
| Compressibilidade | c_f, c_r, c_t | Pa ⁻¹ |
| Aceleração da gravidade | g | m/s ² |
| Profundidade | z | m |
| Pressão | p | Pa |
| Velocidade | \mathbf{u} | m/s |
| Taxa de fluxo | q | kg/m ³ · s |

Tabela 3.1: Parâmetros, símbolos e unidades de medida no SI que são utilizados em escoamentos monofásicos.

Na prática, várias unidades de medida utilizadas na simulação de reservatórios não são dadas no SI e, portanto, conversões são frequentemente requeridas [11]. Por exemplo, a permeabilidade geralmente é expressa em Darcy ou mili-Darcy, o tempo em dias, a pressão pode ser encontrada em psi (1psi \approx 6894,7573Pa) e a viscosidade em centipoise (1cP = 0.001Pa · s).

O sistema de equações governantes para escoamentos monofásicos considera as equações (3.4) e (2.16), juntamente com condições de contorno, como segue:

$$\left\{ \begin{array}{ll} \frac{\partial}{\partial t}(\phi\rho) + \nabla \cdot (\rho\mathbf{u}) = q & \text{em } \Omega \\ \mathbf{u} = -\frac{K}{\mu}(\nabla p - \rho g \nabla z) & \text{em } \Omega \\ p = p_b & \text{em } \partial\Omega_p \\ \mathbf{u} \cdot \mathbf{n} = u_b & \text{em } \partial\Omega_u. \end{array} \right. \quad (3.28)$$

Uma verificação da consistência nas unidades de medida nos fornece

$$[q] = \frac{1}{s} \frac{\text{kg}}{\text{m}^3} + \frac{1}{\text{m}} \frac{\text{kg}}{\text{m}^3} \frac{\text{m}}{\text{s}} = \frac{\text{kg}}{\text{m}^3 \cdot \text{s}} \quad (3.29)$$

para a primeira equação, e

$$[\mathbf{u}] = \frac{\text{m}^2}{\text{Pa} \cdot \text{s}} \left(\frac{\text{Pa}}{\text{m}} + \frac{\text{kg}}{\text{m}^3} \frac{\text{m}}{\text{s}^2} \frac{\text{m}}{\text{m}} \right) = \frac{\text{m}}{\text{s}} + \frac{\text{m}^2}{\frac{\text{kg}}{\text{m} \cdot \text{s}^2} \cdot \text{s}} \frac{\text{kg}}{\text{m}^2 \cdot \text{s}^2} = \frac{\text{m}}{\text{s}} \quad (3.30)$$

para a segunda equação.

3.2.1 Adimensionalização

A adimensionalização das equações governantes é uma prática comum no estudo de equações diferenciais e na simulação numérica [4, 29]. A seguir apresentamos um exemplo de adimensionalização para as equações que descrevem escoamentos monofásicos no caso incompressível, onde o sistema de equações (3.28) pode ser simplificado para

$$\left\{ \begin{array}{ll} \nabla \cdot \mathbf{u} = \frac{q}{\rho} & \text{em } \Omega \\ \mathbf{u} = -\frac{K}{\mu}(\nabla p - \rho g \nabla z) & \text{em } \Omega \\ p = p_b & \text{em } \partial\Omega_p \\ \mathbf{u} \cdot \mathbf{n} = u_b & \text{em } \partial\Omega_u. \end{array} \right. \quad (3.31)$$

Para obter a forma adimensional do problema acima, consideramos as seguintes quantidades adimensionais:

$$\begin{aligned} \mathbf{u}^* &= \frac{\mathbf{u}}{u_{\text{ref}}}, & p^* &= \frac{p}{p_{\text{ref}}}, \\ K^* &= \frac{K}{K_{\text{max}}}, & q^* &= \frac{L}{\rho u_{\text{ref}}} q, \\ g^* &= \frac{g}{g_{\text{ref}}}, & z^* &= \frac{z}{L}, \end{aligned}$$

onde L é um comprimento característico, K_{max} é o valor máximo atingido pela permeabilidade absoluta e as variáveis de referência u_{ref} , p_{ref} e g_{ref} satisfazem

$$p_{\text{ref}} = \frac{L\mu u_{\text{ref}}}{K_{\text{max}}} \quad \text{e} \quad g_{\text{ref}} = \frac{\mu u_{\text{ref}}}{\rho K_{\text{max}}}. \quad (3.32)$$

Note que cada quantidade com o sobrescrito $*$ representa uma quantidade adimensional. Usando essas quantidades nas equações de (3.31) e considerando o operador adimensional $\nabla^* = L\nabla$, obtemos

$$\left\{ \begin{array}{ll} \frac{1}{L} \nabla^* \cdot (u_{\text{ref}} \mathbf{u}^*) = \frac{\rho u_{\text{ref}}}{\rho L} q^* & \text{em } \Omega \\ u_{\text{ref}} \mathbf{u}^* = -\frac{K_{\text{max}} K^*}{\mu} \left(\frac{1}{L} \nabla^* (p_{\text{ref}} p^*) - \rho g_{\text{ref}} g^* \frac{1}{L} \nabla^* (Lz^*) \right) & \text{em } \Omega \\ p_{\text{ref}} p^* = p_b & \text{em } \partial\Omega_p \\ (u_{\text{ref}} \mathbf{u}^*) \cdot \mathbf{n} = u_b & \text{em } \partial\Omega_u. \end{array} \right. \quad (3.33)$$

Substituindo os valores de p_{ref} e g_{ref} e manipulando as equações, concluímos que a forma adimensional do sistema (3.31) é dada por

$$\begin{cases} \nabla^* \cdot \mathbf{u}^* = q^* & \text{em } \Omega \\ \mathbf{u}^* = -K^*(\nabla^* p^* - g^* \nabla^* z^*) & \text{em } \Omega \\ p^* = p_b/p_{\text{ref}} & \text{em } \partial\Omega_p \\ \mathbf{u}^* \cdot \mathbf{n} = u_b/u_{\text{ref}} & \text{em } \partial\Omega_u. \end{cases} \quad (3.34)$$

3.3 Meios homogêneos

Com o objetivo de apresentar alguns modelos frequentemente utilizados em simulações de reservatórios de petróleo, vamos adotar algumas hipóteses simplificadoras para o escoamento. Considere o sistema de equações governantes de um escoamento incompressível, isotérmico e sem efeito gravitacional de um fluido de massa específica constante num meio poroso incompressível:

$$\begin{cases} \nabla \cdot \mathbf{u} = \frac{q}{\rho} & \text{em } \Omega \\ \mathbf{u} = -\frac{K}{\mu} \nabla p & \text{em } \Omega \\ p = p_b & \text{em } \partial\Omega_p \\ \mathbf{u} \cdot \mathbf{n} = u_b & \text{em } \partial\Omega_u. \end{cases} \quad (3.35)$$

Para escoamentos monofásicos governados pelo sistema (3.35), um meio poroso é dito homogêneo quando a permeabilidade absoluta K é constante e uniforme, ou seja, não depende de \mathbf{x} . Meios porosos homogêneos são frequentemente utilizados em testes de verificação de códigos e implementações, em muitos casos através de comparações com soluções analíticas ou semi-analíticas para este problema elíptico bastante simplificado.

3.4 Meios heterogêneos e o projeto SPE10

Para escoamentos monofásicos governados pelo sistema (3.35), um meio poroso é dito heterogêneo quando a permeabilidade absoluta K varia com \mathbf{x} . Nesse caso, o escoamento tende a passar pelas regiões de alta permeabilidade e evitar regiões de baixa permeabilidade.

Na figura 3.2 temos um exemplo de campo de permeabilidades heterogêneo no domínio $\Omega = [0, 1] \times [0, 1]$, gerado em uma malha cartesiana regular com 64×64 células, por $K(\mathbf{x}) = e^{4.5\xi(\mathbf{x})}$, onde $\xi(\mathbf{x})$ é uma distribuição Gaussiana auto-semelhante de medida nula e função de covariância dada por $C(\mathbf{x}, \mathbf{y}) = |\mathbf{x} - \mathbf{y}|^{-1/2}$ [24]. O resultado é um campo com alto contraste de permeabilidade, que é definido como o quociente entre os valores máximo e mínimo da permeabilidade: $K_{\text{max}}/K_{\text{min}} \approx 10^6$.

Na figura 3.3 temos um exemplo campo de permeabilidades heterogêneo tridimensional. Trata-se de um campo realístico fornecido pela Sociedade

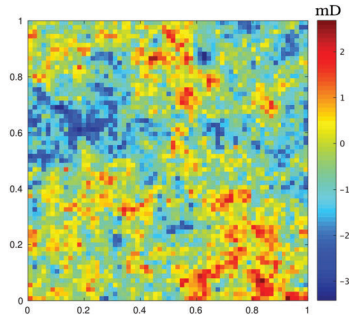


Figura 3.2: Campo de permeabilidades heterogêneo em escala logarítmica.

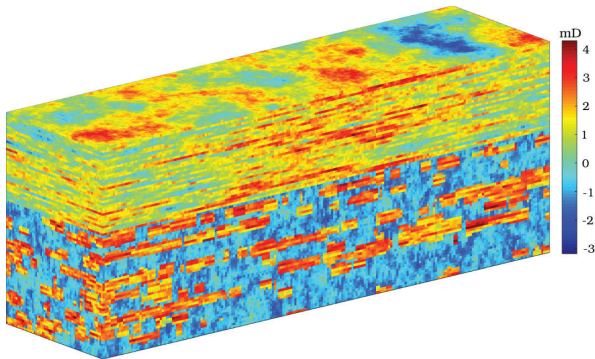


Figura 3.3: Campo de permeabilidades do projeto SPE10 em escala logarítmica.

de Engenheiros de Petróleo (*Society of Petroleum Engineers - SPE*) através do *projeto SPE10* (<https://www.spe.org/web/csp/datasets/set02.htm>) [13], um modelo utilizado como referência em simulações de reservatórios de petróleo.

O modelo SPE10, que possui uma geometria relativamente simples, é muito utilizado para a comparação entre métodos computacionais e simuladores pela comunidade acadêmica. O conjunto de dados é uma realização geoestatística tridimensional das formações *Jurassic Upper Brent* do Mar do Norte de dimensões $365.76\text{m} \times 670.56\text{m} \times 51.81\text{m}$. Uma malha cartesiana regular com $60 \times 220 \times 85$ células é utilizada para descrever o modelo, sendo que as 35 camadas superiores representam a formação marinha rasa de *Tarbert* e as 50 camadas inferiores representam a formação fluvial de *Ness* (uma formação do tipo canalizada de alto contraste).

Geralmente subconjuntos dos campos do projeto SPE10 são utilizados em testes numéricos, como por exemplo, a escolha de uma das 85 camadas para a simulação de problemas bidimensionais. Na figura 3.4 temos a 36ª camada do campo SPE10, amplamente utilizada em testes, comparações e validações de simuladores. Essa camada é uma formação do tipo canalizada

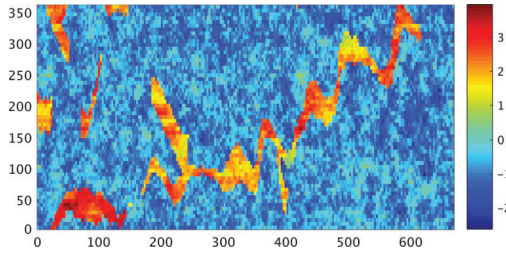


Figura 3.4: Permeabilidade da camada 36 do projeto SPE10 em escala logarítmica.

de alto contraste, com variações abruptas e descontinuidades na distribuição dos valores da permeabilidade, possuindo inclusive um canal de alta permeabilidade pronunciado.

3.5 Exercícios

1. Mostre que as equações (3.21) e (3.22) são equivalentes.
2. Escreva a versão unidimensional do sistema (3.35) com condição de contorno de Neumann à esquerda e de Dirichlet à direita. Mostre como o sistema pode ser escrito em cada um dos casos a seguir:
 - (a) K escalar e homogêneo;
 - (b) K escalar e heterogêneo, dado por uma função contínua em x ;
 - (c) K escalar e heterogêneo, com descontinuidades em x .
3. Forneça a forma adimensional do seguinte problema:

$$\left\{ \begin{array}{ll} \rho\phi c_t \frac{\partial p}{\partial t} + \nabla \cdot (\rho \mathbf{u}) = q & \text{em } \Omega \\ \mathbf{u} = -\frac{K}{\mu} (\nabla p - \rho g \nabla z) & \text{em } \Omega \\ p = p_b & \text{em } \partial\Omega_p \\ \mathbf{u} \cdot \mathbf{n} = u_b & \text{em } \partial\Omega_u. \end{array} \right. \quad (3.36)$$

Capítulo 4

Método de volumes finitos para equações elípticas

Neste capítulo apresentamos esquemas de volumes finitos para equações elípticas com o objetivo de aproximar numericamente a solução do seguinte sistema:

$$\begin{cases} -\nabla \cdot (K\nabla p) = q & \text{em } \Omega \\ p = p_b & \text{em } \partial\Omega_p \\ (-K\nabla p) \cdot \mathbf{n} = u_b & \text{em } \partial\Omega_u, \end{cases} \quad (4.1)$$

sendo a pressão relacionada com a velocidade de Darcy:

$$\mathbf{u} = -K\nabla p. \quad (4.2)$$

Observe que a viscosidade (μ) e a massa específica (ρ), que são uniformes no caso incompressível, foram consideradas unitárias com o objetivo de facilitar o desenvolvimento da formulação. Para reverter essa simplificação, basta dividir K e q pelos valores constantes a serem adotados para μ e ρ , respectivamente.

Para obter uma discretização de volumes finitos integramos a primeira equação de (4.1) sobre um volume de controle genérico V_k

$$-\int_{V_k} \nabla \cdot (K\nabla p) \, d\mathbf{x} = \int_{V_k} q \, d\mathbf{x}, \quad (4.3)$$

e utilizando o teorema da divergência chegamos em

$$-\int_{\partial V_k} (K\nabla p) \cdot \mathbf{n}_k \, ds = \int_{V_k} q \, d\mathbf{x}, \quad (4.4)$$

onde \mathbf{n}_k é o vetor normal à V_k . A discretização de K deve ser tratada adequadamente [19, 47, 43], tendo grande impacto na solução aproximada. Para introduzir a correta discretização deste termo, utilizaremos um domínio unidimensional para o estudo deste problema na próxima seção.

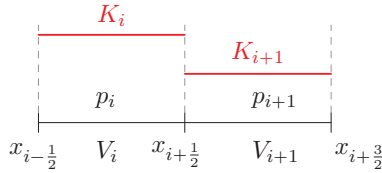


Figura 4.1: Esquema de volumes finitos unidimensional.

4.1 O caso unidimensional

Considere um domínio unidimensional $\Omega = [a, b]$ onde a primeira equação de (4.1) é escrita como:

$$-\frac{d}{dx} \left(K \frac{dp}{dx} \right) = q. \quad (4.5)$$

Aplicando o mesmo processo de discretização por volumes finitos discutido na seção anterior, temos uma partição do domínio em N intervalos $V_i = \left[x_{i-\frac{1}{2}}, x_{i+\frac{1}{2}} \right]$, temos que, integrando a equação em um V_i qualquer,

$$-\int_{x_{i-\frac{1}{2}}}^{x_{i+\frac{1}{2}}} q \, dx = \int_{x_{i-\frac{1}{2}}}^{x_{i+\frac{1}{2}}} \frac{d}{dx} \left(K \frac{dp}{dx} \right) dx = K \frac{dp}{dx} \Big|_{x_{i+\frac{1}{2}}} - K \frac{dp}{dx} \Big|_{x_{i-\frac{1}{2}}}. \quad (4.6)$$

Considerando que a permeabilidade absoluta é constante em cada volume de controle, que é a forma mais comum de apresentação desta propriedade, temos a situação apresentada na figura 4.1. No método de volumes finitos, a incógnita do problema (neste caso a pressão) é interpretada como sendo uma aproximação para a média da solução exata no volume de controle V_i , ou seja,

$$p_i \simeq \frac{1}{|V_i|} \int_{V_i} p(x) \, dx, \quad (4.7)$$

a qual será considerada constante por célula (como indicado na figura 4.1). Como temos que discretizar o termo $K \frac{dp}{dx}$ na borda do volume de controle, a primeira pergunta que surge é: como discretizar K ? Mais especificamente, quanto vale $K(x_{i+\frac{1}{2}})$? Uma resposta ingênua seria tomar a média simples de K nos volumes adjacentes:

$$K(x_{i+\frac{1}{2}}) = \frac{K_{i+1} + K_i}{2}. \quad (4.8)$$

Mas note que o termo $K \frac{dp}{dx}(x_{i+\frac{1}{2}})$ representa a vazão de uma quantidade (neste caso fluxo) ao longo da fronteira $x = x_{i+\frac{1}{2}}$ entre os volumes adjacentes, e obviamente deve preservar essa quantidade que passa através de $x_{i+\frac{1}{2}}$, saindo de um lado para outro. Se o método de volumes finitos possuir esta

propriedade, dizemos que o método é **conservativo**. Supondo a existência de um valor intermediário $p_{i+\frac{1}{2}}$ em $x = x_{i+\frac{1}{2}}$, podemos fazer a discretização do fluxo em cada lado de $x_{i+\frac{1}{2}}$ para encontrar o valor de $p_{i+\frac{1}{2}}$ que preserve o fluxo entre os volumes de controle. Desta forma,

$$\lim_{x \rightarrow x_{i+\frac{1}{2}}^-} K \frac{dp}{dx} \simeq K_i \frac{p_{i+\frac{1}{2}} - p_i}{\frac{\Delta x_i}{2}} \quad (4.9)$$

e

$$\lim_{x \rightarrow x_{i+\frac{1}{2}}^+} K \frac{dp}{dx} \simeq K_{i+1} \frac{p_{i+1} - p_{i+\frac{1}{2}}}{\frac{\Delta x_{i+1}}{2}}. \quad (4.10)$$

Impondo a continuidade do fluxo na interface, devemos ter:

$$\lim_{x \rightarrow x_{i+\frac{1}{2}}^-} K \frac{dp}{dx} = \lim_{x \rightarrow x_{i+\frac{1}{2}}^+} K \frac{dp}{dx}, \quad (4.11)$$

ou seja, os fluxos discretos devem satisfazer

$$2K_i \frac{p_{i+\frac{1}{2}} - p_i}{\Delta x_i} = 2K_{i+1} \frac{p_{i+1} - p_{i+\frac{1}{2}}}{\Delta x_{i+1}}. \quad (4.12)$$

Com isso, temos

$$\Delta x_{i+1} K_i p_{i+\frac{1}{2}} - \Delta x_{i+1} K_i p_i = \Delta x_i K_{i+1} p_{i+1} - \Delta x_i K_{i+1} p_{i+\frac{1}{2}}, \quad (4.13)$$

isto é,

$$(\Delta x_{i+1} K_i + \Delta x_i K_{i+1}) p_{i+\frac{1}{2}} = \Delta x_{i+1} K_i p_i + \Delta x_i K_{i+1} p_{i+1}. \quad (4.14)$$

Portanto,

$$p_{i+\frac{1}{2}} = \frac{\Delta x_{i+1} K_i p_i + \Delta x_i K_{i+1} p_{i+1}}{\Delta x_{i+1} K_i + \Delta x_i K_{i+1}}. \quad (4.15)$$

Substituindo este valor em (4.9) (ou analogamente em (4.10)), obtemos o fluxo

$$\begin{aligned} K \frac{dp}{dx} \Big|_{x_{i+\frac{1}{2}}} &= 2K_i \frac{\Delta x_{i+1} K_i p_i + \Delta x_i K_{i+1} p_{i+1} - \Delta x_{i+1} K_i p_i - \Delta x_i K_{i+1} p_i}{\Delta x_i (\Delta x_{i+1} K_i + \Delta x_i K_{i+1})} \\ &= 2K_i K_{i+1} \left(\frac{p_{i+1} - p_i}{\Delta x_{i+1} K_i + \Delta x_i K_{i+1}} \right), \end{aligned} \quad (4.16)$$

que deve ser único dos dois lados da interface $x_{i+\frac{1}{2}}$. Se considerarmos $\Delta x_{i+1} = \Delta x_i = \Delta x$, fica fácil de ver que

$$K \frac{dp}{dx} \Big|_{x_{i+\frac{1}{2}}} = \underbrace{\frac{2K_i K_{i+1}}{K_i + K_{i+1}}}_{\text{Média harmônica}} \left(\frac{p_{i+1} - p_i}{\Delta x} \right), \quad (4.17)$$

ou seja, o coeficiente que torna o método conservativo, tanto na equação (4.17) quanto na equação (4.16), é de fato a média harmônica entre K_i e K_{i+1} , e que define o valor adequado de K em $x_{i+\frac{1}{2}}$. Observe que o termo entre parêntesis em (4.17) é a discretização central de $\frac{dp}{dx}$ em $x_{i+\frac{1}{2}}$.

Da equação (4.16), é possível determinar os valores de $K \frac{dp}{dx}$ nas interfaces $x_{i+\frac{1}{2}}$ e $x_{i-\frac{1}{2}}$. Voltando à equação (4.6), resta apenas aproximar a integral do lado esquerdo, a qual é dada por:

$$\int_{x_{i-\frac{1}{2}}}^{x_{i+\frac{1}{2}}} q \, dx = \Delta x q_i, \quad (4.18)$$

onde q_i é o valor médio do termo fonte em V_i e, portanto, constante por partes. Considerando uma malha de tamanho uniforme Δx , a aproximação da equação (4.5) em cada volume V_i é finalmente dada por

$$-\frac{2K_i K_{i+1}}{K_i + K_{i+1}} \left(\frac{p_{i+1} - p_i}{\Delta x} \right) + \frac{2K_{i-1} K_i}{K_{i-1} + K_i} \left(\frac{p_i - p_{i-1}}{\Delta x} \right) = \Delta x q_i, \quad (4.19)$$

ou ainda,

$$\frac{1}{\Delta x^2} \left(-K_{i+\frac{1}{2}}(p_{i+1} - p_i) + K_{i-\frac{1}{2}}(p_i - p_{i-1}) \right) = q_i, \quad (4.20)$$

onde

$$K_{i+\frac{1}{2}} = \frac{2K_i K_{i+1}}{K_i + K_{i+1}}. \quad (4.21)$$

Considerando uma discretização com N células computacionais, o esquema numérico de (4.20) pode ser escrito na seguinte forma matricial:

$$\mathbf{A} \mathbf{p} = \mathbf{b}, \quad (4.22)$$

com $\mathbf{p} = (p_1, \dots, p_N)^T$, $\mathbf{b} = (q_1, \dots, q_N)^T$, e \mathbf{A} é uma matriz tridiagonal definida por

$$(\mathbf{A} \mathbf{p})_i = \frac{1}{\Delta x^2} \left(-K_{i-\frac{1}{2}} p_{i-1} + \left(K_{i-\frac{1}{2}} + K_{i+\frac{1}{2}} \right) p_i - K_{i+\frac{1}{2}} p_{i+1} \right), \quad (4.23)$$

para $i = 2, \dots, N-1$. As linhas $i = 1$ e $i = N$ da matriz podem ser modificadas pela imposição de condições de contorno ao problema, como veremos a seguir. Esta discretização pode ser generalizada para o caso de espaçamento variável $\Delta x_i = x_{i+\frac{1}{2}} - x_{i-\frac{1}{2}}$, que fica como exercício.

