

**UNIVERSIDADE FEDERAL DE PERNAMBUCO  
CENTRO DE TECNOLOGIA E GEOCIÊNCIAS  
PROGRAMA DE RECURSOS HUMANOS DA ANP – PRH 26**



**TESE DE DOUTORAMENTO**

***Uma Formulação do Método dos Volumes Finitos com Estrutura de Dados por Aresta para a Simulação de Escoamentos em Meios Porosos***

***Bolsista DSc. Darlan Karlo Elisiário de Carvalho***

***Orientador: Prof. Paulo Roberto Maciel Lyra (PhD)  
Co-Orientador: Prof. Ramiro Brito Willmersdorf (PhD)***



**PRH-26**

***RECIFE – 2005***



Universidade Federal de Pernambuco  
Centro de Tecnologia e Geociências  
Departamento de Engenharia Civil

# Uma Formulação do Método dos Volumes Finitos com Estrutura de Dados por Aresta para a Simulação de Escoamentos em Meios Porosos

*Darlan Karlo Elisiário de Carvalho*

TESE SUBMETIDA AO CORPO DOCENTE DO CURSO DE PÓS-GRADUAÇÃO EM ENGENHARIA CIVIL DA UNIVERSIDADE FEDERAL DE PERNAMBUCO COMO PARTE DOS REQUISITOS NECESSÁRIOS À OBTENÇÃO DO GRAU DE DOUTOR EM CIÊNCIAS DE ENGENHARIA CIVIL.

ÁREA DE CONCENTRAÇÃO:  
ESTRUTURAS (ENGENHARIA DE PETRÓLEO)

Paulo Roberto Maciel Lyra, PhD  
(Orientador)

Recife, Pernambuco, Brasil.

©Darlan Karlo Elisiário de Carvalho, Novembro de 2005.

**Carvalho, Darlan Karlo Elisiário de**

**Uma formulação do método dos volumes finitos com estrutura de dados por aresta para a simulação de escoamentos em meios porosos / Darlan Karlo Elisiário de Carvalho. – Recife : O Autor, 2005.**

**185 folhas : il., fig., tab.**

**Tese (doutorado) – Universidade Federal de Pernambuco. CTG. Engenharia Civil, 2005.**

**Inclui bibliografia e apêndices.**

**1. Engenharia de petróleo – Simulação de escoamentos. 2. Meios porosos – Meios heterogêneos e anisotrópicos. 3. Método dos volumes finitos – Malhas não estruturadas – Estrutura de dados por aresta. I. Título.**

**665.6**

**CDU (2.ed.)**

**UFPE**

**665.5**

**CDD (22.ed.)**

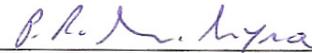
**BC2006-324**

**Uma Formulação do Método dos Volumes Finitos  
com Estrutura de Dados por Aresta para a  
Simulação de Escoamentos em Meios Porosos**

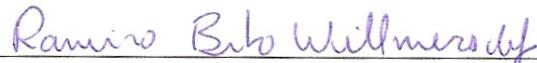
*Darlan Karlo Elisiário de Carvalho*

TESE SUBMETIDA AO CORPO DOCENTE DO CURSO DE PÓS-GRADUAÇÃO EM ENGENHARIA CIVIL DA UNIVERSIDADE FEDERAL DE PERNAMBUCO COMO PARTE DOS REQUISITOS NECESSÁRIOS À OBTENÇÃO DO GRAU DE DOUTOR EM CIÊNCIAS DE ENGENHARIA CIVIL.

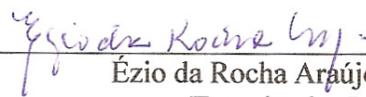
Aprovada por:



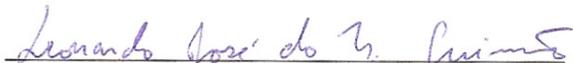
Paulo Roberto Maciel Lyra, PhD  
(Orientador)



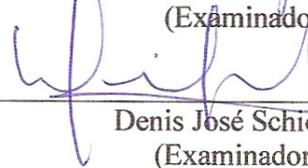
Ramiro Brito Willmersdorf, PhD  
(Co-Orientador)



Ézio da Rocha Araújo, DSc  
(Examinador Interno)



Leonardo José do Nascimento Guimarães PhD  
(Examinador Interno)



Denis José Schiozer, PhD  
(Examinador Externo)



Régis Kruel Romeu PhD  
(Examinador Externo)

**Recife – PE  
Novembro de 2005**

## **Agradecimentos**

Ao Programa de Recursos Humanos da Agência Nacional de Petróleo (PRH-26-ANP), pela bolsa concedida durante o período de realização do doutorado.

A todo o pessoal técnico e administrativo do PRH-26, particularmente a Laudénice, Rosa e Marcos, por me ajudarem a lidar com a tediosa burocracia universitária.

A todos os coordenadores que passaram pelo PRH-26 durante o meu doutoramento: aos Profs. Virgínio Neumann, Edmilson de Lima e Mário pela disposição, alegria e atenção dispensadas durante os períodos em que assumiram o cargo de coordenador.

Aos colegas de pós-graduação de Engenharia Civil e de Geologia do PRH-26 da UF-PE, segue o agradecimento por tornarem mais gratificante o período de doutoramento.

Aos alunos de iniciação científica do PADMEC: Ana Paula, Bruno e Danilo pela troca de idéias e pela ajuda na confecção de várias figuras e gráficos do presente trabalho.

Em particular, agradeço aos colegas Alessandro, Antônio e Filipe, pelas conversas e debates que começavam e terminavam sempre de maneira divertida e estimulante.

Aos Professores Paulo Lyra e Ramiro Willmersdorf pela incessante orientação e pela amizade demonstrada durante toda a jornada.

A minha irmã Thaís pela amizade e pela chateação sazonal, que me mantinha sempre “esperto”.

Aos meus pais, Vânia (Mainha) e Antônio (Tonho) pelo carinho, pela paciência e pelos exemplos de retidão moral e de humanidade, absolutamente indispensáveis, não apenas para a realização deste trabalho, bem como para o caminhar na vida.

A Elba (Binha), minha esposa e meu amor, que me acompanhou de maneira muito próxima desde o início desta jornada, me dando suporte em todos os sentidos, mesmo quando me faltaram o bom humor e o bom senso.

## Resumo

A modelagem e a simulação de escoamentos multifásicos e multicomponentes em meios porosos heterogêneos e anisotrópicos se constitui num grande desafio de ordem matemática e numérica. Neste contexto, são de especial interesse o estudo do transporte de contaminantes em aquíferos e a simulação de escoamentos bifásicos de óleo e água em reservatórios de petróleo.

A utilização de metodologias numéricas capazes de lidar com malhas flexíveis (não-estruturadas) pode oferecer algumas vantagens sobre as formulações baseadas em malhas estruturadas, possibilitando que poços inclinados e estruturas geológicas com características geométricas complexas, tais como, falhas selantes, canais e camadas estratificadas inclinadas, sejam modeladas naturalmente e de maneira mais acurada. Dentre os métodos numéricos que usualmente fazem uso de tais malhas, podemos citar: o método dos elementos finitos (MEF) e o método dos volumes finitos (MVF). Este último é particularmente atrativo devido às suas propriedades de conservação local e global.

No presente trabalho, apresentamos uma nova formulação do método dos volumes finitos com estrutura de dados por aresta (MVFA), considerando volumes de controle construídos pelo método das medianas (median dual). Esta formulação é capaz de lidar com meios heterogêneos e anisotrópicos (tensor completo) de maneira inovadora, utilizando malhas estruturadas e não-estruturadas. É bastante conhecido na literatura que a estrutura de dados por arestas é mais eficiente em termos de economia de memória e tempo de CPU, além disso ela permite uma implementação elegante e eficiente da formulação numérica desenvolvida.

A discretização dos termos elípticos (difusivos) é realizada utilizando uma formulação não óbvia do método dos volumes finitos. Tais termos são calculados em dois laços (loops) nas arestas das malhas. Esta formulação permite que os fluxos através das faces dos volumes de controle sejam calculados adequadamente, mesmo em malhas não-ortogonais, e em meios anisotrópicos e heterogêneos, mantendo uma aproximação de segunda ordem.

Para a discretização dos termos advectivos, utilizamos duas técnicas de alta ordem: um método de Difusão Numérica Artificial (DNA) e um método “Total Variation Diminishing” (TVD), baseado na extrapolação de variáveis, conhecido como “Monotone Upstream Scheme for Conservation Laws” (MUSCL-TVD). Estes métodos são adaptados para utilização com malhas estruturadas e não-estruturadas, em problemas de transporte de fluidos em meios porosos.

A metodologia que desenvolvemos é bastante geral, no sentido em que, tanto a discretização dos termos difusivos, quanto a discretização dos termos advectivos que caracterizam as equações de transporte em meio poroso, são feitas com base nos mesmos princípios de conservação e utilizando a mesma estrutura de dados por arestas.

Toda formulação desenvolvida foi verificada numericamente através da solução de alguns problemas modelos encontrados na literatura. Sempre que possível os resultados são comparados com resultados analíticos ou outras soluções numéricas disponíveis na literatura. Os resultados obtidos no presente trabalho se compararam de maneira bastante favorável com outros resultados fornecidos por diferentes metodologias encontradas na literatura.

## Abstract

The modeling and simulation of multi-phase and multi-component fluid flow in heterogeneous and anisotropic porous media can be a great challenge of mathematical and numerical nature. In this context, the study of contaminant transport in aquifers and the simulation of two-phase flow of oil and water in oil reservoirs are of special interest.

The utilization of methodologies capable of handling flexible meshes (unstructured) may offer some advantage over structured meshes based formulations, allowing that inclined wells and geological structures with complex geometrical features, such as sealing faults, channels and inclined stratified layers, are naturally modeled with more accuracy. Within the class of numerical methods that make use of unstructured meshes, we may quote: the finite element method (FEM) and the finite volume method (FVM). The latter is particularly attractive due to its local and global conservation properties.

In the present work, we present a new finite volume formulation with an edge-based data structure (EBFV), considering median dual control volumes. This formulation is capable of handling heterogeneous and anisotropic (full tensor) porous media in an innovative way, using structured and unstructured meshes. It is well known in literature that the edge-based data structure is more efficient in terms of memory saving and CPU time, besides it allows for an elegant and efficient implementation of the developed numerical formulation.

The discretization of elliptic (diffusive) terms is performed by a non obvious formulation of the finite volume method. Such terms are discretized in two loops over the edges of the mesh. This formulation allows the fluxes through control volume faces to be properly calculated even for non-orthogonal meshes in heterogeneous and anisotropic media, keeping second order accuracy.

For the discretization of advection terms we have used two higher order techniques: an artificial numerical diffusion method (AD) and a “Total Variation Diminishing” (TVD) type method based in variable extrapolation, which is known as “Monotone Upstream Scheme for Conservation Laws”, (MUSCL-TVD). These methods are adapted for use with structured and unstructured meshes, in problems involving fluid transport through porous media.

The methodology we have developed is quite general in the sense that both, the discretization of the diffusive terms and the discretization of the advective terms that characterize the transport equations in porous media, are performed using the same conservation principles and using the same edge-based data structure.

The whole methodology has been numerically verified through the solution of some model problems found in literature. Whenever is possible, the numerical results are compared to the analytical solutions, or to other numerical results available. The results obtained in the present work compare very favorably with other results provided by different methodologies found in literature.

# SUMÁRIO

Resumo .....	iii
Abstract.....	iv
LISTA DE SÍMBOLOS .....	viii
LISTA DE ABREVIATURAS.....	xiv
LISTA DE FIGURAS .....	xv
LISTA DE TABELAS .....	xxiii
1. INTRODUÇÃO.....	24
1.1 Motivação e Considerações Gerais.....	24
1.2 Objetivos e Contribuições do Presente Trabalho .....	28
1.3 Organização Geral da Tese.....	29
2. EQUAÇÕES GOVERNANTES .....	31
2.1 Introdução.....	31
2.2 Escoamento Bifásico e Imiscível em Meios Porosos .....	32
2.2.1 Conceitos Fundamentais.....	32
2.2.2 Equação de Pressão .....	34
2.2.3 Equação de Saturação.....	37
2.2.4 Condições Iniciais e de Contorno.....	38
2.3 Modelos Simplificados .....	39
2.3.1 Equação de Buckley-Leverett.....	39
2.3.2 Escoamento Monofásico em Coordenadas Cartesianas .....	41
2.4 Transporte de Contaminantes em Meios Porosos: Injeção de Traçadores .....	42
2.4.1 Conceitos Fundamentais.....	42
2.4.2 Equação de Pressão .....	43
2.4.3 Equação de Advecção-Dispersão-Reação .....	43
3. MÉTODOS DE RESÍDUOS PONDERADOS .....	48
3.1 Introdução.....	48
3.2 Diferenças Finitas.....	49
3.3 Elementos Finitos .....	49
3.4 Volumes Finitos.....	50
4. MÉTODO DE VOLUMES FINITOS POR ARESTA (MVFA) .....	51
4.1 Introdução.....	51
4.2 Estrutura de Dados por Aresta.....	52
4.3 Método das Medianas.....	54
4.3.1 Coeficientes Geométricos em Duas Dimensões.....	54
4.3.2 Coeficientes Geométricos em Três Dimensões.....	56
4.4 Problemas Difusivos.....	58
4.4.1 Formulação com Estêncil Compacto.....	59
4.4.2 Formulação com Estêncil Estendido (Volumes Finitos Repetido).....	60
4.4.3 Formulação Híbrida: Volumes Finitos - Diferenças Finitas.....	65
4.4.4 Exemplos .....	72
4.5 Problemas Advectivos .....	88
4.5.1 A Equação de Transporte Linear .....	88
4.5.2 Método de Godunov .....	90

4.5.3 Métodos TVD (Total Variation Diminishing).....	91
4.5.4 Métodos MUSCL (Monotone Upstream Scheme for Conservation Laws) .....	92
4.5.5 Métodos de Difusão Numérica Artificial (DNA) .....	95
4.6 Discretização Temporal (Método de Euler-Explícito) .....	97
4.7 Termos Fonte, Condições Iniciais e de Contorno .....	98
4.7.1 Termo Fonte Pontual e Termo Fonte Distribuído .....	98
4.7.2 Condições Iniciais e de Contorno.....	100
5. TRANSPORTE DE CONTAMINANTES EM AQUÍFEROS .....	102
5.1 Introdução.....	102
5.2 Formulação Discreta.....	103
5.3 Exemplos .....	105
5.3.1 Transporte Unidimensional de Contaminantes Numa Coluna de Areia a Partir de Uma Fonte a Montante .....	105
5.3.2 Transporte Unidimensional de Contaminantes Numa Coluna de Areia a Partir de Uma Fonte a Montante com Decaimento Radioativo .....	113
5.3.3 Transporte Bidimensional de Contaminantes Num Aquífero com Uma Fonte Localizada à Montante.....	116
5.3.4 Transporte Bidimensional de Contaminantes a Partir de Um Pulso Transiente Localizada a Montante.....	121
5.3.5 Transporte Bidimensional de Contaminantes com Razão de Dispersividades Não-Unitárias.....	125
6. ESCOAMENTO BIFÁSICO EM MEIOS POROSOS .....	128
6.1 Introdução.....	128
6.2 Método IMPES .....	129
6.3 Formulação Discreta.....	130
6.3.1 Equação de Pressão .....	130
6.3.2 Campo de Velocidades .....	133
6.3.3 Equação de Saturação.....	133
6.4 Exemplos .....	135
6.4.1 O Problema de Buckley-Leverett .....	135
6.4.2 Problema de $\frac{1}{4}$ de Cinco Poços Bidimensional com uma Zona de Baixa Permeabilidade .....	140
6.4.3 escoamento Confinado Através de uma Região com duas Barreiras Perpendiculares.....	146
6.4.4 Estudo do Efeito de Orientação de Malha para o Caso de $\frac{1}{4}$ de Cinco Poços Bidimensional com Razão de Viscosidade Adversa .....	150
6.4.5 Problema de $\frac{1}{4}$ de Cinco Poços Numa Geometria Tridimensional com Razão de Viscosidade Adversa .....	155
7. CONCLUSÕES E TRABALHOS FUTUROS .....	158
7.1 Conclusões.....	158
7.2 Trabalhos Futuros.....	159
APÊNDICE A .....	161
Equação de Buckley-Leverett.....	161
APÊNDICE B.....	167
Inconsistência do Esquema de Dois Pontos Numa Malha Triangular Genérica .....	167
APÊNDICE C.....	171

Detalhamento da Formulação Matricial Implícita Para a Equação Elíptica de Pressão.	171
BIBLIOGRAFIA .....	176

## LISTA DE SÍMBOLOS

$A_k$	: Área da superfície de controle
$C$	: Concentração de um soluto contaminante
$\vec{C}_{IJ_L}$	: Vetor área normal a superfície de controle associada a aresta $IJ_L$ no interior do domínio
$\vec{C}_{IJ_L}^{\Omega_r}$	: Vetor área normal da superfície de controle associada a aresta $IJ_L$ para o interior do subdomínio $\Omega_r$
$D_0$	: Coeficiente de difusão molecular no líquido
$\underline{D}$	: Tensor de dispersão hidrodinâmica
$\vec{D}_{IJ_L}$	: Vetor área normal da superfície de controle associada a aresta $IJ_L$ no contorno do domínio
$\vec{D}_{IJ_L}^{\Omega_r}$	: Vetor área normal da superfície de controle associada a aresta $IJ_L$ para o contorno do domínio $\Omega_r$
$\vec{D}_{IJ_L J_H}$	: Vetor área normal da superfície de controle triangular no contorno, formada pelos nós $I, J_L$ e $J_H$
$D_L$	: Coeficiente de dispersividade longitudinal
$\underline{D}_M$	: Tensor de difusão molecular
$D_T$	: Coeficiente de dispersividade transversal
$erfc$	: Função erro complementar
$exp$	: Função exponencial
$\ E\ $	: Norma do erro assintótico de truncamento
$f_i$	: Fluxo fracional da fase $i$
$\vec{F}$	: Fluxo advectivo exato
$\hat{F}_{IJ_L}$	: Fluxo advectivo aproximado associado a uma aresta $IJ_L$
$g$	: Módulo da aceleração gravitacional

$H_k$	: Funções de interpolação ou funções de forma
$i$	: Fase $i = \text{óleo (o) ou água (w)}$
$I, J_L$	: Nós genéricos da malha, através dos quais são definidos os volumes de controle
$\underline{I}$	: Tensor Identidade
$IJ_L$	: Aresta formada pelos nós $I$ e $J_L$
$\overline{IJ_L}$	: Vetor unitário na direção da aresta, determinado pelos pontos $IJ_L$
$\vec{J}_D$	: Termo de fluxo difusivo
$L_i$	: Operador diferencial
$\vec{L}_{IJ_L}$	: Vetor aresta, determinado pelos pontos $IJ_L$
$\underline{K}$	: Tensor permeabilidade absoluta do meio poroso
$k_{ri}$	: Permeabilidade relativa da fase $i$
$k$	: Parâmetro escalar livre do método MUSCL-TVD que permite estipular a ordem formal da aproximação na face do volume de controle
$m, n$	: Parâmetros empíricos para o modelo de Van Genuchten
$\mathfrak{M}$	: Operador diferencial que pode representar um problema de convecção, difusão ou convecção-difusão
$\vec{n}$	: Vetor área normal
$\vec{n}_k$	: Vetor unitário normal a área $A_k$
$NN$	: Número de nós vizinhos conectados ao um nó $I$ através de uma aresta $IJ_L$
$p_c$	: Pressão capilar
$p_d$	: Parâmetro empírico para o modelo de Brooks e Corey
$p_i$	: Pressão da fase $i$
$p_m$	: Pressão média das fases
$Pe$	: Número de Peclet da malha
$q_C$	: Termos de fonte ou sumidouro para um soluto contaminante
$q_i$	: Termos de fonte ou sumidouro (i.e. poços)

$Q$	: Vazão volumétrica específica total
$Q_i$	: Vazão volumétrica específica da fase $i$
$\bar{Q}_I$	: Vazão volumétrica total no poço injetor
$\bar{Q}_P$	: Vazão volumétrica total no poço produtor
$R$	: Resíduo associado a discretização espacial
$sl$	: Função limitadora de inclinação
$S_i$	: Saturação da fase $i$
$S_{or}$	: Saturação residual de óleo
$S_{wr}$	: Saturação residual de água
$\vec{v}$	: Velocidade total do fluido ou velocidade de transporte advectivo
$\vec{v}_i$	: Vetor velocidade da fase $i$
$V_I$	: Volume de controle associado a um nó $I$
$t$	: Instante de tempo
$T$	: Espessura do domínio
$u$	: Variável escalar genérica (i.e. temperatura, pressão, concentração, etc.)
$u_I$	: Valor exato da variável escalar $u$ num ponto $I$
$\hat{u}_I$	: Valor aproximado da variável escalar $u$ num ponto $I$
$u_{IJ_L}$	: Valor exato da variável escalar $u$ no ponto médio de uma aresta $IJ_L$
$\hat{u}_{IJ_L}$	: Valor aproximado da variável escalar $u$ no ponto médio de uma aresta $IJ_L$
$\hat{u}_{IJ_LJ_H}$	: Valor aproximado da variável escalar $u$ associado a uma superfície de controle triangular formada pelos nós $I, J_L$ e $J_H$
$\nabla \hat{u}_I$	: Gradiente aproximado da variável escalar $u$ no nó $I$
$\nabla \hat{u}_{IJ_L}$	: Gradiente aproximado da variável escalar $u$ no ponto médio da aresta $IJ_L$ obtido por volumes finitos repetidos
$\nabla \hat{u}_{IJ_L}^*$	: Gradiente aproximado da variável escalar $u$ no ponto médio da aresta $IJ_L$ obtido pelo método híbrido de volumes finitos e diferenças finitas

$\nabla \hat{u}_{IJ_L}^N$	: Componente do gradiente aproximado da variável escalar $u$ normal a aresta $IJ_L$ no ponto médio da mesma, obtido por volumes finitos repetidos
$\nabla \hat{u}_{IJ_L}^P$	: Componente do gradiente aproximado da variável escalar $u$ paralelo a aresta $IJ_L$ no ponto médio da mesma, obtido por volumes finitos repetidos
$\nabla \hat{u}_{IJ_L}^{P*}$	: Componente do gradiente aproximado da variável escalar $u$ paralelo a aresta $IJ_L$ no ponto médio da mesma, obtido pelo método híbrido de volumes finitos e diferenças finitas
$W_k$	: Funções de ponderação
$Z$	: Componente do vetor deslocamento orientado para baixo

### Símbolos Gregos

$\alpha$	: Parâmetro empírico para o modelo de Van Genuchten
$\alpha_L$	: Dispersividade longitudinal
$\alpha_T$	: Dispersividade transversal
$\alpha_{IJ_L}$	: Coeficiente do termo de difusão numérica artificial, avaliado no ponto médio da aresta
$\delta_l$	: Operador de diferenças centrais de primeira ordem
$\delta_l^2$	: Operador de diferenças centrais de segunda ordem
$\delta(x - x_0)$	: Função Delta de Dirac
$\Delta_l^-$	: Operador de diferenças atrasadas
$\Delta_{IJ_L}$	: Comprimento da aresta $IJ_L$
$\Delta_{J_L}^+$	: Operador de diferenças avançadas
$\varepsilon$	: Coeficiente escalar utilizado para evitar o surgimento de zero no denominador para a função limitadora de gradiente de Van Albada
$\phi$	: Porosidade
$\lambda_i$	: Mobilidade da fase $i$

- $\lambda_T^{IJ_L}$  : Termo de mobilidade total avaliado no ponto médio da aresta  $IJ_L$   
 $\gamma$  : Termo de decaimento radioativo de um soluto contaminante  
 $\Upsilon_I, \Upsilon_{J_L}$  : Sensores para detectar descontinuidades no método DNA  
 $\Gamma_I$  : Superfície de controle associada a um volume de controle  $\Omega_I$   
 $\Gamma$  : Contorno ou fronteira  
 $\Gamma_I$  : Fronteira interna - Região do contorno com poços injetores  
 $\Gamma_P$  : Fronteira interna - Região do contorno com poços produtores  
 $\Gamma_D$  : Fronteira externa - Região do contorno com pressões prescritas  
 $\Gamma_N$  : Fronteira externa - Região do contorno com vazões prescritas  
 $\mu^{(2)}, \mu^{(4)}$  : Parâmetros fornecidos pelo usuário que permitem ajustar a quantidade de difusão numérica artificial no método DNA  
 $\mu_i$  : Viscosidade da fase  $i$   
 $\Omega$  : Domínio  
 $\Omega_I$  : Volume de controle associado a um nó  $I$   
 $\omega$  : Parâmetros empíricos para o modelo de Brooks e Corey  
 $\theta$  : Coeficiente de ponderação definido pelo usuário para o método DNA  
 $\rho_i$  : Densidade ou massa específica da fase  $i$   
 $\xi$  : Coordenada característica associada às linhas características de uma equação hiperbólica  
 $\xi_{IJ_L}^{(2)}, \xi_{IJ_L}^{(4)}$  : Parâmetros que se adaptam ao escoamento e controlam a quantidade de difusão numérica artificial no método DNA  
 $\tau$  : Tortuosidade do meio poroso

### Matrizes de Aresta

- $[E]_{(\text{ndim} \times 2 \text{ndim})}^{IJ_L(\Omega_r)}$  : Matriz da aresta  $IJ_L$  responsável pela projeção do gradiente numa direção normal a aresta

- $[F]_{(2\text{ndim}\times 2)}^{I_L}$  : Matriz da aresta  $IJ_L$  para o cálculo do gradiente nodal pelo MVFA para meios homogêneos
- $[F]_{(2\text{ndim}\times 2)}^{I_L(\Gamma_r)}$  : Matriz da aresta  $IJ_L$  com os termos do contorno do domínio  $\Omega_r$ , para o cálculo do gradiente nodal pelo MVFA para meios heterogêneos
- $[F]_{(2\text{ndim}\times 2)}^{I_L(\Omega_r)}$  : Matriz com a contribuição da aresta  $IJ_L$  com os termos do interior do domínio  $\Omega_r$ , para o cálculo do gradiente nodal pelo MVFA para meios heterogêneos
- $[F]_{(9\times 3)}^{I_L J_H(\Gamma_r)}$  : Matriz das faces  $IJ_L J_H$  com os termos do contorno do domínio  $\Omega_r$ , para o cálculo do gradiente nodal pelo MVFA para meios heterogêneos no caso de domínios tridimensionais e elementos tetraédricos
- $[G]_{2\times 2}^{I_L(\Omega_r)}$  : Matriz de aresta  $IJ_L$  para a discretização do termo elíptico que contém o termo de projeção do gradiente numa direção paralela a aresta
- $[Q]_{2\times 1}^{I_L(\Omega_r)}$  : Vetor dos termos de fonte e sumidouro para uma aresta  $IJ_L$

### Matrizes Globais

- $[E]_{\text{np}\times(\text{np}\times\text{ndim})}^G$  : Matriz global da projeção do gradiente numa direção normal a aresta
- $[F]_{(\text{np}\times\text{ndim})\times\text{np}}^G$  : Matriz global para o cálculo dos gradientes nodais pelo MVFA
- $[G]_{\text{np}\times\text{np}}^G$  : Matriz de global do termo elíptico que contém o termo de projeção do gradiente numa direção paralela a aresta
- $[Q]_{\text{np}}^G$  : Vetor global dos termos de fonte e sumidouro

## LISTA DE ABREVIATURAS

AD	: “Artificial Diffusion”
CPU	: “Central Processor Unit”
CVFD	: “Control Volume Finite Difference”
CVFE	: “Control Volume Finite Element”
DFC	: Dinâmica dos Fluidos Computacional
DFVC	: Diferenças Finitas com Volume de Controle
DNA	: Difusão Numérica Artificial
EBFV	: “Edge-Based Finite Volume Method”
EDPs	: Equações Diferenciais Parciais
EFVC	: Elementos Finitos com Volume de Controle
FCA	: “Flux Continuous Approximations”
FEM	: “Finite Element Method”
FLOPS	: “Floating Point Operations”
FVM	: “Finite Volume Method”
IMPES	: “Implicit Pressure Explicit Saturation”
MDF	: Método das Diferenças Finitas
MEF	: Método dos Elementos Finitos
MEFM	: Método dos Elementos Finitos Mistos
MVF	: Método dos Volumes Finitos
MPFA	: “Multipoint Flux Approximations”
MRP	: Método dos Resíduos Ponderados
MUSCL	: “Monotone Upstream Scheme for Conservation Laws”
MVFA	: Método dos Volumes Finitos com Estrutura de Dados por Aresta
NDIM	: Número de Dimensões Espaciais
NELEM	: Número de Elementos
NPOIN	: Número de Pontos
NP	: Número de Pontos
SC	: Superfície de Controle
TVD	: “Total Variation Diminishing”
VC	: Volume de Controle
VPI	: Volume Poroso Injetado

## LISTA DE FIGURAS

<b>Figura 2.1:</b>	Modelo esquemático de um reservatório e suas respectivas fronteiras. ....	39
<b>Figura 2.2:</b>	Solução analítica para o problema de Buckley-Leverett em dois instantes $t = 0.2$ e $t = 0.5$ , respectivamente. ....	41
<b>Figura 2.3:</b>	Modelo esquemático de um rio poluído que corta um aquífero e se estabelece um escoamento permanente, uniforme e unidimensional para o interior do aquífero (NE-ZHENG SUN, 1995). ....	47
<b>Figura 4.1:</b>	Diferentes configurações para volumes de controle: a) esquema centrado nas células; b) esquema célula-vértice; c) esquema centrado nos vértices. ....	52
<b>Figura 4.2:</b>	Trecho de malha mista formada por volumes de controle construídos pelo método das medianas. ....	55
<b>Figura 4.3:</b>	(a) Volume de controle para um nó interno em 2-D; (b) volume de controle para um nó do contorno em 2-D. ....	55
<b>Figura 4.4:</b>	Elemento tetraédrico e trecho de um volume de controle para um nó interno $I$ em 3-D. ....	57
<b>Figura 4.5:</b>	Volume de controle para um nó do contorno em 3-D. ....	57
<b>Figura 4.6:</b>	Malha unidimensional com espaçamento uniforme. ....	64
<b>Figura 4.7:</b>	Distribuição não realística de uma variável $u$ para a malha unidimensional da Fig. (4.6). ....	65
<b>Figura 4.8:</b>	Gradiente no ponto médio da aresta $IJ_L$ calculado pelo método híbrido volumes finitos - diferenças finitas. A componente do gradiente ao longo da aresta é representada por $\nabla \hat{u}_{IJ_L}^{P*}$ e a componente normal calculada pelo MVF é representada por $\nabla \hat{u}_{IJ_L}^N$ . ....	67
<b>Figura 4.9:</b>	Volume de controle subdividido por dois tipos diferentes de rocha. ....	70
<b>Figura 4.10:</b>	(a) Domínio quadrado dividido horizontalmente por dois materiais diferentes; (b) malha triangular utilizada para a discretização do domínio e os contornos do campo de pressão $P$ . ....	74
<b>Figura 4.11:</b>	(a) Domínio quadrado dividido verticalmente por dois materiais diferentes; (b) malha triangular utilizada para a discretização do domínio e o campo de pressão $P$ . ....	75

<b>Figura 4.12:</b>	Malha triangular com (8x8) sub-divisões e superfície “extrudada” na direção Z, para a variável $u$ . .....	77
<b>Figura 4.13:</b>	Isolinhas da variável $u$ para a malha com (64x64) divisões. ....	78
<b>Figura 4.14:</b>	Comportamento do erro usando diferentes normas para o exemplo com $\underline{K}$ contínuo e não-diagonal. ....	79
<b>Figura 4.15:</b>	Contornos da função $u(x, y)$ obtidos com a malha (64x64) para $\alpha = 1.0$ . ....	82
<b>Figura 4.16:</b>	Contornos da função $u(x, y)$ obtidos com a malha (64x64) para $\alpha = 10.0$ . ....	82
<b>Figura 4.17:</b>	Contornos da função $u(x, y)$ obtidos com a malha (64x64) para $\alpha = 100.0$ . ....	83
<b>Figura 4.18:</b>	Contornos da função $u(x, y)$ obtidos com a malha (64x64) para $\alpha = 1000.0$ . ....	83
<b>Figura 4.19:</b>	Comportamento do erro usando diferentes normas para o exemplo com $\underline{K}$ descontínuo e não diagonal com intensidade de descontinuidade $\alpha = 1.0$ no MVFA. ....	84
<b>Figura 4.20:</b>	Comportamento do erro usando diferentes normas para o exemplo com $\underline{K}$ descontínuo e não diagonal com intensidade de descontinuidade $\alpha = 10.0$ no MVFA. ....	85
<b>Figura 4.21:</b>	Comportamento do erro usando diferentes normas para o exemplo com $\underline{K}$ descontínuo e não diagonal com intensidade de descontinuidade $\alpha = 100.0$ , no MVFA. ....	86
<b>Figura 4.22:</b>	Comportamento do erro usando diferentes normas para o exemplo com $\underline{K}$ descontínuo e não diagonal com intensidade de descontinuidade $\alpha = 1000.0$ no MVFA. ....	87
<b>Figura 4.23:</b>	Construção de um estêncil estendido a partir da utilização dos nós fictícios $I^E$ e $J_L^D$ associados a uma aresta $IJ_L$ . ....	93
<b>Figura 4.24:</b>	Método MUSCL-TVD: a) aproximação de maior ordem (linear) construída a partir da extrapolação da variável $u$ na interface do volume de controle; b) limitação do gradiente necessária para evitar oscilações em regiões de choques. ....	94
<b>Figura 5.1:</b>	Injeção constante de um soluto contaminante à montante de uma coluna de areia homogênea e isotrópica. ....	105

<b>Figura 5.2:</b>	Malha triangular não-estruturada com 16 subdivisões (ao longo da linha central da coluna de areia) utilizada na discretização espacial do problema do transporte 1-D de contaminantes. ....	107
<b>Figura 5.3:</b>	Contornos de concentração obtidos pelo método MUSCL-TVD para o problema do transporte 1-D de contaminantes em $t = 30d$ com $Pe = 0.75$ . ....	107
<b>Figura 5.4:</b>	Perfis de concentração para o problema do transporte 1-D de contaminantes em $t = 30d$ . Solução analítica e soluções numéricas obtidas numa malha com 16 subdivisões ao longo da linha central da coluna de areia ( $Pe = 0.75$ ). ....	107
<b>Figura 5.5:</b>	Perfis de concentração para o problema do transporte 1-D de contaminantes em $t = 30d$ . Solução analítica e soluções numéricas obtidas numa malha com 32 subdivisões ao longo da linha central da coluna de areia ( $Pe = 0.375$ ). ....	108
<b>Figura 5.6:</b>	Perfis de concentração para o problema do transporte 1-D de contaminantes em $t = 30d$ . Solução analítica e soluções numéricas obtidas numa malha com 64 subdivisões ao longo da linha central da coluna de areia ( $Pe = 0.1875$ ). ....	109
<b>Figura 5.7:</b>	Perfis de concentração para o problema do transporte 1-D de contaminantes em $t = 30d$ . Solução analítica e soluções numéricas obtidas numa malha com 128 subdivisões ao longo da linha central da coluna de areia ( $Pe = 0.1875$ ). ....	109
<b>Figura 5.8:</b>	Perfis da concentração para o problema do transporte 1-D de contaminantes em $t = 50d$ . Solução analítica e soluções numéricas obtidas numa malha com 16 subdivisões ao longo da linha central da coluna de areia ( $Pe = 150.0$ ). ....	110
<b>Figura 5.9:</b>	Perfis da concentração para o problema do transporte 1-D de contaminantes em $t = 50d$ . Solução analítica e soluções numéricas obtidas numa malha com 32 subdivisões longo da linha central da coluna de areia ( $Pe = 75.0$ ). ....	111
<b>Figura 5.10:</b>	Perfis da concentração para o problema do transporte 1-D de contaminantes em $t = 50d$ . Solução analítica e soluções numéricas obtidas numa malha com 64 subdivisões ao longo da linha central da coluna de areia ( $Pe = 37.5$ ). ....	112
<b>Figura 5.11:</b>	Perfis de concentração para o problema do transporte 1-D de contami-	

	nantes em $t = 50d$ . Solução analítica e soluções numéricas obtidas numa malha com 128 subdivisões longo da linha central da coluna de areia ( $Pe = 18.75$ ). .....	112
<b>Figura 5.12:</b>	Perfis de concentração para o problema do transporte 1-D de contaminantes com decaimento radioativo em $t = 50d$ . Solução analítica e soluções numéricas obtidas numa malha com 32 subdivisões ao longo da linha central da coluna de areia ( $Pe = 75.0$ ). .....	114
<b>Figura 5.13:</b>	Perfis de concentração para o problema do transporte 1-D de contaminantes com decaimento radioativo em $t = 50d$ . Solução analítica e soluções numéricas obtidas numa malha com 64 subdivisões ao longo da linha central da coluna de areia ( $Pe = 37.5$ ). .....	114
<b>Figura 5.14:</b>	Perfis de concentração para o problema do transporte 1-D de contaminantes com decaimento radioativo em $t = 50d$ . Solução analítica e soluções numéricas obtidas numa malha com 128 subdivisões ao longo da linha central da coluna de areia ( $Pe = 18.75$ ). .....	115
<b>Figura 5.15:</b>	Geometria para o transporte de contaminantes a partir de uma faixa à montante de um aquífero homogêneo e isotrópico. ....	116
<b>Figura 5.16:</b>	Malhas utilizadas para a discretização do domínio para o problema do transporte 2-D de contaminantes num aquífero: (a) malha triangular mais grosseira com 267 nós e 470 elementos; (b) malha refinada com 1463 nós e 2772 elementos triangulares. ....	117
<b>Figura 5.17:</b>	Contornos de concentração obtidos com o método MUSCL-TVD para o problema do transporte 2-D de contaminantes num aquífero com $Pe = 0.05$ em $t = 1d$ para a malha com $\Delta x = 0.5m$ . ....	118
<b>Figura 5.18:</b>	Contornos de concentração obtidos com o método MUSCL-TVD para o problema do transporte 2-D de contaminantes num aquífero com $Pe = 0.05$ em $t = 4d$ para a malha com $\Delta x = 0.5m$ . ....	118
<b>Figura 5.19:</b>	Contornos de concentração obtidos com o método MUSCL-TVD para o problema do transporte 2-D de contaminantes num aquífero com $Pe = 0.05$ em $t = 1d$ para a malha com $\Delta x = 0.2m$ . ....	119
<b>Figura 5.20:</b>	Contornos de concentração obtidos com o método MUSCL-TVD para o problema do transporte 2-D de contaminantes num aquífero com $Pe = 0.05$ em $t = 4d$ para a malha com $\Delta x = 0.2m$ . ....	119
<b>Figura 5.21:</b>	Perfis de concentração para o problema do transporte 2-D de contaminantes num aquífero com $Pe = 0.05$ , em $t = 1d$ e $t = 4d$ para a malha com $\Delta x = 0.5m$ . ....	120

<b>Figura 5.22:</b>	Perfis de concentração para o problema do transporte 2-D de contaminantes num aquífero com $Pe = 0.05$ , em $t = 1d$ e $t = 4d$ para a malha com $\Delta x = 0.2m$ .	120
<b>Figura 5.23:</b>	Perfis de concentração para o problema do transporte 2-D de um pulso de contaminantes num aquífero em $t = 2d$ e $t = 6d$ para a malha com $\Delta x = 0.5m$ .	122
<b>Figura 5.24:</b>	Perfis de concentração para o problema do transporte 2-D de um pulso de contaminantes num aquífero em $t = 2d$ e $t = 6d$ para a malha com $\Delta x = 0.2m$ .	123
<b>Figura 5.25:</b>	Contornos de concentração obtidos com o método de ROE para o problema do transporte 2-D de um pulso de contaminantes num aquífero com $Pe = 50.0$ em $t = 2d$ para a malha com $\Delta x = 0.2m$ .	123
<b>Figura 5.26:</b>	Contornos de concentração obtidos com o método DNA para o problema do transporte 2-D de um pulso de contaminantes num aquífero com $Pe = 50.0$ em $t = 2d$ para a malha com $\Delta x = 0.2m$ .	124
<b>Figura 5.27:</b>	Contornos de concentração obtidos com o método de ROE para o problema do transporte 2-D de um pulso de contaminantes num aquífero com $Pe = 50.0$ em $t = 6d$ para a malha com $\Delta x = 0.2m$ .	124
<b>Figura 5.28:</b>	Contornos de concentração obtidos com o método DNA para o problema do transporte 2-D de um pulso de contaminantes num aquífero com $Pe = 50.0$ em $t = 6d$ para a malha com $\Delta x = 0.2m$ .	125
<b>Figura 5.29:</b>	Perfis de concentração para o problema do transporte de contaminantes 2-D com $r = 1.0$ , $r = 10.0$ e $r = 100.0$ em $t = 2d$ para a malha com $\Delta x = 0.2m$ .	126
<b>Figura 5.30:</b>	Contornos de concentração obtidos com o método MUSCL-TVD para o problema do transporte de contaminantes 2-D com $r = 1.0$ em $t = 2d$ .	126
<b>Figura 5.31:</b>	Contornos de concentração obtidos com o método MUSCL-TVD para o problema do transporte de contaminantes 2-D com $r = 10.0$ em $t = 2d$ .	127
<b>Figura 5.32:</b>	Contornos de concentração obtidos com o método MUSCL-TVD para o problema do transporte de contaminantes 2-D com $r = 100.0$ em $t = 2d$ .	127
<b>Figura 6.1:</b>	Comparação entre os perfis de saturação de água para o problema de 1-D de Buckley-Leverett numa malha com 8 subdivisões ao longo do eixo $x$ em $t = 0.2$ . Solução analítica e soluções aproximadas obtidas com diferentes métodos numéricos.	137
<b>Figura 6.2:</b>	Comparação entre os perfis de saturação de água para o problema de 1-D de Buckley-Leverett numa malha com 16 subdivisões ao longo do eixo $x$ em $t = 0.2$ . Solução analítica e soluções aproximadas obtidas	

	com diferentes métodos numéricos. ....	137
<b>Figura 6.3:</b>	Comparação entre os perfis de saturação de água para o problema de 1-D de Buckley-Leverett numa malha com 32 subdivisões ao longo do eixo $x$ em $t = 0.2$ . Solução analítica e soluções aproximadas obtidas com diferentes métodos numéricos. ....	138
<b>Figura 6.4:</b>	Comparação entre os perfis de saturação de água para o problema de 1-D de Buckley-Leverett numa malha com 64 subdivisões ao longo do eixo $x$ em $t = 0.2$ . Solução analítica e soluções aproximadas obtidas com diferentes métodos numéricos. ....	138
<b>Figura 6.5:</b>	Comparação entre os perfis de saturação de água para o problema de 1-D de Buckley-Leverett numa malha com 128 subdivisões ao longo do eixo $x$ em $t = 0.2$ . Solução analítica e soluções aproximadas obtidas com diferentes métodos numéricos. ....	139
<b>Figura 6.6:</b>	Comparação entre os perfis de saturação de água para o problema de 1-D de Buckley-Leverett numa malha com 256 subdivisões ao longo do eixo $x$ em $t = 0.2$ . Solução analítica e soluções aproximadas obtidas com diferentes métodos numéricos. ....	139
<b>Figura 6.7:</b>	Geometria para o problema $\frac{1}{4}$ de cinco poços bidimensional, com uma zona central de baixa permeabilidade. ....	140
<b>Figura 6.8:</b>	Malhas triangulares utilizadas na discretização espacial da geometria da Fig. (6.7): a) malha menos refinada com 308 nós; b) malha mais refinada com 1180 nós. ....	141
<b>Figura 6.9:</b>	Campo de pressões para o problema com uma zona central de baixa permeabilidade em $t = 200 d$ para a malha menos refinada com 308 nós. ....	141
<b>Figura 6.10:</b>	Campo de pressões para o problema com uma zona central de baixa permeabilidade em $t = 200 d$ para a malha mais refinada com 1180 nós. ....	142
<b>Figura 6.11:</b>	Campo de pressões para o problema com uma zona central de baixa permeabilidade em $t = 600 d$ para a malha menos refinada com 308 nós. ....	142
<b>Figura 6.12:</b>	Campo de pressões para o problema com uma zona central de baixa permeabilidade em $t = 600 d$ para a malha mais refinada com 1180 nós. ....	143
<b>Figura 6.13:</b>	Contornos de saturação para o problema com uma zona central de baixa permeabilidade em $t = 200 d$ : a) malha menos refinada; b) malha mais refinada. ....	144
<b>Figura 6.14:</b>	Contornos de saturação obtidos pelo método DNA, para o problema com uma zona central de baixa permeabilidade em $t = 400 d$ : a) malha menos refinada; b) malha mais refinada. ....	144