4.1.1 Tratamento das condições de contorno

Suponha uma condição de Neumann no contorno à esquerda do domínio, o que equivale a uma condição de fluxo imposto em $x = a$. Note que, na

notação de malha que utilizamos, esta posição equivale a $x_{i-\frac{1}{2}}$ quando $i = 1$, isto é, $x_{\frac{1}{2}} = a$. Assim a condição é dada por

$$-K \left. \frac{dp}{dx} \right|_{x_{\frac{1}{2}}} = u_b. \quad (4.24)$$

Da equação (4.6) aplicada para $i = 1$, temos

$$- \left(K \left. \frac{dp}{dx} \right|_{x_{\frac{3}{2}}} - K \left. \frac{dp}{dx} \right|_{x_{\frac{1}{2}}} \right) = \Delta x q_1, \quad (4.25)$$

que substituindo diretamente o valor da condição dada em (4.24), pode ser reescrita como

$$- \frac{2K_1 K_2}{K_1 + K_2} \left(\frac{p_2 - p_1}{\Delta x} \right) = \Delta x q_1 + u_b, \quad (4.26)$$

ou, equivalentemente

$$\frac{1}{\Delta x^2} \left(-K_{\frac{3}{2}} (p_2 - p_1) \right) = q_1 + \frac{u_b}{\Delta x}, \quad (4.27)$$

que é a primeira equação do sistema $\mathbf{A}\mathbf{p} = \mathbf{b}$. Para o contorno à direita, vamos considerar uma condição de Dirichlet, ou seja, pressão imposta $p|_{x_{N+\frac{1}{2}}} = p_b$. Mais uma vez, de (4.6) temos

$$- \left(K \left. \frac{dp}{dx} \right|_{x_{N+\frac{1}{2}}} - K \left. \frac{dp}{dx} \right|_{x_{N-\frac{1}{2}}} \right) = \Delta x q_N, \quad (4.28)$$

onde a discretização do fluxo em $x_{N-\frac{1}{2}}$ é feita normalmente, porém em $x_{N+\frac{1}{2}}$ a discretização deve ser modificada de forma a acomodar a condição de contorno. Para tanto, faremos uma discretização regressiva da derivada da pressão, considerando apenas meio volume de controle, resultando em

$$K \left. \frac{dp}{dx} \right|_{x_{N+\frac{1}{2}}} = K_N \left(\frac{p_b - p_N}{\frac{\Delta x}{2}} \right) = 2K_N \left(\frac{p_b - p_N}{\Delta x} \right). \quad (4.29)$$

Nessas condições, quando $i = N$, a última linha do sistema linear é dada por:

$$-2K_N \left(\frac{p_b - p_N}{\Delta x} \right) + K_{N-\frac{1}{2}} \left(\frac{p_N - p_{N-1}}{\Delta x} \right) = \Delta x q_N, \quad (4.30)$$

ou, equivalentemente

$$\frac{1}{\Delta x^2} \left(2K_N p_N + K_{N-\frac{1}{2}} (p_N - p_{N-1}) \right) = q_N + \frac{2K_N p_b}{\Delta x^2}. \quad (4.31)$$

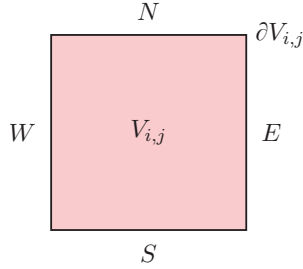


Figura 4.3: Componentes norte, sul, leste e oeste de $\partial V_{i,j}$.

$q(x, y)$ no volume $V_{i,j}$, de acordo com a interpretação de volumes finitos, da seguinte maneira

$$\int_{V_{i,j}} q \, d\mathbf{x} = |V_{i,j}| q_{i,j} = \Delta x \Delta y q_{i,j}, \quad (4.33)$$

onde $\Delta x \Delta y$ é o volume da célula $V_{i,j}$ e $q_{i,j}$ é constante por célula. Para a integral do lado esquerdo de (4.4) consideramos a decomposição em segmentos de reta da borda de $V_{i,j}$, isto é $\partial V_{i,j} = N + S + E + W$, onde N , S , E e W representam, respectivamente, as componentes norte, sul, leste e oeste de $\partial V_{i,j}$, como ilustrado na figura 4.3.

Com isso temos

$$\begin{aligned} \int_{\partial V_{i,j}} (K \nabla p) \cdot \mathbf{n} \, ds &= \int_N (K \nabla p) \cdot \mathbf{n}_N \, ds + \int_S (K \nabla p) \cdot \mathbf{n}_S \, ds \\ &+ \int_E (K \nabla p) \cdot \mathbf{n}_E \, ds + \int_W (K \nabla p) \cdot \mathbf{n}_W \, ds, \end{aligned} \quad (4.34)$$

sendo \mathbf{n}_N , \mathbf{n}_S , \mathbf{n}_E e \mathbf{n}_W os vetores normais à cada aresta de $\partial V_{i,j}$, apontando para fora de $V_{i,j}$. Usando a discretização conservativa vista no caso unidimensional, vamos aproximar cada integral separadamente:

1. Integral na face norte (N): $\mathbf{n}_N = (0, 1)$

$$\begin{aligned} \int_N (K \nabla p) \cdot \mathbf{n}_N \, ds &= \int_{x_{i-\frac{1}{2}}}^{x_{i+\frac{1}{2}}} K \frac{\partial p}{\partial y} \Big|_{(x, y_{j+\frac{1}{2}})} \, dx \\ &\simeq \int_{x_{i-\frac{1}{2}}}^{x_{i+\frac{1}{2}}} \frac{2K_{i,j}K_{i,j+1}}{K_{i,j} + K_{i,j+1}} \left(\frac{p_{i,j+1} - p_{i,j}}{\Delta y} \right) \, dx \\ &= \frac{\Delta x}{\Delta y} \frac{2K_{i,j}K_{i,j+1}}{K_{i,j} + K_{i,j+1}} (p_{i,j+1} - p_{i,j}). \end{aligned}$$

2. Integral na face sul (S): $\mathbf{n}_S = (0, -1)$

$$\begin{aligned} \int_S (K\nabla p) \cdot \mathbf{n}_S \, ds &= \int_{x_{i-\frac{1}{2}}}^{x_{i+\frac{1}{2}}} -K \frac{\partial p}{\partial y} \Big|_{(x, y_{j-\frac{1}{2}})} \, dx \\ &\simeq \int_{x_{i-\frac{1}{2}}}^{x_{i+\frac{1}{2}}} -\frac{2K_{i,j-1}K_{i,j}}{K_{i,j-1} + K_{i,j}} \left(\frac{p_{i,j} - p_{i,j-1}}{\Delta y} \right) \, dx \\ &= \frac{\Delta x}{\Delta y} \frac{2K_{i,j-1}K_{i,j}}{K_{i,j-1} + K_{i,j}} (p_{i,j-1} - p_{i,j}). \end{aligned}$$

3. Integral na face leste (E): $\mathbf{n}_E = (1, 0)$

$$\begin{aligned} \int_E (K\nabla p) \cdot \mathbf{n}_E \, ds &= \int_{y_{j-\frac{1}{2}}}^{y_{j+\frac{1}{2}}} K \frac{\partial p}{\partial x} \Big|_{(x_{i+\frac{1}{2}}, y)} \, dy \\ &\simeq \int_{y_{j-\frac{1}{2}}}^{y_{j+\frac{1}{2}}} \frac{2K_{i,j}K_{i+1,j}}{K_{i,j} + K_{i+1,j}} \left(\frac{p_{i+1,j} - p_{i,j}}{\Delta x} \right) \, dy \\ &= \frac{\Delta y}{\Delta x} \frac{2K_{i,j}K_{i+1,j}}{K_{i,j} + K_{i+1,j}} (p_{i+1,j} - p_{i,j}). \end{aligned}$$

4. Integral na face oeste (W): $\mathbf{n}_W = (-1, 0)$

$$\begin{aligned} \int_W (K\nabla p) \cdot \mathbf{n}_W \, ds &= \int_{y_{j-\frac{1}{2}}}^{y_{j+\frac{1}{2}}} -K \frac{\partial p}{\partial x} \Big|_{(x_{i-\frac{1}{2}}, y)} \, dy \\ &\simeq \int_{y_{j-\frac{1}{2}}}^{y_{j+\frac{1}{2}}} -\frac{2K_{i-1,j}K_{i,j}}{K_{i-1,j} + K_{i,j}} \left(\frac{p_{i,j} - p_{i-1,j}}{\Delta x} \right) \, dy \\ &= \frac{\Delta y}{\Delta x} \frac{2K_{i-1,j}K_{i,j}}{K_{i-1,j} + K_{i,j}} (p_{i-1,j} - p_{i,j}). \end{aligned}$$

Portanto a forma discreta de volumes finitos da equação (4.4) é dada por

$$\begin{aligned} \Delta x \Delta y \, q_{i,j} &= - \underbrace{\frac{\Delta x}{\Delta y} \frac{2K_{i,j}K_{i,j+1}}{K_{i,j} + K_{i,j+1}} (p_{i,j+1} - p_{i,j})}_{(N)} - \underbrace{\frac{\Delta x}{\Delta y} \frac{2K_{i,j-1}K_{i,j}}{K_{i,j-1} + K_{i,j}} (p_{i,j-1} - p_{i,j})}_{(S)} \\ &\quad - \underbrace{\frac{\Delta y}{\Delta x} \frac{2K_{i,j}K_{i+1,j}}{K_{i,j} + K_{i+1,j}} (p_{i+1,j} - p_{i,j})}_{(E)} - \underbrace{\frac{\Delta y}{\Delta x} \frac{2K_{i-1,j}K_{i,j}}{K_{i-1,j} + K_{i,j}} (p_{i-1,j} - p_{i,j})}_{(W)}, \end{aligned} \tag{4.35}$$

que é equivalente a

$$\begin{aligned}
 q_{i,j} = & -\frac{1}{\Delta y^2} K_{i,j+\frac{1}{2}} p_{i,j+1} - \frac{1}{\Delta y^2} K_{i,j-\frac{1}{2}} p_{i,j-1} \\
 & -\frac{1}{\Delta x^2} K_{i+\frac{1}{2},j} p_{i+1,j} - \frac{1}{\Delta x^2} K_{i-\frac{1}{2},j} p_{i-1,j} \\
 & + \left(\frac{1}{\Delta y^2} K_{i,j+\frac{1}{2}} + \frac{1}{\Delta y^2} K_{i,j-\frac{1}{2}} + \frac{1}{\Delta x^2} K_{i+\frac{1}{2},j} + \frac{1}{\Delta x^2} K_{i-\frac{1}{2},j} \right) p_{i,j},
 \end{aligned} \tag{4.36}$$

onde

$$K_{i,j+\frac{1}{2}} = \frac{2K_{i,j}K_{i,j+1}}{K_{i,j} + K_{i,j+1}} \quad \text{e} \quad K_{i+\frac{1}{2},j} = \frac{2K_{i,j}K_{i+1,j}}{K_{i,j} + K_{i+1,j}}. \tag{4.37}$$

Considerando uma discretização com $M \times N$ células computacionais, o esquema numérico de (4.36) pode ser escrito na seguinte forma matricial:

$$\mathbf{A}\mathbf{p} = \mathbf{b}, \tag{4.38}$$

com $\mathbf{p} = (p_1, \dots, p_{MN})^T$ e $\mathbf{b} = (q_1, \dots, q_{MN})^T$. Cada linha da matriz \mathbf{A} está relacionada com uma célula (i, j) e leva em consideração as contribuições de seus quatro vizinhos $(i-1, j)$, $(i+1, j)$, $(i, j-1)$ e $(i, j+1)$. Aqui é importante observar a necessidade de uma ordenação para as células computacionais, que impacta diretamente na estrutura da matriz \mathbf{A} . Tal escolha também é possível no caso unidimensional, porém a ordenação positiva dos intervalos (da esquerda para a direita) é a escolha mais natural. Qualquer ordem pode ser escolhida, desde que se mantenha a consistência na numeração das incógnitas e das equações. No caso bidimensional, há pelo menos duas ordenações consideradas triviais, a ordenação usual por linhas ou ordenação usual por colunas.

Para exemplificar a ordenação usual por linhas, considere uma malha 3×3 onde as células são ordenadas da esquerda para a direita e depois de baixo para cima, como ilustrado na figura 4.4. Temos que a linha 5 da matriz $\mathbf{A}_{9 \times 9}$, que está relacionada à célula (i, j) , tem contribuições nas colunas 4, 5, 6, 2 e 8. A coluna 5 tem como contribuição o fator que multiplica $p_{i,j}$ em (4.36), já as colunas 4, 6, 2 e 8, recebem contribuições dos fatores que multiplicam, respectivamente, $p_{i-1,j}$, $p_{i+1,j}$, $p_{i,j-1}$ e $p_{i,j+1}$. Com esta ordenação, a matriz terá uma estrutura pentadiagonal, três diagonais sucessivas (diagonal inferior, principal e superior) e as outras duas diagonais afastadas da principal a uma distância de M posições acima e abaixo da diagonal principal.

A ordenação usual por linhas pode ser facilmente calculada por uma relação algébrica, dada por

$$k = i + (j-1)M \tag{4.39}$$

onde k é o número da incógnita e correspondente linha da matriz e M o número de células em cada linha da malha. Note que esta fórmula funciona

| | | |
|-----------------|---------------|-----------------|
| $i-1, j+1$ 7 | $i, j+1$ 8 | $i+1, j+1$ 9 |
| $i-1, j$ 4 | i, j 5 | $i+1, j$ 6 |
| $i-1, j-1$ 1 | $i, j-1$ 2 | $i+1, j-1$ 3 |

Figura 4.4: Exemplo de ordenação das células computacionais para um problema bidimensional.

apenas para $i = 1, 2, \dots, M$ e $j = 1, 2, \dots, N$. Uma fórmula para a ordenação usual por colunas pode ser obtida de forma análoga.

Uma vez calculada a pressão de (4.38), o campo de velocidades pode ser calculado de forma consistente com a discretização por volumes finitos, usando-se a mesma estratégia para aproximação dos fluxos nas integrais em $\partial V_{i,j}$. Pela definição em (4.2), temos

$$\mathbf{u} = \begin{bmatrix} u \\ v \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} -K \frac{\partial p}{\partial x} \\ -K \frac{\partial p}{\partial y} \end{bmatrix}.$$

Para se manter a consistência com a aproximação conservativa de volumes finitos, calcula-se as componentes horizontal e vertical do campo de velocidades em cada face correspondente de $V_{i,j}$, usando a estratégia de discretização dos fluxos discutida anteriormente:

$$\begin{aligned} u_E &\simeq -K_{i+\frac{1}{2},j} \frac{p_{i+1,j} - p_{i,j}}{\Delta x}, & u_W &\simeq -K_{i-\frac{1}{2},j} \frac{p_{i,j} - p_{i,j-1}}{\Delta x}, \\ v_N &\simeq -K_{i,j+\frac{1}{2}} \frac{p_{i,j+1} - p_{i,j}}{\Delta y}, & v_S &\simeq -K_{i,j-\frac{1}{2}} \frac{p_{i,j} - p_{i,j-1}}{\Delta y}. \end{aligned}$$

Para fins de visualização ou utilização do campo de velocidades para o transporte de um traçador passivo, o campo vetorial pode ser calculado no centro das células, fornecendo um campo discreto mais conveniente para a maioria das situações. Isso pode ser facilmente calculado através de médias simples dentro de cada volume de controle, ou seja,

$$u_{i,j} = \frac{u_E + u_W}{2} \quad \text{e} \quad v_{i,j} = \frac{v_N + v_S}{2}.$$

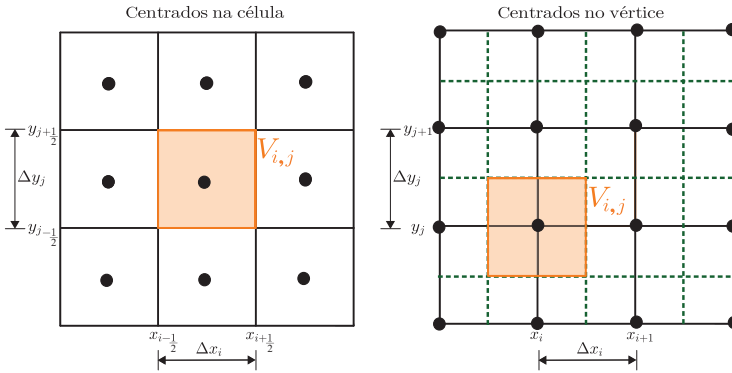


Figura 4.5: Pontos da malha e volumes de controle para discretizações de volumes finitos centrados na célula e centrados no vértice.

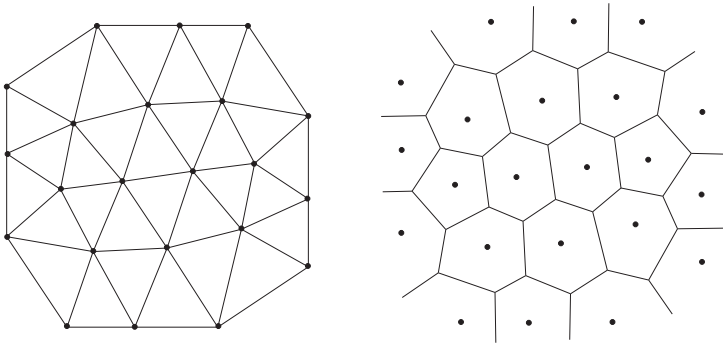


Figura 4.6: Exemplo de malha não estruturada gerada através de triangulação de Delaunay (esquerda) e respectivo diagrama de Voronoi (direita).

4.3 Outras malhas e discretizações

Existem várias possibilidades para a escolha das malhas computacionais a serem utilizadas pelo método de volumes finitos, desde malhas ortogonais e estruturadas até malhas não ortogonais e não estruturadas.

Dependendo de como os volumes elementares são definidos, e da escolha do posicionamento das incógnitas, podemos ter duas formas de discretização por volumes finitos, os centrados em células e os centrados nos vértices.

O método de volumes finitos centrados em células foi o método apresentado neste capítulo, onde as incógnitas podem ser consideradas como posicionadas no centro dos elementos da malha, como ilustrado na figura 4.2. Por outro lado, as técnicas de volumes finitos centrados em vértices alocam as incógnitas nos vértices da malha, e os volumes de controle, onde serão integradas as equações diferenciais, são definidos como regiões fechadas em

torno destes vértices. Há várias formas de obter tais volumes de controle. Em malhas cartesianas, por exemplo, os volumes de controle podem ser obtidos por uma malha “deslocada” ou “dual”, como ilustrado na figura 4.5. Outro exemplo, em malhas não estruturadas baseadas em triangulação de Delaunay, os volumes de controle podem ser obtidos através do diagrama de Voronoi, dual à triangulação de Delaunay, ilustrados na figura 4.6.

Explorar os diferentes tipos de discretização em malhas não cartesianas está fora do escopo deste livro, porém o leitor interessado poderá consultar outras obras mais completas, como por exemplo [34].

4.4 Condições de contorno

Nesta seção vamos discutir o tratamento das condições de contorno para o problema bidimensional considerando o caso de discretizações de volumes finitos centrados nas células.

4.4.1 Condição de Neumann

Quando a condição de contorno é uma condição do tipo Neumann, significa a imposição de um fluxo naquela fronteira. Considere primeiramente que temos uma condição de fluxo nulo, dada por uma condição de Neumann homogênea, ou seja

$$-K \frac{\partial p}{\partial \mathbf{n}} = -(K \nabla p) \cdot \mathbf{n} = 0 \quad \text{em } \Gamma \subset \partial V_{i,j}. \quad (4.40)$$

Para melhor introduzir a discretização do contorno em cada situação, vamos considerar como exemplo que a face E do volume $V_{i,j}$ esteja em Γ , como ilustrado na figura 4.7a, sendo que a sua generalização pode ser feita de forma análoga para outras situações. Neste caso, apenas a integral (E) será alterada:

$$\int_E (K \nabla p) \cdot \mathbf{n}_E \, ds = 0, \quad (4.41)$$

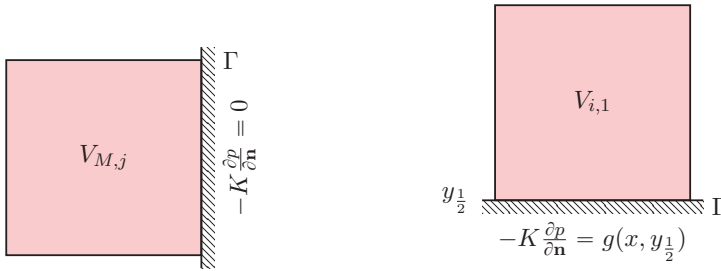
de forma que sua contribuição será eliminada da equação (4.35).

Quando a condição de contorno é uma condição do tipo Neumann não homogênea, tem-se

$$-K \frac{\partial p}{\partial \mathbf{n}} = -(K \nabla p) \cdot \mathbf{n} = g(x, y) \quad \text{em } \Gamma \subset \partial V_{i,j}, \quad (4.42)$$

onde g é uma função conhecida para o fluxo na borda. Vamos considerar como exemplo que a face S do volume $V_{i,j}$ esteja em Γ , como ilustrado na figura 4.7b. Neste caso, a integral (S) será alterada:

$$\int_S (K \nabla p) \cdot \mathbf{n}_S \, ds = \int_{x_{i-\frac{1}{2}}}^{x_{i+\frac{1}{2}}} (K \nabla p) \cdot \mathbf{n}_S \, dx = - \int_{x_{i-\frac{1}{2}}}^{x_{i+\frac{1}{2}}} g(x, y_{\frac{1}{2}}) \, dx. \quad (4.43)$$



(a) Condição homogênea na borda leste de $V_{M,j}$.

(b) Condição não homogênea na borda sul de $V_{i,1}$.

Figura 4.7: Condições de contorno do tipo Neumann na borda de $V_{i,j}$.

Portanto, é preciso integrar numericamente a função g . Seja G_i a aproximação da referida integral pela regra do trapézio [7, 23], então

$$G_i = \int_{x_{i-\frac{1}{2}}}^{x_{i+\frac{1}{2}}} g(x, y_{\frac{1}{2}}) dx \simeq \frac{\Delta x}{2} \left(g(x_{i-\frac{1}{2}}, y_{\frac{1}{2}}) + g(x_{i+\frac{1}{2}}, y_{\frac{1}{2}}) \right). \quad (4.44)$$

Desta maneira, a equação (4.35) será modificada quando $j = 1$ para

$$\begin{aligned} \Delta x \Delta y q_{i,1} - G_i = & - \underbrace{\frac{\Delta x}{\Delta y} K_{i,\frac{3}{2}} (p_{i,2} - p_{i,1})}_{(N)} - \underbrace{\frac{\Delta y}{\Delta x} K_{i+\frac{1}{2},1} (p_{i+1,1} - p_{i,1})}_{(E)} \\ & - \underbrace{\frac{\Delta y}{\Delta x} K_{i-\frac{1}{2},1} (p_{i-1,1} - p_{i,1})}_{(W)}. \end{aligned} \quad (4.45)$$

4.4.2 Condição de Dirichlet

Quando a condição de contorno é uma condição do tipo Dirichlet, isto é, imposição da pressão em alguma borda, tem-se

$$p = g(x, y) \quad \text{em } \Gamma \subset \partial V_{i,j}, \quad (4.46)$$

onde g é uma função conhecida para a pressão na borda. Vamos considerar como exemplo que a face W do volume $V_{i,j}$ esteja em Γ , como ilustrado na figura 4.8. Neste caso, a contribuição da integral (W) deve ser recalculada:

$$\begin{aligned} \int_W (K \nabla p) \cdot \mathbf{n} &= \int_{y_{j-\frac{1}{2}}}^{y_{j+\frac{1}{2}}} -K \frac{\partial p}{\partial x} (x_{\frac{1}{2}}, y) dy \\ &\simeq \int_{y_{j-\frac{1}{2}}}^{y_{j+\frac{1}{2}}} -K_{\frac{1}{2},j} \left(\frac{p_{1,j} - g(x_{\frac{1}{2}}, y)}{x_1 - x_{\frac{1}{2}}} \right) dy \\ &= -2 \frac{\Delta y}{\Delta x} K_{\frac{1}{2},j} p_{1,j} + \frac{2}{\Delta x} K_{\frac{1}{2},j} \int_{y_{j-\frac{1}{2}}}^{y_{j+\frac{1}{2}}} g(x_{\frac{1}{2}}, y) dy. \end{aligned} \quad (4.47)$$

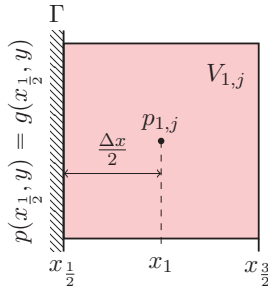


Figura 4.8: Condição de contorno do tipo Dirichlet na borda oeste de $V_{1,j}$.

E, novamente, é preciso integrar numericamente a função g . Temos que o valor de G_j pela regra do trapézio e dado por

$$G_j := \int_{y_{j-\frac{1}{2}}}^{y_{j+\frac{1}{2}}} g(x_{\frac{1}{2}}, y) dy \simeq \frac{\Delta y}{2} \left(g(x_{\frac{1}{2}}, y_{j-\frac{1}{2}}) + g(x_{\frac{1}{2}}, y_{j+\frac{1}{2}}) \right). \quad (4.48)$$

Dessa forma, a equação (4.35) será modificada quando $i = 1$ para

$$\begin{aligned} \Delta x \Delta y q_{1,j} - \frac{2}{\Delta x} K_{\frac{1}{2},j} G_j = & - \underbrace{\frac{\Delta x}{\Delta y} K_{1,j+\frac{1}{2}} (p_{1,j+1} - p_{1,j})}_{(N)} \\ & - \underbrace{\frac{\Delta x}{\Delta y} K_{1,j-\frac{1}{2}} (p_{1,j-1} - p_{1,j})}_{(S)} \\ & - \underbrace{\frac{\Delta y}{\Delta x} K_{\frac{3}{2},j} (p_{2,j} - p_{1,j})}_{(E)} + 2 \underbrace{\frac{\Delta y}{\Delta x} K_{\frac{1}{2},j} p_{1,j}}_{(W)}, \end{aligned} \quad (4.49)$$

onde $K_{\frac{1}{2},j} = K_{1,j}$. Note que quando $g(x, y) \neq 0$ temos uma condição de Dirichlet não homogênea, que altera o lado direito do sistema linear, o que não ocorre com o caso de condição de Dirichlet homogênea ($g(x, y) = 0$), que alteraria somente a linha correspondente na matriz \mathbf{A} .