<b>Figura 6.15:</b>	Contornos de saturação obtidos pelo método DNA para o problema com uma zona central de baixa permeabilidade em $t = 600d$ : a) malha menos refinada; b) malha mais refinada. ....	145
<b>Figura 6.16:</b>	Contornos de saturação obtidos com diferentes métodos, para o problema com uma zona central de baixa permeabilidade em $t = 600d$ , com a malha menos refinada: a) método de ROE; b) método MUSCL-TVD. ....	145
<b>Figura 6.17:</b>	Perfis de saturação para o problema com uma zona central de baixa permeabilidade ao longo da diagonal que liga o poço injetor ao poço produtor, em $t = 600d$ para a malha mais refinada (solução obtida com o método DNA). ....	146
<b>Figura 6.18:</b>	Geometria para o problema do escoamento confinado através de uma região com duas barreiras perpendiculares. ....	147
<b>Figura 6.19:</b>	Malhas triangulares não-estruturadas utilizadas para o problema do escoamento confinado: a) malha menos refinada com 156 nós e 266 elementos; b) malha mais refinada com 1845 nós e 3528 elementos. ....	147
<b>Figura 6.20:</b>	Campo de pressões “extrudado” na direção Z, em $t = 28d$ para a malha menos refinada com 156 nós. ....	148
<b>Figura 6.21:</b>	Campos de saturações, em $t = 28d$ para a malha menos refinada com 156 nós e 266 elementos: a) método de ROE; b) método MUSCL-TVD. ....	148
<b>Figura 6.22:</b>	Contornos de saturação, obtidos com o método MUSCL-TVD, em $t = 48d$ : a) malha menos refinada com 156 nós e 266 elementos b) malha mais refinada com 1845 nós e 3528 elementos. ....	149
<b>Figura 6.23:</b>	Problema $\frac{1}{4}$ de cinco poços com razão entre viscosidades $M = 4.0$ : a) malha não-estruturada com $(16 \times 16)$ subdivisões; b) contornos de saturação, obtidos com o método MUSCL-TVD, em $t = 0.1$ VPI. ....	151
<b>Figura 6.24:</b>	Problema $\frac{1}{4}$ de cinco poços com razão entre viscosidades $M = 4.0$ : a) malha alinhada com $(16 \times 16)$ subdivisões; b) contornos de saturação obtidos com o método MUSCL-TVD, em $t = 0.1$ VPI. ....	151
<b>Figura 6.25:</b>	Problema $\frac{1}{4}$ de cinco poços com razão entre viscosidades $M = 4.0$ : a) malha transversal com $(16 \times 16)$ subdivisões; b) contornos de saturação obtidos com o método MUSCL-TVD, em $t = 0.1$ VPI. ....	152
<b>Figura 6.26:</b>	Óleo acumulado para o problema $\frac{1}{4}$ de cinco poços com razão entre viscosidades $M = 4.0$ , para uma malha com $(16 \times 16)$ subdivisões. ....	152
<b>Figura 6.27:</b>	Óleo recuperado para o problema $\frac{1}{4}$ de cinco poços com razão entre	

	viscosidades para uma malha com (16x16) subdivisões. ....	153
<b>Figura 6.28:</b>	Óleo acumulado para o problema de $\frac{1}{4}$ de cinco poços com razão entre viscosidades bastante adversa, $M = 40.0$ , para uma malha com (16x16) subdivisões. ....	154
<b>Figura 6.29:</b>	Óleo recuperado para o problema de $\frac{1}{4}$ de cinco poços com razão entre viscosidades bastante adversa, $M = 40.0$ , para uma malha com (16x16) subdivisões. ....	155
<b>Figura 6.30:</b>	Malha tetraédrica utilizada no exemplo de $\frac{1}{4}$ de cinco poços tridimensional. ....	156
<b>Figura 6.31:</b>	Contornos de pressão para $t = 0.01$ VPI no exemplo de $\frac{1}{4}$ de cinco poços tridimensional. ....	156
<b>Figura 6.32:</b>	Contornos de saturação para $t = 0.01$ VPI no exemplo de $\frac{1}{4}$ de cinco poços tridimensional. ....	157
<b>Figura 6.33:</b>	Contornos de saturação para $t = 0.1$ VPI no exemplo de $\frac{1}{4}$ de cinco poços tridimensional. ....	157
<b>Figura A.1:</b>	Múltiplos valores para a saturação (situação não-física). ....	164
<b>Figura A.2:</b>	Volume de controle ao longo de um choque. ....	165
<b>Figura B.1:</b>	Volume de controle construído pelo método das medianas para o nó 1, numa malha triangular genérica: observe que as superfícies de controle e as arestas da malha primal não são ortogonais entre si. ....	167

## LISTA DE TABELAS

<b>Tabela 4.1:</b>	Operações de busca e distribuição com estrutura de dados por aresta e por elementos (LÖHNER, 2001). .....	53
<b>Tabela 4.2:</b>	Operações de ponto flutuante com estrutura de dados por aresta e por elementos (LÖHNER, 2001). .....	53
<b>Tabela 4.3:</b>	Erros e taxas de convergência para o exemplo 2 (CRUMPTON et al., 1995). .....	76
<b>Tabela 4.4:</b>	Erros e taxas de convergência para o exemplo 2 pelo método “Cell-Node” (HYMAN et al., 1997). .....	76
<b>Tabela 4.5:</b>	Erros e taxas de convergência para o exemplo 2 Método “Cell-Surface” (HYMAN et al., 1997). .....	77
<b>Tabela 4.6:</b>	Erros e taxas de convergência para o exemplo 2 obtidas pelo MVFA. ....	78
<b>Tabela 4.7:</b>	Erros e taxas de convergência para o exemplo 3 com $\alpha=1.0$ (CRUMPTON et al., 1995). .....	80
<b>Tabela 4.8:</b>	Erros e taxas de convergência para o exemplo 3 com $\alpha=10.0$ (CRUMPTON et al., 1995). .....	80
<b>Tabela 4.9:</b>	Erros e taxas de convergência para o exemplo 3 com $\alpha=100.0$ (CRUMPTON et al., 1995). .....	81
<b>Tabela 4.10:</b>	Erros e taxas de convergência para o exemplo 3 com $\alpha=1000.0$ (CRUMPTON et al., 1995). .....	81
<b>Tabela 4.11:</b>	Erros e taxas de convergência para o exemplo 3 pelo método “Cell-Node” com $\alpha=1.0$ (HYMAN et al., 1997). .....	81
<b>Tabela 4.12:</b>	Erros e taxas de convergência para o exemplo 3 pelo método “Cell-Surface” com $\alpha=1.0$ (HYMAN et al., 1997). .....	81
<b>Tabela 4.13:</b>	Erros e taxas de convergência para o MVFA no exemplo 3, com $\alpha=1.0$ . ....	84
<b>Tabela 4.14:</b>	Erros e taxas de convergência para o MVFA no exemplo 3, com $\alpha=10.0$ . ....	85
<b>Tabela 4.15:</b>	Erros e taxas de convergência para o MVFA no exemplo 3, com $\alpha=100.0$ . ....	86
<b>Tabela 4.16:</b>	Erros e taxas de convergência para o MVFA no exemplo 3, com $\alpha=1000.0$ . ....	87

# 1. INTRODUÇÃO

## 1.1 Motivação e Considerações Gerais

O transporte multifásico e multicomponente de fluidos em meios porosos é um fenômeno que envolve um conjunto de processos físicos e químicos bastante complexos e de difícil modelagem física e matemática (EWING, 1983; REES, 2004). Dois temas de extremo interesse social e econômico e que envolvem a modelagem numérica e computacional de tais processos são: a simulação do transporte de poluentes em aquíferos (águas subterrâneas) e a simulação do fluxo de petróleo e água em reservatórios de petróleo.

A contaminação da água subterrânea por poluentes ocorre devido a diferentes fatores que vão desde poluição doméstica até a contaminação “natural” pelo próprio meio ambiente em que se encontra o aquífero (REES, 2004). A poluição doméstica pode ocorrer devido à contaminação dos aquíferos por fossas sanitárias, por vazamentos em tubulações de esgoto, etc. Os fatores ambientais decorrem do meio pelo qual a água subterrânea é transportada. Intrusão salina ou contaminação por rochas carbonáticas são problemas diretamente associados ao meio no qual se encontra o aquífero. A poluição industrial se dá de diferentes maneiras estando ligada à contaminação dos aquíferos por resíduos industriais não tratados ou inadequadamente tratados. Dentre estes resíduos, destacam-se os metais pesados que, além de serem de difícil dispersão, são extremamente tóxicos. Particularmente no Brasil, a agricultura tem-se tornado uma fonte importante de poluentes que podem contaminar os aquíferos. A água de irrigação ou mesmo a água da chuva pode transportar restos de fertilizantes, sais, herbicidas, etc.

Outra área de interesse, e que na verdade foi o elemento motivador do nosso trabalho, é a simulação numérica de fluxo em reservatórios de petróleo. Segundo EWING (1983), o principal objetivo da simulação numérica do transporte multifásico em meios porosos consiste “no correto entendimento dos fenômenos físicos e químicos associados ao escoamento fluido no interior dos mesmos de modo a se otimizar a recuperação de hidrocarbonetos”. Desta forma, o desenvolvimento da capacidade de prever o comportamento dos fluidos em reservatórios de menor ou maior complexidade estrutural é essencial para a aplicação racional do capital pelas empresas petrolíferas. Uma avaliação adequada do comportamento do reservatório quando submetido a diferentes estratégias de produção permite a economia de recursos e a maximização dos lucros (EWING, 1983; REES, 2004).

A recuperação de óleo em rochas reservatório envolve diferentes técnicas que vão desde a simples injeção de água até a utilização de polímeros que aumentam a viscosidade da água dificultando sua chegada antecipada a poços produtores, ou ainda a utilização de surfactantes que reduzem a tensão superficial do óleo de modo a facilitar sua remoção (EWING, 1983). De maneira geral, as pressões no interior das rochas reservatório são bastante altas, de tal forma que o simples fato de se perfurar um poço através da formação promove a saída espontânea do óleo residente (EWING, 1983). Este tipo de recuperação de óleo é conhecido como recuperação primária. A recuperação primária é responsável por baixas recuperações do óleo residente (média de aproximadamente 20%), até que as pressões no

interior do reservatório sejam insuficientes para posterior extração do óleo. A técnica de recuperação secundária envolve a injeção de água através de poços injetores, de forma que esta água sirva tanto para aumentar a pressão no interior dos reservatórios, como para deslocar mecanicamente o óleo na direção de poços produtores. Vale salientar que apesar da extrema importância da recuperação secundária, grandes quantidades de óleo permanecem no reservatório. Todas as técnicas que são utilizadas na tentativa de retirar o restante do óleo são conhecidas como técnicas de recuperação terciária (EWING, 1983; FANCHI, 2001).

Tanto no caso do estudo do transporte de contaminantes, quanto no caso da simulação de fluxo em reservatórios de petróleo, o analista numérico tem de enfrentar problemas associados à modelagem de geometrias complicadas decorrentes da presença de características geológicas complexas como, por exemplo, falhas selantes, camadas estratificadas inclinadas, canais, ou a existência de poços inclinados que são cada vez mais utilizados na indústria petrolífera. Estas falhas geológicas, comuns nas formações porosas, podem gerar grandes descontinuidades em propriedades físicas de interesse, tais como porosidade e permeabilidade. A permeabilidade, em particular, é uma propriedade que pode variar muitas ordens de grandeza num curto trecho do reservatório ou do aquífero (CRUMPTON et al., 1995; VERMA, 1996; GEIGER et al., 2004). Além disso, devido ao fato das camadas sedimentares poderem se depositar de diferentes maneiras proporcionando diferentes direções preferenciais para o fluxo de fluidos, os meios porosos devem ser tratados preferencialmente como sistemas anisotrópicos (Tensor Completo), (VERMA, 1996; VERMA e AZIZ, 1996; EDWARDS, 1998; EDWARDS, 2000). A existência de tais características na maioria das formações dificulta tanto a análise matemática quanto a análise numérica dos processos envolvidos no deslocamento de fluidos em tais meios (EWING, 1983; CHAVENT e JAFFRE, 1986).

De maneira geral, a modelagem do movimento de fluidos (água, óleo, gás, etc.) em meios porosos envolve a solução de um sistema de equações diferenciais parciais não-lineares mais ou menos acopladas (PEACEMAN, 1977; EWING, 1983; CHAVENT e JAFFRE, 1986; CHEN et al., 1994), cuja solução analítica só é conseguida nos casos mais simples, tanto do ponto de vista do problema físico em si, quanto das geometrias a serem tratadas. A solução aproximada destas equações a partir de métodos numéricos é praticamente imperativa quando algum resultado quantitativo deve ser obtido para se definir, por exemplo, a quantidade e a distribuição dos poços de injeção e produção num reservatório de petróleo.

Tanto na modelagem numérica do problema do transporte de contaminantes (NE-SHENG SUN, 1995; KOVARIK, 2000; ZHENG e BENNETT, 2002; REES, 2004), quanto na simulação numérica do fluxo em reservatórios de petróleo, o método numérico tradicionalmente utilizado é o método de diferenças finitas (PEACEMAN, 1977; AZIZ, 1993; ERTEKIN et al., 2001), devido, em grande parte, à sua simplicidade de entendimento, bem como à sua robustez e facilidade de implementação. Além do mais, este método está tradicionalmente associado às malhas (grids) estruturadas, o que o torna um método extremamente econômico do ponto de vista do consumo de memória e de utilização de CPU. Por outro lado, a associação destes métodos às malhas estruturadas também causa dificuldades importantes, particularmente no que diz respeito à modelagem das geometrias mais complexas (ex. falhas e poços inclinados) além de dificultar a utilização de procedimentos de adaptação automática de malhas os quais são naturalmente incorporados a métodos capazes

de lidar com malhas não-estruturadas, como o método dos elementos finitos (MEF), e o método dos volumes finitos (MVF), (ZIENKIEWICZ e MORGAN, 1983; PATANKAR, 1980; MALISKA, 2004).

Nas últimas décadas, muito se tem trabalhado no desenvolvimento de métodos que façam uso de malhas não-estruturadas, tais como o MEF e o MVF, devido ao fato desses métodos permitirem uma melhor modelagem de características físicas e geométricas complexas, além de incorporarem, naturalmente, técnicas de adaptação automática de malhas.

Além dos tradicionais métodos de diferenças finitas, elementos finitos e volumes finitos, recentemente, muitas variações e combinações das diferentes técnicas têm sido utilizadas, tanto no estudo do transporte de contaminantes em aquíferos, quanto na simulação de reservatórios de petróleo.

Uma formulação que já se tornou clássica na literatura envolve os chamados métodos dos elementos finitos mistos (MEFM), do inglês, “Mixed Finite Element Method” (EWING, 1983; CHAVENT e JAFFRE, 1986; WHEELER, 1988; CHEN et al., 1994). Tradicionalmente estes métodos são utilizados em conjunto com formulações segregadas de tal maneira que o campo de pressões é calculado simultaneamente com o campo de velocidades, e posteriormente este campo de velocidades é utilizado na equação de transporte (concentração ou saturação) a qual é resolvida através de algum esquema de captura de choque ou através de técnicas Lagrangianas, como por exemplo, “Front Tracking” ou “Level Set Method” (KARLSEN, 1999; KARLSEN, 2000). Apesar dos excelentes resultados numéricos obtidos pelo método dos elementos finitos mistos, esta formulação tem encontrado muita resistência na sua aplicação, tanto de parte da comunidade acadêmica quanto dos desenvolvedores de pacotes comerciais da indústria do petróleo para sua utilização, devido a: complicações matemáticas associadas à formulação, ao seu pouco apelo físico, e aos elevados custos computacionais associados ao cálculo simultâneo do campo de pressões e velocidades (EYMARD, 2002).

Variações do MEF também têm sido utilizadas com sucesso na literatura (MALTA et al., 1993; GARCIA, 1997; LOULA et al., 1999). Um método interessante e que foi originalmente desenvolvido para a solução de escoamentos miscíveis em meios porosos heterogêneos e anisotrópicos, envolve o uso direto do MEF de Galerkin para o cálculo do campo de pressões em conjunto com uma técnica de pós-processamento (global ou local) do campo de velocidades que objetiva reforçar a conservação da massa (GARCIA, 1997; LOULA et al., 1999). Nesta metodologia, a equação de saturação é resolvida usando um método SUPG (Streamline Upwind Petrov Galerkin).

Recentemente, combinações do método dos elementos finitos e do método dos volumes finitos também têm sido desenvolvidas na literatura (DURLOFSKY, 1993; GEIGER et al., 2003; GEIGER et al., 2004). Nestas formulações, o método dos elementos finitos mistos ou o MEF de Galerkin, associado a alguma técnica de recuperação de velocidade, são utilizados para resolver o problema pressão-velocidade, e a equação de saturação é resolvida por um método dos volumes finitos centrado no vértice (GEIGER et al., 2003; GEIGER et al., 2004) ou centrado na célula (DURLOFSKY, 1993).

Na formulação apresentada em GEIGER et al. (2003) e GEIGER et al. (2004), o campo de pressões é calculado usando o MEF de Galerkin com as velocidades calculadas nos centróides dos elementos da malha primal. A malha dual de volumes finitos é então construída levando-se em conta que as velocidades do fluido, as quais são descontínuas nas interfaces dos elementos, são contínuas através das superfícies de controle.

Nos últimos anos, formulações de volumes finitos que permitem resolver problemas em malhas estruturadas e não-estruturadas em meios heterogêneos, ortotrópicos e anisotrópicos têm recebido bastante atenção na literatura. Tais metodologias são particularmente interessantes, pois são, em geral, global e localmente conservativas (PATANKAR, 1980; MORTON, 1996; EYMARD et al., 1997; MALISKA, 2004).

Uma formulação recente e bem interessante envolve os chamados “Control Volume Function Approximation Methods” (Métodos de aproximação de funções nos volumes de controle), nos quais funções de diferentes tipos tais como “splines” ou polinomiais são utilizadas para aproximar pressões e velocidades de maneira independente, sendo que, diferentes famílias de funções podem ser utilizadas na aproximação de cada variável de maneira conservativa (LI et al., 2003a) usando malhas arbitrárias. Apesar de, em princípio, o método poder ser aplicado em meios porosos heterogêneos e anisotrópicos, os resultados disponíveis até o momento na literatura se restringem a escoamentos em meios porosos homogêneos e isotrópicos (CHEN et al., 2002; CHEN e HUAN, 2003; LI et al., 2003a; LI et al., 2003b; CHEN et al., 2004). Além disso, até onde sabemos nenhuma informação a respeito dos custos computacionais associados à formulação com os diferentes tipos de funções propostas é fornecida na literatura.

Desde meados dos anos noventa, particularmente na indústria do petróleo, uma família de formulações conservativas tomou a dianteira entre os diferentes métodos numéricos utilizados para a discretização das equações de fluxo em meios porosos. Estas metodologias são chamadas de aproximações de fluxo com múltiplos pontos ou “Multipoint Flux Approximations” (MPFA), (AAVATSMARK et al., 1998a, AAVATSMARK et al., 1998b; NORDBOTTEN E EIGESTAD, 2005), em contraste com as “Two Point Flux Approximation” (TPFA) (AAVATSMARK et al., 1998a) que eram, e ainda são comumente utilizados na indústria do petróleo, a despeito das limitações inerentes a este tipo de formulações (KLAUSEN e EIGSTAD, 2004), no que diz respeito à modelagem de geometrias complexas e na solução de problemas em que a malha computacional não está alinhada com as direções principais do campo de permeabilidade (anisotropia). Os métodos MPFA conservam massa localmente em malhas estruturadas e não-estruturadas em meios heterogêneos e anisotrópicos, generalizando, em alguns casos, o conceito de média harmônica. A idéia básica por trás destes métodos é dividir cada volume de controle em subcélulas e assumir uma variação linear da pressão dentro de cada subcélula. Restrições adicionais são impostas sobre os fluxos de modo a garantir continuidade entre as faces dos volumes de controle e entre subcélulas adjacentes.

De maneira independente, EDWARDS (1998), EDWARDS e ROGERS (1998) e EDWARDS (2000) desenvolveram as chamadas aproximações com fluxo contínuo ou “Flux Continuous Approximations” (FCA), que compartilham muitas das características e propriedades dos MPFA. Na verdade, alguns autores têm estudado ambas as metodologias de maneira unificada (KLAUSEN e EIGSTAD, 2004). Este tipo de formulação se aplica bem a malhas estruturadas e não-estruturadas de diversos tipos (PREVOST, 2001). Além disso, é possível construir métodos de fluxo contínuo que são centrados na célula (cell centered) ou centrados nos nós (node centered). Neste último caso, as propriedades físicas do meio poroso, tais como porosidade e permeabilidade podem estar associadas, tanto aos volumes de controle da malha dual (node based schemes), quanto aos elementos da malha primal (cell based schemes).

A despeito dos elevados custos computacionais associados aos métodos MPFA, cuja discretização espacial envolve de 9 a 27 pontos em malhas quadrilaterais (em 2-D) e hexaédricas (em 3-D) estruturadas, graças à sua robustez, que garante aproximações de segunda ordem mesmo em meios altamente heterogêneos e anisotrópicos, e devido ao seu forte apelo físico, que está relacionado à generalização de metodologias conservativas clássicas utilizadas pela indústria do petróleo (NORDBOTTEN e EIGESTAD, 2005), variações destas formulações têm sido implementadas com muito sucesso em diferentes simuladores comerciais e acadêmicos, tais como o ECLIPSE (CAO, 2002; NORDBOTTEN e EIGESTAD, 2005) e o “General Purpose Simulator” de Stanford (SCHLUMBERGER INFORMATION SYSTEMS, 2002; NORDBOTTEN e EIGESTAD, 2005).

## 1.2 Objetivos e Contribuições do Presente Trabalho

No presente trabalho, nós descrevemos em detalhes uma formulação do método dos volumes finitos cujos volumes de controle são centrados nos vértices da malha primal (ex. triângulos, tetraedros, quadriláteros ou hexaedros) utilizando uma estrutura de dados por aresta. Os volumes de controle são construídos pelo método das medianas (median dual control volumes) e os coeficientes geométricos da malha estão associados às arestas (arestas e faces em 3-D) e nós da malha.

O nosso objetivo principal foi o de desenvolver uma formulação conservativa de volumes finitos que nos permitisse resolver as equações diferenciais parciais não lineares resultantes da modelagem do transporte de contaminantes em meios porosos, bem como o deslocamento imiscível de óleo por água em reservatórios de petróleo. A discretização do termo elíptico se baseia nas idéias de Crumpton (CRUMPTON et al., 1997; SORENSEN, 2001). No presente trabalho nós estendemos o método para lidar com meios altamente heterogêneos e anisotrópicos comuns na modelagem de aquíferos e reservatórios de petróleo. No caso do escoamento bifásico de óleo e água, utilizamos a metodologia IMPES (Implicit Pressure Explicit Saturation), (PEACEMAN, 1977; CHEN, 2004) na qual a equação elíptica de pressão é resolvida através de uma formulação matricial implícita e a equação hiperbólica de saturações é resolvida explicitamente. Neste caso, as velocidades obtidas diretamente a partir do campo de pressões são utilizadas diretamente na equação de saturação, sem nenhum tipo de pós-processamento. Para a discretização dos termos advectivos, nós utilizamos duas metodologias diferentes. A primeira é baseada em técnicas de difusão numérica artificial (HIRSCH, 1990; PERAIRE et al., 1993; BARTH, 1994; LYRA, 1994, LYRA e MORGAN, 2002), as quais, até onde sabemos, são utilizadas pela primeira vez para a resolução de problemas que envolvem o fluxo em meios porosos usando malhas não-estruturadas. A segunda se baseia na generalização de técnicas TVD (Total Variation Diminishing) para malhas não-estruturadas a partir de uma estrutura de dados por aresta (HIRSCH, 1990; LYRA, 1994).

Soluções para problemas bidimensionais são obtidas com precisão espacial de segunda ordem utilizando apenas a estrutura de dados por arestas. Segundo LÖHNER (1994), LYRA (1994), LÖHNER (2001), REES (2004) e LEWIS e MALAN (2005), esta estrutura de dados oferece ganhos computacionais significativos tanto do ponto de vista da economia de memória quanto do uso de CPU. No caso tridimensional pode-se optar por manter-se a es-

estrutura de dados de aresta implicando em alguma perda de acurácia nos contornos, ou pode-se migrar para uma estrutura de dados em que os coeficientes geométricos relacionados aos fluxos no interior do domínio estão associados às arestas da malha, enquanto que os fluxos relacionados aos termos de contorno estão associados às faces dos elementos da malha, mantendo-se, neste caso, a aproximação espacial de segunda ordem.

Dois programas acadêmicos foram desenvolvidos. O primeiro, escrito nas linguagens Fortran 77/90 foi utilizado para a solução explícita das equações de transporte de contaminantes em meios porosos. O segundo foi construído no ambiente do MATLAB, fazendo uso de uma série de vantagens do mesmo, principalmente na utilização de suas estruturas de dados e na realização de operações algébricas vetorizadas (ex. multiplicação de matrizes e vetores), além da disponibilidade de ferramentas simples e úteis de visualização científica e de depuração de códigos.

Vale ainda mencionar que, em paralelo ao trabalho aqui desenvolvido, participamos do desenvolvimento de ferramentas computacionais para a solução do problema de biotransferência de calor. Em particular, a formulação que desenvolvemos ao longo do presente trabalho para a solução de problemas elípticos foi utilizada por GUIMARÃES (2003) para resolver problemas bidimensionais envolvendo o tratamento de tumores no duodeno através de hipertermia a laser e, em SILVA (2004), esta formulação foi estendida para lidar com problemas axissimétricos, sendo utilizada na solução do problema da distribuição de temperatura em olhos humanos com implantes retiniais (sub e epirretiniais).

### 1.3 Organização Geral da Tese

O presente texto foi dividido em sete capítulos mais a bibliografia e uma lista de três apêndices.

No presente capítulo, fazemos uma introdução em que contextualizamos o nosso trabalho, apresentamos brevemente algumas das diferentes formulações numéricas para o tratamento dos problemas de simulação de fluxo em meios porosos, e indicamos, de maneira sucinta, os principais objetivos e as principais contribuições de nossa tese.

No capítulo dois, apresentamos a formulação matemática para os dois problemas físicos de interesse. Primeiramente, apresentamos as equações que descrevem o fluxo bifásico de água e óleo em meios porosos, em seguida, mostramos as equações de movimento de um elemento traçador num escoamento monofásico.

No capítulo três, introduzimos de maneira muito breve o MVF, colocando-o no contexto dos métodos de resíduos ponderados (MRP).

No capítulo quatro, o método dos volumes finitos por aresta (MVFA) em malhas não-estruturadas é descrito em detalhes, incluindo a discretização conservativa de termos elípticos em meios heterogêneos e anisotrópicos. Com o objetivo de avaliarmos a acurácia desta nova formulação e para ilustrarmos a aplicação desta metodologia na discretização de problemas com coeficientes descontínuos, resolvemos alguns problemas modelos (benchmarks) encontrados na literatura. Comparamos ainda a metodologia proposta para lidar com meios cujos coeficientes são descontínuos, com outra encontrada na literatura. Ao final, apresentamos duas formulações de alta ordem que podem ser aplicadas na discretização dos termos advectivos existentes nas equações de fluxo em meios porosos.

No capítulo cinco, apresentamos a forma discreta da equação de transporte de contaminantes em aquíferos. Alguns exemplos que envolvem o transporte de um elemento traçador num meio poroso homogêneo e isotrópico são resolvidos. Exemplos dispersivos dominantes, advectivos dominantes e com termos de fonte são apresentados com o objetivo de validar a formulação proposta.

No capítulo seis, descrevemos a formulação discreta das equações de transporte para o escoamento bifásico de água e óleo em meios porosos heterogêneos e anisotrópicos a partir do procedimento IMPES. A equação de pressão é descrita utilizando uma formulação matricial implícita a partir de uma estrutura de dados por arestas. A equação de saturação é discretizada utilizando as formulações de alta ordem apresentadas no capítulo quatro. Ao final deste capítulo, alguns problemas são resolvidos para validar a metodologia apresentada.

No capítulo sete, apresentamos as conclusões, onde as contribuições do nosso trabalho são sumarizadas e onde indicamos as direções para pesquisas futuras.

Finalmente, apresentamos a bibliografia que utilizamos durante o desenvolvimento do presente trabalho, seguida de um conjunto de apêndices onde são descritos e detalhados alguns elementos que complementam as informações apresentadas ao longo do texto.

## 2. EQUAÇÕES GOVERNANTES

### 2.1 Introdução

Neste capítulo, apresentaremos as equações fundamentais que regem dois importantes problemas relacionados ao escoamento de fluidos em meios porosos. O primeiro problema a ser abordado é o escoamento bifásico incompressível de dois fluidos imiscíveis, óleo e água, no interior de rochas reservatório. O segundo problema diz respeito ao escoamento miscível de contaminantes em aquíferos. Para cada um dos problemas serão mostradas formulações mais gerais, que em seguida serão simplificadas para equações modelo que possuem soluções de referência analíticas ou numéricas encontradas na literatura.

As equações a serem abordadas no presente trabalho podem ser classificadas como parabólicas, elípticas ou hiperbólicas (TANNEHILL et al., 1997; FORTUNA, 2000). Esta classificação, de cunho matemático, é feita de acordo com o conceito de linhas (em 2-D) ou superfícies (em 3-D) características, sendo relativamente simples determinar a qual classe pertence uma equação a partir do estudo de seus coeficientes. Ao longo das linhas ou superfícies características, algumas propriedades físicas permanecem constantes, de tal forma que suas respectivas derivadas são descontínuas. Estas linhas (ou superfícies) são relacionadas às direções ao longo das quais a informação física de interesse é transmitida.

Por outro lado, se levarmos em consideração os fenômenos físicos em estudo, as equações tratadas aqui podem ser classificadas como de difusão, advecção ou advecção-difusão (CRANK, 1973; FORTUNA, 2000). As equações de difusão estão associadas a diversos problemas físicos em que efeitos dissipativos são importantes, tais como, problemas de condução de calor em sólidos, torção em barras, determinação do campo de pressões em escoamentos mono ou multifásicos, dispersão de solutos numa fase líquida, etc. As equações de advecção ou convecção, onde reservamos este último termo para o transporte advectivo devido à diferença de temperatura, estão associadas a problemas de transporte de ondas com pouco ou nenhum amortecimento, característicos da dinâmica dos gases, da geofísica, da ótica, etc. Finalmente, as equações de advecção-difusão envolvem o transporte de informação com amortecimento estando presentes no estudo de uma ampla gama de problemas que vão desde problemas da biomecânica computacional ao transporte de contaminantes em meios porosos.

De maneira geral, podemos associar respectivamente, as equações elípticas e parabólicas a problemas de difusão ou dispersão de uma dada propriedade física, no regime permanente e transiente, enquanto que as equações hiperbólicas podem ser associadas a problemas de convecção ou advecção. Já as equações de advecção-difusão ou advecção-dispersão apresentam caráter parabólico ou hiperbólico dependendo da relação entre a velocidade de transporte e os mecanismos físicos de dissipação da informação transportada. Maiores detalhes sobre a classificação das EDPs podem ser encontrados nos trabalhos de HIRSCH (1988), LYRA (1994), TANNEHILL et al. (1997) e FORTUNA (2000).

É importante frisar que a classificação e o conseqüente conhecimento das propriedades físicas e matemáticas dos diferentes tipos de equação tratados no presente trabalho é extre-

mamente importante para a construção de esquemas numéricos que permitam sua resolução de maneira eficiente e acurada.

## 2.2 Escoamento Bifásico e Imiscível em Meios Porosos

### 2.2.1 Conceitos Fundamentais

Nesta seção, nos concentraremos nas equações que modelam o escoamento bifásico e incompressível de água e óleo em meios porosos rígidos. Em linhas gerais, dois tipos fundamentais de formulações podem ser propostas. Na mais tradicional, a Lei de Darcy é substituída diretamente na equação de conservação de massa para cada fase produzindo um conjunto de EDPs parabólicas que são, em geral, resolvidas simultaneamente. Este tipo de formulação é a mais utilizada na indústria do petróleo (ERTEKIN et al., 2001; AZIZ et al., 1993), e nos programas comerciais e acadêmicos desenvolvidos para o estudo de escoamentos de subsuperfície associados a problemas ambientais (NE-ZHENG SUN, 1995; HELMIG, 1997; KOVARIK, 2000). Neste tipo de formulação, diferentes alternativas podem ser utilizadas na escolha das variáveis primitivas do problema. Em função da escolha destas variáveis, podemos classificar estas formulações como (HELMIG, 1997):

1. *Pressões das Fases*: Nesta formulação as variáveis fundamentais são as pressões das fases;
2. *Pressão-Saturação*: As variáveis fundamentais são a pressão de uma fase, e as saturações das outras fases (no caso de termos mais de duas fases);
3. *Saturação das Fases*: As saturações das fases são tomadas como variáveis fundamentais.

Numa outra abordagem, desenvolvida inicialmente por PEACEMAN (1977), e utilizada por diversos pesquisadores (EWING, 1983; CHAVENT, 1986; EDWARDS, 2000; GEIGER et al., 2004), a equação de conservação da massa e a lei de Darcy são manipuladas de modo a produzir um sistema de equações segregado em que, para o caso bifásico (óleo-água), uma equação parabólica quase elíptica representa o campo de pressões fluido, e uma equação de advecção-difusão, não-linear de caráter parabólico quase hiperbólico representa o campo de saturações de uma das fases. O acoplamento entre estas equações é feito através de um termo de velocidade total ou de fluxo total dependendo de como são escritas estas equações. Recentemente, CHEN e EWING, (1997), estenderam esta formulação para o caso mais geral de escoamentos multifásicos e multicomponentes.

No presente trabalho, apresentaremos em detalhes a formulação segregada proposta inicialmente por PEACEMAN (1977) para o escoamento imiscível de óleo e água em reservatórios de petróleo. Apesar da dedução destas equações ser bem mais trabalhosa que a formulação acoplada utilizada normalmente nos “softwares” comerciais (ERTEKIN et al., 2001; AZIZ et al., 1993), diversos pesquisadores, dentre os quais podemos citar EWING (1983), CHAVENT (1986), DURLOFSKY (1993), CHEN e EWING (1997) e GEIGER et al. (2004), advogam que a formulação segregada permite que métodos numéricos mais efi-

cientos e capazes de explorar as características matemáticas bem diferentes das equações de pressão e saturação, sejam utilizados para a solução do sistema de equações resultantes, fornecendo, em princípio, resultados mais acurados a um custo computacional menor.

Com o objetivo de obtermos estas equações para o nosso caso de interesse, as principais hipóteses simplificadoras adotadas são (PEACEMAN, 1977):

1. O meio poroso está totalmente saturado pelas fases líquidas;
2. O fluido e a rocha são incompressíveis;
3. Escoamento imiscível;
4. Escoamento isotérmico;
5. Os fluidos obedecem à lei de Darcy generalizada (HELMIG, 1997);

A hipótese 5 é digna de um comentário adicional. A lei de Darcy, obtida experimentalmente pela primeira vez por Henry Darcy em 1856, ao investigar o escoamento de água em filtros de areia verticais (BEAR, 1972; WANG e ANDERSON, 1983), pode ser vista como uma lei experimental, podendo também ser deduzida a partir das equações de Navier-Stokes a partir de diferentes considerações físicas (BEAR, 1972; HELMIG, 1997). Em ambos os casos, devemos ter em mente que o domínio de validade da Lei de Darcy se restringe a escoamentos laminares em meios porosos rígidos (BEAR, 1972; HELMIG, 1997). Discussões sobre os limites de validade desta “lei”, bem como formulações alternativas podem ser encontradas em BEAR (1972).

Tendo em vista as considerações acima, começaremos nossa exposição escrevendo a Lei de Darcy generalizada para uma fase  $i$ , como (BEAR, 1972; HELMIG, 1997; KOVARIK, 2000):

$$\bar{v}_i = -\underline{K} \lambda_i (\nabla p_i - \rho_i g \nabla Z). \quad (2.1)$$

Na Eq. (2.1),  $v_i$  é a velocidade da fase  $i$ ,  $\underline{K}$  é o tensor de permeabilidade absoluta do meio, representando uma propriedade apenas da rocha,  $p_i$  é a pressão da fase  $i$ ,  $\rho_i$  é a massa específica ou a “densidade” da fase  $i$ ,  $g$  é o módulo da aceleração gravitacional,  $Z$  é o componente do vetor deslocamento orientado para baixo e  $\lambda_i = k_{ri}/\mu_i$  é a mobilidade da fase  $i$ , onde  $k_{ri}$  e  $\mu_i$  são a permeabilidade relativa e a viscosidade da fase  $i$ , respectivamente. O tensor de segunda ordem de permeabilidade absoluta do meio poroso  $\underline{K}$  é definido em coordenadas cartesianas como:

$$\underline{K} = \begin{pmatrix} K_{xx} & K_{xy} & K_{xz} \\ K_{yx} & K_{yy} & K_{yz} \\ K_{zx} & K_{zy} & K_{zz} \end{pmatrix}. \quad (2.2)$$

Por sua vez, a equação de conservação da massa para cada uma das fases, pode ser escrita como (BEAR 1972; HELMIG, 1997; KOVARIK, 2000):

$$-\nabla \cdot (\rho_i \bar{v}_i) + q_i = \frac{\partial (\phi \rho_i S_i)}{\partial t}. \quad (2.3)$$

Na Equação (2.3),  $\phi$  é a porosidade, *i.e.* a fração da rocha que pode ser ocupada por fluidos,  $q_i$  denota termos fonte ou sumidouros (*i.e.*, poços), e  $S_i$  é a saturação da fase  $i$ , que representa a fração do volume poroso ocupado por esta fase. Devido a esta última definição, podemos escrever a equação constitutiva ou de restrição das saturações, como:

$$\sum_{i=o,w} S_i = 1 \text{ ou ainda } S_o + S_w = 1, \quad (2.4)$$

onde  $o, w$  representam, respectivamente, óleo e água.

Finalmente, definimos ainda a pressão capilar, como a diferença entre as pressões das fases, ou seja:

$$p_c = p_o - p_w. \quad (2.5)$$

A pressão capilar representa uma descontinuidade da pressão associada ao contato entre dois fluidos imiscíveis nos interstícios do meio poroso (BEAR, 1972; HELMIG, 1997). Esta pressão é um parâmetro obtido experimentalmente que depende fortemente da saturação da água, ou seja,  $p_c = p_c(S_w)$ . Dois modelos empíricos clássicos utilizados para relacionar pressão capilar e saturação da água são o modelo de Brooks e Corey, Eq. (2.6), e o modelo de Van Genuchten, Eq. (2.7).

$$p_c(S_w) = p_d \left( \frac{S_w - S_{wr}}{1 - S_{wr}} \right)^{-\frac{1}{\omega}}, \quad (2.6)$$

$$p_c(S_w) = \frac{1}{\alpha} \left[ \left( \frac{S_w - S_{wr}}{1 - S_{wr}} \right)^{\frac{1}{m}} - 1 \right]^{\frac{1}{n}}, \quad (2.7)$$

onde  $S_{wr}$  é a saturação residual da água. Maiores detalhes sobre ambos os modelos, e particularmente sobre os coeficientes empíricos  $p_d$ ,  $\omega$ ,  $\alpha$ ,  $m$  e  $n$ , podem ser encontrados em HELMIG (1997).

## 2.2.2 Equação de Pressão

A idéia básica na obtenção da equação da pressão é eliminarmos as derivadas da saturação de modo a resolvermos uma equação diferencial parcial, apenas na variável pressão.

A partir da Eq (2.3), escrita para cada fase  $i = o, w$ , expandindo-se as derivadas temporais, temos:

$$-\nabla \cdot (\rho_o \vec{v}_o) + q_o = \rho_o S_o \frac{\partial \phi}{\partial t} + \phi \rho_o \frac{\partial S_o}{\partial t}, \quad (2.8)$$

$$-\nabla \cdot (\rho_w \vec{v}_w) + q_w = \rho_w S_w \frac{\partial \phi}{\partial t} + \phi \rho_w \frac{\partial S_w}{\partial t}. \quad (2.9)$$

Dividindo a Eq. (2.8) por  $\rho_o$ , e a Eq. (2.9) por  $\rho_w$ , e utilizando o fato de assumirmos que os fluidos e a rocha são incompressíveis, podemos escrever :

$$-\nabla \cdot \vec{v}_o + Q_o = \phi \frac{\partial S_o}{\partial t}, \quad (2.10)$$

$$-\nabla \cdot \vec{v}_w + Q_w = \phi \frac{\partial S_w}{\partial t}, \quad (2.11)$$

onde,  $Q_i = q_i / \rho_i$  é a vazão volumétrica específica da fase  $i$ . Somando as Eqs. (2.10) e (2.11), obtemos:

$$-\nabla \cdot (\vec{v}_o + \vec{v}_w) + (Q_o + Q_w) = \phi \left( \frac{\partial S_o}{\partial t} + \frac{\partial S_w}{\partial t} \right), \quad (2.12)$$

ou ainda:

$$-\nabla \cdot (\vec{v}_o + \vec{v}_w) + (Q_o + Q_w) = \phi \frac{\partial (S_o + S_w)}{\partial t}. \quad (2.13)$$

Usando a Eq. (2.4), e rearranjando os termos, obtemos finalmente a equação de pressão:

$$\nabla \cdot \vec{v} = Q. \quad (2.14)$$

Na Eq. (2.14),  $\vec{v} = \vec{v}_o + \vec{v}_w$  é a velocidade total do fluido e  $Q = Q_o + Q_w$  é a vazão volumétrica específica total.

Para observarmos mais claramente algumas características da equação de pressão, com o auxílio da lei de Darcy, Eq. (2.1), vamos reescrever a Eq. (2.14), como:

$$\nabla \cdot \left( -K \lambda_o (\nabla p_o - \rho_o g \nabla Z) - K \lambda_w (\nabla p_w - \rho_w g \nabla Z) \right) = Q. \quad (2.15)$$

Definindo ainda a pressão média das fases como:

$$p_o = p = \frac{p_o + p_w}{2}. \quad (2.16)$$

Da equação anterior e da definição da pressão capilar, Eq. (2.5) resulta ainda:

$$p_o = p + \frac{P_c}{2} \text{ e } p_w = p - \frac{P_c}{2}. \quad (2.17)$$

Reescrevendo a Eq. (2.15) em função da pressão média das fases e da pressão capilar, temos:

$$\nabla \cdot \left( -\underline{K} \left( \lambda_o \nabla \left( p + \frac{P_c}{2} \right) + \lambda_w \nabla \left( p - \frac{P_c}{2} \right) - (\lambda_o \rho_o + \lambda_w \rho_w) g \nabla Z \right) \right) = Q. \quad (2.18)$$

Rearranjando os termos podemos escrever:

$$\nabla \cdot \left( -\underline{K} \left( (\lambda_o + \lambda_w) \nabla p + \frac{(\lambda_o - \lambda_w)}{2} \nabla p_c - (\lambda_o \rho_o + \lambda_w \rho_w) g \nabla Z \right) \right) = Q. \quad (2.19)$$

Como se pode facilmente observar, a equação de pressão, no caso incompressível, é uma equação elíptica ou de difusão (EWING, 1983). Devido às heterogeneidades ao longo de reservatórios típicos, o coeficiente  $\underline{K}$  é, em geral, variável e não-isotrópico (EWING, 1983; VERMA, 1996; VERMA e AZIZ, 1996; EDWARDS 2000). Portanto, a equação de pressão, no caso incompressível, é uma equação elíptica com coeficientes descontínuos.

A partir da Eq. (2.19), podemos escrever a velocidade total como:

$$\vec{v} = -\underline{K} \left( (\lambda_o + \lambda_w) \nabla p + \frac{(\lambda_o - \lambda_w)}{2} \nabla p_c - (\lambda_o \rho_o + \lambda_w \rho_w) g \nabla Z \right), \quad (2.20)$$

ou ainda:

$$\vec{v} = -(\lambda_o + \lambda_w) \underline{K} \nabla p - \frac{(\lambda_o - \lambda_w)}{2} \underline{K} \nabla p_c + (\lambda_o \rho_o + \lambda_w \rho_w) g \underline{K} \nabla Z. \quad (2.21)$$

Na Equação (2.21) podemos observar os três termos que compõem a velocidade total do escoamento. O primeiro termo está relacionado ao gradiente da pressão média dos fluidos. O segundo termo está ligado ao gradiente da pressão capilar, e o terceiro termo diz respeito à força gravitacional.