4.5 Consistência, estabilidade e convergência

Para avaliar a acurácia dos métodos de volumes finitos para equações elípticas, precisamos de alguns conceitos básicos de análise numérica. Primeiro, precisamos definir o conceito de convergência, que é a propriedade do método numérico de fornecer uma solução que se aproxima cada vez mais da solução analítica da equação diferencial, quando o espaçamento característico da discretização vai a zero. É a principal propriedade que gostaríamos de avaliar

em um método numérico, o que nos garante na teoria que estamos fazendo uma boa aproximação.

Para tanto, precisamos definir erro entre a aproximação e a solução analítica. Não é algo trivial, uma vez que a solução que obtemos pelo método de volumes finitos é constante por partes em cada elemento de malha (volume de controle), ainda mais, é um conjunto finito de valores, que deve ser comparado com uma função.

Seja $p : \Omega \subset \mathbb{R}^d \rightarrow \mathbb{R}$ a solução exata do problema elíptico (4.1). Recordemos que a solução pelo método de volumes finitos, constante em cada elemento da malha, é de fato uma aproximação para a média da solução exata em cada elemento, de forma que podemos escrever

$$p_k \simeq \hat{p}_k = \frac{1}{|V_k|} \int_{V_k} p(\mathbf{x}) \, d\mathbf{x}, \quad (4.50)$$

ou seja, o valor de cada incógnita p_k calculado pelo método é uma aproximação para a média de $p(\mathbf{x})$ em V_k , representada pelo valor \hat{p}_k . Note também que

$$\lim_{h \rightarrow 0} \frac{1}{|V_k|} \int_{V_k} p(\mathbf{x}) \, d\mathbf{x} = p(\mathbf{x}_k), \quad (4.51)$$

ou seja, a média converge para o valor de p em um ponto \mathbf{x}_k do elemento V_k , que pode, sem perda de generalidade, ser identificado como o centróide de V_k . Com isso, podemos definir o erro global entre as soluções numérica e exata em um volume de controle V_k como sendo $e_k = \hat{p}_k - p_k$, componentes do vetor erro $\mathbf{e}_h = \hat{\mathbf{p}}_h - \mathbf{p}_h$, e portanto temos os ingredientes necessários para definir matematicamente a propriedade de convergência.

Definição 4.1 (Convergência). *Dizemos que um método de volumes finitos para resolver o problema elíptico (4.1) é convergente em uma norma $\|\cdot\|$ se*

$$\lim_{h \rightarrow 0} \|\mathbf{e}_h\| = \lim_{h \rightarrow 0} \|\mathbf{p}_h - \hat{\mathbf{p}}_h\| = 0,$$

onde h é o espaçamento característico da malha utilizada.

Com relação à norma usada para o cálculo do erro, pode-se pensar que basta utilizar uma norma de vetor em espaços euclidianos de dimensão finita, já que \mathbf{e}_h tem número finito de componentes. Contudo, é preciso observar que quando $h \rightarrow 0$, o número de componentes deste vetor cresce infinitamente, portanto é preciso tomar um cuidado extra aqui. De fato, devemos pensar \mathbf{e}_h como sendo uma amostragem discreta de uma função erro contínua $e(\mathbf{x})$, e como tal, devemos usar normas associadas a espaços de funções normados que contêm a solução do problema exato. Em geral utilizamos normas nos espaços $L^q(\Omega)$, dadas por

$$\|e\|_{L^q(\Omega)} = \left(\int_{\Omega} |e|^q \, d\mathbf{x} \right)^{\frac{1}{q}}, \quad (4.52)$$

onde o parâmetro q (não confundir com o termo fonte da equação de modelo) normalmente é escolhido como $q = 1$, $q = 2$ ou $q = \infty$, resultando nas normas

$$\|e\|_{L^1(\Omega)} = \int_{\Omega} |e| \, d\mathbf{x}, \quad (4.53)$$

$$\|e\|_{L^2(\Omega)} = \left(\int_{\Omega} |e|^2 \, d\mathbf{x} \right)^{\frac{1}{2}}, \quad (4.54)$$

$$\|e\|_{L^\infty(\Omega)} = \lim_{q \rightarrow \infty} \|e\|_{L^q(\Omega)} = \sup_{\mathbf{x} \in \Omega} |e(\mathbf{x})|. \quad (4.55)$$

Por exemplo, a restrição da norma dada em (4.54) para uma amostragem discreta pode ser escrita como

$$\begin{aligned} \|\mathbf{e}_h\|_{L^2(\Omega)} &= \left(\sum_k \int_{V_k} |p_k - \hat{p}_k|^2 \, d\mathbf{x} \right)^{\frac{1}{2}} = \left(\sum_k |V_k| |p_k - \hat{p}_k|^2 \right)^{\frac{1}{2}} \\ &= h^{\frac{d}{2}} \left(\sum_k |p_k - \hat{p}_k|^2 \right)^{\frac{1}{2}}, \end{aligned} \quad (4.56)$$

onde na última igualdade foi usada a simplificação de uma malha uniforme de elementos V_k de tamanho h e volume h^d , num espaço \mathbb{R}^d . Note que esta norma é muito similar a uma norma de vetor em um espaço euclidiano, porém está multiplicada por um fator $h^{\frac{d}{2}}$.

Geralmente não é possível obter uma expressão para o erro global, e portanto, temos que usar de resultados da análise numérica para garantir que um método seja convergente. Este estudo nos leva às definições de **consistência** e **estabilidade**, propriedades cruciais para garantir a convergência de um método numérico [14, 32]. Enquanto a consistência garante que estamos de fato aproximando a equação diferencial que nos propusemos a resolver, com erro local que diminui com a redução de h , a estabilidade garante que pequenas flutuações nos erros locais não cresçam catastróficamente a ponto de comprometer a solução. Veremos estes dois conceitos com mais detalhes nas próximas seções, no contexto de equações elípticas.

4.5.1 Erro de truncamento local e consistência

O erro de truncamento local (ETL) refere-se ao erro da aproximação local de volumes finitos à equação diferencial, de forma que seja dependente do parâmetro de malha h .

Definição 4.2 (Erro de truncamento local). *Seja $\mathcal{F}(\mathbf{p}_h)$ a fórmula discreta de volumes finitos que aproxima (4.1), que satisfaz*

$$\mathcal{F}(\mathbf{p}_h) = \mathbf{0},$$

e seja $\hat{\mathbf{p}}_h = (p(\mathbf{x}_1), p(\mathbf{x}_2), \dots, p(\mathbf{x}_N))^T$ a solução exata calculada nos pontos $\mathbf{x}_1, \dots, \mathbf{x}_N$ dos volumes de controle. O erro de truncamento local é definido

como

$$\boldsymbol{\tau}_h = \mathcal{F}(\hat{\mathbf{p}}_h),$$

ou seja, é a medida do quanto a solução analítica do problema elíptico (4.1) não satisfaz, pontualmente, a equação de aproximação de volumes finitos.

Para exemplificar o ETL, considere o problema unidimensional (4.5), a fórmula de volumes finitos é dada por (4.20), então segundo a definição 4.2, a i -ésima componente do ETL $\boldsymbol{\tau}_h$ pode ser estimada por

$$\begin{aligned} \tau_i &= \mathcal{F}_i(\hat{\mathbf{p}}_h) \\ &= \frac{1}{\Delta x^2} \left(-K_{i-\frac{1}{2}} p(x_{i-1}) + \left(K_{i-\frac{1}{2}} + K_{i+\frac{1}{2}} \right) p(x_i) - K_{i+\frac{1}{2}} p(x_{i+1}) \right) - q(x_i). \end{aligned} \quad (4.57)$$

Para simplificar a análise deste caso, considere uma permeabilidade uniforme $K = 1$, o que resulta

$$\tau_i = \frac{1}{\Delta x^2} \left(-p(x_{i-1}) + 2p(x_i) - p(x_{i+1}) \right) - q(x_i). \quad (4.58)$$

Desta forma é possível estimar como o ETL se comporta em termos do espaçamento da malha $h = \Delta x = x_{i+1} - x_i$, considerado uniforme para esta análise. Para tanto, usaremos expansões em série de Taylor da solução exata p . Supondo que p seja suficientemente suave, os termos $p(x_{i+1}) = p(x_i + \Delta x)$ e $p(x_{i-1}) = p(x_i - \Delta x)$ podem ser expandidos em série de Taylor em torno de x_i da seguinte forma:

$$\begin{aligned} p(x_i + \Delta x) &= p(x_i) + \Delta x p'(x_i) \\ &\quad + \frac{\Delta x^2}{2} p''(x_i) + \frac{\Delta x^3}{6} p'''(x_i) + \frac{\Delta x^4}{24} p^{(4)}(x_i) + \dots \end{aligned} \quad (4.59)$$

$$\begin{aligned} p(x_i - \Delta x) &= p(x_i) - \Delta x p'(x_i) \\ &\quad + \frac{\Delta x^2}{2} p''(x_i) - \frac{\Delta x^3}{6} p'''(x_i) + \frac{\Delta x^4}{24} p^{(4)}(x_i) + \dots \end{aligned} \quad (4.60)$$

Substituindo (4.59) e (4.60) em (4.58) obtemos:

$$\tau_i = -p''(x_i) - \frac{\Delta x^2}{12} p^{(4)}(x_i) + \dots - q(x_i). \quad (4.61)$$

Como $p(x)$ é a solução exata do problema (4.5), então $-p''(x) - q(x) = 0$, para qualquer x , de modo que

$$\tau_i = -\frac{\Delta x^2}{12} p^{(4)}(x_i) + \dots \quad (4.62)$$

Note que o erro de truncamento é dominado pelo termo que multiplica Δx^2 , pois como Δx é um valor pequeno (de fato infinitesimal em um processo de convergência), os outros termos de τ_i com potências maiores de Δx são muito menores, e assim, dizemos que o erro de truncamento local é da ordem de Δx^2 , ou, matematicamente, $\|\boldsymbol{\tau}_h\| = \mathcal{O}(\Delta x^2)$. Com isso, podemos definir a propriedade de consistência:

Definição 4.3 (Consistência). *Um método de volumes finitos com erro de truncamento local τ_h é dito ser consistente com a equação diferencial (4.1) se*

$$\lim_{h \rightarrow 0} \|\tau_h\| = 0.$$

Em particular, se

$$\|\tau_h\| = \mathcal{O}(h^q),$$

dizemos que o método possui ordem de consistência q .

Portanto, pela equação (4.62), podemos concluir que o método de volumes finitos para o problema unidimensional analisado acima é consistente de ordem 2. Cálculos análogos podem ser realizados para concluir a mesma coisa para o método de volumes finitos para problemas em dimensões maiores.

4.5.2 Estabilidade

Da definição 4.2 de erro de truncamento local, podemos escrever que

$$\tau_h = \mathcal{F}(\hat{\mathbf{p}}_h) = \mathbf{A}_h \hat{\mathbf{p}}_h - \mathbf{b}_h, \quad (4.63)$$

onde \mathbf{A}_h é a matriz de discretização do método de volumes finitos e \mathbf{b}_h o lado direito correspondente, que satisfazem o sistema discreto $\mathbf{A}_h \mathbf{p}_h = \mathbf{b}_h$, sendo \mathbf{p}_h a solução discreta aproximada. O índice h serve para denotar explicitamente a dependência da discretização sobre o parâmetro de malha h , que influencia diretamente na dimensão do sistema linear. Subtraindo o sistema discreto da equação (4.63), temos

$$\mathbf{A}_h(\mathbf{p}_h - \hat{\mathbf{p}}_h) = -\tau_h \quad (4.64)$$

de modo que o erro global $\mathbf{e}_h = \mathbf{p}_h - \hat{\mathbf{p}}_h$,

$$\mathbf{A}_h \mathbf{e}_h = -\tau_h \quad \Rightarrow \quad \mathbf{e}_h = -\mathbf{A}_h^{-1} \tau_h. \quad (4.65)$$

Aplicando-se uma norma $\|\cdot\|$ em ambos os lados desta igualdade, podemos tentar limitar o erro global da seguinte forma

$$\|\mathbf{e}_h\| = \|\mathbf{A}_h^{-1} \tau_h\| \leq \|\mathbf{A}_h^{-1}\| \|\tau_h\|, \quad (4.66)$$

onde $\|\cdot\|$ é uma norma de matriz, consistente com a norma $\|\cdot\|$. Note portanto que, a norma do erro global é limitada pela norma da matriz inversa da discretização de volumes finitos multiplicada pela norma do erro de truncamento local.

Numa situação infinitesimal quando $h \rightarrow 0$, passando os limites dos dois lados da equação (4.66), vemos que para haver convergência, é necessário que o termo da direita vá a zero quando $h \rightarrow 0$, como vimos no início desta seção. Se o método for consistente, isso será garantido para o erro de truncamento (veja definição 4.3). Note porém que concluir a convergência não é trivial,

uma vez que não sabemos como $\|\mathbf{A}_h^{-1}\|$ se comporta. A situação é ainda pior quando notamos que a dimensão de \mathbf{A}_h^{-1} vai ao infinito quando $h \rightarrow 0$. Portanto precisamos de algum limitante para este termo, para que possamos garantir a convergência do método numérico.

O limitante que precisamos vem da seguinte propriedade, a qual damos o nome de estabilidade para métodos numéricos para equações elípticas:

Definição 4.4 (Estabilidade). *Dizemos que um método de volumes finitos que aproxima o problema elíptico (4.1) é estável na norma $\|\cdot\|$ se existem uma constante $C > 0$ independente de h , e $h_0 > 0$ de forma que*

$$\|\mathbf{A}_h^{-1}\| \leq C, \quad \forall h < h_0,$$

ou seja, que a matriz inversa da discretização de volumes finitos seja uniformemente limitada por uma constante independente de h .

A estabilidade é uma propriedade que garante que pequenas flutuações nos erros de discretização não sejam amplificadas de forma catastrófica. Note que se a matriz da discretização \mathbf{A}_h começa a se aproximar cada vez mais de matrizes singulares quando $h \rightarrow 0$, a sua inversa certamente terá norma divergindo ao infinito, de forma que o erro limitado em (4.66) pode crescer catastróficamente. Desta forma, a definição 4.4 nos dá um limitante para o crescimento deste erro, garantindo que

$$\lim_{h \rightarrow 0} \|\mathbf{e}_h\| \leq \lim_{h \rightarrow 0} \|\mathbf{A}_h^{-1}\| \|\boldsymbol{\tau}_h\| \leq \lim_{h \rightarrow 0} C \|\boldsymbol{\tau}_h\| = 0, \quad (4.67)$$

onde foi usada a propriedade de consistência para zerar a última igualdade. Isso é suficiente para garantir convergência do método numérico, de acordo com a definição 4.1. De fato, a equação (4.67) é uma parte pequena da demonstração do teorema da equivalência de Lax [32], enunciado a seguir.

Teorema 4.1 (Equivalência de Lax). *Um método numérico que seja consistente com a equação elíptica (4.1) é convergente se, e somente se, for estável.*

O método de volumes finitos para equações elípticas descrito no presente capítulo, além de ser consistente, é estável [19]. Para a matriz simétrica tridiagonal descrita na equação (4.23), tem-se que a norma de matriz compatível com a norma $\|\cdot\|_{L^2(\Omega)}$, denotada por $\|\cdot\|_2$, coincide com o raio espectral da própria matriz, e considerando $K = 1$, temos o seguinte resultado

$$\|\mathbf{A}_h^{-1}\|_2 \leq \frac{1}{\pi^2}, \quad (4.68)$$

ou seja, $\|\mathbf{A}_h^{-1}\|_2$ é limitada uniformemente por uma constante $C = \pi^{-2}$, confirmando a estabilidade e conseqüentemente a convergência do método.

Um último comentário que se faz necessário é que a análise feita aqui é bastante simplificada, utilizando muitas das ferramentas consolidadas para métodos de diferenças finitas. Uma análise mais completa necessitaria de ferramentas de análise funcional, o que não é o objetivo deste livro. O leitor interessado pode buscar mais informações em livros como [30] e [39].

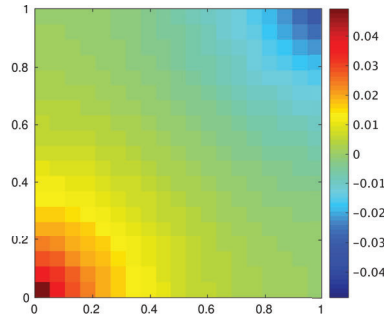


Figura 4.9: Pressão gerada com o domínio do tipo *a quarter of the five spot*.

4.6 Simulação de escoamentos monofásicos

A equação (3.35), que modela escoamentos monofásicos considerando algumas simplificações, é de natureza elíptica e a aproximação de sua solução pode ser feita utilizando o método de volumes finitos apresentado neste capítulo. Nesta seção, são apresentadas algumas simulações numéricas de escoamentos monofásicos obtidas com o método de volumes finitos.

Campo homogêneo

Nas figuras 4.9 e 4.10 temos, respectivamente, o campo de pressões e o campo de velocidades resultantes da aproximação do problema (3.35) no domínio $\Omega = [0, 1] \times [0, 1]$ considerando uma malha cartesiana regular com 20×20 células. Foi utilizada uma configuração do tipo *a quarter of the five spot* com $\tilde{q}/\rho = 1$, $K/\mu = 1$ e pressão nula imposta no ponto de fronteira superior esquerdo. Essa escolha para a imposição de pressão será utilizada em todas as simulações que envolvem problemas do tipo *a quarter of the five spot*. Na figura 4.10b temos o mesmo campo de velocidades da figura 4.10a, com seus vetores normalizados para facilitar a visualização. Note que os perfis de pressão e velocidade indicam um escoamento iniciando no poço de injeção com direção ao poço de produção.

Campo heterogêneo

Na figura 4.11 temos os campos de pressões e velocidades resultantes da aproximação do problema (3.35) considerando o campo de permeabilidades da figura 3.2 e uma configuração do tipo *a quarter of the five spot* com $\tilde{q}/\rho = 1$ e $\mu = 1$. Note que os perfis de pressão e velocidade indicam um escoamento iniciando no poço de injeção com direção ao poço de produção passando por caminhos preferenciais determinados pelas regiões de alta permeabilidade.

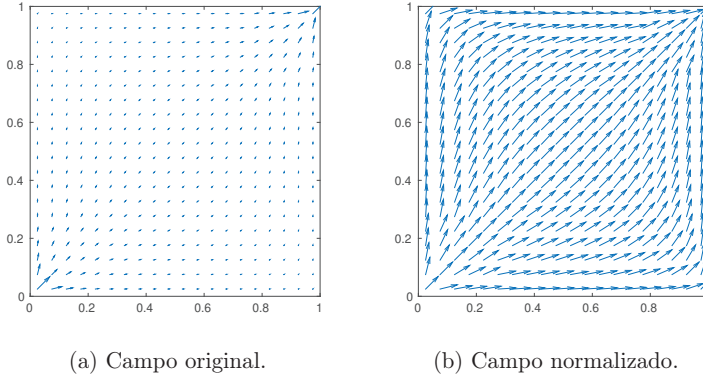


Figura 4.10: Campo de velocidades gerado com o domínio do tipo *a quarter of the five spot*.

Campo heterogêneo canalizado

Na figura 4.12 temos os campos de pressões e velocidades resultantes da aproximação do problema (3.35) considerando o campo de permeabilidades da camada 36 do projeto SPE10 e uma configuração do tipo *a quarter of the five spot* com $\tilde{q}/\rho = 1$ e $\mu = 1$. Percebemos que o campo de velocidades tem intensidade maior no canal de alta permeabilidade, o que indica que há a tendência do escoamento em passar por esse canal.

4.7 Exercícios

1. De acordo com a equação (4.36), escreva a linha $\ell = 5$ completa de \mathbf{A}_p , cuja representação da ordenação das células está ilustrada na figura 4.4. Utilize uma notação consistente com a ordenação das células computacionais, por exemplo, K_1 e p_1 para representar a permeabilidade e pressão da célula $(i - 1, j - 1)$.
2. Escreva a discretização final e a forma matricial para o problema unidimensional com espaçamento variável $\Delta x_i = x_{i+1} - x_i$.
3. Escreva uma fórmula para a ordenação usual por colunas, para o caso bidimensional. Generalize para obter fórmulas para a ordenação de incógnitas em um domínio hexaédrico em três dimensões.
4. Mostre que tanto a ordenação por linhas quanto por colunas, no caso bidimensional, leva a uma estrutura pentadiagonal da matriz \mathbf{A} . Imagine agora que a malha que discretize o domínio seja colorida como um tabuleiro de xadrez. Considere a seguinte ordenação de incógnitas:

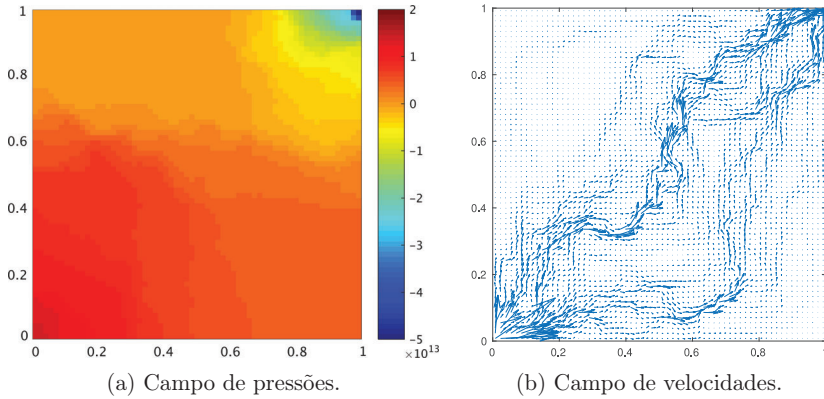


Figura 4.11: Campos de pressões e velocidades gerados com o domínio do tipo *a quarter of the five spot* em um meio heterogêneo.

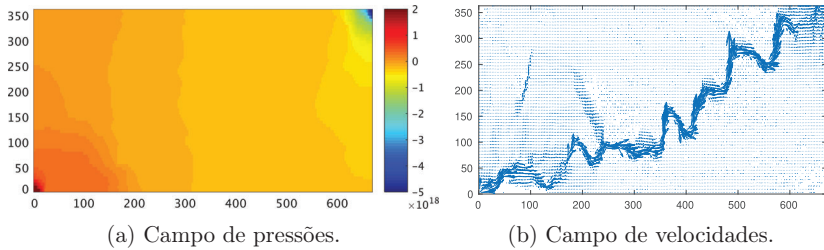


Figura 4.12: Campos de pressões e velocidades gerados com o domínio do tipo *a quarter of the five spot* na camada 36 do projeto SPE10.

primeiro numera-se somente os espaços pintados de branco do tabuleiro, sequencialmente, da esquerda pra direita, e de baixo para cima. Após todas as casas brancas serem preenchidas, comece a numerar as pretas, da esquerda pra direita, de baixo para cima. Qual seria a estrutura da matriz \mathbf{A} obtida da discretização por volumes finitos com essa numeração? É possível tirar vantagem desta estrutura?

4.8 Projetos computacionais

1. Implemente o método de volumes finitos para a solução do seguinte problema unidimensional:

$$-\frac{d}{dx} \left(K \frac{dp}{dx} \right) = 0, \quad x \in [0, 1], \quad (4.69)$$

com condições de contorno de Dirichlet $p(0) = 0$ e $p(1) = 1$. Considere um problema de interface descontínua com $K(x)$ dada por

$$K(x) = \begin{cases} \epsilon, & \text{se } 0 \leq x \leq x^* \\ 1, & \text{se } x^* < x \leq 1. \end{cases} \quad (4.70)$$

Note que sua malha deve ter uma interface entre volumes finitos justamente no ponto x^* . Este problema tem solução analítica dada por:

$$p(x) = \begin{cases} \frac{x}{x^* - \epsilon x^* + \epsilon}, & \text{se } 0 \leq x < x^* \\ \frac{\epsilon(x-1)}{x^* - \epsilon x^* + \epsilon} + 1, & \text{se } x^* \leq x \leq 1. \end{cases} \quad (4.71)$$

- (a) Compare a solução numérica obtida pelo método de volumes finitos conservativo com a solução analítica;
 - (b) Calcule o erro e responda se faz sentido calcular ordem de convergência para a solução numérica obtida pelo método conservativo;
 - (c) Repita a mesma comparação, mas com um método de volumes finitos "não conservativo", isto é, ao invés de calcular K na interface x^* com médias harmônicas, usar médias simples;
 - (d) Calcule a taxa de convergência da solução numérica para a solução analítica deste método "não conservativo".
2. Considere um reservatório modelado por um problema de valor de contorno unidimensional dado por

$$\begin{cases} -\frac{d}{dx} \left(K \frac{dp}{dx} \right) = -25 \cos(25x) & \text{em } \Omega = [0, 1] \\ p = x & \text{sobre } \partial\Omega, \end{cases} \quad (4.72)$$

onde $K(x) = 2 + \sin(25x)$ é a permeabilidade absoluta do meio, conhecida em todo o domínio. Note que a pressão é prescrita nos contornos (extremos do intervalo $\Omega = [0, 1]$), que deve gerar um fluxo de fluido (para qual sentido?). A solução exata do problema é conhecida: $p(x) = x$. Pede-se:

- (a) Implemente o método de volumes finitos conservativo para resolver este problema;
 - (b) Faça uma análise de convergência do código produzido, comparando as soluções aproximadas com a solução exata, e indique a ordem obtida com sua implementação.
3. Considere agora um reservatório modelado pelo problema de valor de contorno unidimensional

$$\begin{cases} \frac{d}{dx} \left(-\frac{K}{\mu} \frac{dp}{dx} \right) = 0 & \text{em } \Omega = [0, L] \\ -\frac{K}{\mu} \frac{dp}{dx} = u_{in} & \text{em } x = 0 \\ p = p_{out} & \text{em } x = 1 \end{cases} \quad (4.73)$$

onde a permeabilidade absoluta K é constante por partes, obtida pela primeira linha ($y = 0$) da camada 33 do projeto SPE10 (disponível em <https://www.spe.org/web/csp/datasets/set02.htm>), cuja ilustração encontra-se na figura 4.13. Assuma neste caso que o reservatório de comprimento $L = 670$ m está completamente saturado de água ($\mu = 8.9 \times 10^{-14}$ Pa · s), e que injetamos água à velocidade de $u_{in} = 0.036$ m/h (metros por hora), sendo a pressão no poço produtor dada por $p_{out} = 6$ MPa. Note que o valor da massa específica da água (ρ) não é necessário neste caso (por quê?).

- (a) Faça a adimensionalização deste sistema;
 - (b) Implemente um código de volumes finitos que resolva este problema na forma adimensional;
 - (c) Apresente gráficos da permeabilidade absoluta, da pressão do reservatório e da velocidade do escoamento neste meio poroso. Apresente os resultados convertidos para unidades do sistema SI;
 - (d) Utilize outras linhas da camada 33 do SPE10 para gerar diferentes permeabilidades, resolva e ilustre os resultados para cada escolha (pelo menos mais 3 simulações diferentes).
4. Considere agora um reservatório modelado por um problema elíptico bidimensional, dado por

$$\begin{cases} \nabla \cdot \mathbf{u} = -8\pi^2 \cos(2\pi x) \cos(2\pi y) & \text{em } \Omega = [0, 1] \times [0, 1] \\ -K \nabla p = \mathbf{u} \\ \mathbf{u} \cdot \mathbf{n} = 0 \end{cases} \quad \text{sobre } \partial\Omega, \quad (4.74)$$

onde a permeabilidade absoluta é constante $K = 1$.

- (a) Verifique que a solução exata deste problema é dada por $p(x, y) = \cos(2\pi x) \cos(2\pi y)$;
 - (b) Implemente um código de volumes finitos que resolva este problema e faça um estudo de ordem de convergência comparando as soluções numéricas com a solução exata. Qual a ordem obtida?
5. Considere mais uma vez um reservatório modelado por um problema elíptico bidimensional, dado por

$$\begin{cases} \nabla \cdot \mathbf{u} = \frac{q}{\rho} & \text{em } \Omega = [0, L_x] \times [0, L_y] \\ -\frac{K}{\mu} \nabla p = \mathbf{u} & \text{em } \Omega \\ p = p_b & \text{em } \partial\Omega_p, \\ \mathbf{u} \cdot \mathbf{n} = u_b & \text{em } \partial\Omega_u, \end{cases} \quad (4.75)$$

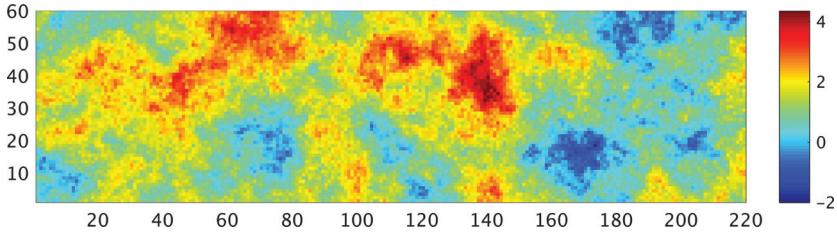


Figura 4.13: Permeabilidade em escala logarítmica da camada 33 do projeto SPE10.

onde a permeabilidade absoluta do meio é a camada 33 do projeto SPE10, ilustrada na figura 4.13. Assuma neste caso que as dimensões do reservatório são $L_x = 670\text{ m}$, $L_y = 365\text{ m}$, e que ele está totalmente saturado de água ($\mu = 8.9 \times 10^{-14}\text{ Pa} \cdot \text{s}$, $\rho = 997\text{ kg/m}^3$).

- (a) Faça a adimensionalização do sistema;
- (b) Implemente um código de volumes finitos que resolva este problema;
- (c) Resolva o problema com condições do tipo *slab*. Considerando que o contorno pode ser dividido como $\partial\Omega = \partial\Omega_{in} \cup \partial\Omega_{no} \cup \partial\Omega_{out}$, onde

$$\begin{aligned} \partial\Omega_{in} &= \{(0, y) : y \in [0, L_y]\} \\ \partial\Omega_{no} &= \{(x, 0) \text{ e } (x, L_y) : x \in [0, L_x]\} \\ \partial\Omega_{out} &= \{(L_x, y) : y \in [0, L_y]\} \end{aligned}$$

são impostas as condições de contorno: $\mathbf{u} \cdot \mathbf{n} = u_b = 0.036\text{ m/h}$ em $\partial\Omega_{in}$, $\mathbf{u} \cdot \mathbf{n} = 0$ em $\partial\Omega_{no}$ e $p = p_b = 6\text{ MPa}$ em $\partial\Omega_{out}$. Neste caso, o termo fonte é $q = 0$;

- (d) Resolva o problema com condições do tipo *five-spot*: $\mathbf{u} \cdot \mathbf{n} = 0$ em $\partial\Omega$, sendo \tilde{q} o fluxo na célula de entrada, e $-\tilde{q}$ o fluxo na célula de saída, onde $\tilde{q} = 0.0108\text{ kg/m}^3 \cdot \text{s}$;

Capítulo 5

Modelagem de problemas de transporte passivo em meios porosos

O movimento de um fluido em escoamento monofásico em meios porosos é descrito por um problema de transporte passivo, onde o fluido marcado segue o escoamento sem alterá-lo. Com a velocidade do fluido \mathbf{u} , obtida através da solução do problema elíptico dado por (4.1) e (4.2), o deslocamento do mesmo pode ser estimado pela seguinte equação hiperbólica

$$\left\{ \begin{array}{ll} \frac{\partial}{\partial t}(\phi c) + \nabla \cdot (\mathbf{u}c) = q & \text{em } \Omega \\ c(\mathbf{x}, t = 0) = c_0(\mathbf{x}) & \text{em } \Omega \\ c(\mathbf{x}, t) = c_b(\mathbf{x}, t) & \text{em } \partial\Omega^-, \end{array} \right. \quad (5.1)$$

onde ϕ é a porosidade, q é o termo fonte, c é uma concentração do traçador presente na fase fluida, c_0 é a condição inicial desta concentração e c_b é a concentração nas bordas de entrada $\partial\Omega^- = \{\mathbf{x} \in \partial\Omega, \mathbf{u} \cdot \mathbf{n}_{\partial\Omega} < 0\}$. O modelo acima também é conhecido como problema de transporte de traçadores passivos, marcadores, partículas neutras, contaminantes, etc. [33, 16]. Em todos estes casos, tem-se um mecanismo de transporte dado pelo movimento do fluido sem que haja alterações nas propriedades do escoamento [31, 40, 28].

Em simulações numéricas de escoamentos de um fluido em meios porosos, temos que o termo fonte da equação (5.1) geralmente leva em conta os poços de injeção e produção, os quais podem ser convertidos em uma condição de contorno adequada [18], gerando a seguinte equação:

$$\left\{ \begin{array}{ll} \phi \frac{\partial c}{\partial t} + \nabla \cdot (\mathbf{u}c) = 0 & \text{em } \Omega \\ c(\mathbf{x}, t = 0) = c_0(\mathbf{x}) & \text{em } \Omega \\ c(\mathbf{x}, t) = c_b(\mathbf{x}, t) & \text{em } \partial\Omega^-, \end{array} \right. \quad (5.2)$$

onde a porosidade $\phi = \phi(\mathbf{x})$ é constante no tempo. Se, além disso, a porosi-

dade for uniforme, é possível escalonar a primeira equação de (5.2) para:

$$\frac{\partial c}{\partial \tau} + \nabla \cdot (\mathbf{u}c) = 0 \quad (5.3)$$

onde $\tau = t/\phi$. Como a velocidade \mathbf{u} é conhecida e não depende da concentração, temos uma lei de conservação hiperbólica linear. Neste capítulo serão apresentadas as principais propriedades dos problemas hiperbólicos como o modelado pela equação (5.3).

5.1 Derivação de leis de conservação hiperbólicas

Equações diferenciais parciais hiperbólicas são utilizadas para descrever uma grande quantidade de fenômenos, incluindo vários tipos de aplicações de escoamentos de fluidos. Para entender fisicamente como esse tipo de equação surge, vamos derivar uma lei de balanço para determinar a conservação de uma determinada propriedade em um domínio $\Omega \subset \mathbb{R}^n$ ao longo do tempo. A propriedade considerada será a concentração $c(\mathbf{x}, t)$, e a lei de balanço estabelece que a variação temporal da quantidade de c contida no domínio Ω é igual a taxa de fluxo de c pelas fronteiras de Ω mais o total de c injetado ou retirado de Ω através de termos fonte. Matematicamente temos

$$\frac{\partial}{\partial t} \int_{\Omega} \phi c(\mathbf{x}, t) \, d\mathbf{x} = - \int_{\partial\Omega} \mathbf{f}(c(\mathbf{x}, t)) \cdot \mathbf{n} \, ds + \int_{\Omega} q \, d\mathbf{x}, \quad (5.4)$$

onde \mathbf{n} é o vetor normal à Ω , $\mathbf{f}(c)$ é a função de fluxo, que depende de c (não necessariamente de maneira linear), e q é o termo fonte. Aplicando o teorema da divergência obtemos

$$\frac{\partial}{\partial t} \int_{\Omega} \phi c(\mathbf{x}, t) \, d\mathbf{x} + \int_{\Omega} \nabla \cdot (\mathbf{f}(c(\mathbf{x}, t))) \, d\mathbf{x} = \int_{\Omega} q \, d\mathbf{x}, \quad (5.5)$$

ou seja

$$\int_{\Omega} \left(\frac{\partial}{\partial t} (\phi c(\mathbf{x}, t)) + \nabla \cdot (\mathbf{f}(c(\mathbf{x}, t))) - q \right) d\mathbf{x} = 0. \quad (5.6)$$

Como a equação acima vale para qualquer domínio arbitrário Ω e a porosidade $\phi = \phi(\mathbf{x})$ é constante no tempo, então é possível obter a seguinte forma diferencial

$$\phi \frac{\partial c}{\partial t} + \nabla \cdot (\mathbf{f}(c)) = q. \quad (5.7)$$

A lei de balanço acima é uma equação diferencial parcial hiperbólica, que não se limita apenas às aplicações em meios porosos, sendo chamada de lei de conservação quando $q = 0$. Vejamos alguns exemplos clássicos de leis de conservação hiperbólicas:

1. Equação de transporte linear:

$$\frac{\partial c}{\partial t} + \nabla \cdot (\mathbf{f}(c)) = 0, \quad (5.8)$$

com

$$\mathbf{f}(c) = \mathbf{u}c, \quad (5.9)$$

onde c é a concentração do fluido e \mathbf{u} é a velocidade constante do escoamento. Note que esse problema é equivalente a (5.3). Em uma dimensão temos:

$$\frac{\partial c}{\partial t} + \frac{\partial}{\partial x}(uc) = 0, \quad (5.10)$$

ou ainda

$$\frac{\partial c}{\partial t} + u \frac{\partial c}{\partial x} = 0, \quad (5.11)$$

a qual é conhecida como equação de advecção linear [32].

2. Equação de Burgers unidimensional:

$$\frac{\partial u}{\partial t} + \frac{\partial}{\partial x}(f(u)) = 0, \quad (5.12)$$

com

$$f(u) = \frac{u^2}{2}, \quad (5.13)$$

é um modelo simples, porém não linear, que captura propriedades importantes da dinâmica dos gases [8]. Neste caso a incógnita considerada é $u(x, t)$. Expandindo a derivada, temos a versão não conservativa da equação de Burgers:

$$\frac{\partial u}{\partial t} + u \frac{\partial u}{\partial x} = 0. \quad (5.14)$$

3. Equação de Buckley-Leverett:

$$\phi \frac{\partial s}{\partial t} + \nabla \cdot (\varphi(s)\mathbf{u}) = 0, \quad (5.15)$$

com

$$\varphi(s) = \frac{Ms^2}{Ms^2 + (1-s)^2} \quad \text{e} \quad M = \frac{\mu_o}{\mu_w}. \quad (5.16)$$

Esta equação modela escoamentos de água e óleo em meios porosos, onde a incógnita $s(x, t)$ é a saturação da água, \mathbf{u} é a velocidade do escoamento, e μ_o e μ_w são, respectivamente, as viscosidades do óleo e da água [6].

Note que, tanto o exemplo 2 quanto o exemplo 3 acima trazem funções de fluxo não lineares em termos da incógnita da equação hiperbólica, e portanto estas são chamadas de leis de conservação hiperbólicas não lineares. Equações não lineares modelam problemas mais complexos e interessantes, como o escoamento bifásico entre água e óleo em meios porosos modelado por Buckley-Leverett, porém, primeiramente, é necessário compreender como os métodos numéricos se comportam em situações simples, em equações lineares, que já trazem desafios importantes na sua modelagem computacional.

Por esta razão, este e o próximo capítulo estão focados apenas no transporte passivo modelado por equações lineares, com coeficientes constantes ou variáveis, sendo os métodos para equações não lineares deixados de fora do escopo deste livro.

5.2 Leis de conservação hiperbólicas lineares

Para discutirmos a teoria matemática e desenvolvermos métodos numéricos para a solução de leis de conservação hiperbólicas, iniciamos considerando o problema simplificado de uma equação de advecção unidimensional com coeficiente constante.

5.2.1 Solução da equação de advecção

Considere a equação de advecção (5.11), que também pode ser escrita como

$$c_t + uc_x = 0, \quad (5.17)$$

onde $u \in \mathbb{R}$ é a velocidade constante do fluido. Para estabelecer a solução de (5.17), vamos considerar um problema de Cauchy, onde o domínio espacial da equação é $\Omega = (-\infty, +\infty)$, e é imposta uma condição inicial $c(x, 0) = c_0(x)$, $x \in \mathbb{R}$. Suponha uma parametrização para as variáveis x e t da forma $x = x(\zeta)$ e $t = t(\zeta)$, de maneira que

$$c(x, t) = c(x(\zeta), t(\zeta)). \quad (5.18)$$

Então,

$$\frac{dc}{d\zeta} = \frac{\partial c}{\partial t} \frac{dt}{d\zeta} + \frac{\partial c}{\partial x} \frac{dx}{d\zeta} = c_t \frac{dt}{d\zeta} + c_x \frac{dx}{d\zeta}. \quad (5.19)$$

Note que a expressão acima transforma-se na equação (5.17) quando

$$\frac{dx}{d\zeta} = u \quad \text{e} \quad \frac{dt}{d\zeta} = 1, \quad (5.20)$$

e, com isso,

$$\frac{dc}{d\zeta} = c_t + uc_x = 0, \quad (5.21)$$

o que significa que a solução $c(x, t)$ é constante em relação ao parâmetro ζ . Além disso, se resolvermos as equações (5.20), obtemos

$$x(\zeta) = x_0 + u\zeta \quad \text{e} \quad t(\zeta) = t_0 + \zeta = \zeta, \quad (5.22)$$

onde podemos considerar $t_0 = 0$. Portanto,

$$c(x, t) = c(x(\zeta), t(\zeta)) = c(x_0 + u\zeta, \zeta). \quad (5.23)$$

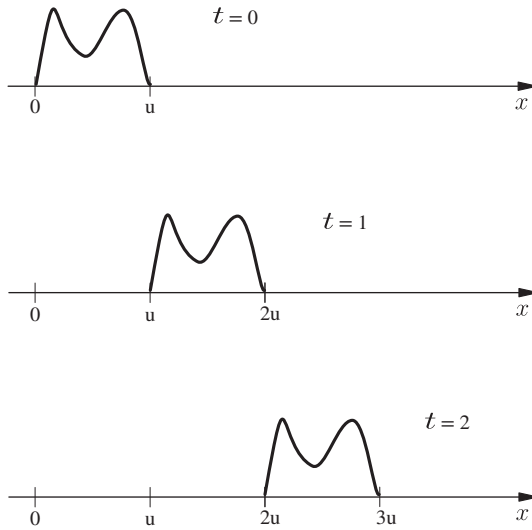


Figura 5.1: Representação do comportamento da solução $c(x, t)$ quando u é uma constante positiva.

Como $c(x, t)$ é constante com relação a ζ , e para $\zeta = 0$ temos $c(x, t) = c(x_0, 0)$, usando a condição inicial encontramos

$$c(x, t) = c(x_0, 0) = c_0(x_0) = c_0(x - u\zeta) = c_0(x - ut), \quad (5.24)$$

já que $t = \zeta$ pela equação (5.22) ou seja, a solução $c(x, t)$ é simplesmente a condição inicial transladada de ut , ou seja, transportada com velocidade

$$\frac{dx}{dt} = u. \quad (5.25)$$

A solução de um problema hiperbólico linear é, portanto, a propagação de uma onda indeformável dada pela condição inicial, com velocidade u [44, 14]. Um exemplo pode ser visto na figura 5.1 que ilustra o comportamento da solução $c(x, t)$ quando u é uma constante positiva.

Outra observação importante é que a condição inicial de problemas hiperbólicos pode admitir descontinuidades, as quais, caso existam, são propagadas sem alteração [44, 22]. A figura 5.2 ilustra a solução $c(x, t)$ com $u = 1$ e uma condição inicial descontínua da forma

$$c_0(x) = \begin{cases} 1, & \text{se } x \leq 0 \\ 0, & \text{se } x > 0. \end{cases} \quad (5.26)$$

Esta última observação pode parecer um contrassenso, uma vez que admite-se uma solução descontínua para uma equação diferencial. É importante complementar que soluções descontínuas aparecem em equações

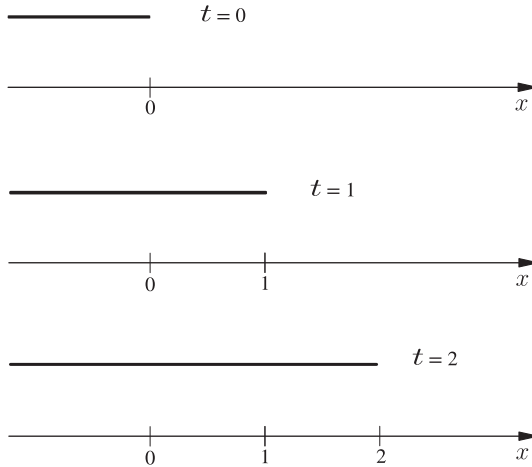


Figura 5.2: Representação do comportamento da solução $c(x, t)$ quando $u = 1$ e a condição inicial é descontínua.

hiperbólicas lineares somente quando a condição inicial é descontínua, porém em equações não lineares, pode haver a formação de soluções descontínuas, mesmo que a condição inicial seja perfeitamente suave. Esse não é um artifício numérico ou erro de modelagem, uma vez que descontinuidades são observadas na física dos escoamentos: por exemplo, uma onda de choque aerodinâmica é uma descontinuidade de pressão que se observa em vôos supersônicos, ou ainda em escoamentos bifásicos, onde são observadas descontinuidades da densidade dos fluidos (massa específica).

Para pensar em soluções descontínuas para equações hiperbólicas, é preciso estender o espaço de busca de soluções, considerando uma formulação variacional da equação diferencial. Com isso, pode-se mover as derivadas da variável principal para uma outra função auxiliar que seja suave, através do uso de teoremas de integração, enfraquecendo o requisito de suavidade da solução. Este mecanismo permite que soluções descontínuas sejam admitidas, porém o seu estudo está fora do escopo deste livro. O leitor interessado pode encontrar o embasamento necessário em [31].

5.2.2 Curvas características

As trajetórias

$$X(t) = x_0 + ut, \quad (5.27)$$

soluções da equação (5.25), são conhecidas como curvas características da equação (5.17), ao longo das quais vale o seguinte:

$$\frac{d}{dt}c(X(t), t) = c_t(X(t), t) + c_x(X(t), t)X'(t) = c_t + uc_x = 0, \quad (5.28)$$

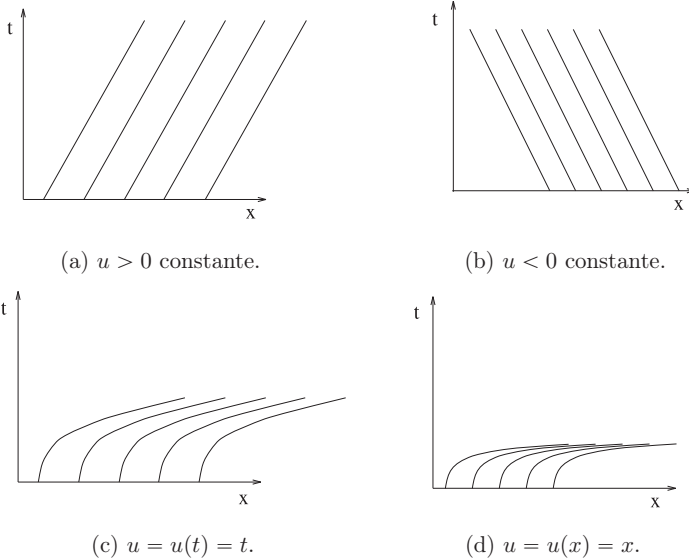


Figura 5.3: Diferentes tipos de curvas características para a equação (5.17).

de onde se conclui que a solução $c(x, t)$ é constante ao longo das curvas características.

Uma forma comum de se representar graficamente as curvas características é desenhar o conjunto de soluções de (5.25) no plano (x, t) . Como a solução é uma função $X(t)$, o mais imediato seria desenhar o gráfico de X em função da abscissa t . No entanto, na maioria dos livros e artigos sobre o assunto, convencionou-se ilustrar as curvas características colocando X como abscissa, o que ajuda na interpretação das muitas soluções em função da constante de integração x_0 e da propagação delas ao longo do tempo.

Por exemplo, se u é constante, então as curvas características são retas paralelas no plano (x, t) , como ilustrado nas figuras 5.3a e 5.3b para $u > 0$ e $u < 0$, respectivamente. Para casos mais gerais, as características não necessariamente são retas. A figura 5.3c ilustra uma situação em que $u = u(t) = t$, e portanto, as curvas características são da forma

$$X(t) = x_0 + \frac{t^2}{2}. \tag{5.29}$$

Já a figura 5.3d representa o caso onde $u = u(x) = x$, cujas curvas características são dadas por

$$X(t) = x_0 + e^t. \tag{5.30}$$

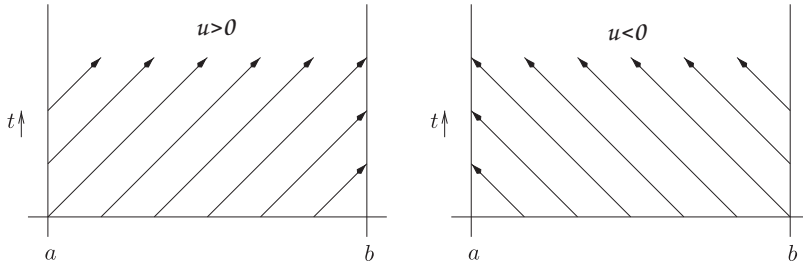


Figura 5.4: Representação das especificações das condições de contorno nas bordas de entrada quando $a < x < b$ e u é constante.

5.2.3 Condições de contorno

Até agora não nos preocupamos com condições de contorno para o problema hiperbólico. Alisamos apenas o problema de Cauchy, onde o domínio espacial da EDP é $\Omega = (-\infty, +\infty)$. No entanto, em qualquer aplicação mais prática, o domínio da EDP é um conjunto limitado (por exemplo, um intervalo $[a, b]$ em uma dimensão), de forma que é necessário pensar sobre as condições de contorno nas fronteiras desse domínio.