### 2.2.3 Equação de Saturação

Nesta seção determinaremos a equação de saturação para a fase água. A escolha da fase foi feita de forma totalmente arbitrária seguindo a prática usual da literatura (PEACEMAN, 1977; EWING, 1983; GEIGER et al., 2004). Para determinarmos a equação de saturação, inicialmente derivamos a Eq. (2.5), escrevendo o gradiente da pressão capilar como:

$$\nabla p_c = \nabla p_o - \nabla p_w. \quad (2.22)$$

Utilizando a Eq. (2.1), as velocidades das fases água e óleo podem ser escritas, respectivamente, como:

$$\vec{v}_w = -K \lambda_w (\nabla p_w - \rho_w g \nabla Z), \quad (2.23)$$

$$\vec{v}_o = -K \lambda_o (\nabla p_o - \rho_o g \nabla Z). \quad (2.24)$$

Multiplicando a Eq. (2.23) por  $\lambda_o$  e a Eq. (2.24) por  $\lambda_w$  obtemos:

$$\lambda_o \vec{v}_w = -K \lambda_w \lambda_o (\nabla p_w - \rho_w g \nabla Z), \quad (2.25)$$

$$\lambda_w \vec{v}_o = -K \lambda_o \lambda_w (\nabla p_o - \rho_o g \nabla Z). \quad (2.26)$$

Subtraindo a Eq. (2.25) da Eq. (2.26), chegamos a:

$$\lambda_w \vec{v}_o - \lambda_o \vec{v}_w = -K \lambda_o \lambda_w (\nabla p_o - \rho_o g \nabla Z - \nabla p_w + \rho_w g \nabla Z). \quad (2.27)$$

Multiplicando a Eq. (2.27) por (-1), e usando a Eq. (2.22), temos:

$$-\lambda_w \vec{v}_o + \lambda_o \vec{v}_w = +K \lambda_o \lambda_w \nabla p_c - K \lambda_o \lambda_w (\rho_o - \rho_w) g \nabla Z. \quad (2.28)$$

Rearranjando os termos e usando ainda que  $\vec{v}_o = \vec{v} - \vec{v}_w$ , e que  $\lambda = \lambda_w + \lambda_o$  podemos escrever:

$$\lambda \vec{v}_w = \lambda_w \vec{v} + K \lambda_o \lambda_w (\nabla p_c + (\rho_w - \rho_o) g \nabla Z). \quad (2.29)$$

Definindo ainda o fluxo fracional de uma fase  $i$  como  $f_i = \lambda_i / \lambda$ , e para simplificar a notação definindo  $h_w = -\frac{(\lambda_o \lambda_w)}{\lambda} \frac{dp_c}{dS_w}$ , temos:

$$\vec{v}_w = f_w \vec{v} - K h_w \nabla S_w + K \lambda_o f_w (\rho_w - \rho_o) g \nabla Z. \quad (2.30)$$

Desta forma conseguimos escrever a velocidade da fase água,  $\vec{v}_w$  em função da velocidade total  $\vec{v}$ . Substituindo a equação anterior na Eq. (2.3), com  $i = w$ , e rearranjando os termos:

$$\frac{\partial(\phi\rho_w S_w)}{\partial t} = -\nabla \cdot (\rho_w (f_w \vec{v} - \tilde{K} h_w \nabla S_w + \tilde{K} \lambda_o f_w (\rho_w - \rho_o) g \nabla Z)) + q_w. \quad (2.31)$$

Utilizando as hipóteses de que o meio poroso é rígido e que os fluidos são incompressíveis podemos ainda escrever:

$$\phi\rho_w \frac{\partial(S_w)}{\partial t} = -\rho_w \nabla \cdot ((f_w \vec{v} - \tilde{K} h_w \nabla S_w + \tilde{K} \lambda_o f_w (\rho_w - \rho_o) g \nabla Z)) + q_w. \quad (2.32)$$

Finalmente, dividindo por  $\rho_w$  e assumindo que  $Q_w = q_w / \rho_w$  chegamos a:

$$\phi \frac{\partial S_w}{\partial t} = -\nabla \cdot (f_w \vec{v} - \tilde{K} h_w \nabla S_w + \tilde{K} \lambda_o f_w (\rho_w - \rho_o) g \nabla Z) + Q_w. \quad (2.33)$$

A Eq. (2.33) é conhecida como a equação de saturação da fase água num meio poroso rígido. Esta equação é similar a uma equação de advecção-difusão-reação não-linear. Em muitos casos, como por exemplo, na vizinhança de poços de injeção ou em partes do reservatório aonde o fluido de injeção ainda não chegou, ou de maneira geral, onde a velocidade total for alta, esta equação assume um caráter fortemente advectivo, compartilhando muitas das propriedades das equações hiperbólicas de primeira ordem (EWING, 1983; CHAVENT e JAFFRE, 1986).

## 2.2.4 Condições Iniciais e de Contorno

Para que possamos tornar o problema representado pelas equações de pressão e saturação, completamente determinado é necessário que utilizemos um conjunto apropriado de condições iniciais e de contorno. Dependendo das características geológicas das vizinhanças do reservatório, bem como, das condições de produção impostas a ele, várias configurações podem ser obtidas. Uma análise detalhada das possíveis condições iniciais e de contorno que podem ser utilizadas garantindo a compatibilidade entre as equações é dada em CHAVENT e JAFRE (1986).

A seguir apresentaremos um conjunto de condições iniciais e de contorno associadas a um reservatório com poços injetores ( $I$ ) e produtores ( $P$ ). Usualmente estes poços são tratados como “fronteiras internas” dos reservatórios e as condições aplicadas a estes poços são chamadas de condições de “contorno internas” (CHAVENT e JAFFRE, 1986; AZIZ, 1993; ERTEKIN et al., 2001).

A Figura (2.1) mostra esquematicamente o contorno  $\Gamma = \Gamma_I \cup \Gamma_P \cup \Gamma_D \cup \Gamma_N$  do domínio  $\Omega$ , onde:

- $\Gamma_I$  = Poços Injetores;
- $\Gamma_P$  = Poços Produtores;
- $\Gamma_D$  = Fronteiras Externas com Pressão Prescrita;
- $\Gamma_N$  = Fronteiras Externas com Fluxo Prescrito.

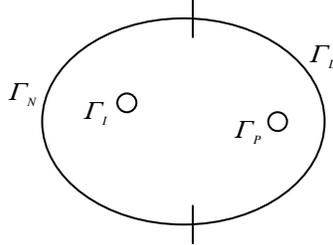


Figura 2.1 – Modelo esquemático de um reservatório e suas respectivas fronteiras.

Assumindo um reservatório isolado (*i.e.*  $\Gamma_D = \emptyset$ ) no qual a entrada e a saída de massa se dá apenas através de poços injetores e produtores, e considerando a equação de pressão, podemos escrever:

$$\begin{aligned}
 \vec{v} \cdot \vec{n} &= \bar{Q}_I \quad \text{ou} \quad p(\vec{x}, t) = \bar{p} \quad \text{em} \quad \Gamma_I X [0, T], \\
 \vec{v} \cdot \vec{n} &= \bar{Q}_P \quad \text{ou} \quad p(\vec{x}, t) = \bar{p} \quad \text{em} \quad \Gamma_P X [0, T], \\
 \vec{v} \cdot \vec{n} &= 0 \quad \text{em} \quad \Gamma_N X [0, T],
 \end{aligned} \tag{2.34}$$

onde  $\vec{n}$  é o vetor área normal e  $Q_I$  e  $Q_P$  são, respectivamente, as vazões volumétricas nos poços injetores e produtores.

Para o mesmo reservatório, as condições de contorno para a equação de saturação são:

$$\begin{aligned}
 S_w(\vec{x}, t) &= \bar{S}_w \quad \text{em} \quad \Gamma_I X [0, T], \\
 \underline{K}h_w \nabla S_w \cdot \vec{n} &= 0 \quad \text{em} \quad \Gamma_N X [0, T].
 \end{aligned} \tag{2.35}$$

As condições iniciais do problema podem ser escritas como:

$$S_w(\vec{x}, 0) = \bar{S}_w^0 \quad \text{em} \quad \Omega. \tag{2.36}$$

## 2.3 Modelos Simplificados

### 2.3.1 Equação de Buckley-Leverett

A equação de Buckley-Leverett foi originalmente obtida por BUCKLEY e LEVERETT (1942), num trabalho clássico e que se tornou referência para o estudo de escoamen-

tos bifásicos em meios porosos. Esta equação representa o deslocamento imiscível e unidimensional de óleo por água num meio poroso rígido, desprezando-se os termos de gravidade e de capilaridade.

A partir da equação de saturação, Eq. (2.33), considerando o deslocamento unidimensional de óleo por água e desprezando os termos de gravidade, de capilaridade e de fonte, podemos escrever:

$$\phi \frac{\partial S_w}{\partial t} + \frac{\partial(\bar{v}f_w)}{\partial x} = 0 \quad \text{ou} \quad \phi \frac{\partial S_w}{\partial t} + \frac{\partial f}{\partial x} = 0, \quad (2.37)$$

onde a função de fluxo  $f = \bar{v}f_w$ .

Reescrevendo a Eq. (2.37), assumindo-se que  $\bar{v} = cte$ , e usando a regra da cadeia para o segundo termo da mesma, chegamos a:

$$\phi \frac{\partial S_w}{\partial t} + \bar{v} \frac{\partial f_w}{\partial S_w} \frac{\partial S_w}{\partial x} = 0. \quad (2.38)$$

A equação acima, conhecida como “Equação de Buckley-Leverett” (BUCKLEY e LEVERETT, 1942), é uma equação hiperbólica de transporte não-linear, onde o coeficiente multiplicando o termo  $\partial S_w / \partial x$  é uma função não-linear de  $S_w$ , com propriedades particularmente interessantes e que permitem inferir uma série de propriedades de escoamentos mais complexos sendo amplamente estudada na literatura (HELMIG, 1997; FANCHI, 2001). Tendo em vista a importância desta equação para a compreensão do escoamento de fluidos imiscíveis em meios porosos, apresentaremos, no apêndice A, uma breve análise de suas propriedades de transporte. Esta análise se baseia no estudo das suas linhas características de maneira análoga ao tratamento comumente dado à equação de transporte linear e não-linear no contexto de aerodinâmica (HIRSCH, 1988; LYRA, 1994; HELMIG, 1997; TANNEHILL et al., 1997). A Figura (2.2) apresenta a frente de saturação nos instantes  $t = 0.2$  e  $t = 0.5$  para o problema do deslocamento imiscível unidimensional de óleo por água. A saturação em  $x = 0$  é  $1 - S_{or}$  e as saturações residuais de óleo e de água são  $S_{or} = 0.1$  e  $S_{wr} = 0.1$ , respectivamente.

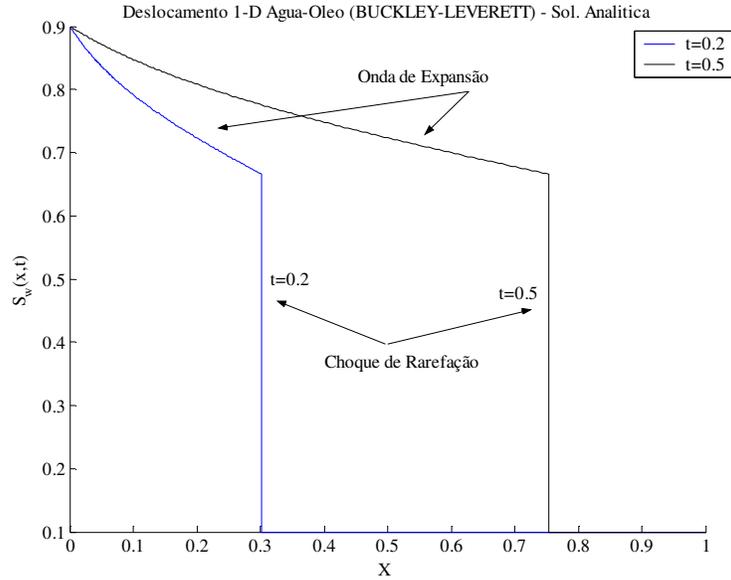


Figura 2.2 – Solução analítica para o problema de Buckley-Leverett em dois instantes  $t = 0.2$  e  $t = 0.5$ , respectivamente.

### 2.3.2 Escoamento Monofásico em Coordenadas Cartesianas

Ao considerarmos o escoamento monofásico não precisamos nos preocupar com a saturação da única fase  $i$ , pois esta é  $S_i = 1$ . Neste caso nos preocuparemos apenas com o campo de pressões e o correspondente campo de velocidades do fluido.

Substituindo a lei de Darcy, Eq. (2.1), na equação de conservação da massa, Eq. (2.3), diretamente e desprezando efeitos gravitacionais, temos:

$$-\nabla \cdot \left( -\rho \frac{K}{\mu} \nabla p \right) + q = \rho S \frac{\partial \phi}{\partial t} + \phi \rho \frac{\partial S}{\partial t} + \phi S \frac{\partial \rho}{\partial t}. \quad (2.39)$$

Considerando o escoamento monofásico de um líquido incompressível (ex. óleo ou água) num meio poroso rígido, homogêneo e isotrópico, podemos escrever:

$$\rho \frac{K}{\mu} \nabla^2 p + q = 0, \quad (2.40)$$

ou ainda:

$$\nabla^2 p = -\frac{\mu}{K} Q. \quad (2.41)$$

Em coordenadas cartesianas, temos:

$$\left( \frac{\partial^2 p}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 p}{\partial y^2} + \frac{\partial^2 p}{\partial z^2} \right) = -\frac{\mu}{K} Q. \quad (2.42)$$

A Eq. (2.40) é a “Equação de Poisson” que representa um problema clássico de difusão, estando associada a diversos outros problemas da física-matemática, tais como a condução de calor em meios sólidos ou a difusão de um soluto num meio líquido (CRANK, 1973).

## 2.4 Transporte de Contaminantes em Meios Porosos: Injeção de Traçadores

### 2.4.1 Conceitos Fundamentais

O problema da injeção de traçadores em meios porosos é, em geral, um processo não permanente e irreversível (no sentido que revertendo o escoamento, a distribuição inicial do soluto não pode ser obtida), no qual, a massa de um soluto (traçador) que está dissolvido num fluido solvente (ex. água ou óleo) é transportada pelo fluido.

Em geral, a mudança de concentração de um soluto dissolvido num fluido num meio poroso pode variar devido aos seguintes fatores (NE-ZHENG SUN, 1995; KOVARIK, 2000):

1. Advecção Macroscópica: O soluto escoar em conjunto com o solvente que o transporta;
2. Dispersão Hidrodinâmica: Os efeitos combinados de dispersão mecânica e difusão molecular fazem com que o soluto se disperse por uma área maior do que a esperada devido apenas ao transporte advectivo;
3. Termos Fonte e Sumidouros: O soluto pode entrar ou sair do meio poroso devido à presença de poços injetores ou produtores;
4. Adsorção ou Troca Iônica: O soluto no líquido pode ser adsorvido pela fase sólida, ou a massa na fase sólida pode ser dissolvida, ou pode ocorrer troca iônica;
5. Reações Químicas: Podem ocorrer reações químicas entre os diversos componentes transportados e o solvente mudando as concentrações dos mesmos;
6. Decaimento Radioativo: Componentes radioativos terão suas concentrações reduzidas devido ao decaimento radioativo ao longo do tempo.

Nas equações de transporte que descrevem o movimento de um traçador num escoamento monofásico, os termos decorrentes dos fatores 4, 5 e 6 podem ser todos tratados como termos de fonte e sumidouro. Por outro lado, o termo advectivo está diretamente relacionado ao campo de velocidades obtido para o fluido solvente. Já a dispersão hidrodinâmica é um fenômeno extremamente complexo que decorre tanto de mecanismos de dispersão mecânica quanto do fenômeno de difusão molecular do traçador no interior do fluido sol-

vente. Esta dispersão implica que, ao longo do tempo, este traçador ocupa uma região maior que a associada ao escoamento propriamente dito.

Para uma apresentação detalhada das equações de transporte em meio poroso sugerimos os livros de BEAR (1972) e NE-ZHENG SUN (1995). Discussões sucintas destas equações podem ser encontradas em WANG e ANDERSON (1983), KOVARIK (2000) e ZHENG e BENNET (2002). Em WHEELER e RUSSEL (1983) é apresentada uma dedução sintética seguida de uma análise aprofundada a respeito de algumas das propriedades físicas e matemáticas destas equações.

## 2.4.2 Equação de Pressão

Admitindo-se que o traçador não interfira nas propriedades de um fluido incompressível no qual está dissolvido, vimos na Eq. (2.14) que o campo de pressões para o escoamento monofásico pode ser calculado como:

$$\nabla \cdot \left( -\frac{K}{\mu} (\nabla p - g \nabla Z) \right) = Q \quad \text{ou} \quad \nabla \cdot \vec{v} = Q. \quad (2.43)$$

Em coordenadas cartesianas, no caso de num meio poroso isotrópico e homogêneo, desprezando o termo gravitacional, conforme vimos na Eq. (2.42), podemos escrever:

$$\left( \frac{\partial^2 p}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 p}{\partial y^2} + \frac{\partial^2 p}{\partial z^2} \right) = -\frac{\mu}{K} Q. \quad (2.44)$$

Tendo calculado o campo de pressões a partir da Eq. (2.43) ou da Eq.(2.44) podemos calcular o campo de velocidades diretamente a partir da lei de Darcy.

## 2.4.3 Equação de Advecção-Dispersão-Reação

A obtenção da equação de transporte para o componente soluto num escoamento monofásico envolve a equação de conservação da massa, a equação de difusão molecular dada pela lei de Fick, o termo de transporte advectivo, o qual depende da velocidade de Darcy e por último o termo de dispersão mecânica (EWING, 1983; NE-ZHENG SUN, 1995; KOVARIK, 2000; ZHENG e BENNET, 2002). Esta equação pode ser escrita como:

$$\phi \frac{\partial C}{\partial t} + \nabla \cdot (\vec{v}C) - \nabla \cdot (\phi D \nabla C) = q_c. \quad (2.45)$$

A Eq. (2.45) é uma equação de advecção-dispersão-reação onde identificamos o segundo termo do lado esquerdo da equação,  $\nabla \cdot (\vec{v}C)$ , como o termo de fluxo advectivo de um soluto com concentração  $C$  e velocidade de transporte  $\vec{v}$ . O terceiro termo do lado es-

querdo da equação,  $\nabla \cdot (\phi \underline{D} \nabla C)$ , é o termo de dispersão e o termo  $q_C$ , que pode ser escrito de várias maneiras (NE-ZHENG SUN, 1995; KOVARIK, 2000), responde pelos termos de fonte. O tensor de dispersão hidrodinâmica é representado por  $\underline{D}$ . Este tensor possui os componentes de dispersão mecânica e de difusão molecular.

Conforme mencionado anteriormente, a componente de difusão molecular pode ser calculado pela lei de difusão molecular de Fick, que é dada por:

$$\vec{J}_D = -\underline{D}_M \nabla C. \quad (2.46)$$

Na Eq. (2.46), o termo de fluxo difusivo,  $\vec{J}_D$ , depende do tensor de difusão molecular  $\underline{D}_M$  e do gradiente de concentração do soluto  $C$ .

O tensor de difusão molecular nos escoamentos em meio porosos é normalmente um tensor diagonal constante dado por:

$$\underline{D}_M = \begin{bmatrix} \tau D_0 & 0 & 0 \\ 0 & \tau D_0 & 0 \\ 0 & 0 & \tau D_0 \end{bmatrix}, \quad (2.47)$$

que pode ser escrito simplesmente, como:

$$D_M = \tau D_0, \quad (2.48)$$

onde  $0 \leq \tau \leq 1$  é a tortuosidade do meio poroso e  $D_0$  é o coeficiente de difusão molecular no líquido (BEAR, 1972; NE-ZHENG SUN, 1995; ZHENG e BENNET, 2002).

Considerando apenas meios isotrópicos, o tensor de dispersão hidrodinâmica, já considerando os termos de dispersão mecânica e o termo de difusão molecular, pode ser escrito como:

$$\underline{D} = \begin{pmatrix} D_{xx} & D_{xy} & D_{xz} \\ D_{yx} & D_{yy} & D_{yz} \\ D_{zx} & D_{zy} & D_{zz} \end{pmatrix}. \quad (2.49)$$

As componentes deste tensor podem ser escritas como:

$$\begin{aligned}
D_{xx} &= \frac{\alpha_T (v_y^2 + v_z^2) + \alpha_L v_x^2}{\phi |\bar{v}|} + \tau D_0, & D_{xy} = D_{yx} &= \frac{(\alpha_L - \alpha_T)}{\phi |\bar{v}|} |v_x v_y|, \\
D_{yy} &= \frac{\alpha_T (v_x^2 + v_z^2) + \alpha_L v_y^2}{\phi |\bar{v}|} + \tau D_0, & D_{yz} = D_{zy} &= \frac{(\alpha_L - \alpha_T)}{\phi |\bar{v}|} |v_y v_z|, \\
D_{zz} &= \frac{\alpha_T (v_x^2 + v_y^2) + \alpha_L v_z^2}{\phi |\bar{v}|} + \tau D_0, & D_{zx} = D_{xz} &= \frac{(\alpha_L - \alpha_T)}{\phi |\bar{v}|} |v_x v_z|,
\end{aligned} \tag{2.50}$$

Na equação anterior,  $\alpha_L$  e  $\alpha_T$  são, respectivamente, as dispersividades longitudinal e transversal. Considerando ainda que o eixo  $x$  está orientado segundo a velocidade média do escoamento (no caso de  $\bar{v}$  ser uniforme), e desprezando a difusão molecular, podemos escrever:

$$\tilde{D} = \begin{pmatrix} D_L & 0 & 0 \\ 0 & D_T & 0 \\ 0 & 0 & D_T \end{pmatrix}, \tag{2.51}$$

onde  $D_L = \alpha_L v$  e  $D_T = \alpha_T v$  são, respectivamente os coeficientes de dispersividade longitudinal e transversal e  $v = |\bar{v}|/\phi$ .

Uma observação interessante é que, mesmo que a velocidade do escoamento seja unidimensional e o meio poroso seja isotrópico, haverá um espalhamento transversal do traçador, pois, diferentemente da permeabilidade absoluta que é uma função da matriz porosa, o coeficiente de dispersão hidrodinâmica é determinado pela velocidade do escoamento.

### ***Transporte de Contaminantes num Escoamento com Velocidade Uniforme***

Apenas para efeito de simplificação, consideramos um meio poroso cuja porosidade é unitária, saturado por água cuja velocidade média  $\bar{v}$  para o escoamento uniforme, tem componentes dados num sistema cartesiano de coordenadas por  $v_x$ ,  $v_y$ ,  $v_z$ . Desprezando ainda os termos de derivada cruzada (REES, 2004), podemos escrever:

$$\frac{\partial C}{\partial t} = \frac{\partial}{\partial x} \left( D_{xx} \frac{\partial C}{\partial x} \right) + \frac{\partial}{\partial y} \left( D_{yy} \frac{\partial C}{\partial y} \right) + \frac{\partial}{\partial z} \left( D_{zz} \frac{\partial C}{\partial z} \right) - v_x \frac{\partial C}{\partial x} - v_y \frac{\partial C}{\partial y} - v_z \frac{\partial C}{\partial z} + q_C. \tag{2.52}$$

Se, por exemplo, considerarmos que o soluto contaminante sofre um decaimento radiativo com comportamento exponencial de tal forma que:

$$C = e^{-\lambda t}. \tag{2.53}$$

Pode-se mostrar que (NE-ZHENG SUN, 1995; REES, 2004):

$$q_c = -\gamma C, \quad (2.54)$$

onde  $\gamma$  representa um termo de decaimento radioativo do soluto.