As curvas características possuem mais uma interpretação importante para nossa análise: elas transportam a informação vinda da condição inicial, propagando-a para dentro do domínio $\Omega \times \mathbb{R}_+$. Se Ω é um conjunto limitado, então é esperado que alguma informação nestes contornos também seja propagada para dentro do domínio.

Para simplificar, considere um problema linear unidimensional, definido em um intervalo limitado $\Omega = [a, b]$, com velocidade constante $u > 0$, de forma que as características são retas com inclinação $1/u$ no plano (x, t) (lembre-se que o plano “invertido” com abcissa x). Portanto a informação se propaga da esquerda para a direita ao longo do tempo, de forma que não faz sentido impor uma condição de contorno para $c(b, t)$ no extremo direito b , já que essa informação nunca será propagada para dentro do domínio. Como se trata de uma equação de ordem 1, temos direito de impor apenas uma condição de contorno, idealmente no extremo esquerdo de $[a, b]$, ou seja, $c(a, t)$ em $x = a$. Essa situação fica clara na figura 5.4 (esquerda). Caso $u < 0$, a situação se inverte, caso que também é ilustrado na figura 5.4 (direita).

Num contexto de escoamento de fluido, dizemos no caso $u > 0$, que $x = a$ representa a fronteira de entrada de fluido (em inglês, *inflow*), e que $x = b$ representa a fronteira de saída de fluido (em inglês, *outflow*), onde não é necessário nenhum tratamento especial para a solução, apenas que o que passar desta fronteira, sairá do domínio de interesse. Obviamente a nomenclatura também se inverte caso $u < 0$.

5.2.4 Problema de Riemann

Um caso clássico muito utilizado no contexto de leis de conservação hiperbólicas é o problema de Riemann, o qual é constituído de uma equação diferencial parcial na forma de conservação juntamente com uma condição inicial dada por uma função Heaviside do tipo:

$$H(x) = \begin{cases} c_e, & \text{se } x \leq 0 \\ c_d, & \text{se } x > 0, \end{cases} \quad (5.31)$$

com $c_e \neq c_d$. A equação de advecção (5.17) com u constante positiva, com condição inicial dada por (5.31) tem solução constante por partes dada por (5.24), ou seja, $c(x, t) = H(x - ut)$, que resulta

$$c(x, t) = \begin{cases} c_e, & \text{se } x \leq ut \\ c_d, & \text{se } x > ut, \end{cases} \quad (5.32)$$

como ilustrado na figura 5.2 para $u = 1$, $c_e = 1$ e $c_d = 0$.

5.2.5 Coeficientes variáveis

Quando a velocidade do fluido varia com x ou t , ou seja, $u = u(x, t)$ tem-se uma equação de advecção com coeficientes variáveis, mas ainda linear

$$c_t + (u(x, t)c)_x = 0. \quad (5.33)$$

Neste caso, as curvas características $X(t)$ são soluções da equação diferencial ordinária

$$X'(t) = u(X(t), t), \quad (5.34)$$

cujas soluções não necessariamente é um conjunto de retas, como visto nos exemplos das figuras 5.3c e 5.3d.

A equação de advecção com coeficientes variáveis também assume uma forma simplificada ao longo das características:

$$\begin{aligned} \frac{d}{dt}c(X(t), t) &= c_t(X(t), t) + X'(t)c_x(X(t), t) \\ &= c_t + u(X(t), t)c_x \\ &= c_t + (u(X(t), t)c)_x - u'(X(t), t)c \\ &= -u'(X(t), t)c(X(t), t). \end{aligned} \quad (5.35)$$

Observe que a solução c não é mais constante ao longo das curvas, mas ainda assim a equação diferencial parcial original foi reduzida a conjuntos de equações diferenciais ordinárias lineares, que possuem solução já que o lado direito da equação é linear em c , e portanto, Lipschitz contínua.

A equação (5.33) está na forma conservativa. Também é comum encontrar a equação de advecção com coeficientes variáveis na forma não conservativa

$$c_t + u(x, t)c_x = 0, \quad (5.36)$$

caso em que as curvas características $X(t)$ também satisfazem a equação (5.34), porém a segunda linha de (5.35) é igual a zero, de modo que c passa a ser constante ao longo das curvas características.

5.2.6 Funções de fluxo em problemas lineares com coeficientes variáveis

Usualmente, no caso escalar, as leis de conservação são definidas a partir de funções de fluxo $\mathbf{f}(\mathbf{x}, t, c, \nabla c, \dots)$. Para que a lei de conservação seja hiperbólica, \mathbf{f} não pode depender das derivadas de c . Veremos mais adiante que, na dedução dos métodos de volumes finitos, normalmente utiliza-se a definição de fluxo $\mathbf{f} = \mathbf{f}(c)$. Porém, como visto acima, equações lineares admitem coeficientes não constantes, sendo que \mathbf{f} também pode depender de t e \mathbf{x} .

Nos casos unidimensionais é fácil demonstrar uma equivalência entre equações escalares ou sistemas hiperbólicos, onde a função de fluxo depende explicitamente de \mathbf{x} e t , e sistemas hiperbólicos onde a função de fluxo depende exclusivamente da incógnita c , com dependência implícita de \mathbf{x} e t . Contudo, tal mudança não traz benefício outro, senão generalizar a notação das equações e dos métodos apresentados na sua formulação de fluxo, o que será útil no próximo capítulo.

A título de exemplo, considere o caso escalar com dependência $f = f(x, t, c)$ na equação

$$\frac{\partial c}{\partial t} + \frac{\partial}{\partial x} f(x, t, c) = 0. \quad (5.37)$$

Note que podemos definir

$$\mathbf{q}(x, t) = \begin{bmatrix} q_1 \\ q_2 \\ q_3 \end{bmatrix} := \begin{bmatrix} x \\ t \\ c \end{bmatrix}, \quad (5.38)$$

de modo que

$$\frac{\partial}{\partial t} \mathbf{q}(x, t) = \begin{bmatrix} 0 \\ 1 \\ \frac{\partial c}{\partial t} \end{bmatrix}. \quad (5.39)$$

Definindo

$$\mathbf{F}(\mathbf{q}(x, t)) = \begin{bmatrix} 0 \\ -q_1 \\ f(q_1, q_2, q_3) \end{bmatrix} \quad (5.40)$$

temos

$$\frac{\partial}{\partial t} \begin{bmatrix} x \\ t \\ c \end{bmatrix} + \frac{\partial}{\partial x} \begin{bmatrix} 0 \\ -x \\ f(x, t, c) \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 0 \\ 1 - 1 \\ \frac{\partial c}{\partial t} + \frac{\partial f}{\partial x} \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 0 \\ 0 \\ 0 \end{bmatrix}, \quad (5.41)$$

que é um sistema hiperbólico da forma

$$\mathbf{q}_t + \mathbf{F}(\mathbf{q})_x = \mathbf{0}. \quad (5.42)$$

No caso onde a dependência explícita de x e t é em um sistema hiperbólico da forma

$$\mathbf{c}_t + \mathbf{f}(x, t, \mathbf{c})_x = \mathbf{0} \quad (5.43)$$

o processo é análogo, uma vez que definindo

$$\mathbf{q}(x, t) = \begin{bmatrix} x \\ t \\ \mathbf{c} \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} x \\ t \\ c_1 \\ c_2 \\ \vdots \end{bmatrix} \quad (5.44)$$

e

$$\mathbf{F}(\mathbf{q}) = \begin{bmatrix} 0 \\ -q_1 \\ \mathbf{f}(q_1, q_2, \dots) \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 0 \\ -q_1 \\ f_1(q_1, q_2, \dots) \\ f_2(q_1, q_2, \dots) \\ \vdots \end{bmatrix}, \quad (5.45)$$

novamente encontramos um sistema hiperbólico na forma

$$\mathbf{q}_t + \mathbf{F}(\mathbf{q})_x = \mathbf{0}. \quad (5.46)$$

5.3 Exercícios

1. Mostre que se não for especificada uma condição inicial, então qualquer função suave da forma $c(x, t) = \tilde{c}(x - ut)$ é solução de (5.17).
2. Mostre que as trajetórias (5.29) e (5.30) são as curvas características da equação (5.17) quando $u = u(t) = t$ e $u = u(x) = x$, respectivamente.
3. Justifique que (5.32) é a solução da equação de advecção (5.17) com u constante positiva e condição inicial dada por (5.31). Qual a solução para o caso u constante negativa?
4. Considere uma equação com coeficientes variáveis

$$\frac{\partial c}{\partial t} + \frac{\partial}{\partial x}(u(x)c) = 0,$$

onde $u(x)$ é uma função escalar de x . Transforme esta equação em um sistema hiperbólico da forma (5.42).

Capítulo 6

Método de volumes finitos para leis de conservação hiperbólicas lineares

Como a solução numérica de equações hiperbólicas admite descontinuidades, para que a solução calculada seja representativa da solução do problema físico, as descontinuidades devem ser corretamente tratadas pelos métodos numéricos. Estes devem levar em conta a direção e a velocidade de propagação de informações ao longo do domínio computacional. Os esquemas de volumes finitos, que são derivados com base na forma integral da lei de conservação, são adequados para este tipo de problema. Nesse capítulo, serão apresentados alguns métodos de volumes finitos para leis de conservação hiperbólicas lineares.

Os métodos de volumes finitos consideram leis de conservação hiperbólicas da forma (5.7). Sendo $\phi = 1$ e $q = 0$, temos a forma unidimensional dada por:

$$\frac{\partial c}{\partial t} + \frac{\partial}{\partial x} f(c) = 0. \quad (6.1)$$

Vamos considerar uma discretização do domínio computacional no espaço e no tempo, como indicado na figura 6.1. Por simplicidade, faremos uma discretização uniforme centrada nos pontos: x_j , $j = 1, \dots, N$, de maneira que as interfaces entre dois volumes de controle V_{j-1} e V_j são dadas por

$$x_{j \pm \frac{1}{2}} = x_j \pm \frac{\Delta x}{2} \quad (6.2)$$

Com isso, cada volume de controle é dado por

$$V_j = [x_{j-\frac{1}{2}}, x_{j+\frac{1}{2}}). \quad (6.3)$$

A discretização temporal inicialmente será considerada uniforme, com cada passo de tempo de tamanho Δt , sendo os níveis no tempo denotados por $t^n = n\Delta t$.

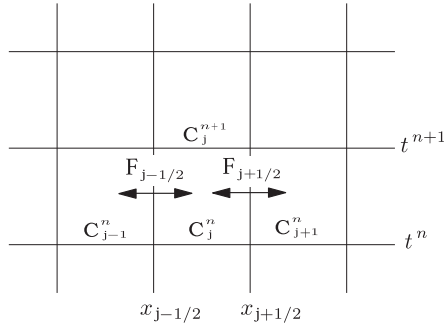


Figura 6.1: Representação de uma discretização de volumes finitos para leis de conservação hiperbólicas.

Em cada passo de tempo t^n , a aproximação da solução no volume de controle V_j é dada por um valor médio da concentração nessa célula computacional

$$C_j^n = \frac{1}{\Delta x} \int_{x_{j-\frac{1}{2}}}^{x_{j+\frac{1}{2}}} c(x, t^n) dx. \quad (6.4)$$

Se C_j^n é conhecida em um certo passo de tempo t^n , o método de volumes finitos calcula a aproximação C_j^{n+1} , no próximo passo de tempo t^{n+1} . Para tanto, integra-se a lei de conservação (6.1) sobre o domínio $[x_{j-\frac{1}{2}}, x_{j+\frac{1}{2}}] \times [t^n, t^{n+1})$, isto é,

$$\int_{t^n}^{t^{n+1}} \int_{x_{j-\frac{1}{2}}}^{x_{j+\frac{1}{2}}} \left(\frac{\partial c}{\partial t} + \frac{\partial}{\partial x} f(c) \right) dx dt = 0. \quad (6.5)$$

Separando as integrais e utilizando o teorema fundamental do cálculo, temos

$$\begin{aligned} \int_{x_{j-\frac{1}{2}}}^{x_{j+\frac{1}{2}}} c(x, t^{n+1}) dx - \int_{x_{j-\frac{1}{2}}}^{x_{j+\frac{1}{2}}} c(x, t^n) dx \\ = - \int_{t^n}^{t^{n+1}} f(c(x_{j+\frac{1}{2}}, t)) dt + \int_{t^n}^{t^{n+1}} f(c(x_{j-\frac{1}{2}}, t)) dt. \end{aligned} \quad (6.6)$$

Definindo a média temporal da função fluxo

$$\bar{F}_{j+\frac{1}{2}}^n = \frac{1}{\Delta t} \int_{t^n}^{t^{n+1}} f(c(x_{j+\frac{1}{2}}, t)) dt, \quad (6.7)$$

e dividindo ambos os lados da equação (6.6) por Δx , obtemos:

$$C_j^{n+1} = C_j^n - \frac{\Delta t}{\Delta x} \left(\bar{F}_{j+\frac{1}{2}}^n - \bar{F}_{j-\frac{1}{2}}^n \right). \quad (6.8)$$

A equação acima estabelece um princípio de conservação: a variação média da concentração na célula é dada pela diferença dos fluxos nas fronteiras da mesma. Note que trata-se de uma equação exata, pois ainda não houve aproximações nem para as médias de c , nem para as médias temporais dos fluxos. Diferentes esquemas de volumes finitos são obtidos a partir de diferentes definições para os fluxos discretos $F_{j+\frac{1}{2}}^n$ que aproximam a média temporal da função fluxo dada por (6.7).

6.1 Esquemas de volumes finitos para leis de conservação hiperbólicas lineares com coeficientes constantes

A seguir apresentamos algumas escolhas para as aproximações dos fluxos discretos $F_{j+\frac{1}{2}}^n$ para leis de conservação hiperbólicas lineares com coeficientes constantes, ou seja, $f(c) = uc$, com u constante. Mais adiante, veremos propriedades e características de cada esquema, especialmente em termos de estabilidade e convergência.

Esquema central

A tentativa mais intuitiva possível para a definição do fluxo em $x_{j+\frac{1}{2}}$ é tomar a média aritmética entre os dados à esquerda C_j e à direita C_{j+1} :

$$F_{j+\frac{1}{2}}^n = \frac{1}{2} \left(f(C_j^n) + f(C_{j+1}^n) \right) = \frac{u}{2} \left(C_j^n + C_{j+1}^n \right) \quad (6.9)$$

e assim, a equação (6.8) se torna

$$C_j^{n+1} = C_j^n - \frac{u\Delta t}{2\Delta x} \left(C_{j+1}^n - C_{j-1}^n \right). \quad (6.10)$$

Na prática, este método não é útil, pois não é um método estável para problemas hiperbólicos, como veremos a seguir.

O método de Lax-Friedrichs

O método de Lax-Friedrichs, cujos fluxos são dados por

$$F_{j+\frac{1}{2}}^n = \frac{u}{2} \left(C_{j+1}^n + C_j^n \right) - \frac{\Delta x}{2\Delta t} \left(C_{j+1}^n - C_j^n \right), \quad (6.11)$$

é uma pequena modificação no esquema central para fornecer uma aproximação estável. Escrevendo o método de Lax-Friedrichs na forma da equação (6.8), encontramos

$$C_j^{n+1} = \frac{1}{2} \left(C_{j-1}^n + C_{j+1}^n \right) - \frac{u\Delta t}{2\Delta x} \left(C_{j+1}^n - C_{j-1}^n \right). \quad (6.12)$$

Note que a modificação com relação ao método central é que o valor de C_j^n da equação (6.10) foi substituído pela média aritmética $(C_{j-1}^n + C_{j+1}^n)/2$.

O método de Lax-Wendroff

O método de Lax-Wendroff, com fluxos definidos por

$$F_{j+\frac{1}{2}}^n = \frac{u}{2} (C_{j+1}^n + C_j^n) - \frac{u^2 \Delta t}{2 \Delta x} (C_{j+1}^n - C_j^n), \quad (6.13)$$

é um método que utiliza expansões em séries de Taylor no tempo da solução $c(x, t)$ para obter segunda ordem formal de precisão. Escrevendo o método de Lax-Wendroff na forma da equação (6.8) obtemos

$$C_j^{n+1} = C_j^n - \frac{u \Delta t}{2 \Delta x} (C_{j+1}^n - C_{j-1}^n) + \frac{u^2 (\Delta t)^2}{2 (\Delta x)^2} (C_{j+1}^n - 2C_j^n + C_{j-1}^n). \quad (6.14)$$

Note que

$$c_t = -f_x(c) = -uc_x \quad (6.15)$$

e

$$c_{tt} = (-uc_x)_t = -u(c_x)_t = -u(c_t)_x = -u(-uc_x)_x = u^2 c_{xx}. \quad (6.16)$$

Portanto, se considerarmos expansões em série de Taylor no tempo para $c(x, t)$, supostamente suave, temos:

$$c(x_j, t^{n+1}) = c(x_j, t^n) + \Delta t c_t(x_j, t^n) + \frac{(\Delta t)^2}{2} c_{tt}(x_j, t^n) + \mathcal{O}((\Delta t)^3), \quad (6.17)$$

ou seja,

$$c(x_j, t^{n+1}) = c(x_j, t^n) - u \Delta t c_x(x_j, t^n) + \frac{u^2 (\Delta t)^2}{2} c_{xx}(x_j, t^n) + \mathcal{O}((\Delta t)^3). \quad (6.18)$$

Aproximando as derivadas espaciais por diferenças finitas centrais de segunda ordem [32]

$$c_x(x_j, t^n) \approx \frac{C_{j+1}^n - C_{j-1}^n}{2 \Delta x} \quad (6.19)$$

e

$$c_{xx}(x_j, t^n) \approx \frac{1}{(\Delta x)^2} (C_{j+1}^n - 2C_j^n + C_{j-1}^n), \quad (6.20)$$

encontramos a mesma aproximação da equação (6.14).

O método *upwind*

Os métodos considerados anteriormente são métodos centrados, simétricos em relação ao ponto onde estamos atualizando a solução. Para problemas hiperbólicos, no entanto, esperamos que as informações se propaguem como ondas que se movem ao longo de características. Com isso, faz sentido tentar usar o conhecimento da estrutura da solução para definir as funções de fluxo numérico. Esta ideia dá origem a métodos do tipo *upwind*, nos quais a informação em cada ponto é obtida olhando a direção na qual a mesma se

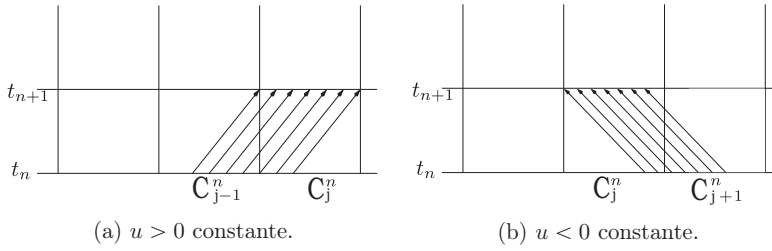


Figura 6.2: Propagação da informação em uma célula de um passo de tempo t^n para t^{n+1} .

propaga. Para a equação de advecção escalar, há apenas uma velocidade, que é positiva ou negativa e, portanto, um método upwind é um método unilateral, com valores determinados com base nas informações à esquerda ou à direita.

Na figura 6.2 ilustramos como a informação em uma célula é propagada do passo de tempo t^n para t^{n+1} . Para u positiva, temos que o fluxo na face $x_{j+\frac{1}{2}}$ só depende de C_{j-1}^n , enquanto que esse mesmo fluxo depende apenas de C_{j+1}^n quando u é negativa. Essas observações sugerem que o fluxo numérico seja definido da seguinte maneira:

$$F_{j+\frac{1}{2}}^n = \begin{cases} u C_j^n, & \text{se } u > 0 \\ u C_{j+1}^n, & \text{se } u < 0. \end{cases} \quad (6.21)$$

Com isso, a equação (6.8) para o método upwind é dada por

$$C_j^{n+1} = C_j^n - \frac{u\Delta t}{\Delta x} (C_j^n - C_{j-1}^n), \quad \text{se } u > 0 \quad (6.22)$$

e

$$C_j^{n+1} = C_j^n - \frac{u\Delta t}{\Delta x} (C_{j+1}^n - C_j^n), \quad \text{se } u < 0. \quad (6.23)$$

Também podemos analisar o método upwind sob um ponto de vista de propagação de ondas. Considere as funções de salto

$$\mathcal{W}_{j+\frac{1}{2}} = C_{j+1}^n - C_j^n \quad (6.24)$$

e

$$\mathcal{W}_{j-\frac{1}{2}} = C_j^n - C_{j-1}^n, \quad (6.25)$$

que representam, respectivamente, as ondas que estão se movendo para as células V_{i+1} e V_i com velocidade u . Voltando às expressões (6.22) e (6.23), temos

$$C_j^{n+1} = C_j^n - \frac{u\Delta t}{\Delta x} \mathcal{W}_{j-\frac{1}{2}}, \quad \text{se } u > 0 \quad (6.26)$$

e

$$C_j^{n+1} = C_j^n - \frac{u\Delta t}{\Delta x} \mathcal{W}_{j+\frac{1}{2}}, \quad \text{se } u < 0. \quad (6.27)$$

Definindo os fluxos discretos por

$$F_{j+\frac{1}{2}}^n = u^+ C_j^n + u^- C_{j+1}^n, \quad (6.28)$$

onde $u^+ = \max\{u, 0\}$ e $u^- = \min\{u, 0\}$, podemos combinar (6.26) e (6.27) em uma única fórmula:

$$\begin{aligned} C_j^{n+1} &= C_j^n - \frac{\Delta t}{\Delta x} \left(u^+ C_j^n + u^- C_{j+1}^n - u^+ C_{j-1}^n - u^- C_j^n \right) \\ &= C_j^n - \frac{\Delta t}{\Delta x} \left(u^+ \mathcal{W}_{j-\frac{1}{2}} + u^- \mathcal{W}_{j+\frac{1}{2}} \right). \end{aligned} \quad (6.29)$$

6.2 Volumes finitos para equações com coeficientes variáveis

Quando a velocidade do fluido varia espacialmente, os métodos de volumes finitos desenvolvidos para a equação (6.1), que está escrita na forma de conservação, não podem ser aplicados diretamente, pois neste caso temos uma função do tipo $f(c, x) = u(x)c$, levando à equação

$$\frac{\partial c}{\partial t} + \frac{\partial}{\partial x} (u(x)c) = 0. \quad (6.30)$$

Note que a equação resultante ainda é hiperbólica, e a dependência de x da função f pode ser “retirada”, transformando a equação (6.30) em um sistema hiperbólico, assim como discutido na seção 5.2.6. Isso permitiria aplicar sem muito trabalho os esquemas de volumes finitos deduzidos anteriormente, porém adaptados para sistemas ao invés de equações escalares. Ao invés disso, vamos simplesmente deduzir novamente os esquemas escalares a partir de (6.30), o que permitirá tratar adequadamente a velocidade variável nestes esquemas de volumes finitos.

Integrando (6.30) sobre o domínio $[x_{j-\frac{1}{2}}, x_{j+\frac{1}{2}}] \times [t^n, t^{n+1})$ temos

$$\int_{t^n}^{t^{n+1}} \int_{x_{j-\frac{1}{2}}}^{x_{j+\frac{1}{2}}} \left(\frac{\partial c}{\partial t} + \frac{\partial}{\partial x} (uc) \right) dx dt = 0. \quad (6.31)$$

Separando as integrais e utilizando o teorema fundamental do cálculo, obtemos

$$\begin{aligned} &\int_{x_{j-\frac{1}{2}}}^{x_{j+\frac{1}{2}}} c(x, t^{n+1}) dx - \int_{x_{j-\frac{1}{2}}}^{x_{j+\frac{1}{2}}} c(x, t^n) dx \\ &= - \int_{t^n}^{t^{n+1}} (uc)|_{x_{j+\frac{1}{2}}} dt + \int_{t^n}^{t^{n+1}} (uc)|_{x_{j-\frac{1}{2}}} dt. \end{aligned} \quad (6.32)$$

Definindo

$$\bar{F}_{j+\frac{1}{2}}^n = \frac{1}{\Delta t} \int_{t^n}^{t^{n+1}} u(x_{j+\frac{1}{2}}) c(x_{j+\frac{1}{2}}, t) dt, \quad (6.33)$$

e dividindo ambos os lados da equação (6.5) por Δx , obtemos:

$$C_j^{n+1} = C_j^n - \frac{\Delta t}{\Delta x} \left(\bar{F}_{j+\frac{1}{2}}^n - \bar{F}_{j-\frac{1}{2}}^n \right), \quad (6.34)$$

onde C_j^n é o valor médio da concentração na célula V_i no tempo t^n , como definido em (6.4), isto é,

$$C_j^n = \frac{1}{\Delta x} \int_{x_{j-\frac{1}{2}}}^{x_{j+\frac{1}{2}}} c(x, t^n) dx. \quad (6.35)$$

Dessa maneira, os esquemas de volumes finitos apresentados anteriormente precisam considerar fluxos discretos $F_{j+\frac{1}{2}}^n$ que aproximem (6.33). A seguir vamos apresentar a generalização dos métodos discutidos anteriormente para o caso $f(c, x) = u(x)c$. Da forma como os esquemas foram apresentados, em termos dos fluxos numéricos, essa generalização é bastante simples, caso contrário não saberíamos exatamente onde avaliar $u(x)$.

Esquema central

Fluxos discretos:

$$F_{j+\frac{1}{2}}^n = \frac{u(x_{j+\frac{1}{2}})}{2} (C_j^n + C_{j+1}^n), \quad (6.36)$$

e portanto,

$$C_j^{n+1} = C_j^n - \frac{\Delta t}{2\Delta x} \left(u(x_{j+\frac{1}{2}}) (C_{j+1}^n + C_j^n) - u(x_{j-\frac{1}{2}}) (C_j^n + C_{j-1}^n) \right). \quad (6.37)$$

O método de Lax-Friedrichs

Fluxos discretos:

$$F_{j+\frac{1}{2}}^n = \frac{u(x_{j+\frac{1}{2}})}{2} (C_{j+1}^n + C_j^n) - \frac{\Delta x}{2\Delta t} (C_{j+1}^n - C_j^n), \quad (6.38)$$

e assim,

$$\begin{aligned} C_j^{n+1} = & C_j^n - \frac{\Delta t}{\Delta x} \left[\frac{u(x_{j+\frac{1}{2}})}{2} (C_{j+1}^n + C_j^n) - \frac{\Delta x}{2\Delta t} (C_{j+1}^n - C_j^n) \right] \\ & + \frac{\Delta t}{\Delta x} \left[\frac{u(x_{j-\frac{1}{2}})}{2} (C_j^n + C_{j-1}^n) - \frac{\Delta x}{2\Delta t} (C_j^n - C_{j-1}^n) \right], \end{aligned} \quad (6.39)$$

ou seja,

$$\begin{aligned} C_j^{n+1} = & \frac{1}{2} (C_{j+1}^n + C_{j-1}^n) \\ & - \frac{\Delta t}{2\Delta x} \left[u(x_{j+\frac{1}{2}}) (C_{j+1}^n + C_j^n) - u(x_{j-\frac{1}{2}}) (C_j^n + C_{j-1}^n) \right]. \end{aligned} \quad (6.40)$$

O método de Lax-Wendroff

Fluxos discretos:

$$F_{j+\frac{1}{2}}^n = \frac{u(x_{j+\frac{1}{2}})}{2} (C_{j+1}^n + C_j^n) - \frac{(u(x_{j+\frac{1}{2}}))^2 \Delta t}{2\Delta x} (C_{j+1}^n - C_j^n), \quad (6.41)$$

de onde obtemos

$$\begin{aligned} C_j^{n+1} = & C_j^n - \frac{\Delta t}{\Delta x} \left[\frac{u(x_{j+\frac{1}{2}})}{2} (C_{j+1}^n + C_j^n) - \frac{(u(x_{j+\frac{1}{2}}))^2 \Delta t}{2\Delta x} (C_{j+1}^n - C_j^n) \right] \\ & + \frac{\Delta t}{\Delta x} \left[\frac{u(x_{j-\frac{1}{2}})}{2} (C_j^n + C_{j-1}^n) - \frac{(u(x_{j-\frac{1}{2}}))^2 \Delta t}{2\Delta x} (C_j^n - C_{j-1}^n) \right], \end{aligned} \quad (6.42)$$

ou seja,

$$\begin{aligned} C_j^{n+1} = & C_j^n - \frac{\Delta t}{2\Delta x} \left[u(x_{j+\frac{1}{2}}) (C_{j+1}^n + C_j^n) - u(x_{j-\frac{1}{2}}) (C_j^n + C_{j-1}^n) \right] \\ & + \frac{(\Delta t)^2}{2(\Delta x)^2} \left[(u(x_{j+\frac{1}{2}}))^2 (C_{j+1}^n - C_j^n) - (u(x_{j-\frac{1}{2}}))^2 (C_j^n - C_{j-1}^n) \right]. \end{aligned} \quad (6.43)$$

O método *upwind*

No caso de coeficientes variáveis, o método *upwind* não é mais um método apenas unilateral, pois agora com $u(x)$ variável, a discretização pode variar também, dependendo do sinal de u .

Fluxos discretos:

$$F_{j+\frac{1}{2}}^n = u^+(x_{j+\frac{1}{2}}) C_j^n + u^-(x_{j+\frac{1}{2}}) C_{j+1}^n, \quad (6.44)$$

onde $u^+ = \max\{u, 0\}$, $u^- = \min\{u, 0\}$. Consequentemente:

$$\begin{aligned} C_j^{n+1} = & C_j^n - \frac{\Delta t}{\Delta x} \left[u^+(x_{j+\frac{1}{2}}) C_j^n + u^-(x_{j+\frac{1}{2}}) C_{j+1}^n \right. \\ & \left. - u^+(x_{j-\frac{1}{2}}) C_{j-1}^n - u^-(x_{j-\frac{1}{2}}) C_j^n \right] \\ = & C_j^n - \frac{\Delta t}{\Delta x} \left[u^+(x_{j+\frac{1}{2}}) C_j^n + u^-(x_{j+\frac{1}{2}}) (C_{j+1}^n - C_j^n) \right. \\ & \left. + u^-(x_{j+\frac{1}{2}}) C_j^n + u^+(x_{j-\frac{1}{2}}) (C_j^n - C_{j-1}^n) \right. \\ & \left. - u^+(x_{j-\frac{1}{2}}) C_j^n - u^-(x_{j-\frac{1}{2}}) C_j^n \right], \end{aligned} \quad (6.45)$$

e, finalmente

$$\begin{aligned} C_j^{n+1} = & C_j^n - \frac{\Delta t}{\Delta x} \left[u^+(x_{j+\frac{1}{2}}) - u^+(x_{j-\frac{1}{2}}) + u^-(x_{j+\frac{1}{2}}) - u^-(x_{j-\frac{1}{2}}) \right] C_j^n \\ & - \frac{\Delta t}{\Delta x} \left[u^+(x_{j-\frac{1}{2}}) \mathcal{W}_{j-\frac{1}{2}} + u^-(x_{j+\frac{1}{2}}) \mathcal{W}_{j+\frac{1}{2}} \right]. \end{aligned} \quad (6.46)$$

A velocidade utilizada nos métodos descritos acima precisa estar definida nas interfaces, o que pode ter consequência na escolha dos métodos para resolver o problema de velocidade e pressão. Note que o desenvolvimento apresentado aqui é compatível com o método de volumes finitos apresentado no Capítulo 4, que por sua vez entrega os fluxos nas interfaces entre os volumes de controle.

6.3 A condição CFL

A condição CFL (Courant, Friedrichs e Lewy) é uma condição necessária, porém não suficiente, para garantir convergência do método de volumes finitos para a equação diferencial, à medida que a malha é refinada. Isso significa que, se a condição CFL for satisfeita, o método pode convergir ou não, a depender de suas propriedades de consistência e estabilidade. Porém se ela não for satisfeita, o método numérico não terá nenhuma chance de convergência.

A solução da equação (5.17) é dada por (5.25), sendo o valor de c constante ao longo de cada característica. Por exemplo, se a curva característica é uma reta, então para cada passo de tempo, a solução exata obedece a expressão

$$c(x, t^{n+1}) = c(x - u\Delta t, t^n), \quad (6.47)$$

ou seja, a solução em (x_j, t^{n+1}) depende da informação localizada no ponto $(x_j - u\Delta t, t^n)$. Lembrando que o método de volumes finitos calcula médias espaciais, a solução aproximada C_j^n deve ser comparada com

$$c_j^n = \frac{1}{\Delta x} \int_{x_{j-\frac{1}{2}}}^{x_{j+\frac{1}{2}}} c(x, t^n) dx, \quad (6.48)$$

que é o valor exato desta média. Os esquemas de volumes finitos vistos até aqui são métodos explícitos, e podem ser escritos por uma função de atualização da forma

$$C_j^{n+1} = \mathcal{H}(C_{j-1}^n, C_j^n, C_{j+1}^n), \quad (6.49)$$

a depender do esquema escolhido. Portanto, a construção da solução numérica C_j^{n+1} no volume de controle V_j depende da informação que está confinada em V_j e nos volumes vizinhos V_{j-1} e V_{j+1} e, portanto, no intervalo $[x_{j-\frac{3}{2}}, x_{j+\frac{3}{2}}]$, no tempo t^n .

Abrindo as recorrências até $t^0 = 0$, é fácil verificar que, sendo a solução analítica dada por

$$c(x, t^{n+1}) = c_0(x - u t^{n+1}) = c_0(x - (n+1)u\Delta t), \quad (6.50)$$

a informação que compõe a média c_j^{n+1} da solução exata, que é propagada

pelas características, está contida no intervalo

$$\left[x_{j-\frac{1}{2}} - u t^{n+1}, x_{j+\frac{1}{2}} - u t^{n+1} \right] = \left[x_{j-\frac{1}{2}} - (n+1)u\Delta t, x_{j+\frac{1}{2}} - (n+1)u\Delta t \right]. \quad (6.51)$$

Por outro lado, a solução numérica será calculada dependendo dos valores $C_{j-1-n}^0, \dots, C_j^0, \dots, C_{j+1+n}^0$ e, portanto, a informação que será propagada para a construção de C_j^{n+1} está confinada no intervalo

$$\left[x_{j-\frac{1}{2}-(n+1)}, x_{j+\frac{1}{2}+(n+1)} \right] = \left[x_{j-\frac{1}{2}} - (n+1)\Delta x, x_{j+\frac{1}{2}} + (n+1)\Delta x \right]. \quad (6.52)$$

A ideia principal da condição CFL é que o método numérico só terá alguma chance de convergir para a solução exata com o refinamento de Δt e Δx , se a informação original carregada pelas curvas características parte de uma região coberta pela recorrência do método numérico. Em outras palavras, se o intervalo definido em (6.51) está contido no intervalo definido na equação (6.52). Um cálculo algébrico mostra que isso só acontece se

$$\nu := u \frac{\Delta t}{\Delta x} \leq 1, \quad (6.53)$$

onde u é constante e ν é conhecido como número de Courant [31]. Se esta condição não for satisfeita, o método numérico não tem chance alguma de convergir, visto que a solução numérica será construída com informações que não levam à solução exata do problema. Podemos generalizar estes conceitos usando a seguinte definição e enunciando o teorema 6.1.

Definição 6.1 (Domínio de dependência). *O domínio de dependência \mathcal{D} de uma solução (exata ou numérica) de uma lei de conservação hiperbólica em um certo tempo t , é o conjunto de pontos em $t = 0$ que podem influenciar o valor da solução em t .*

Por exemplo, de acordo com os cálculos acima,

$$\mathcal{D}(u(x_j, t^{n+1})) = \{x_j - u t^{n+1}\} \quad (6.54)$$

$$\mathcal{D}(c_j^{n+1}) = \left[x_{j-\frac{1}{2}} - u t^{n+1}, x_{j+\frac{1}{2}} - u t^{n+1} \right] \quad (6.55)$$

$$\mathcal{D}(C_j^{n+1}) = \left[x_{j-\frac{1}{2}-(n+1)}, x_{j+\frac{1}{2}+(n+1)} \right]. \quad (6.56)$$

Teorema 6.1 (Condição CFL). *Uma condição necessária, mas não suficiente, para que a solução aproximada de uma lei de conservação hiperbólica, calculada por um método de volumes finitos, convirja para a sua solução exata, é que o domínio de dependência da solução exata deve estar contido no domínio de dependência da solução aproximada, para todo $\Delta t, \Delta x \rightarrow 0$.*

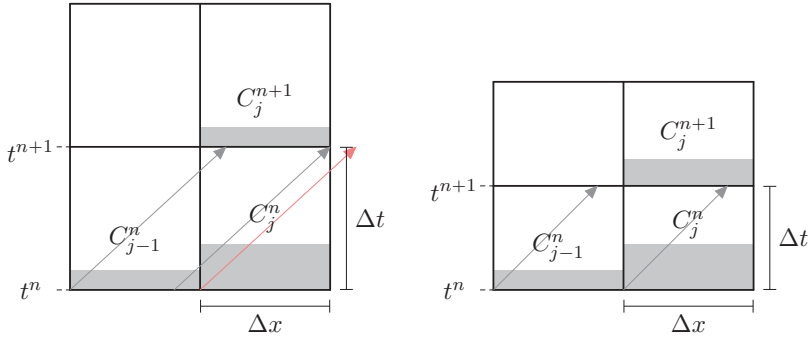


Figura 6.3: Propagação da informação de t^n para t^{n+1} , para $u = 1$, mostrando um caso em que a escolha de Δt e Δx não satisfaz CFL (esquerda) e um caso que a escolha Δt e Δx satisfaz CFL (direita).

Portanto, de acordo com o teorema 6.1, para o método de volumes finitos devemos ter

$$\mathcal{D}(c_j^{n+1}) \subset \mathcal{D}(C_j^{n+1}). \quad (6.57)$$

A figura 6.3 traz dois exemplos de escolhas dos espaçamentos de malha Δt e Δx que podem satisfazer ou não a condição CFL, com o mesma velocidade $u = 1$. Na figura 6.3 (esquerda), a escolha não satizfaz CFL pois $\Delta t > \Delta x$, situação em que o teorema 6.1 garante que o método não irá convergir. É possível notar que, do tempo t^n para t^{n+1} , uma informação pode se propagar por mais de uma célula de distância. Por outro lado, na figura 6.3 (direita), situação em que $\Delta t < \Delta x$ e, portanto há chance (mas não garantia) de que o método seja convergente segundo o teorema 6.1. Neste caso, vemos que a informação nunca se propaga para além dos volumes vizinhos.

A observação feita no parágrafo anterior é de fato outra interpretação da condição CFL: Ela é satisfeita se uma onda $\mathcal{W}_{j+\frac{1}{2}}$ partindo de $x_{j+\frac{1}{2}}$ não percorre uma distância maior que Δx em um tempo Δt .

6.4 Consistência, estabilidade e convergência

Para avaliar a acurácia e convergência dos métodos de volumes finitos para leis de conservação hiperbólicas vamos definir o erro global em um tempo fixo $T = N\Delta t$ por

$$\mathbf{e}^N = \mathbf{C}^N - \mathbf{c}^N, \quad (6.58)$$

onde \mathbf{C}^N é o vetor com as aproximações de volumes finitos e \mathbf{c}^N é o vetor com a solução exata. No contexto de volumes finitos, em uma dimensão,

para cada célula j temos que comparar C_j^N com

$$c_j^N = \frac{1}{\Delta x} \int_{x_{j-\frac{1}{2}}}^{x_{j+\frac{1}{2}}} c(x, t^N) dx. \quad (6.59)$$

Para simplificar a notação, geralmente assume-se que Δt e Δx estão relacionados. Como a condição CFL para este problema resulta que (6.53) deve ser satisfeita para que haja possibilidade de convergência, temos que a razão $\Delta t/\Delta x$ é fixa (neste caso igual a $1/u$). Neste contexto, temos a seguinte definição

Definição 6.2. (*Convergência*) Um método de volumes finitos da forma (6.8) converge para a solução analítica de (6.1), em uma norma $\|\cdot\|$, se

$$\lim_{\substack{\Delta t \rightarrow 0 \\ T = N\Delta t}} \|e^N\| = 0.$$

para todo $0 < T < T_{\max}$, com $T = N\Delta t$.

A convergência dos métodos de volumes finitos para equações hiperbólicas é ditada pelo mesmo teorema introduzido no capítulo 4, o teorema 4.1 da equivalência de Lax [32]. Desta forma, precisamos novamente analisar consistência e estabilidade para verificar se os métodos apresentados são convergentes.

6.4.1 Erro de truncamento local

Um método numérico explícito qualquer pode ser escrito como

$$\mathbf{C}^{n+1} = \mathcal{N}(\mathbf{C}^n), \quad (6.60)$$

onde $\mathcal{N}(\cdot)$ representa o operador numérico que aproxima a solução em um passo de tempo t^{n+1} , dada a solução calculada previamente no passo de tempo t^n . A cada passo de tempo, comete-se um erro local dado pela diferença entre a solução exata em t^{n+1} (\mathbf{c}^{n+1}) e o que o método calcularia no tempo t^{n+1} , considerando que os cálculos anteriores foram feitos exatamente ($\mathcal{N}(\mathbf{c}^n)$). O acúmulo desta diferença em cada passo é o que chamamos de erro de truncamento local, dado por

$$\tau^n = \frac{1}{\Delta t} (\mathcal{N}(\mathbf{c}^n) - \mathbf{c}^{n+1}). \quad (6.61)$$

O erro de truncamento local fornece uma indicação do comportamento do erro global em termos de sua ordem de precisão nos casos em que o método é estável. A definição de consistência é a mesma estabelecida na definição 4.3, isto é, um método é dito consistente com a equação diferencial se o erro de truncamento local for para zero quando $\Delta t \rightarrow 0$. A seguir ilustramos como o erro de truncamento local pode ser estimado para alguns dos métodos vistos anteriormente.

1. O método *upwind*:

Considere o método *upwind* para a equação de advecção com velocidade constante $u > 0$, dada por

$$C_j^{n+1} = C_j^n - \frac{u\Delta t}{\Delta x} \left(C_j^n - C_{j-1}^n \right). \quad (6.62)$$

Aplicando-se este método à solução exata obtemos o seguinte erro de truncamento local

$$\tau^n = \frac{1}{\Delta t} \left[c(x_j, t^n) - \frac{u\Delta t}{\Delta x} \left(c(x_j, t^n) - c(x_{j-1}, t^n) \right) - c(x_j, t^{n+1}) \right]. \quad (6.63)$$

Assumindo suavidade suficiente para c , pode-se expandir os termos $c(x_{j-1}, t^n)$ e $c(x_j, t^{n+1})$ em séries de Taylor em torno de (x_j, t^n) , resultando em

$$c(x_{j-1}, t^n) = c(x_j, t^n) - \Delta x c_x(x_j, t^n) + \frac{\Delta x^2}{2} c_{xx}(x_j, t^n) - \mathcal{O}(\Delta x^3) \quad (6.64)$$

e

$$c(x_j, t^{n+1}) = c(x_j, t^n) + \Delta t c_t(x_j, t^n) + \frac{\Delta t^2}{2} c_{tt}(x_j, t^n) + \mathcal{O}(\Delta t^3). \quad (6.65)$$

Portanto,

$$\begin{aligned} \tau^n &= \frac{1}{\Delta t} \left[c(x_j, t^n) - \frac{u\Delta t}{\Delta x} \left(c(x_j, t^n) - c(x_j, t^n) + \Delta x c_x(x_j, t^n) \right. \right. \\ &\quad \left. \left. - \frac{\Delta x^2}{2} c_{xx}(x_j, t^n) + \mathcal{O}(\Delta x^3) \right) - c(x_j, t^n) - \Delta t c_t(x_j, t^n) \right. \\ &\quad \left. - \frac{\Delta t^2}{2} c_{tt}(x_j, t^n) - \mathcal{O}(\Delta t^3) \right] \\ &= - \left(c_t(x_j, t^n) + u c_x(x_j, t^n) \right) + \frac{u\Delta x}{2} c_{xx}(x_j, t^n) \\ &\quad - \mathcal{O}(\Delta x^2) - \frac{\Delta t}{2} c_{tt}(x_j, t^n) - \mathcal{O}(\Delta t^2). \end{aligned} \quad (6.66)$$

Como c é solução da equação de advecção, $c_t(x_j, t^n) + u c_x(x_j, t^n) = 0$, alguns termos desaparecem devido à equação

$$\tau^n = \frac{u\Delta x}{2} c_{xx}(x_j, t^n) - \mathcal{O}(\Delta x^2) - \frac{\Delta t}{2} c_{tt}(x_j, t^n) - \mathcal{O}(\Delta t^2). \quad (6.67)$$

Note que $c_{tt} = (c_t)_t = (-uc_x)_t = -u(c_t)_x = u^2(c_x)_x = u^2 c_{xx}$, devido à suavidade de c . Deste modo, o erro de truncamento local do método *upwind* é dado por

$$\tau^n = \frac{u\Delta x}{2} (1 - \nu) c_{xx}(x_j, t^n) + \mathcal{O}(\Delta t^2), \quad (6.68)$$

onde $\nu = u\Delta t/\Delta x$ é o número de Courant, que estabelece a relação entre Δt e Δx que deve ser respeitada em uma situação de convergência. Portanto, o erro de truncamento é governado por Δx (ou Δt), e o método então é consistente de primeira ordem.

2. O método de Lax-Friedrichs:

O erro de truncamento local do método de Lax-Friedrichs é dado por

$$\begin{aligned}\tau^n &= \frac{1}{2} \left(\frac{\Delta x^2}{\Delta t} - u^2 \Delta t \right) c_{xx}(x_j, t^n) + \mathcal{O}(\Delta t^2) \\ &= \frac{u\Delta x}{2} \left(\frac{1}{\nu} - \nu \right) c_{xx}(x_j, t^n) + \mathcal{O}(\Delta t^2).\end{aligned}\quad (6.69)$$

Ou seja, o erro de truncamento é dominado por um termo da ordem de Δx (ou Δt), e o método é de primeira ordem.

3. O método de Lax-Wendroff:

O erro de truncamento local do método de Lax-Wendroff é dado por

$$\tau^n = -\frac{u\Delta x^2}{6} (1 - \nu^2) c_{xxx}(x_j, t^n) + \mathcal{O}(\Delta t^3).\quad (6.70)$$

Portanto, o erro de truncamento é dominado por um termo da ordem de Δx^2 , e o método é de segunda ordem.

6.4.2 Estabilidade linear

Antes de analisar a estabilidade dos métodos vistos, é necessário revisar algumas propriedades básicas sobre estabilidade. Suponha que no passo de tempo t^n tem-se uma aproximação \mathbf{C}^n com erro \mathbf{e}^n . Recordando a equação (6.58), podemos escrever

$$\mathbf{C}^n = \mathbf{c}^n + \mathbf{e}^n.\quad (6.71)$$

Ao aplicar o método numérico para obter \mathbf{C}^{n+1} temos

$$\mathbf{C}^{n+1} = \mathcal{N}(\mathbf{C}^n) = \mathcal{N}(\mathbf{c}^n + \mathbf{e}^n),\quad (6.72)$$

de modo que

$$\begin{aligned}\mathbf{e}^{n+1} &= \mathbf{C}^{n+1} - \mathbf{c}^{n+1} \\ &= \mathcal{N}(\mathbf{c}^n + \mathbf{e}^n) - \mathbf{c}^{n+1} \\ &= \mathcal{N}(\mathbf{c}^n + \mathbf{e}^n) - \mathcal{N}(\mathbf{c}^n) + \mathcal{N}(\mathbf{c}^n) - \mathbf{c}^{n+1} \\ &= \mathcal{N}(\mathbf{c}^n + \mathbf{e}^n) - \mathcal{N}(\mathbf{c}^n) + \Delta t \tau^n.\end{aligned}\quad (6.73)$$

Com isso, temos que o erro global será o acúmulo de $\mathcal{N}(\mathbf{c}^n + \mathbf{e}^n) - \mathcal{N}(\mathbf{c}^n)$, que mede o efeito do método numérico sobre o erro global no passo anterior, e o acúmulo de $\Delta t \tau^n$, que contabiliza o erro introduzido no passo de tempo

atual. Vimos anteriormente que o estudo do erro de truncamento local permite limitar o acúmulo do termo $\Delta t \tau^n$. Já a teoria de estabilidade, será desenvolvida para limitar o termo $\mathcal{N}(\mathbf{c}^n + \mathbf{e}^n) - \mathcal{N}(\mathbf{c}^n)$. Juntando as duas técnicas será possível limitar o erro global, o que seria parte da prova do teorema 4.1 de Lax para equações hiperbólicas.