Neste caso, a Eq. (2.52) pode ser escrita como:

$$\frac{\partial C}{\partial t} = \frac{\partial}{\partial x} \left( D_{xx} \frac{\partial C}{\partial x} \right) + \frac{\partial}{\partial y} \left( D_{yy} \frac{\partial C}{\partial y} \right) + \frac{\partial}{\partial z} \left( D_{zz} \frac{\partial C}{\partial z} \right) - v_x \frac{\partial C}{\partial x} - v_y \frac{\partial C}{\partial y} - v_z \frac{\partial C}{\partial z} - \gamma C. \quad (2.55)$$

A Eq. (2.55) representa de maneira simplificada o transporte de material contaminante radioativo através de um aquífero no qual a velocidade do escoamento é considerada uniforme.

### ***Injeção do Traçador num Escoamento Unidimensional em Coordenadas Cartesianas***

Assumindo novamente que existe um escoamento uniforme num meio poroso, homogêneo e isotrópico, de tal forma que possamos escrever  $\vec{v} = v\vec{i}$ . Em  $t = t_0$  não há traçador no meio poroso. Enquanto que, para  $t \geq t_0$ , a concentração numa extremidade do meio permanece constante ( $C(0, t) = C_0$ ). Segundo NE-ZHENG SUN (1995), este é um caso comumente estudado em laboratório. Por exemplo, o transporte unidimensional pode ser estudado numa coluna de areia longa injetando-se água com um traçador com uma concentração  $C = C_0$  numa extremidade da coluna para deslocar a coluna original de água sem o traçador. Um caso “prático” análogo ocorre quando um rio poluído corta um aquífero e se estabelece um escoamento estável (permanente), uniforme e unidimensional para o interior do aquífero. A Figura (2.3), adaptada de NE-ZHENG SUN (1995), apresenta esquematicamente este possível problema físico.

Considerando as restrições anteriores, e ignorando termos de fonte, a Eq. (2.52) reduz-se a:

$$\frac{\partial C}{\partial t} = D_L \frac{\partial^2 C}{\partial x^2} + D_T \left( \frac{\partial^2 C}{\partial y^2} + \frac{\partial^2 C}{\partial z^2} \right) - v \frac{\partial C}{\partial x}. \quad (2.56)$$

No caso de podermos desprezar o componente de dispersão transversal, o problema é essencialmente unidimensional, de modo que podemos escrever:

$$\frac{\partial C}{\partial t} = D_L \frac{\partial^2 C}{\partial x^2} - v \frac{\partial C}{\partial x}. \quad (2.57)$$

Neste caso, a equação de transporte do traçador assume o caráter de uma equação de advecção-difusão unidimensional.

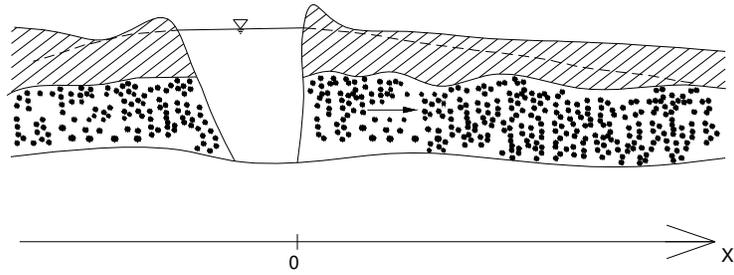


Figura 2.3 – Modelo esquemático de um rio poluído que corta um aquífero e se estabelece um escoamento permanente, uniforme e unidimensional para o interior do aquífero (NE-ZHENG SUN, 1995).

## 3. MÉTODOS DE RESÍDUOS PONDERADOS

### 3.1 Introdução

Alguns dos principais métodos numéricos utilizados na solução de equações diferenciais parciais (EDPs) podem ser enquadrados dentro da grande família dos métodos dos resíduos ponderados (MRP), (ZIENKIEWICZ e MORGAN, 1983).

Nestes métodos, consideramos um sistema de  $N$  equações diferenciais da forma:

$$L_i(u(x), x) = 0 \quad x \in \Omega \quad i \in [1, N], \quad (3.1)$$

onde  $L_i$  é um operador diferencial e  $u$  e  $x$  são as variáveis dependentes e independentes, respectivamente.

Os métodos dos resíduos ponderados são definidos através da integração da Eq. (3.1) ao longo do domínio discreto  $\Omega$  da seguinte maneira:

$$\int_{\Omega} L_i(u(x), x) \cdot W_k(x) d\Omega = 0. \quad (3.2)$$

Na Eq. (3.2),  $\{W_k(x)\}$ , com  $k = 1, N$ , é um conjunto linearmente independente de  $N$  funções. Isto gera um conjunto de  $N \times N$  equações independentes. De maneira geral, nosso problema básico consiste em encontrar aproximações da forma:

$$\hat{u}(x) = \sum_{p=1}^N u_p H_p(x). \quad (3.3)$$

para as variáveis dependentes ou incógnitas  $u$ , que satisfaçam ao mesmo tempo a Eq. (3.2), e as condições de contorno do problema. As funções  $H_p$  são comumente chamadas na literatura de volumes finitos, de funções de interpolação (PATANKAR, 1980; MALISKA, 2004), ou funções de forma “shape functions” na literatura de elementos finitos (ZIENKIEWICZ e MORGAN, 1983; GRESHO, 2000).

Existem diversas escolhas para as funções de ponderação  $\{W_k(x)\}$ , sendo que cada escolha acaba por gerar um método numérico em particular. A seguir apresentaremos de maneira muito breve três possíveis escolhas para as funções de ponderação, que geram três diferentes métodos de aproximação muito populares, o método das diferenças finitas (MDF), o método dos elementos finitos (MEF), e o método dos volumes finitos (MVF). A despeito de sua ligação com o MRP, que permite encará-los com uma certa unicidade, estes métodos são normalmente estudados de maneira completamente independente uns dos outros.

## 3.2 Diferenças Finitas

São considerados MDF todos os métodos em que  $W_k$  são escolhidas como as funções Delta de Dirac, de tal modo que:

$$W_k(x) = \delta(x - x_0), \quad (3.4)$$

onde  $x_0$  é um ponto qualquer do domínio  $\Omega$ .

Sendo que as funções Delta de Dirac possuem as seguintes propriedades:

$$\delta(x - x_0) = 0, \quad x \neq x_0, \quad (3.5)$$

$$\delta(x - x_0) = \infty, \quad x = x_0, \quad (3.6)$$

$$\int_{x < x_0}^{x > x_0} S(x) \delta(x - x_0) dx = S(x_0). \quad (3.7)$$

O MDF usual, em malhas estruturadas ortogonais, tem como principais características: o baixo custo computacional e os consideráveis erros geométricos na aproximação de geometrias curvilíneas, associados à discretização destes contornos por malhas retangulares. Além disso, de maneira geral, neste método, aproximações de maior ordem só são obtidas a custos da introdução de um número maior de pontos nodais na construção das equações de diferença (HIRSCH, 1988; LI et al., 2000).

## 3.3 Elementos Finitos

No MEF convencional de Galerkin, as funções de ponderação  $W_k$  são tomadas como as próprias funções de aproximação, ou seja:

$$W_k = H_k. \quad (3.8)$$

O MEF de Galerkin possui várias propriedades matemáticas e numéricas interessantes, tais como o fato de ele sempre produzir matrizes simétricas desde que o operador diferencial seja auto-adjunto (simétrico) e o fato de as funções de aproximação possuírem suporte compacto, de modo a produzirem matrizes esparsas em que apenas os vizinhos mais próximos contribuem nas equações nodais. Além disso, o MEF de Galerkin possui a propriedade de ser a aproximação ótima para operadores elípticos segundo a norma da energia (GRISHO, 2000).

### 3.4 Volumes Finitos

O MVF resulta da seguinte escolha para as funções de ponderação:

$$W_k = \begin{cases} 1 & x \in \Omega_k \\ 0 & x \notin \Omega_k \end{cases}. \quad (3.9)$$

Desta definição, resulta que as integrais no interior dos subdomínios  $\Omega_k$  são tomadas como constantes. Isto é equivalente a integrarmos diretamente as equações diferenciais  $L_i$ , sem nenhuma ponderação de fato dentro dos subdomínios  $\Omega_k$ . No MVF estes subdomínios são normalmente chamados de volumes de controle.

A descrição acima não traduz completamente a riqueza de nenhum dos três métodos. Para uma descrição detalhada sobre o MDF em malhas estruturadas recomendamos HIRSCH (1988) e HIRSCH (1990). Recentemente, o MDF foi generalizado para lidar com malhas não-estruturadas, de modo a herdar características tanto do MEF quanto do MVF, sendo que uma obra bastante completa sobre o assunto pode ser encontrada em LI et al. (2000). Por outro lado, existe uma ampla literatura sobre o MEF convencional (ZIENKIEWICZ e MORGAN, 1983; GRESHO, 2000), bem como as suas variantes, dentre as quais podemos citar o método dos elementos finitos mistos (EWING, 1983; WHEELER, 1983; CHAVENT e JAFFRE, 1986), e os métodos de Petrov-Galerkin (HUGES, 2000; GRESHO, 2000). Já sobre o MVF a literatura também é vasta e diversificada (PATANKAR, 1980; BARTH, 1994; BARTH, 1995; EYMARD et al., 1997; MALISKA, 2004;), sendo que, até o momento, não existe uma metodologia unificada e generalizada que permita a construção de métodos de ordem qualquer e com características conservativas os quais possam fazer uso de malhas quaisquer.

Quanto à primazia de um método sobre os outros, muita polêmica tem sido travada entre os defensores ardorosos de cada um dos métodos (GRESHO, 2000; LI et al., 2000; MALISKA, 2004).

No presente trabalho, não entraremos neste debate que consideramos algumas vezes infrutífero. De fato, apresentaremos uma formulação do MVF capaz de lidar com malhas estruturadas e não-estruturadas, a partir de uma estrutura de dados por aresta. Acreditamos que a metodologia a ser apresentada é capaz de lidar com problemas que envolvam leis de conservação de forma elegante e acurada permitindo sua utilização tanto na solução de problemas elípticos/parabólicos quanto hiperbólicos que são característicos das leis que regem o fluxo de fluidos em meios porosos.

No capítulo a seguir descrevemos de maneira detalhada o método dos volumes finitos por aresta (MVFA) o qual será utilizado posteriormente para a solução de problemas associados ao fluxo de fluidos em meios porosos.

## 4. MÉTODO DE VOLUMES FINITOS POR ARESTA (MVFA)

### 4.1 Introdução

A expressão “Método dos Volumes Finitos” apareceu pela primeira vez na literatura no início dos anos 1970 em referência a discretizações conservativas da equação potencial da dinâmica dos gases (MORTON, 1996). Segundo MORTON (1996), a idéia da utilização de um esquema integral para a derivação de esquemas de diferenças finitas para equações elípticas em malhas estruturadas remonta ao livro de VARGA (1962). Conforme vimos anteriormente, dá-se o nome de MVF a variações do método dos resíduos ponderados que utilizam funções de ponderação constantes por partes (piecewise constant weighting functions). Na prática, são considerados métodos de volumes finitos todos os métodos de discretização em que, inicialmente as equações diferenciais são integradas diretamente no domínio físico, e posteriormente, o teorema da divergência de Green-Gauss é utilizado, de modo a transformarem-se as integrais de domínio em integrais de superfície, para, só então, aplicar-se algum procedimento de discretização que permita a obtenção da solução numérica do problema (MORTON, 1996). Uma característica importante de todos os métodos que se enquadram nesta categoria é o fato que, quando bem aplicados, garantem conservação local (no nível da célula) e global de quantidades como massa, momento e energia.

Existem diferentes esquemas que podem ser classificados como pertencentes à família dos métodos de volumes finitos (MORTON, 1996). De maneira geral, os MVF podem ser classificados de acordo com a posição relativa entre pontos nodais e os volumes de controle (células onde são realizados os balanços discretos):

1. Os esquemas centrados nas células (cell centered schemes) são àqueles em que as incógnitas estão associadas aos centros das células ou volumes de controle onde são resolvidas as equações de balanço (Fig. 4.1a);

2. Os esquemas célula-vértice (cell vertex) são àqueles em que as incógnitas estão associadas aos nós da malha, sendo que os próprios elementos das malhas são utilizados como volumes de controle (Fig. 4.1b);

3. Em métodos centrados nos nós (node-centered ou vertex-centered) as variáveis dependentes são armazenadas nos nós e os volumes de controle são construídos ao redor dos nós, de modo que apenas um nó esteja contido em cada subdomínio (volume de controle). A malha de elementos em cujos vértices são definidas as incógnitas é conhecida como malha “primal” e a outra malha formada pelos volumes de controle é conhecida como malha dual, construída a partir da malha original em função de diferentes critérios (BARTH, 1994; REES, 2004; MALISKA, 2004). O conjunto de superfícies interconectadas separando cada subdomínio forma as superfícies de controle, as quais limitam a malha dual (Fig. 4.1c). Diferentes malhas duais podem ser construídas. As mais comuns são àquelas construídas pelo método das medianas “median dual” e os diagramas de Voronoi (MISHEV, 1998; MALISKA, 2004).

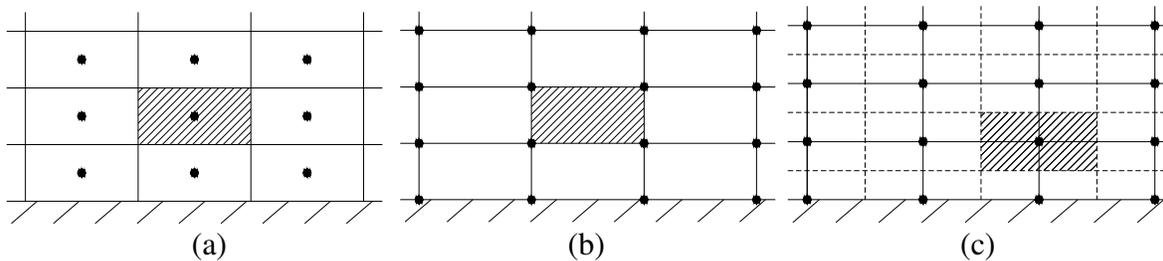


Figura 4.1 – Diferentes configurações para volumes de controle: a) esquema centrado nas células; b) esquema célula-vértice; c) esquema centrado nos vértices.

Dos métodos apresentados acima, os dois mais utilizados na prática, são os métodos centrados na célula e os métodos centrados nos nós (MORTON, 1996). Conforme indicado em LUO et al. (1995), MALAN (2002), REES (2004) e REES et al. (2004), os métodos centrados nas células fazem uso mais intensivo de memória que os métodos centrados nos nós. Além disso, métodos centrados nos nós oferecem a vantagem adicional de permitirem o uso de estruturas de dados por arestas que, de maneira geral, oferecem um apreciável ganho computacional quando comparados com métodos baseados em elementos conforme mostrado em LÖHNER (1994), LUO et al. (1995), MALAN (2002), REES (2004) e REES et al. (2004).

## 4.2 Estrutura de Dados por Aresta

A estrutura de dados natural para o MEF ou para MVF em malhas não-estruturadas é a estrutura de dados por elemento, que consiste numa lista formada pelas conectividades (nós interconectados) dos elementos usados na discretização do domínio. Adicionalmente, são fornecidas: uma lista de nós e suas coordenadas espaciais e uma lista de faces e suas conectividades. Com estes dados geométricos e topológicos, as integrais que aparecem, tanto no MEF quanto no MVF podem ser calculadas com um ou mais “laços” nos elementos e nas faces dos elementos a partir das contribuições dos elementos para as equações nodais sendo acumuladas durante o processo.

Uma alternativa importante à estrutura de dados por elementos é a estrutura de dados por aresta (PERAIRE et al., 1993; BARTH, 1994; LÖHNER, 1994; LYRA, 1994; LUO et al., 1995; LÖHNER, 2001; MALAN, 2002; LYRA et al., 2004; REES, 2004; REES et al., 2004). Com esta estrutura de dados, substituem-se os elementos por arestas para se representar uma malha não-estruturada. Adicionalmente, são ainda mantidos os nós e suas coordenadas espaciais. No caso tridimensional, dependendo do tipo de integração no contorno, as arestas são substituídas por faces.

As estruturas de dados por arestas têm sido usadas intensamente na literatura da Dinâmica dos Fluidos Computacional (DFC), sempre que malhas não-estruturadas são utilizadas, tanto no caso do MEF quanto no caso do MVF (PERAIRE, 1993; BARTH, 1994; LÖHNER, 1994; LYRA, 1994; LUO et al., 1995; LÖHNER, 2001).

Pode-se mostrar que uma redução significativa de operações de coleta e distribuição “gather/scatter” de informações para um dado resolvidor (solver) de sistema de equações

pode ser obtida quando se parte de uma estrutura de dados de elementos para uma estrutura de dados por arestas (BARTH, 1994; LÖHNER, 1994; LÖHNER, 2001). Além disso, dependendo da implementação, uma economia significativa de memória e no número de operações de ponto flutuante pode ser alcançada. Em linhas gerais, o uso da estrutura de dados por aresta para descrever a topologia da malha evita que certas redundâncias de armazenamento, operações de coleta e distribuição de dados e operações de ponto flutuante ocorram (BARTH, 1994; LÖHNER, 1994; LÖHNER, 2001). Isto ocorre basicamente porque laços sobre elementos implicam no cálculo das mesmas contribuições provenientes de arestas compartilhadas por múltiplos elementos. Em 2-D estes coeficientes são computados duas vezes e em 3-D este número pode ser muito maior tendo em vista que uma mesma aresta pode ser compartilhada por diversos elementos.

Conforme descrito em LÖHNER (1994) e LÖHNER (2001), para elementos lineares (triângulos e tetraedros), as operações de busca e distribuição, bem como o “overhead” em operações de ponto flutuante (FLOPS), são bastante reduzidos, particularmente no caso tridimensional. Apenas em caráter ilustrativo, reproduzimos abaixo duas tabelas apresentadas em LÖHNER (2001), que expressam bem este fenômeno para o caso do cálculo de gradientes nodais pelo método de Galerkin utilizando uma malha com elementos triangulares

Tabela 4.1 – Operações de busca e distribuição com estrutura de dados por aresta e por elementos (LÖHNER, 2001).

Operações de busca e distribuição (gather/scater)	Baseado em Elementos	Baseado em Arestas
2D	$2*NELEM = 12*NPOIN$	$2*2* NEDGE = 12*NPOIN$
3D	$2*4*NELEM = 44*NPOIN$	$3*2* NEDGE = 42*NPOIN$

Tabela 4.2 – Operações de ponto flutuante com estrutura de dados por aresta e por elementos (LÖHNER, 2001).

Operações de ponto flutuante (FLOPS)	Baseado em Elementos	Baseado em Arestas
2D	$2*3*3*NELEM = 6*NPOIN$	$4*NEDGE = 12*NPOIN$
3D	$22*NELEM = 121*NPOIN$	$7*NEDGE = 49*NPOIN$

Nas tabelas 4.1 e 4.2, NELEM é o número de elementos da malha triangular, NPOIN é o número de pontos nodais, e NEDGE é o número de arestas da malha.

A despeito das vantagens computacionais associadas à estrutura de dados por aresta, deve-se ter em mente que os geradores de malhas convencionais fornecem os dados da malha através de uma estrutura de dados por elementos. Portanto, seja qual for o método de discretização adotado, MEF ou MVF, no caso de utilizarmos a estrutura de dados por aresta devemos construir um programa que pré-processe os dados topológicos da malha, de modo a convertermos a estrutura de dados por elementos numa estrutura de dados por aresta. Após a finalização do estágio de pré-processamento, a estrutura de dados por elementos pode ser descartada durante a etapa de processamento.

A etapa de pré-processamento pode ser resumida pelas seguintes etapas (LÖHNER, 1994; LYRA, 1994; LÖHNER, 2001):

1. Gerar a malha usando um gerador de malhas não-estruturadas convencional;

2. Construir os vetores com a malha e a topologia do contorno, que consiste numa lista de arestas e, se for o caso, uma lista de faces de contorno com suas respectivas conexividades;
3. Calcular e armazenar os coeficientes geométricos associados às arestas da malha;
4. Transferir dados que estão inicialmente associados à geometria, e que são relativos a carregamentos, propriedades dos materiais, condições de contorno e condições iniciais, para as entidades topológicas da malha (*i.e.* arestas, faces e nós).

## 4.3 Método das Medianas

### 4.3.1 Coeficientes Geométricos em Duas Dimensões

Conforme mencionado anteriormente, chamamos de malha dual, a malha construída de alguma maneira a partir de malha original ou “primal” utilizada para discretizar um dado domínio computacional. No presente trabalho, utilizaremos a malha dual construída pelo método das medianas (PATANKAR, 1980; MALISKA, 2004). Os volumes de controle associados à malha dual construída por este método em duas dimensões têm as suas faces, também chamadas de superfícies de controle, construídas a partir da conexão dos pontos médios das arestas que compõem a malha “primal” aos centróides dos elementos que compartilham as arestas. Em três dimensões, as superfícies de controle são construídas unindo-se os pontos médios das arestas, com os centróides das faces e com os centróides dos elementos da malha “primal” que compartilham estas arestas.

Para calcularmos os fluxos das quantidades físicas de interesse, tais como massa, momento ou energia, através das superfícies de controle (SC) pelo método dos volumes finitos com estrutura de dados por aresta (MVFA), nós associaremos as SC a coeficientes geométricos e ou físicos que, por sua vez, estarão associados às arestas da malha. Na Figura (4.2) apresentamos de forma esquemática dois trechos de uma malha bidimensional mista, composta de triângulos e quadriláteros, em que são mostrados os volumes de controle formados pelo método das medianas.

Em duas dimensões, os coeficientes geométricos associados às arestas  $IJ_L$  são definidos como:

$$\begin{aligned}\bar{C}_{IJ_L} &= \sum_{j=k}^{k+1} A_k \bar{n}_k = A_k \bar{n}_k + A_{k+1} \bar{n}_{k+1}, \\ \bar{D}_{IJ_L} &= A_L \bar{n}_L.\end{aligned}\tag{4.1}$$

Na Equação (4.1),  $A_{k+1} = TL_{k+1}$ ,  $A_k = TL_k$  e  $A_L = TL_L$  são as áreas das superfícies de controle associadas aos vetores normais  $\bar{n}_{k+1}$ ,  $\bar{n}_k$  e  $\bar{n}_L$ , respectivamente, e  $T$  é a espessura do domínio. Com  $T=1$ , o domínio estudado é efetivamente bidimensional. Definidos assim, os coeficientes  $\bar{C}_{IJ_L}$  e  $\bar{D}_{IJ_L}$  representam os vetores área das superfícies de controle

adjacentes as arestas  $IJ_L$  que concorrem num nó  $I$  da malha. Na Figura (4.3a) mostramos, para uma malha triangular, um volume de controle e os termos que compõem os coeficientes geométricos das arestas que concorrem num nó ( $I$ ) do interior da malha. Na Figura (4.3b) apresentamos um volume de controle associado a um nó ( $I$ ) sobre o contorno do domínio. Os nós vizinhos ao nó  $I$  e ligados a ele através de uma aresta são designados por  $J_L$  com  $L = 1, NN$ , onde  $NN$  é igual ao número de vizinhos conectados ao nó  $I$  através de uma aresta  $IJ_L$ .