Se o operador $\mathcal{N}(\cdot)$ é linear, então

$$\mathcal{N}(\mathbf{c}^n + \mathbf{e}^n) - \mathcal{N}(\mathbf{c}^n) = \mathcal{N}(\mathbf{c}^n) + \mathcal{N}(\mathbf{e}^n) - \mathcal{N}(\mathbf{c}^n) = \mathcal{N}(\mathbf{e}^n) \quad (6.74)$$

e assim, abrindo-se a recorrência da equação (6.73), e aplicando uma norma nos dois lados, chega-se a

$$\|\mathbf{e}^{n+1}\| \leq \|\mathcal{N}^n(\mathbf{e}^0)\| + \Delta t \sum_{\ell} \|\tau^\ell\|. \quad (6.75)$$

Note que n aparece como índice no lado esquerdo e potência no lado direito de (6.75), representando a quantidade de aplicações sucessivas do operador \mathcal{N} . Sendo o método consistente, tem-se que o erro de truncamento local será limitado, então resta apenas garantir que $\mathcal{N}^n(\mathbf{e}^0)$ também seja limitado para que haja convergência. Portanto, deriva-se uma condição sobre a norma do operador linear \mathcal{N} para cada tempo T :

$$\|\mathcal{N}^n\| \leq L, \quad (6.76)$$

para todo $n \leq N = T/\Delta t$, onde L é uma constante que não depende de n . Em outras palavras, para que o erro global seja limitado, precisamos que a n -ésima potência do operador linear \mathcal{N} seja uniformemente limitada até o tempo de interesse T . Para métodos lineares, esta forma de estabilidade é conhecida como estabilidade Lax-Richtmyer [31, 32].

6.4.3 O critério de von Neumann

Para problemas de Cauchy lineares com coeficientes constantes, a estabilidade é particularmente simples de ser analisada na norma 2, pois a análise de Fourier pode ser utilizada e simplificar o problema [35]. Esta é a base do critério de von Neumann para estabilidade, onde supõe-se que C_j^n tenha norma finita e, então, pode ser expresso como uma série de Fourier:

$$C_j^n = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \int_{-\infty}^{\infty} \hat{C}^n(\xi) e^{i\xi j \Delta x} d\xi, \quad (6.77)$$

onde $i = \sqrt{-1}$. Aplicando-se esquemas lineares de volumes finitos para C_j^n , e manipulando os exponenciais, é possível encontrar uma expressão da forma

$$C_j^{n+1} = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \int_{-\infty}^{\infty} \hat{C}^n(\xi) g(\xi, \Delta x, \Delta t) e^{i\xi j \Delta x} d\xi, \quad (6.78)$$

onde $g(\xi, \Delta x, \Delta t) \in \mathbb{C}$ é chamado de fator de amplificação para o número de onda ξ , uma vez que pode-se definir a recorrência

$$\hat{C}^{n+1}(\xi) = g(\xi, \Delta x, \Delta t) \hat{C}^n(\xi). \quad (6.79)$$

Da relação de Parseval temos que

$$\|\mathbf{C}^n\|_2 = \|\hat{C}^n\|_2, \quad (6.80)$$

onde

$$\|\mathbf{C}^n\|_2 = \left(\Delta x \sum_{j=-\infty}^{\infty} |C_j^n|^2 \right)^{\frac{1}{2}} \quad \text{e} \quad \|\hat{C}^n\|_2 = \left(\int_{-\infty}^{\infty} |\hat{C}^n(\xi)|^2 d\xi \right)^{\frac{1}{2}}. \quad (6.81)$$

Para mostrar que a norma 2 de \mathbf{C}^n é limitada, basta mostrar que a norma 2 de \hat{C}^n permanece limitada. Note que a função \hat{C}^n satisfaz a equação (6.79) quando ξ varia. Portanto, é suficiente considerar um número de onda arbitrário ξ e

$$C_j^n = e^{i\xi j \Delta x}, \quad (6.82)$$

de modo que podemos calcular $g(\xi, \Delta x, \Delta t)$ usando a recorrência

$$C_j^{n+1}(\xi) = g(\xi, \Delta x, \Delta t) C_j^n(\xi). \quad (6.83)$$

ao invés da equação (6.79). Se garantirmos que

$$|g(\xi, \Delta x, \Delta t)| \leq 1, \quad (6.84)$$

para todo ξ , então teremos a estabilidade do método numérico garantida, pois não haverá amplificação desastrosa dos modos de Fourier.

A aplicação do critério de von Neumann é bastante simples, ficando mais clara através de alguns exemplos:

1. O esquema central:

Considerando o esquema central

$$C_j^{n+1} = C_j^n - \frac{u\Delta t}{2\Delta x} (C_{j+1}^n - C_{j-1}^n), \quad (6.85)$$

e C_j^n dada por (6.82), de tal forma que

$$C_j^{n+1} = g(\xi, \Delta x, \Delta t) e^{i\xi j \Delta x}, \quad (6.86)$$

temos:

$$g(\xi, \Delta x, \Delta t) e^{i\xi j \Delta x} = e^{i\xi j \Delta x} - \frac{u\Delta t}{2\Delta x} (e^{i\xi(j+1)\Delta x} - e^{i\xi(j-1)\Delta x}), \quad (6.87)$$

isto é,

$$\begin{aligned} g(\xi, \Delta x, \Delta t) &= 1 - \frac{u\Delta t}{2\Delta x} (e^{i\xi\Delta x} - e^{-i\xi\Delta x}) \\ &= 1 - \frac{u\Delta t}{2\Delta x} (2i \sin(\xi\Delta x)) \\ &= 1 - \nu (i \sin(\xi\Delta x)), \end{aligned} \quad (6.88)$$

onde $\nu = u\Delta t/\Delta x$ é o número de Courant. Com isso temos

$$|g(\xi, \Delta x, \Delta t)| = \left(1 + (\nu \sin(\xi\Delta x))^2\right)^{\frac{1}{2}}. \quad (6.89)$$

Da expressão acima podemos concluir que $|g(\xi, \Delta x, \Delta t)| \geq 1$ sempre, e portanto, o esquema central é instável, como havíamos comentado na seção 6.1.

2. O método *upwind*:

Considere o método *upwind* para a equação de advecção com velocidade constante $u > 0$:

$$C_j^{n+1} = (1 - \nu)C_j^n + \nu C_{j-1}^n, \quad (6.90)$$

onde $\nu = u\Delta t/\Delta x$ é o número de Courant. Escrevendo C_j^n como em (6.82) temos

$$\begin{aligned} g(\xi, \Delta x, \Delta t)e^{i\xi j\Delta x} &= (1 - \nu)e^{i\xi j\Delta x} + \nu e^{i\xi(j-1)\Delta x} \\ &= \left((1 - \nu) + \nu e^{-i\xi\Delta x}\right)e^{i\xi j\Delta x}, \end{aligned} \quad (6.91)$$

portanto,

$$g(\xi, \Delta x, \Delta t) = (1 - \nu) + \nu e^{-i\xi\Delta x}. \quad (6.92)$$

Note que $g(\xi, \Delta x, \Delta t)$ encontra-se em um círculo de raio ν no plano complexo, centrado no eixo real em $1 - \nu$. Este círculo está inteiramente dentro do círculo unitário, ou seja, $|g| \leq 1 \forall \xi$ se e somente se $0 \leq \nu \leq 1$. Como essa desigualdade sempre é satisfeita devido à condição CFL, podemos concluir que o método *upwind* é estável sempre que a condição CFL seja satisfeita.

3. O método de Lax-Friedrichs:

Escrevendo C_j^n de acordo com (6.82) e (6.83) e considerando o método de Lax-Friedrichs (6.12), é possível mostrar que $|g| \leq 1$ sempre que $|\nu| \leq 1$, ou seja, o método é condicionalmente estável.

4. O método de Lax-Wendroff:

Escrevendo C_j^n de acordo com (6.82) e (6.83) e considerando o método de Lax-Wendroff (6.14), é também possível mostrar que o método é condicionalmente estável quando $|\nu| \leq 1$.

6.5 Problemas multidimensionais

Em duas dimensões a lei de conservação (6.1) assume a forma

$$c_t + f_x(c) + g_y(c) = 0, \quad (6.93)$$

onde a concentração do fluido agora depende de x , y e t , isto é $c = c(x, y, t)$, e $f(c)$ e $g(c)$ são as funções de fluxo nas direções x e y , respectivamente. Em três dimensões mais um termo é adicionado, e tem-se

$$c_t + f_x(c) + g_y(c) + h_z(c) = 0, \quad (6.94)$$

com $c = c(x, y, z, t)$ e $h(c)$ sendo a função de fluxo na direção z . Com isso, temos que mesmo em várias dimensões as leis de conservação hiperbólicas escalares são escritas na forma (5.7). Considerando $\phi = 1$ e $q = 0$, temos:

$$\frac{\partial c}{\partial t} + \nabla \cdot (\mathbf{f}(c)) = 0, \quad (6.95)$$

com $\mathbf{f}(c) = [f(c), g(c), h(c)]$, no caso tridimensional.

A equação de advecção em duas dimensões é dada por

$$c_t + (u(x, y, t)c)_x + (v(x, y, t)c)_y = 0, \quad (6.96)$$

ou ainda

$$\frac{\partial c}{\partial t} + \nabla \cdot (\mathbf{u}c) = 0, \quad (6.97)$$

onde a velocidade do fluido é da forma $\mathbf{u} = [u(x, y, t), v(x, y, t)]$, enquanto que, a função de fluxo $\mathbf{f}(c) = \mathbf{u}c = [f, g]$ é tal que $f = u(x, y, t)c(x, y, t)$ e $g = v(x, y, t)c(x, y, t)$. Quando a velocidade é constante no espaço e no tempo, tem-se que o fluido está simplesmente sendo transladado a uma velocidade constante e direção fixa, e a equação (6.96) se reduz a:

$$c_t + uc_x + vc_y = 0, \quad (6.98)$$

cuja solução é dada por

$$c(x, y, t) = c_0(x - ut, y - vt), \quad (6.99)$$

sendo $c_0(x, y) = c(x, y, 0)$ a condição inicial do problema hiperbólico.

6.5.1 Métodos de volumes finitos para leis de conservação hiperbólicas multidimensionais

Como em uma dimensão, podemos usar a forma integral das equações para determinar como a solução varia com o tempo em cada volume de controle, e desenvolver métodos de volumes finitos com base em aproximações para os fluxos em cada borda de célula. Por exemplo, em duas dimensões podemos considerar malhas cartesianas como ilustrado na figura 6.4, e definir o valor médio da concentração na célula (i, j) no tempo t^n por

$$C_{i,j}^n = C(x_i, y_j, t^n) \approx \frac{1}{\Delta x \Delta y} \int_{y_{j-\frac{1}{2}}}^{y_{j+\frac{1}{2}}} \int_{x_{i-\frac{1}{2}}}^{x_{i+\frac{1}{2}}} c(x, y, t^n) dx dy. \quad (6.100)$$

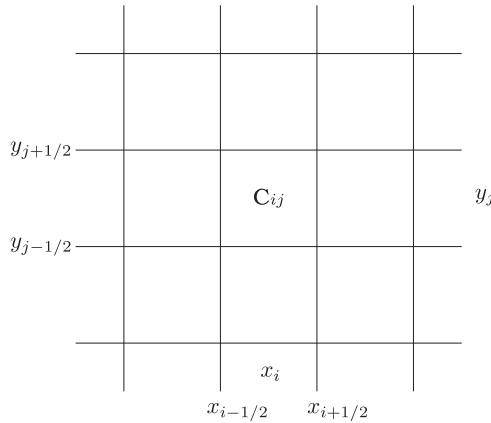


Figura 6.4: Representação de uma discretização de volumes finitos para leis de conservação hiperbólicas em duas dimensões.

Se considerarmos um domínio Ω bidimensional com a discretização cartesiana, então cada volume de controle é da forma

$$V_{i,j} = [x_{i-\frac{1}{2}}, x_{i+\frac{1}{2}}] \times [y_{j-\frac{1}{2}}, y_{j+\frac{1}{2}}]. \quad (6.101)$$

Integrando a lei de conservação (6.93) sobre o domínio $[x_{i-\frac{1}{2}}, x_{i+\frac{1}{2}}] \times [y_{j-\frac{1}{2}}, y_{j+\frac{1}{2}}] \times [t^n, t^{n+1}]$, obtemos

$$\int_{t^n}^{t^{n+1}} \int_{y_{j-\frac{1}{2}}}^{y_{j+\frac{1}{2}}} \int_{x_{i-\frac{1}{2}}}^{x_{i+\frac{1}{2}}} \left(c_t + f_x(c) + g_y(c) \right) dx dy dt = 0. \quad (6.102)$$

Separando as integrais e utilizando o teorema fundamental do cálculo, temos

$$\begin{aligned} & \int_{y_{j-\frac{1}{2}}}^{y_{j+\frac{1}{2}}} \int_{x_{i-\frac{1}{2}}}^{x_{i+\frac{1}{2}}} c(x, y, t^{n+1}) dx dy - \int_{y_{j-\frac{1}{2}}}^{y_{j+\frac{1}{2}}} \int_{x_{i-\frac{1}{2}}}^{x_{i+\frac{1}{2}}} c(x, y, t^n) dx dy \\ &= - \int_{t^n}^{t^{n+1}} \int_{y_{j-\frac{1}{2}}}^{y_{j+\frac{1}{2}}} f(c(x_{i+\frac{1}{2}}, y, t)) dy dt \\ &+ \int_{t^n}^{t^{n+1}} \int_{y_{j-\frac{1}{2}}}^{y_{j+\frac{1}{2}}} f(c(x_{i-\frac{1}{2}}, y, t)) dy dt \\ &- \int_{t^n}^{t^{n+1}} \int_{x_{i-\frac{1}{2}}}^{x_{i+\frac{1}{2}}} g(c(x, y_{j+\frac{1}{2}}, t)) dx dt \\ &+ \int_{t^n}^{t^{n+1}} \int_{x_{i-\frac{1}{2}}}^{x_{i+\frac{1}{2}}} g(c(x, y_{j-\frac{1}{2}}, t)) dx dt. \end{aligned} \quad (6.103)$$

Definindo

$$\bar{F}_{i+\frac{1}{2},j}^n = \frac{1}{\Delta t \Delta y} \int_{t^n}^{t^{n+1}} \int_{y_{j-\frac{1}{2}}}^{y_{j+\frac{1}{2}}} f(c(x_{i+\frac{1}{2}}, y, t)) dy dt \quad (6.104)$$

e

$$\bar{G}_{i,j+\frac{1}{2}}^n = \frac{1}{\Delta t \Delta x} \int_{t^n}^{t^{n+1}} \int_{x_{i-\frac{1}{2}}}^{x_{i+\frac{1}{2}}} g(c(x, y_{j+\frac{1}{2}}, t)) dx dt, \quad (6.105)$$

e dividindo ambos os lados da equação (6.103) por $\Delta x \Delta y$, obtemos:

$$C_{i,j}^{n+1} = C_{i,j}^n - \frac{\Delta t}{\Delta x} \left(\bar{F}_{i+\frac{1}{2},j}^n - \bar{F}_{i-\frac{1}{2},j}^n \right) - \frac{\Delta t}{\Delta y} \left(\bar{G}_{i,j+\frac{1}{2}}^n - \bar{G}_{i,j-\frac{1}{2}}^n \right). \quad (6.106)$$

Com isso, chegamos ao princípio de conservação em duas dimensões, sendo que os fluxos $\bar{F}_{i+\frac{1}{2},j}^n$ e $\bar{G}_{i,j+\frac{1}{2}}^n$ podem ser aproximados por fluxos discretos $F_{i+\frac{1}{2},j}^n$ e $G_{i,j+\frac{1}{2}}^n$ em cada direção.

6.6 Simulação numérica de problemas de transporte passivo

Como a equação (5.2) é uma lei de conservação hiperbólica linear, a simulação numérica de problemas de transporte passivo em meios porosos pode ser feita utilizando os métodos de volumes finitos exibidos anteriormente. Nesta seção, apresentamos alguns experimentos numéricos utilizando o método *upwind* para obter a aproximação da concentração modelada pela seguinte equação:

$$\begin{cases} \frac{\partial c}{\partial t} + \nabla \cdot (\mathbf{u}c) = 0 & \text{em } \Omega \\ c(\mathbf{x}, t = 0) = 0 & \text{em } \Omega \\ c(\mathbf{x}, t) = 1 & \text{em } \partial\Omega^-, \end{cases} \quad (6.107)$$

onde a porosidade foi considerada uniforme $\phi = 1$.

Campo homogêneo

Nosso primeiro exemplo considera o campo de velocidades \mathbf{u} ilustrado na figura 4.10, o qual é dado pela solução do problema (3.35) através do método de volumes finitos apresentado no capítulo 4. Lembramos que, neste caso, foi considerado o domínio $\Omega = [0, 1] \times [0, 1]$ discretizado por uma malha cartesiana regular com 20×20 células e uma configuração do tipo *a quarter of the five spot* com $\tilde{q}/\rho = 1$ e $K/\mu = 1$. A aproximação da solução do problema (6.107) será dada na mesma malha espacial e com espaçamento temporal respeitando a condição CFL:

$$\Delta t \leq \frac{\min\{\Delta x, \Delta y\}}{\max\{|u|, |v|\}}. \quad (6.108)$$

Na figura 6.5, temos a aproximação da solução do problema (6.107) pelo método *upwind* em diferentes passos de tempo (adimensional). Note que a concentração está se deslocando de maneira linear e simétrica do poço de injeção para o poço de produção. A solução apresenta um comportamento difusivo, que é uma característica intrínseca ao método *upwind* (o leitor interessado pode consultar informações mais detalhadas sobre difusividade dos métodos numéricos em [14] e [31]).

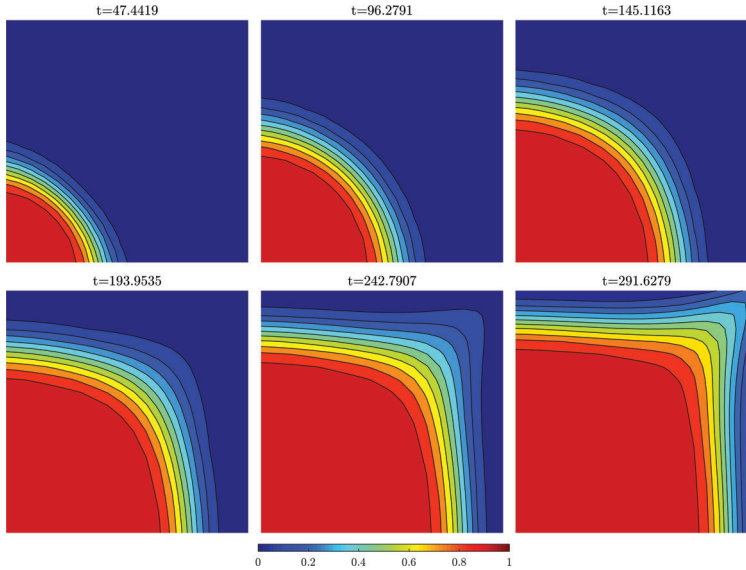


Figura 6.5: Aproximação da concentração considerando o campo de velocidades dado pelo problema do tipo *a quarter of the five spot* com um campo de permeabilidades homogêneo.

Campo heterogêneo

Agora, vamos tomar o campo de velocidades \mathbf{u} ilustrado na figura 4.11b, que foi obtido pela solução do problema (3.35) através do método de volumes finitos apresentado no capítulo 4. Este campo de velocidades é dado no domínio $\Omega = [0, 1] \times [0, 1]$ com 64×64 células, considerando uma configuração do tipo *a quarter of the five spot* com $\tilde{q}/\rho = 1$, $\mu = 1$ e o campo de permeabilidades ilustrado na figura 3.2. A solução do problema (6.107) será dada na mesma malha espacial e com espaçamento temporal respeitando a condição CFL (6.108). Na figura 6.6 é apresentada a aproximação do campo de concentrações pelo o método *upwind* para diferentes passos de tempo. Observe que a concentração está se movimentando do poço de injeção com direção ao poço de produção, passando por caminhos preferenciais determinados pelas regiões de alta permeabilidade.

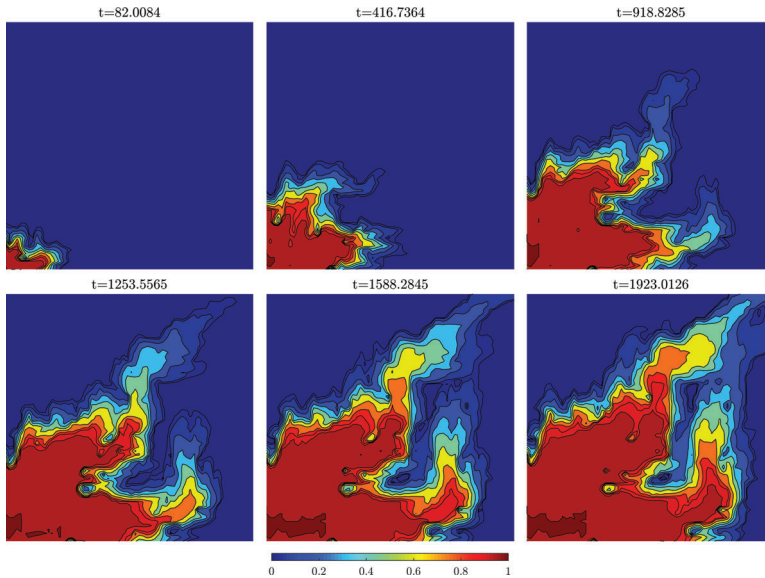


Figura 6.6: Aproximação da concentração considerando o campo de velocidades dado pelo problema do tipo *a quarter of the five spot* com um campo de permeabilidades heterogêneo.

Campo heterogêneo canalizado

Por fim, vamos escolher o campo de velocidades \mathbf{u} ilustrado na figura 4.12b, que foi obtido pela solução do problema (3.35) pelo método do capítulo 4. Nesse exemplo, o domínio é $\Omega = [0, 670] \times [0, 365]$ com 220×60 células, sendo considerada uma configuração do tipo *a quarter of the five spot* com $\tilde{q}/\rho = 1$, $\mu = 1$ e o campo de permeabilidades da camada 36 do projeto SPE10, ilustrado na figura 3.4. Como nos casos anteriores, o espaçamento temporal respeita a condição CFL (6.108). Na figura 6.7, temos os campos de concentrações resultantes da aproximação do problema (6.107) pelo método *upwind* em diferentes passos de tempo. Percebemos que a concentração segue do poço de injeção, em direção ao poço de produção, passando preferencialmente pelo canal de alta permeabilidade.

6.6.1 Modelagem de poços de injeção e produção

Comentamos anteriormente que os poços de injeção e produção normalmente são convertidos em condições de contorno. Observe que as simulações numéricas apresentadas nessa seção consideram o termo fonte $q = \tilde{q}$ para os problemas elípticos (3.35). Esse termo fonte deve ser adaptado através de uma modelagem de poços [18] para a simulação do problema de transporte passivo, dado por uma lei de conservação hiperbólica.

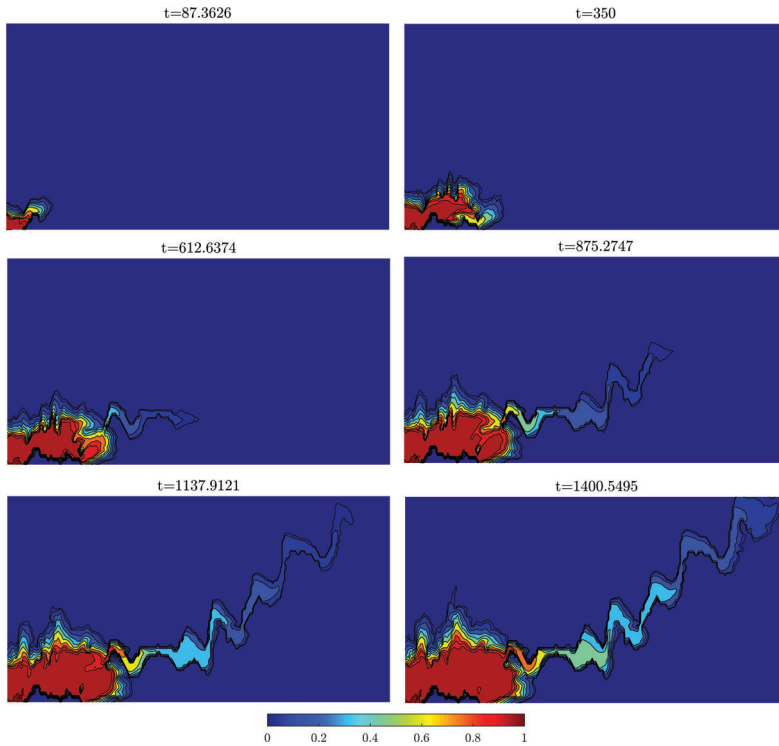


Figura 6.7: Aproximação da concentração considerando o campo de velocidades dado pelo problema do tipo *a quarter of the five spot* com o campo de permeabilidades heterogêneo e canalizado da camada 36 do projeto SPE10.