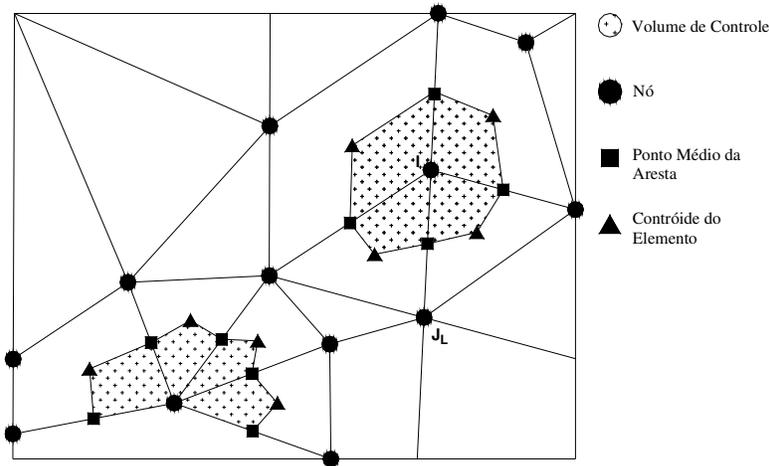


Figura 4.2 – Trecho de malha mista formada por volumes de controle construídos pelo método das medianas.

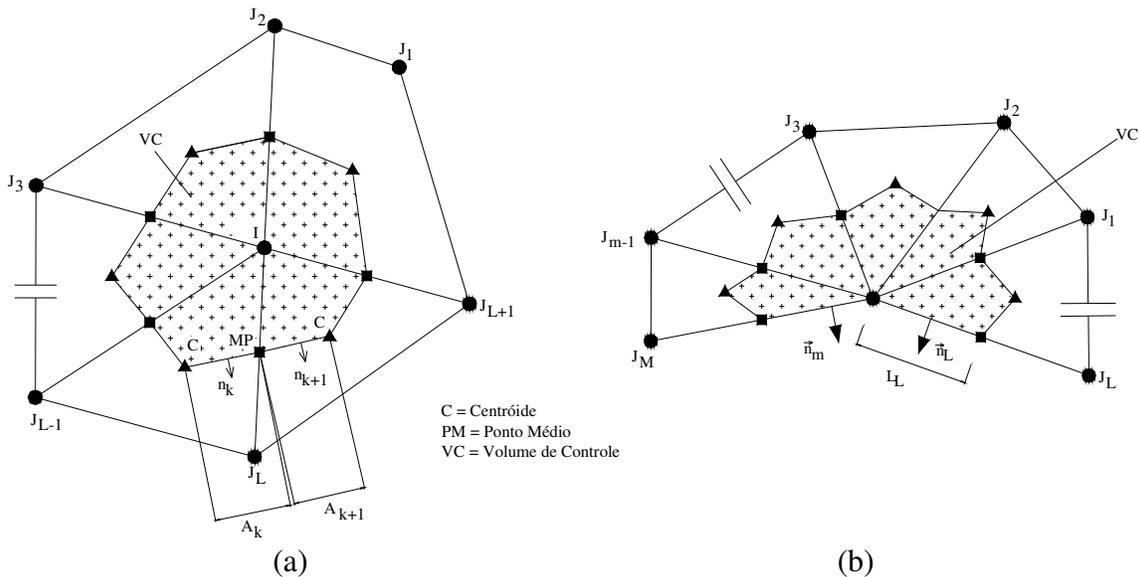


Figura 4.3 – (a) Volume de controle para um nó interno em 2-D; (b) volume de controle para um nó do contorno em 2-D.

Tendo em vista a definição anterior para os coeficientes geométricos, observamos as seguintes propriedades de interesse:

1. Dois volumes de controle adjacentes através de uma aresta  $IJ_L$  compartilham a mesma interface, de modo que:

$$\vec{C}_{IJ_L} = -\vec{C}_{JLI}; \quad (4.2)$$

2. Para a interface do volume de controle, cujo vetor normal aponta para fora do domínio, temos:

$$\vec{D}_{IJ_L} = \vec{D}_{JLI}, \quad (4.3)$$

3. Para nós no interior do domínio, vale a seguinte relação:

$$\sum_{L=1}^{NN^{(\Omega)}} \vec{C}_{IJ_L} = \vec{0}, \quad (4.4)$$

4. Para nós do contorno temos:

$$\sum_{L=1}^{NN^{(\Omega)}} \vec{C}_{IJ_L} + \sum_{L=1}^{NN^{(\Gamma)}} \vec{D}_{IJ_L} = \vec{0}. \quad (4.5)$$

Nas Eqs. (4.4) e (4.5) os super-índices  $\Omega$  e  $\Gamma$  referem-se a arestas no interior e no contorno do domínio, respectivamente.

É interessante notar que as Eqs. (4.2) até (4.5) expressam, na forma discreta, o princípio de conservação da propriedade física de interesse, num nível local para um volume de controle em torno de um nó  $I$  qualquer da malha. Além disso, quando escrevemos estas expressões para todos os nós da malha, garantimos que a propriedade física é conservada globalmente.

### 4.3.2 Coeficientes Geométricos em Três Dimensões

Utilizando a malha dual construída pelo método das medianas, em três dimensões nós podemos construir os volumes de controle seguindo os mesmos princípios que foram utilizados para a construção da malha dual em duas dimensões. Para efeito de simplificação e sem perda de generalidade, consideraremos apenas malhas formadas por tetraedros. Contudo, o processo construtivo das malhas duais é o mesmo para qualquer tipo de elemento da malha primal. Consideraremos um nó  $I$  genérico da malha, o qual está rodeado por um conjunto de nós  $J_L$  com  $L = 1, NN$ , onde novamente,  $NN$  é igual ao número de nós vizinhos conectados ao nó  $I$  através de uma aresta. As superfícies de controle serão formadas ligando o ponto médio de cada aresta  $IJ_L$  com o centróide das faces  $IJ_LJ_K$  e com o centróide do

elemento tetraédrico. Na Figura (4.4), vemos um elemento tetraédrico e o trecho do volume de controle associado a um nó no interior do domínio e na Fig. (4.5) vemos um nó de contorno e um trecho do volume de controle indicando os parâmetros utilizados na construção dos coeficientes  $\bar{D}_{IJ_L}$  associados a uma aresta  $IJ_L$ . No caso tridimensional, estes coeficientes são definidos de maneira análoga ao caso bidimensional como:

$$\begin{aligned} \bar{C}_{IJ_L} &= \sum_{k=1}^{NT} A_k \bar{n}_k, \\ \bar{D}_{IJ_L}^0 &= A_L \bar{n}_L, \\ \bar{D}_{IJ_L}^1 &= A_{L+1} \bar{n}_{L+1}. \end{aligned} \tag{4.6}$$

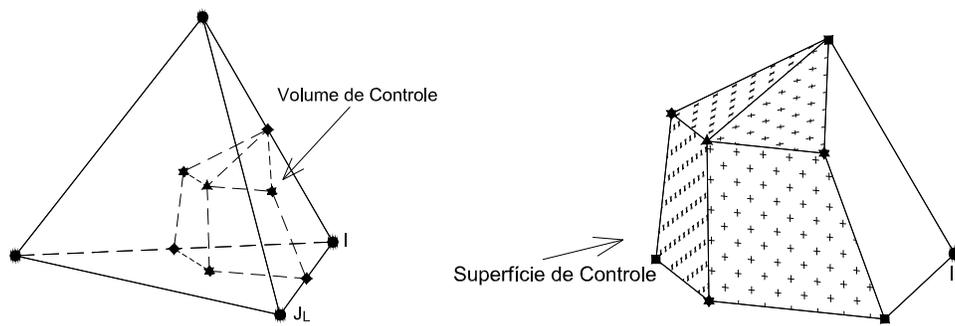


Figura 4.4 – Elemento tetraédrico e trecho de um volume de controle para um nó interno  $I$  em 3-D.

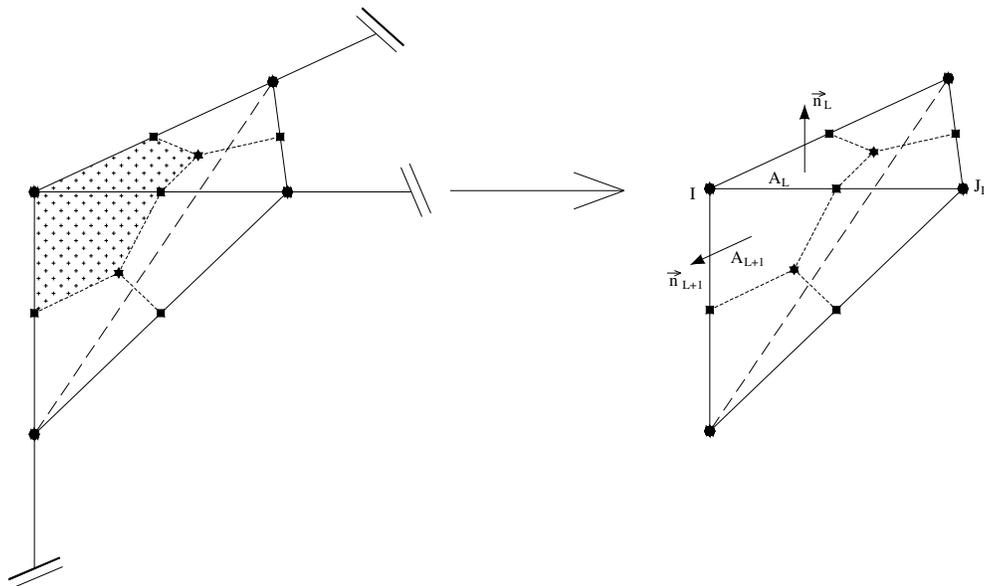


Figura 4.5 – Volume de controle para um nó do contorno em 3-D.

Na Equação (4.6), os termos  $A_k$  e  $\vec{n}_k$  referem-se à área e ao vetor normal das faces dos volumes de controle adjacentes a uma aresta  $IJ_L$  associadas aos  $NT$  tetraedros que concorrem na aresta em questão, e  $A_L$ ,  $\vec{n}_L$ ,  $A_{L+1}$  e  $\vec{n}_{L+1}$  correspondem às faces do volume de controle que estão sobre o contorno do domínio. No caso tridimensional, utilizando a estrutura de dados por aresta, são considerados dois vetores distintos  $\vec{D}_{IJ_L}^0$  e  $\vec{D}_{IJ_L}^1$ , já que uma aresta do contorno pode estar associada a duas superfícies submetidas a condições de contorno diferentes.

Novamente, os coeficientes geométricos são definidos de tal forma que relações análogas às apresentadas nas Eqs. (4.2), (4.3), (4.4) e (4.5) continuam válidas.

## 4.4 Problemas Difusivos

Diferentemente do método dos elementos finitos (MEF), a discretização de termos elípticos ou difusivos pelo método dos volumes finitos em malhas gerais (estruturadas e não-estruturadas) e com tensores não diagonais (tensor completo) é ainda um campo aberto para a investigação científica (VERMA, 1996; VERMA e AZIZ, 1996; AAVATSMARK et al., 1998a; AAVATSMARK et al., 1998b; EDWARDS, 1998; EDWARDS e ROGERS, 1998; EYMARD, 2002; SVÄRD e NORDSTRÖM, 2003; KLAUSEN e EIGESTAD, 2004; MALISKA, 2004). Independente da estrutura de dados utilizada (por elementos ou por arestas), uma formulação tradicionalmente utilizada por praticantes do MVF para o cálculo de termos difusivos é conhecida como “Diferenças Finitas com Volume de Controle” (DFVC), do inglês “Control Volume Finite Difference” (CVFD), e emprega apenas dois pontos para a construção dos fluxos ao longo de uma aresta da malha. Esta aproximação, que utiliza um estêncil compacto formado apenas pelos vizinhos mais próximos, é sabidamente limitada para o tratamento de problemas em malhas não-ortogonais ou problemas envolvendo tensores de condutividade ou permeabilidade não-diagonais (VERMA, 1996; VERMA e AZIZ, 1996; AAVATSMARK et al., 1998a; AAVATSMARK et al., 1998b; EDWARDS e ROGERS, 1998; KLAUSEN e EIGESTAD, 2004).

Uma outra formulação, naturalmente associada à estrutura de dados por aresta, inclui não apenas os nós mais próximos, mas também os vizinhos que se encontram a “dois nós” de distância. Esta formulação é conhecida comumente na literatura como aproximação de duas camadas, do inglês “Two Layers Approximation” (SVÄRD e NORDSTRÖM, 2003). Apesar de sua ampla utilização por praticantes do MVF, esta formulação apresenta alguns problemas graves que serão discutidos sucintamente no presente texto (SVÄRD e NORDSTRÖM, 2003; REES, 2004; REES et al., 2004).

A seguir, apresentamos brevemente as duas aproximações tipicamente utilizadas para o termo difusivo utilizando-se uma estrutura de dados por arestas, além de discutirmos suas limitações. Ao final, descrevemos em detalhes um procedimento alternativo (CRUMPTON et al., 1997; SORENSEN et al., 2001; LYRA et al., 2004; REES et al., 2004; CARVALHO et al., 2005a; CARVALHO et al., 2005b) que supera a maioria dos problemas impostos pelos procedimentos anteriores.

#### 4.4.1 Formulação com Estêncil Compacto

Considere a equação diferencial homogênea e elíptica (Equação de Laplace):

$$\nabla^2 u = 0. \quad (4.7)$$

Integrando a equação anterior e aplicando o teorema da divergência de Green-Gauss chegamos a:

$$\int_{\Omega} \nabla^2 u \, d\Omega = \int_{\Gamma} \nabla u \cdot \vec{n} \, d\Gamma = 0. \quad (4.8)$$

O domínio computacional é subdividido num conjunto estruturado ou não-estruturado de elementos (CARVALHO, 2001), e os volumes de controle são construídos em torno dos nós da malha pelo método das medianas conforme indicado na seção (4.3). Desta maneira, para um volume de controle em torno de um nó genérico  $I$  da malha, podemos escrever:

$$\int_{\Gamma_I} \nabla u \cdot \vec{n} \, d\Gamma_I \cong \left( \sum_{L=1}^{NN^{(\Omega)}} \left( \frac{\hat{u}_{J_L} - \hat{u}_I}{\Delta_{IJ_L}} \vec{L}_{IJ_L} \right) \cdot \vec{C}_{IJ_L} + TC \right), \quad (4.9)$$

onde,  $\vec{L}_{IJ_L} = \vec{X}_{J_L} - \vec{X}_I$ , com  $\vec{X}_{J_L} = (x_{J_L}, y_{J_L}, z_{J_L})$  e  $\vec{X}_I = (x_I, y_I, z_I)$ ,  $\Delta_{IJ_L}$  é o comprimento da aresta  $IJ_L$ , i.e.  $\Delta_{IJ_L} = |\vec{L}_{IJ_L}|$ , e  $TC$  representa os termos de contorno.

Na equação anterior, podemos notar que a aproximação para o fluxo na interface entre dois volumes de controle definidos pelos nós  $I$  e  $J_L$  depende apenas dos valores funcionais nos referidos nós. Além disso, algumas observações adicionais devem ser feitas ao analisarmos a aproximação anterior:

1. Em uma dimensão, orientando a aresta  $IJ_L$  segundo o sentido positivo do eixo dos  $x$ , esta aproximação corresponde ao método de diferenças finitas de segunda ordem para o gradiente no ponto médio da aresta, pois (utilizando uma expansão em séries de Taylor):

$$u_{J_L} = u_{IJ_L} + \frac{du}{dx} \Big|_{IJ_L} \frac{\Delta_{IJ_L}}{2} + O(\Delta_{IJ_L}^2), \quad (4.10)$$

onde,  $u_{IJ_L}$  refere-se ao valor da função no ponto médio desta aresta, e ainda:

$$u_I = u_{IJ_L} - \frac{du}{dx} \Big|_{IJ_L} \frac{\Delta_{IJ_L}}{2} + O(\Delta_{IJ_L}^2), \quad (4.11)$$

Subtraindo a Eq. (4.11) da Eq. (4.10) e re-arrumando os termos, chegamos a:

$$\left. \frac{du}{dx} \right|_{J_L} = \frac{u_{J_L} - u_I}{\Delta_{J_L}} + O(\Delta_{J_L}^2). \quad (4.12)$$

2. Em mais de uma dimensão a análise anterior continua sendo válida desde que os gradientes/fluxos estejam orientados ao longo da aresta e a interface do volume de controle seja ortogonal à mesma (VERMA, 1996; VERMA e AZIZ, 1996; SVÄRD e NORDSTRÖM, 2003; MALISKA, 2004).

3. No caso de utilizarmos volumes de controle construídos pelo método das medianas nem sempre as superfícies de controle são ortogonais às arestas da malha e, portanto, termos de fluxo não paralelos à aresta (cross-diffusion terms) surgem como consequência natural desta não-ortogonalidade.

Na verdade, conforme mostrado no apêndice B, em malhas gerais e não ortogonais, a formulação de dois pontos para o fluxo no meio da aresta, produz uma aproximação que é, em geral, inconsistente, onde entendemos consistência como sendo o fato da solução calculada da equação discreta, obtida a partir de um esquema de discretização numérica, “tender” para a solução exata da equação diferencial à medida que refinamos a malha (HIRSCH, 1988). EYMARD et al. (1997) mostram que este tipo de aproximação só produz aproximações adequadas numa determinada família de malhas. No referido trabalho, são definidas “malhas válidas” para este tipo de aproximação. MALISKA (2004) também faz referência a malhas válidas num contexto ligeiramente diferente, porém seguindo os mesmos princípios.

#### 4.4.2 Formulação com Estêncil Estendido (Volumes Finitos Repetido)

Novamente consideraremos o problema descrito pela Eq. (4.7). A formulação apresentada a seguir consiste em duas etapas: primeiramente encontrarmos uma aproximação para os gradientes nodais, e em seguida, utilizarmos estes gradientes nodais para a obtenção de uma aproximação para os gradientes ou fluxos no ponto médio das arestas da malha.

Integrando o gradiente de  $u$  ao longo de um domínio  $\Omega$  e, em seguida, aplicando o teorema da divergência de Green-Gauss, temos:

$$\int_{\Omega} \nabla u \, d\Omega = \int_{\Gamma} u \vec{n} \, d\Gamma. \quad (4.13)$$

Escrevendo a expressão anterior para um volume de controle  $I$  temos:

$$\int_{\Omega_I} \nabla u \, d\Omega_I = \int_{\Gamma_I} u \vec{n} \, d\Gamma_I. \quad (4.14)$$

Podemos ainda definir o gradiente médio no interior do volume de controle como:

$$\bar{\nabla} u_I = \left( \int_{\Omega_I} \nabla u \, d\Omega_I \right) / V_I, \quad (4.15)$$

onde:

$$V_I = \int_{\Omega_I} d\Omega_I. \quad (4.16)$$

Substituindo o lado direito da Eq. (4.15) pelo lado direito da Eq. (4.14), podemos escrever:

$$\bar{\nabla} u_I = \left( \int_{\Gamma_I} u \vec{n} \, d\Gamma_I \right) / V_I. \quad (4.17)$$

Por outro lado, a integral de superfície do lado direito da Eq. (4.17) é aproximada como:

$$\int_{\Gamma_I} u \vec{n} \, d\Gamma \cong \sum_{L=1}^{NN^{(\Omega)}} \hat{u}_{IJ_L}^{\Omega} \vec{C}_{IJ_L} + \sum_{L=1}^{NN^{(\Gamma)}} \hat{u}_{IJ_L}^{\Gamma} \vec{D}_{IJ_L}. \quad (4.18)$$

Na equação anterior, para uma dada aresta  $IJ_L$ ,  $\Omega$  refere-se a aproximações obtidas para as arestas que se encontram no interior do domínio, e  $\Gamma$  refere-se às arestas no contorno do domínio. Para volumes de controle no interior do domínio, vale a seguinte expressão,  $\hat{u}_{IJ_L}^{\Gamma} \vec{D}_{IJ_L} = 0$ .

Para aproximarmos o termo  $\hat{u}_{IJ_L}^{\Omega}$ , usamos a regra do ponto médio:

$$\hat{u}_{IJ_L}^{\Omega} = \frac{\hat{u}_I + \hat{u}_{J_L}}{2}. \quad (4.19)$$

Para discretizarmos o termo de contorno algumas alternativas podem ser utilizadas. A primeira alternativa, clássica na literatura de volumes finitos em malhas não-estruturadas (SVÄRD e NORDSTRÖM, 2003; REES, 2004; REES et al., 2004; LEWIS et al., 2005), envolve a utilização de um único ponto de integração para aproximarmos o valor  $\hat{u}_{IJ_L}^{\Gamma}$  conforme mostrado abaixo:

$$\hat{u}_{IJ_L}^{\Gamma} = \hat{u}_I. \quad (4.20)$$

SVÄRD e NORDSTRÖM (2003), mostram que esta aproximação não é formalmente de segunda ordem para nós do contorno.