A modelagem de poços para os problemas do tipo *a quarter of the five spot* considerados nos exemplos acima é simples e intuitiva. Inicialmente, constata-se que a borda de injeção $\partial\Omega^-$ é dada pelas faces sul e oeste da célula inferior à esquerda, enquanto que a borda de produção é dada pelas faces norte e leste da célula superior à direita. Em seguida, identifica-se as velocidades \bar{u} e \bar{v} , geradas na célula de injeção e as velocidades \tilde{u} e \tilde{v} , geradas na célula de produção, como representado na figura 6.8. Essas velocidades são obtidas através da solução do problema elíptico e refletem a ação do termo fonte. Para converter o termo fonte em condições de contorno compatíveis, basta replicar as velocidades \bar{u} e \bar{v} nas faces de injeção e as velocidades \tilde{u} e \tilde{v} nas faces de produção. Com isso, criamos condições de contorno de entrada e saída relacionadas aos poços de injeção e produção, respectivamente. Note que em todas as outras faces da borda do domínio tem-se velocidade nula devido à condição de contorno de Neumann nula.

Em termos da lei de conservação hiperbólica, geralmente células *fantasmas* são utilizadas para impor as condições de contorno [31]. Para o exemplo

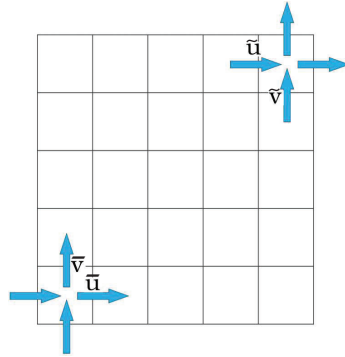


Figura 6.8: Representação da modelagem de poços para o problema do tipo *a quarter of the five spot*.

considerado, temos que uma condição de entrada na célula $(1, 1)$ significa que a concentração deve ser igual a 1 nas células fantasmas $(0, 1)$ e $(1, 0)$. Por outro lado, uma condição de saída na célula (N, M) significa que a concentração nas células fantasmas $(N + 1, M)$ e $(N, M + 1)$ deve ser igual ao valor da concentração na própria célula (N, M) , onde considerou-se uma discretização com $N \times M$ células. Veja a figura 6.9.

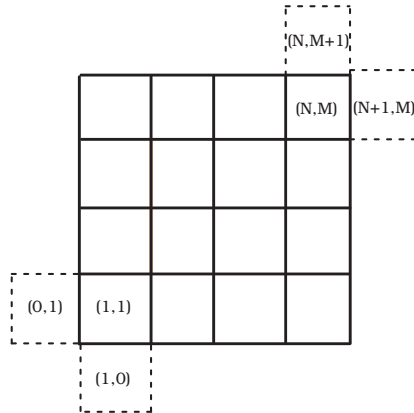


Figura 6.9: Representação da modelagem das condições de contorno através de células *fantasmas* para o problema do tipo *a quarter of the five spot*.

6.6.2 Adimensionalização

Para adimensionalizar o problema (6.107) vamos utilizar uma velocidade \mathbf{u}^* proveniente do sistema monofásico adimensional, como apresentado na seção

3.2. Considere as quantidades adimensionais

$$\mathbf{x}^* = \frac{\mathbf{x}}{L} \quad \text{e} \quad \mathbf{u}^* = \frac{\mathbf{u}}{u_{\text{ref}}},$$

onde L é um comprimento característico e a variável u_{ref} satisfaz

$$t^* = \frac{u_{\text{ref}}}{L} t. \quad (6.109)$$

Com a variável temporal na forma adimensional e considerando o operador também adimensional $\nabla^* = L\nabla$, encontramos a forma adimensional do problema (6.107):

$$\begin{cases} \frac{\partial c}{\partial t^*} + \nabla^* \cdot (\mathbf{u}^* c) = 0 & \text{em } \Omega \\ c(\mathbf{x}^*, t^* = 0) = 0 & \text{em } \Omega \\ c(\mathbf{x}^*, t^*) = 1 & \text{em } \partial\Omega^-, \end{cases} \quad (6.110)$$

onde cada parâmetro com o sobrescrito $*$ representa uma quantidade adimensional.

6.7 Exercícios

1. Mostre que o erro de truncamento local do método de Lax-Friedrichs é dado por (6.69).
2. Mostre que o erro de truncamento local do método de Lax-Wendroff é dado por (6.70).
3. Observe os termos dominantes dos erros de truncamento dos esquemas *upwind*, Lax-Friedrichs e Lax-Wendroff. O que acontece se o número de Courant for $\eta = 1$? Verifique pelo menos até o segundo termo dominante do erro de truncamento antes de dar sua resposta.
4. O que significa $\nu = 1$ em termos da condição CFL e a propagação de informações através das curvas características?
5. Utilize o critério de von Neumann para demonstrar que o método de Lax-Friedrichs é estável sempre que $|\nu| \leq 1$.
6. Utilize o critério de von Neumann para demonstrar que o método de Lax-Wendroff é estável sempre que $|\nu| \leq 1$.

6.8 Projetos computacionais

1. Considere um reservatório unidimensional dado por $\Omega = [0, 25]$, cuja velocidade de transporte de fluido neste reservatório é dada por $u(t) = 1$ constante. Considere a concentração de um contaminante passivo neste

fluido, dada por $c(x, t)$, de forma que o transporte é modelado pela seguinte equação:

$$\begin{aligned} \frac{\partial c}{\partial t} + u \frac{\partial c}{\partial x} &= 0 & \text{em } \Omega \\ c(x, t = 0) &= e^{-20(x-2)^2} + e^{-(x-5)^2} & \text{em } \Omega \end{aligned}$$

- (a) Encontre a solução exata do problema;
 - (b) Implemente os métodos de Lax-Friedrichs, Upwind (unilateral) e Lax-Wendroff, e realize testes de convergência para verificar se os métodos implementados possuem a ordem de convergência esperada. Escolha malhas com espaçamentos Δx e Δt que satisfaçam a condição CFL;
 - (c) Verifique através de simulações o que acontece se a condição CFL (que coincide com o limite de estabilidade destes métodos) não for satisfeita;
 - (d) Compare as soluções no tempo $t = 17$ usando $\Delta x = 0.05$ e número de Courant $\nu = 0.8$. Repita a comparação para uma malha mais fina e discuta os resultados. O que acontece com as soluções se reduzirmos apenas o passo de tempo (reduzindo o número de Courant), mas deixando Δx intacto?
 - (e) Inclua os métodos de diferenças finitas *Leapfrog* (de dois passos) e *Beam-Warming* (unilateral) nas suas análises.
2. Considere o problema resolvido no trabalho computacional da seção 4.8, item 2, de um reservatório unidimensional com permeabilidade absoluta heterogênea K extraída da camada 33 do projeto SPE10. Considere ainda as mesmas dimensões do trabalho computacional da seção 4.8 e que o reservatório possua porosidade $\phi = 1$ uniforme. Pretendemos estudar o transporte passivo de um contaminante $c(x, t)$, sujeito à velocidade $u(x)$ obtida como solução do trabalho da seção 4.8. O contaminante é injetado na fronteira à esquerda do domínio. Tal situação é modelada pela lei de conservação hiperbólica:

$$\begin{aligned} \frac{\partial c}{\partial t} + \frac{\partial}{\partial x} (u(x)c) &= 0 & \text{em } \Omega \\ c(x, t = 0) &= 0 & \text{em } \Omega \\ c(x = 0, t) &= 1 & \text{em } x = 0 \end{aligned}$$

- (a) Implemente os métodos Upwind, Lax-Friedrichs e Lax-Wendroff para este problema com coeficientes variáveis;
- (b) Conduza testes de refinamento temporal e verifique como cada método se comporta;

- (c) Qual dos métodos você recomendaria para este problema? Justifique.
3. Considere agora o problema do item 4 do trabalho computacional da seção 4.8, ou seja, um reservatório bidimensional $\Omega = [0, L_x] \times [0, L_y]$ com permeabilidade absoluta K extraída da camada 33 do projeto SPE10, porosidade uniforme $\phi = 1$, e as dimensões e propriedades dadas na seção 4.8. O objetivo é estudar a propagação de um contaminante sujeito a um campo de velocidades $\mathbf{u}(\mathbf{x})$ do escoamento no meio poroso, obtido na resolução do item 4 do trabalho da seção 4.8. O transporte do contaminante é modelado de acordo com o seguinte sistema hiperbólico:

$$\begin{aligned} \frac{\partial c}{\partial t} + \nabla \cdot (\mathbf{u}(\mathbf{x})c) &= 0 \quad \text{em } \Omega \\ c(\mathbf{x}, t = 0) &= 0 \quad \text{em } \Omega \end{aligned}$$

e mais condições de contorno de injeção de contaminante, de acordo com a escolha das condições de contorno para o problema elíptico do tipo *slab* (injeção de contaminante em toda fronteira esquerda do reservatório) ou *five-spot* (injeção de contaminante na célula correspondente ao poço de injeção). Para ambos casos (*slab* e *five-spot*), faça:

- Implemente os métodos upwind, Lax-Friedrichs e Lax-Wendroff para este problema;
- Faça um estudo de convergência para um problema simplificado (geometria quadrada por exemplo) com velocidade constante (por exemplo $\mathbf{u} = (1, 1)$) para verificar que os métodos estão bem implementados;
- Faça comparações entre estes métodos, incluindo uma análise de tempo de computação;
- Qual seria a sua recomendação de escolha de método e passo temporal para resolver este problema da melhor forma possível?

Capítulo 7

Considerações finais

Este livro traz uma pequena introdução ao mundo da modelagem matemática e computacional em problemas de escoamentos em meios porosos com aplicações na área de extração de petróleo. Apresentamos ao longo do texto também uma pitada de análise numérica básica, sem entrar muito no formalismo matemático, mas trazendo o mínimo necessário para compreensão e análise dos métodos apresentados, tornando-se uma introdução para estudos futuros nesta área. Nossa ideia aqui não foi traduzir o conteúdo de livros clássicos, como os de Chen [11, 12] ou LeVeque [31, 32] por exemplo, mas sim introduzir de forma compacta, para um público proficiente na Língua Portuguesa, os conceitos fundamentais da área, com abordagem diferenciada nas análises dos métodos. O leitor mais atento notará tais diferenças principalmente na abordagem de problemas hiperbólicos lineares com coeficientes variáveis, na análise da condição CFL e estabilidade linear, na adimensionalização dos problemas e na modelagem dos poços de injeção e produção.

O leitor que chegou até o final deve, portanto, estar familiarizado com as técnicas básicas de volumes finitos para resolução de problemas elípticos e hiperbólicos em uma ou mais dimensões, que modelam escoamentos monofásicos em meios porosos, incluindo o transporte passivo de contaminantes. Para o leitor mais interessado em se aprofundar nestes estudos, saiba que o que foi apresentado aqui é apenas a pequena ponta de um enorme *iceberg*. O primeiro próximo passo seria um estudo mais aprofundado de leis de conservação hiperbólicas, principalmente as não lineares, com suas soluções descontínuas, e a base matemática para entender a construção de soluções analíticas como da equação de Buckley-Leverett, por exemplo. Em seguida, o leitor deverá se aprofundar nos métodos numéricos para leis de conservação hiperbólicas não lineares, especialmente métodos de Godunov e suas derivações, e métodos centrais, para poder começar a estudar métodos de mais alta ordem, limitadores de fluxo, e os métodos que possuam a propriedade TVD¹. Com tais ferramentas, o estudante poderá finalmente começar a resolver problemas bifásicos incompressíveis que modelam o escoamento de água

¹ *Total Variation Diminishing*, ou diminuição da variação total

e óleo em subsuperfície, tipo de escoamento mais comum e simplificado que ocorre na extração secundária de petróleo. O acoplamento de equações de naturezas diferentes também será um desafio neste ponto, como por exemplo o acoplamento entre equações elípticas e hiperbólicas para a resolução de escoamentos bifásicos incompressíveis.

A partir desse ponto, o céu é o limite, pois o modelo pode ser complicado de diversas maneiras, com a introdução de compressibilidade e a possibilidade de resolução de escoamento de gases em subsuperfície, levando a, por exemplo, o modelo Black-Oil, que considera três fases e três componentes diferentes, capaz de resolver o escoamento simultâneo de água, óleo e gás com troca de massa entre eles. Talvez um dos modelos mais completos de interesse para a indústria petrolífera seja o modelo composicional, que pode considerar o escoamento simultâneo de diversas componentes (água, óleo, gases, parafina, etc.) com reações químicas e troca de massa entre as fases. Obviamente há outras formas de complicar o modelo, como alterando-se a geometria, a possibilidade de uso de malhas não estruturadas, acoplamento com modelos geomecânicos, computação multiescala, entre diversos outros desafios.

Esperamos que esta pequena introdução seja um incentivo para os alunos de graduação e pós-graduação interessados na área, e que seja apenas o primeiro ou um dos primeiros estudos de muitos outros, nessa longa e gratificante estrada.

Bibliografia

- [1] AHMED, T. *Reservoir engineering handbook*. [S.l.]: Gulf professional publishing, 2018.
- [2] ARBOGAST, T. Numerical subgrid upscaling of two-phase flow in porous media. In: SPRINGER. *Numerical Treatment of Multiphase Flows in Porous Media: Proceedings of the International Workshop Held a Beijing, China, 2–6 August 1999*. [S.l.], 2000. p. 35–49.
- [3] AZIZ, K. Petroleum reservoir simulation. *Applied Science Publishers*, v. 476, 1979.
- [4] BARENBLATT, G. I. *Scaling*. [S.l.]: Cambridge University Press, 2003.
- [5] BEAR, J. *Dynamics of fluids in porous media*. [S.l.]: Courier Corporation, 2013.
- [6] BUCKLEY, S. E.; LEVERETT, M. Mechanism of fluid displacement in sands. *Transactions of the AIME*, OnePetro, v. 146, n. 01, p. 107–116, 1942.
- [7] BURDEN, R. L.; FAIRES, J. D.; REYNOLDS, A. C. *Numerical analysis*. [S.l.]: Brooks/cole Pacific Grove, CA, 2001.
- [8] BURGERS, J. M. A mathematical model illustrating the theory of turbulence. In: *Advances in applied mechanics*. [S.l.]: Elsevier, 1948. v. 1, p. 171–199.
- [9] CHEN, Y.; DURLOFSKY, L. J. Adaptive local–global upscaling for general flow scenarios in heterogeneous formations. *Transport in porous Media*, Springer, v. 62, p. 157–185, 2006.
- [10] CHEN, Y. et al. A coupled local–global upscaling approach for simulating flow in highly heterogeneous formations. *Advances in water resources*, Elsevier, v. 26, n. 10, p. 1041–1060, 2003.
- [11] CHEN, Z. *Reservoir simulation: mathematical techniques in oil recovery*. [S.l.]: SIAM, 2007.
- [12] CHEN, Z.; HUAN, G.; MA, Y. *Computational methods for multiphase flows in porous media*. [S.l.]: SIAM, 2006.

- [13] CHRISTIE, M. A.; BLUNT, M. Tenth SPE comparative solution project: a comparison of upscaling techniques. *SPE Reservoir Evaluation & Engineering*, OnePetro, v. 4, n. 04, p. 308–317, 2001.
- [14] CUMINATO, J. A.; MENEGUETTE, M. *Discretização de equações diferenciais parciais: técnicas de diferenças finitas*. [S.l.]: Sociedade Brasileira de Matemática, 2013.
- [15] DARCY, H. *Les fontaines publiques de la ville de Dijon: exposition et application des principes à suivre et des formules à employer dans les questions de distribution d'eau... un appendice relatif aux fournitures d'eau de plusieurs villes au filtrage des eaux*. [S.l.]: Victor Dalmont, éditeur, 1856.
- [16] DATTA-GUPTA, A.; KING, M. J. *Streamline simulation: theory and practice*. [S.l.]: Society of Petroleum Engineers Richardson, Texas, 2007.
- [17] ERTEKIN, T.; ABOU-KASSEM, J. H.; KING, G. R. *Basic applied reservoir simulation*. [S.l.]: Society of Petroleum Engineers Richardson, TX, 2001.
- [18] EWING, R. E. *The mathematics of reservoir simulation*. [S.l.]: SIAM, 1983.
- [19] EYMARD, R.; GALLOUËT, T.; HERBIN, R. Finite volume methods. *Handbook of numerical analysis*, Elsevier, v. 7, p. 713–1018, 2000.
- [20] FANCHI, J. R. *Principles of applied reservoir simulation*. [S.l.]: Elsevier, 2005.
- [21] FARMER, C. Upscaling: a review. *International journal for numerical methods in fluids*, Wiley Online Library, v. 40, n. 1-2, p. 63–78, 2002.
- [22] FORTUNA, A. de O. *Técnicas Computacionais para Dinâmica dos Flúídos Vol. 30*. [S.l.]: Edusp, 2000.
- [23] FRANCO, N. B. *Cálculo numérico*. [S.l.]: Pearson, 2006.
- [24] GLIMM, J. et al. A theory of macrodispersion for the scale-up problem. *Transport in Porous Media*, Springer, v. 13, n. 1, p. 97–122, 1993.
- [25] GOLUB, G. H.; LOAN, C. F. V. *Matrix computations*. [S.l.]: Johns Hopkins studies in the mathematical sciences, 1996.
- [26] HOLDEN, L.; NIELSEN, B. F. Global upscaling of permeability in heterogeneous reservoirs; the output least squares (ols) method. *Transport in Porous Media*, Springer, v. 40, p. 115–143, 2000.
- [27] ISAACSON, E.; KELLER, H. B. *Analysis of numerical methods*. [S.l.]: Courier Corporation, 2012.

- [28] KRÖNER, D. *Numerical schemes for conservation laws*. [S.l.]: John Wiley & Sons, 1997.
- [29] LANGTANGEN, H. P.; PEDERSEN, G. K. *Scaling of differential equations*. [S.l.]: Springer Nature, 2016.
- [30] LARSSON, S.; THOMEE, V. *Partial Differential Equations with Numerical Methods*. [S.l.]: Springer Berlin Heidelberg, 2014.
- [31] LEVEQUE, R. J. *Finite volume methods for hyperbolic problems*. [S.l.]: Cambridge university press, 2002.
- [32] LEVEQUE, R. J. *Finite difference methods for ordinary and partial differential equations: steady-state and time-dependent problems*. [S.l.]: SIAM, 2007.
- [33] LIE, K.-A. *An introduction to reservoir simulation using MATLAB/GNU Octave: User guide for the MATLAB Reservoir Simulation Toolbox (MRST)*. [S.l.]: Cambridge University Press, 2019.
- [34] MOUKALLED, F.; MANGANI, L.; DARWISH, M. *The Finite Volume Method in Computational Fluid Dynamics: An Advanced Introduction with OpenFOAM® and Matlab*. [S.l.]: Springer International Publishing, 2015. (Fluid Mechanics and Its Applications).
- [35] NOVAIS, A.; CUNHA, M. C. C. *Métodos numéricos para equações diferenciais parciais*. [S.l.]: SBMAC, 2003.
- [36] OVAYSI, S.; WHEELER, M. F.; BALHOFF, M. Quantifying the representative size in porous media. *Transport in porous media*, Springer, v. 104, n. 2, p. 349–362, 2014.
- [37] PEACEMAN, D. W. *Fundamentals of numerical reservoir simulation*. [S.l.]: Elsevier, 2000.
- [38] QUARTERONI, A.; SACCO, R.; SALERI, F. *Numerical mathematics*. [S.l.]: Springer Science & Business Media, 2010.
- [39] QUARTERONI, A.; VALLI, A. *Numerical approximation of partial differential equations*. [S.l.]: Springer Science & Business Media, 2008.
- [40] RICHTMYER, R. D.; MORTON, K. W. *Difference methods for initial-value problems*. [S.l.]: Malabar, 1994.
- [41] ROSA, A. J.; CARVALHO, R. de S.; XAVIER, J. A. D. *Engenharia de reservatórios de petróleo*. [S.l.]: Interciência, 2006.
- [42] THOMAS, J. E. *Fundamentos de engenharia de petróleo*. [S.l.]: Interciência, 2001.

- [43] THOMAS, J. W. *Numerical partial differential equations: conservation laws and elliptic equations*. [S.l.]: Springer Science & Business Media, 2013.
- [44] THOMAS, J. W. *Numerical partial differential equations: finite difference methods*. [S.l.]: Springer Science & Business Media, 2013.
- [45] WEDLAND, E. *Modelos matemáticos e métodos numéricos em águas subterrâneas*. [S.l.]: SBMAC, 2003.
- [46] WEN, X.-H.; CHEN, Y.; DURLOFSKY, L. J. Efficient 3d implementation of local-global upscaling for reservoir simulation. *Spe Journal*, OnePetro, v. 11, n. 04, p. 443–453, 2006.
- [47] WESSELING, P. *Principles of computational fluid dynamics*. [S.l.]: Springer Science & Business Media, 2009.
- [48] WU, X.-H.; EFENDIEV, Y.; HOU, T. Y. Analysis of upscaling absolute permeability. *Discrete and Continuous Dynamical Systems Series B*, AIMS PRESS, v. 2, n. 2, p. 185–204, 2002.

Índice

- Adimensionalização, 25, 90
- Análise da sísmica, 6
- Arenitos, 2

- Coefficientes constantes, 69
- Coefficientes variáveis, 20, 63, 64, 72, 74
- Compressibilidade, 12
- Compressibilidade constante, 21
- Compressibilidade da rocha, 10
- Compressibilidade total, 20
- Concentração, 55
- Condição CFL, 75, 76, 78
- Condição de contorno de Dirichlet, 22, 33, 41
- Condição de contorno de Neumann, 22, 32, 40
- Condição de fluxo nulo, 40
- Condição inicial, 22
- Condições de contorno, 22, 40, 62
- Condições do tipo *slab*, 22
- Conservação de massa, 19, 69, 86
- Consistência, 44, 46, 47, 78
- Contrate de permeabilidade, 26
- Convergência, 42, 43, 47, 77
- Crítério de von Neumann, 81
- Curvas características, 60, 63, 75

- Diagrama de Voronoi, 40
- Domínio de dependência, 76

- Equação de advecção, 79, 84
- Equação de advecção linear, 57
- Equação de Buckley-Leverett, 57
- Equação de Burgers, 57
- Equação de Laplace, 20
- Equação de Poisson, 20
- Equação de transporte linear, 56

- Equação elíptica, 20, 29
- Equação hiperbólica, 55
- Equação parabólica, 21
- Erro de truncamento local, 44, 78
- Erro global, 43, 46, 77, 80
- Escala de Darcy, 16
- Escala do poro, 16
- Escoamento compressível, 13
- Escoamento incompressível, 13, 20
- Escoamento levemente compressível, 13, 21
- Escoamentos monofásicos, 19
- Espaços $L^q(\Omega)$, 43
- Esquema central, 69, 73, 82
- Estabilidade, 44, 46, 47, 78, 80, 81

- Forma matricial, 32
- Formação do tipo canalizada, 27
- Função Heaviside, 63
- Funções de fluxo, 64

- Homogeneização, 14

- Inflow, 62

- Lei de Conservação, 56
- Lei de conservação hiperbólica, 67
- Lei de conservação hiperbólica linear, 56, 58

- Massa específica, 20
- Meio heterogêneo, 11, 26
- Meio homogêneo, 11, 26
- Meio poroso, 9
- Modelo *five-spot*, 23, 89
- Modelos macroscópicos, 15
- Modelos mesoscópicos, 15
- Modelos microscópicos, 15

- Média harmônica, 32
- Método de Lax-Friedrichs, 69, 73, 80, 83
- Método de Lax-Wendroff, 70, 74, 80, 83
- Método de volumes finitos, 29, 36, 67, 72, 84
- Método de volumes finitos conservativo, 31
- Método upwind, 70, 74, 79, 83
- Norma, 43
- Número de Courant, 76
- Ordenação usual por colunas, 37
- Ordenação usual por linhas, 37
- Outflow, 62
- Permeabilidade, 10
- Poros, 3
- Porosidade, 9, 20
- Porosidade efetiva, 9
- Poços de injeção, 23, 88
- Poços de produção, 23, 88
- Pressão, 20, 29
- Pressão de ponto de bolha, 13
- Problema de Cauchy, 58, 81
- Problema de Riemann, 63
- Problemas multidimensionais, 83
- Projeto SPE10, 27
- Querogênio, 2
- Recuperação primária, 3
- Recuperação secundária, 3
- Recuperação terciária, 4
- Regra do trapézio, 41, 42
- Reservatórios de petróleo, 2
- Rochas carbonáticas, 2
- Rochas sedimentares, 2
- Simulação de reservatórios, 5
- Solução exata, 43, 77, 78
- Série de Fourier, 81
- Série de Taylor, 45
- Teorema da equivalência de Lax, 47, 78, 81
- Termo fonte, 32, 34, 88
- Transporte passivo, 55
- Triangulação de Delaunay, 40
- Upscaling, 14
- Velocidade de Darcy, 17, 29
- Viscosidade, 13
- Volume de controle, 29, 67, 85
- Volumes centrados em células, 39
- Volumes centrados em vértices, 39
- Volumes Elementares Representativos, 16