Uma outra possível aproximação, inspirada no MEF, envolve, no caso bidimensional, os dois pontos da aresta  $IJ_L$ . No caso tridimensional, são usados tantos pontos quantos existirem nas faces dos elementos que interceptarem o contorno (ex. três para tetraedros e quatro para hexaedros). Para o caso bidimensional, utilizando uma malha formada apenas por triângulos lineares, a expressão para a aproximação do termo de contorno pode ser escrita como:

$$\hat{u}_{IJ_L}^\Gamma = \frac{5\hat{u}_I + \hat{u}_{J_L}}{6}. \quad (4.21)$$

Para o caso tridimensional, se utilizarmos uma malha formada apenas por tetraedros, podemos escrever (LUO et al., 1995):

$$\hat{u}_{IJ_LJ_H}^\Gamma = \frac{6\hat{u}_I + \hat{u}_{J_L} + \hat{u}_{J_H}}{8}, \quad (4.22)$$

onde, neste último caso,  $I$ ,  $J_L$  e  $J_H$  representam os nós da face triangular do tetraedro que pertence ao contorno conforme mostrado na Fig. (4.4b). Se a área deste triângulo é dada por  $A_{IJ_LJ_H}$  podemos redefinir o coeficiente  $\bar{D} = \bar{D}_{IJ_LJ_H}$ , associado à face do volume de controle sobre o contorno do domínio, como:

$$\bar{D}_{IJ_LJ_H} = \frac{\vec{n}_{IJ_LJ_H} A_{IJ_LJ_H}}{3}. \quad (4.23)$$

Conforme estabelecido em LUO et al. (1995), o uso da aproximação que envolve múltiplos pontos é formalmente de segunda ordem, porém, no caso tridimensional, como se pode notar pela Eq. (4.22), a estrutura de dados deixa de ser apenas de arestas, sendo necessário armazenar, para os elementos no contorno, as faces que definem o contorno, ao invés das arestas. A estrutura de dados fica então condicionada aos tipos dos elementos utilizados para a discretização espacial.

Apenas para efeito de simplificação de notação, salvo estabelecido em contrário, utilizaremos a aproximação  $\hat{u}_{IJ_L}^\Gamma = \hat{u}_I$ , que nos permite escrever indistintamente os casos bi e tridimensional.

Substituindo as Eqs. (4.18), (4.19), e (4.20) na Eq. (4.17), e re-arrumando os termos, podemos escrever:

$$\nabla \hat{u}_I = \frac{1}{V_I} \left( \sum_{L=1}^{NM^{(\Omega)}} \frac{\hat{u}_I + \hat{u}_{J_L}}{2} \bar{C}_{IJ_L} + \sum_{L=1}^{NM^{(\Gamma)}} \hat{u}_I \bar{D}_{IJ_L} \right). \quad (4.24)$$

Pode-se mostrar que a expressão acima, a menos do termo de contorno, é uma aproximação de segunda ordem para o gradiente nodal sendo equivalente ao MEF de Galerkin

linear com matriz de massa diagonalizada (BARTH, 1994; SVÄRD e NORDSTRÖM, 2003; REES, 2004).

Após obtermos esta aproximação para o gradiente, voltamos nossa atenção para o problema elíptico original. Ao integrarmos a Eq. (4.7) e usarmos novamente o teorema da divergência de Green-Gauss, obtemos:

$$\int_{\Omega} \nabla^2 u \, d\Omega = \int_{\Gamma} \nabla u \cdot \vec{n} \, d\Gamma = 0. \quad (4.25)$$

Se, de agora em diante, considerarmos um volume de controle  $I$  que se encontra inteiramente no interior do domínio, podemos escrever:

$$\int_{\Gamma_I} \nabla u \cdot \vec{n} \, d\Gamma_I \cong \sum_{L=1}^{NN^{(\Omega)}} \nabla \hat{u}_{I_L} \cdot \vec{C}_{I_L}. \quad (4.26)$$

Utilizando novamente a regra do ponto médio temos:

$$\int_{\Gamma_I} \nabla u \cdot \vec{n} \, d\Gamma_I \cong \sum_{L=1}^{NN^{(\Omega)}} \frac{\nabla \hat{u}_I + \nabla \hat{u}_{J_L}}{2} \cdot \vec{C}_{I_L}. \quad (4.27)$$

Inserindo a Eq. (4.24) na Eq.(4.27), sem considerar nós sobre o contorno, chegamos a:

$$\int_{\Gamma_I} \nabla u \cdot \vec{n} \, d\Gamma_I \cong \sum_{L=1}^{NN^{(\Omega)}} \left( \frac{\frac{1}{V_I} \sum_{\Gamma_I} \frac{\hat{u}_I + \hat{u}_{J_L}}{2} \vec{C}_{I_L} + \frac{1}{V_{J_L}} \sum_{\Gamma_{J_L}} \frac{\hat{u}_{J_L} + \hat{u}_M}{2} \vec{C}_{J_{LM}}}{2} \right) \cdot \vec{C}_{I_L}. \quad (4.28)$$

onde o sub-índice  $M$  foi introduzido para indicar os vizinhos dos nós  $J_L$  vizinhos ao nó  $I$  em questão. Novamente, algumas observações pertinentes devem ser feitas sobre a metodologia em questão.

1. A formulação acima envolve duas etapas bem distintas, uma para o cálculo dos gradientes nodais e outra para o cálculo do termo elíptico fazendo uso dos gradientes calculados no passo anterior;

2. O cálculo do termo elíptico envolve, em princípio, o valor funcional de duas camadas de nós adjacentes a um dado nó  $I$  da malha;

3. Numa malha ortogonal e com espaçamento constante, uni, bi ou tridimensional, podemos mostrar que, num problema isotrópico, o cálculo do termo elíptico para um dado nó  $I$  não faz uso dos vizinhos imediatamente acoplados ao nó. Este desacoplamento, já conhecido e amplamente estudado na literatura de volumes finitos é conhecido como “desaco-

plamento par-ímpar” (PATANKAR, 1980; LYRA, 2004; REES, 2004; REES et al., 2004; LEWIS et al., 2005) sendo mostrado a seguir para um exemplo particular.

Considerando a malha unidimensional e de espaçamento uniforme  $\Delta_{U_L} = 1$ , da Fig. (4.6), temos:

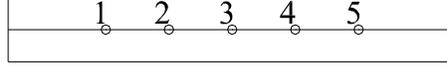


Figura 4.6 – Malha unidimensional com espaçamento uniforme.

A partir da Eq. (4.24), podemos escrever para o nó 3:

$$\nabla \hat{u}_3 = \left(\frac{1}{1}\right) \left( (-1) \frac{\hat{u}_3 + \hat{u}_2}{2} + (1) \frac{\hat{u}_3 + \hat{u}_4}{2} \right) = \frac{\hat{u}_4 - \hat{u}_2}{2}. \quad (4.29)$$

De maneira análoga, obtemos os gradientes para os nós 2 e 4 como:

$$\nabla \hat{u}_2 = \left(\frac{1}{1}\right) \left( (-1) \frac{\hat{u}_2 + \hat{u}_1}{2} + (1) \frac{\hat{u}_2 + \hat{u}_3}{2} \right) = \frac{\hat{u}_3 - \hat{u}_1}{2} \quad (4.30)$$

$$\nabla \hat{u}_4 = \left(\frac{1}{1}\right) \left( (-1) \frac{\hat{u}_4 + \hat{u}_3}{2} + (1) \frac{\hat{u}_4 + \hat{u}_5}{2} \right) = \frac{\hat{u}_5 - \hat{u}_3}{2} \quad (4.31)$$

Calculando os termos difusivos a partir da Eq. (4.28), podemos escrever para o nó 3:

$$\int_{\Gamma_3} \nabla u \cdot \vec{n} d\Gamma_3 \cong \frac{(-1) \left( \frac{\hat{u}_4 - \hat{u}_2}{2} + \frac{\hat{u}_3 - \hat{u}_1}{2} \right) + (1) \left( \frac{\hat{u}_4 - \hat{u}_2}{2} + \frac{\hat{u}_5 - \hat{u}_3}{2} \right)}{2}. \quad (4.32)$$

Rearranjando os termos temos:

$$\int_{\Gamma_3} \nabla u \cdot \vec{n} d\Gamma_3 \cong \frac{\left( \frac{\hat{u}_2 - \hat{u}_4}{2} + \frac{\hat{u}_1 - \hat{u}_3}{2} + \frac{\hat{u}_4 - \hat{u}_2}{2} + \frac{\hat{u}_5 - \hat{u}_3}{2} \right)}{2} = \frac{\hat{u}_1 - 2\hat{u}_3 + \hat{u}_5}{4}. \quad (4.33)$$

Na Equação (4.33), podemos facilmente notar que a formulação que envolve o uso recursivo da média aritmética para o cálculo das derivadas segundas, e que corresponde, no caso unidimensional com malha uniforme, a uma aplicação repetida de um esquema de diferenças finitas centradas para o termo difusivo, produz um estêncil em que um dado nó da malha está desacoplado dos nós vizinhos mais próximos. No caso apresentado, a equação do nó (3) faz uso dos valores funcionais dos nós (1) e (5), estando desacoplada dos nós (2) e (4).

A primeira conclusão que podemos tirar deste fenômeno é que, na verdade, a malha que de fato estamos utilizando para o cálculo dos termos de difusão é uma malha mais “grosseira”, com espaçamento igual à  $2\Delta_{u_L}$ . Graças a este fenômeno, uma distribuição não realística em Zig-Zag da variável  $u$ , conforme mostrado na Fig. (4.7), seria vista pela formulação como um campo constante, o que obviamente não faz nenhum sentido físico.

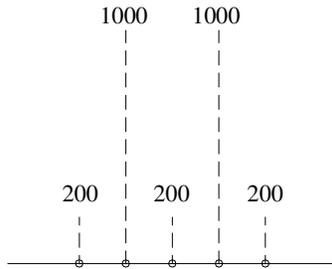


Figura 4.7 – Distribuição não realística de uma variável  $u$  para a malha unidimensional da Fig. (4.6).

Em SVÄRD e NORDSTRÖM (2003) demonstra-se que, mesmo numa malha não-estruturada genérica formada por triângulos, a aproximação que envolve o uso recursivo da média aritmética para o cálculo dos gradientes nos pontos médios das arestas é, no máximo, uma aproximação de primeira ordem para termos difusivos, podendo ser inconsistente em malhas gerais.

#### 4.4.3 Formulação Híbrida: Volumes Finitos - Diferenças Finitas

Tendo em vista as dificuldades inerentes aos dois esquemas apresentados anteriormente, é necessária a utilização de um esquema alternativo, que permita a inclusão dos vizinhos mais próximos como no esquema de dois pontos, e que ao mesmo tempo inclua os termos de fluxo não alinhados com a aresta (cross diffusion terms). Uma possível solução, e que já se tornou clássica na literatura, envolve esquemas em que algumas propriedades do MVF são herdadas pelo método dos elementos finitos. Tais esquemas, que são conhecidos por “Método dos Elementos Finitos com Volume de Controle” (EFVC), do inglês “Control Volume Finite Element” (CVFE), são amplamente utilizados na literatura da DFC, (VERMA, 1996; VERMA e AZIZ, 1996; GRESHO, 2000; PREVOST, 2001; MALISKA, 2004). MALISKA, (2004), levanta alguma polêmica sobre se esta família de aproximações não deveria ser chamada de “Método dos Volumes Finitos Baseados em Elementos” tendo em vista que se realizam balanços sobre volumes de controle criados a partir de elementos, e que se “empresta” de elementos finitos apenas sua “construção geométrica” e o conceito de elementos. Sem nos determos a este tipo de questão terminológica, vale lembrar que, nestes métodos, as funções de forma de elementos finitos (Galerkin) são utilizadas diretamente para a construção dos fluxos utilizados nas equações de balanço nos volumes de controle, sendo que o método importa várias das ferramentas desenvolvidas originalmente para o MEF tradicional no que diz respeito à análise de erros e o estudo de convergência (GRESHO, 2000). No nosso trabalho, utilizaremos uma formulação originalmente proposta por

CRUMPTON et al. (1997), no contexto da solução explícita das equações de Navier-Stokes em meios homogêneos e isotrópicos. Recentemente, esta estratégia foi utilizada com sucesso na solução de problemas de difusão (LYRA, 2004; REES, 2004; REES et al., 2004; LEWIS et al., 2005; CARVALHO et al., 2005a; CARVALHO et al., 2005b) e na discretização de termos difusivos em equações de convecção-difusão (REES, 2004; REES et al., 2004; LEWIS et al., 2005; CARVALHO et al., 2005) a partir de formulações explícitas (REES, 2004; REES et al., 2004; LEWIS et al., 2005). No presente capítulo, estendemos esta formulação para o tratamento de meios heterogêneos e anisotrópicos característicos de meios porosos, além de desenvolvermos as matrizes obtidas a partir da discretização implícita do termo difusivo.

Nossa equação modelo, novamente é a equação elíptica homogênea,  $\nabla^2 u = 0$ . Conforme descrito anteriormente, integramos a equação diferencial e aplicamos o teorema da divergência de Green-Gauss chegando a:

$$\int_{\Omega} \nabla^2 u \, d\Omega = \int_{\Gamma} \nabla u \cdot \vec{n} \, d\Gamma = 0. \quad (4.34)$$

Considerando um volume de controle  $I$  sem interfaces sobre o contorno, podemos escrever a equação anterior na forma discreta como:

$$\int_{\Gamma_I} \nabla u \cdot \vec{n} \, d\Gamma_I \cong \sum_{L=1}^{NN^{(\Omega)}} \nabla \hat{u}_{IJ_L} \cdot \vec{C}_{IJ_L}. \quad (4.35)$$

Ao discretizarmos o termo  $\nabla \hat{u}_{IJ_L}$ , vamos nos utilizar de um sistema local e ortogonal de coordenadas no qual um eixo está orientado segundo uma aresta  $IJ_L$  da malha e o outro eixo está numa direção normal a aresta, conforme mostrado na Fig. (4.8). No caso 2-D a obtenção desta direção é trivial (basta que obtenhamos a direção única em que o produto interno entre as duas direções seja nulo), no caso tridimensional esta direção não está determinada a priori, já que, em três dimensões nós devemos determinar um plano ( $N1 \times N2$ ) ortogonal a aresta  $IJ_L$ , o qual contenha as componentes do gradiente não orientadas segundo a mesma. A seguir, mostraremos em detalhes como determinarmos esta direção, além de mostrarmos como obtermos a aproximação dos gradientes ao longo destas direções ortogonais.

Inicialmente, dividiremos o gradiente total exato ao longo da aresta, em suas componentes paralela (P) e normal (N) a aresta, de modo a termos:

$$\nabla u_{IJ_L} = \nabla u_{IJ_L}^P + \nabla u_{IJ_L}^N. \quad (4.36)$$

Utilizando novamente a regra do ponto médio, podemos escrever o gradiente total aproximado no ponto médio da aresta como:

$$\nabla \hat{u}_{IJ_L} = \nabla \hat{u}_{IJ_L}^P + \nabla \hat{u}_{IJ_L}^N = \left( \frac{\nabla \hat{u}_I + \nabla \hat{u}_{J_L}}{2} \right)^P + \left( \frac{\nabla \hat{u}_I + \nabla \hat{u}_{J_L}}{2} \right)^N. \quad (4.37)$$

Na equação anterior, os gradientes nodais  $\nabla \hat{u}_I$  e  $\nabla \hat{u}_{J_L}$  são calculados pela Eq. (4.24). O gradiente aproximado normal à aresta pode ser então obtido através da seguinte expressão:

$$\nabla \hat{u}_{IJ_L}^N = \nabla \hat{u}_{IJ_L} - \nabla \hat{u}_{IJ_L}^P, \quad (4.38)$$

onde o  $\nabla \hat{u}_{IJ_L}^P$  é calculado através de:

$$\nabla \hat{u}_{IJ_L}^P = \nabla \hat{u}_{IJ_L} \cdot \vec{L}_{IJ_L}. \quad (4.39)$$

Substituindo a Eq. (4.39) na Eq. (4.38), temos:

$$\nabla \hat{u}_{IJ_L}^N = \nabla \hat{u}_{IJ_L} - \nabla \hat{u}_{IJ_L} \cdot \vec{L}_{IJ_L}. \quad (4.40)$$

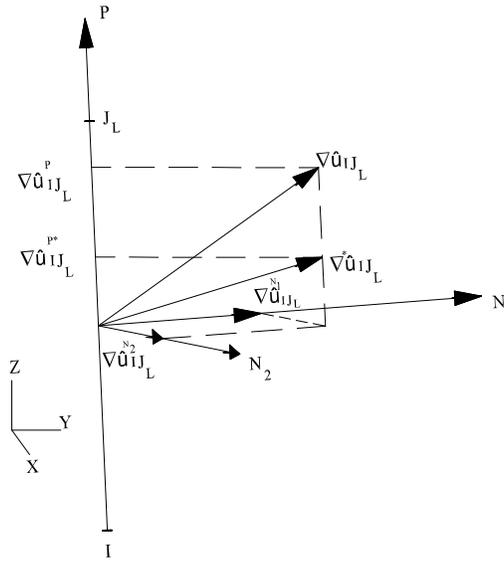


Figura 4.8 – Gradiente no ponto médio da aresta  $IJ_L$  calculado pelo método híbrido volumes finitos - diferenças finitas. A componente do gradiente ao longo da aresta é representada por  $\nabla \hat{u}_{IJ_L}^{P*}$  e componente normal calculada pelo MVF é representada por  $\nabla \hat{u}_{IJ_L}^N$ .

Por outro lado, podemos substituir a componente aproximada paralela a aresta do gradiente,  $\nabla \hat{u}_{IJ_L}^P$ , por uma nova aproximação em diferenças centradas,  $\nabla \hat{u}_{IJ_L}^{P*}$ , obtida por:

$$\nabla \hat{u}_{IJ_L}^{P*} = \frac{\hat{u}_{J_L} - \hat{u}_I}{\Delta_{IJ_L}} \bar{L}_{IJ_L}. \quad (4.41)$$

Portanto, podemos escrever um novo gradiente aproximado no ponto médio da aresta  $IJ_L$ , como:

$$\nabla \hat{u}_{IJ_L}^* = \nabla \hat{u}_{IJ_L}^{P*} + \nabla \hat{u}_{IJ_L}^N. \quad (4.42)$$

Substituindo a Eq. (4.37) na Eq. (4.40), e substituindo o termo resultante e a Eq. (4.41) na Eq. (4.42), chegamos a:

$$\nabla \hat{u}_{IJ_L}^* = \left( \frac{\nabla \hat{u}_I + \nabla \hat{u}_{J_L}}{2} - \left( \frac{\nabla \hat{u}_I + \nabla \hat{u}_{J_L}}{2} \cdot \bar{L}_{IJ_L} \right) \bar{L}_{IJ_L} + \frac{\hat{u}_{J_L} - \hat{u}_I}{\Delta_{IJ_L}} \bar{L}_{IJ_L} \right). \quad (4.43)$$

Finalmente, utilizando a aproximação da Eq. (4.43) na Eq. (4.35), podemos escrever:

$$\begin{aligned} \int_{\Gamma_I} \nabla u \cdot \bar{n} d\Gamma_I &\cong \sum_{L=1}^{NN^{(\Omega)}} \nabla \hat{u}_{IJ_L}^* \cdot \bar{C}_{IJ_L} = \\ &\sum_{L=1}^{NN^{(\Omega)}} \left( \frac{\nabla \hat{u}_I + \nabla \hat{u}_{J_L}}{2} - \left( \frac{\nabla \hat{u}_I + \nabla \hat{u}_{J_L}}{2} \cdot \bar{L}_{IJ_L} \right) \bar{L}_{IJ_L} + \frac{\hat{u}_{J_L} - \hat{u}_I}{\Delta_{IJ_L}} \bar{L}_{IJ_L} \right) \cdot \bar{C}_{IJ_L}. \end{aligned} \quad (4.44)$$

Lembrando que na Eq. (4.44), desconsideramos o termo de contorno. De maneira análoga a Eq. (4.18), este termo é incluído de maneira simples como:

$$\begin{aligned} \int_{\Gamma_I} \nabla u \cdot \bar{n} d\Gamma &\cong \sum_{L=1}^{NN^{(\Omega)}} \nabla \hat{u}_{IJ_L}^* \cdot \bar{C}_{IJ_L} + \sum_{L=1}^{NN^{(\Gamma)}} \nabla \hat{u}_{IJ_L}^\Gamma \cdot \bar{D}_{IJ_L} = \\ &\sum_{L=1}^{NN^{(\Omega)}} \left( \frac{\nabla \hat{u}_I + \nabla \hat{u}_{J_L}}{2} - \left( \frac{\nabla \hat{u}_I + \nabla \hat{u}_{J_L}}{2} \cdot \bar{L}_{IJ_L} \right) \bar{L}_{IJ_L} + \frac{\hat{u}_{J_L} - \hat{u}_I}{\Delta_{IJ_L}} \bar{L}_{IJ_L} \right) \cdot \bar{C}_{IJ_L} + \sum_{L=1}^{NN^{(\Gamma)}} \nabla \hat{u}_{IJ_L}^\Gamma \cdot \bar{D}_{IJ_L}. \end{aligned} \quad (4.45)$$

Algumas observações pertinentes devem ser feitas a respeito da aproximação anterior:

1. Ao utilizarmos a aproximação local de diferenças centradas para a componente paralela do gradiente aproximado, nós acoplamos os nós adjacentes e evitamos a ocorrência de oscilações par-ímpar características de formulações clássicas que utilizam o estêncil estendido;

2. Ao utilizarmos a aproximação estendida para calcularmos a componente normal do gradiente, nós garantimos a consistência física da formulação (ao incluirmos os termos de

difusão cruzada) mesmo quando as faces dos volumes de controle não forem ortogonais a aresta;

3. No caso de malhas não-ortogonais o custo a ser pago para garantirmos a continuidade e a consistência física nos gradientes/fluxos nas interfaces dos volumes de controle para malhas gerais é lidarmos com um estêncil maior que aquele que obteríamos ao utilizarmos, por exemplo, o método de Galerkin, inclusive no caso de meios homogêneos e isotrópicos (EDWARDS, 1998; AAVATSMARK, et al., 1998b; PREVOST, 2001).

4. No caso de malhas ortogonais, para problemas homogêneos e isotrópicos, esta formulação é análoga ao método DFVC usual.

### ***Meios Heterogêneos e Anisotrópicos***

A solução de problemas elípticos em meios heterogêneos e anisotrópicos constitui-se num grande desafio para os pesquisadores da área de modelagem e simulação de fluxo em meios porosos. A discretização destes termos elípticos utilizando-se de métodos localmente conservativos é algo não trivial, sendo uma área de pesquisa intensa nos últimos dez anos, (CRUMPTON et al., 1995; VERMA, 1996; VERMA e AZIZ, 1996; HYMAN et al., 1997; EDWARDS, 1998; EDWARDS e ROGERS, 1998; AAVATSMARK, et al., 1998a; AAVATSMARK, et al., 1998b; PREVOST, 2001; KLAUSEN e EIGESTAD, 2004; REES, 2004; LEWIS et al. 2005). No presente trabalho apresentaremos uma formulação do método dos volumes finitos em que as propriedades físicas dos materiais estão associadas aos elementos da malha primal (ex. triângulos e quadriláteros em 2-D e tetraedros e hexaedros em 3-D). Estes esquemas são comumente chamados de “distribuídos nas células” (cell distributed schemes), PREVOST (2001), em contraste com os esquemas em que as propriedades físicas estão associadas aos elementos da malha dual (volumes de controle), os quais são conhecidos como “distribuídos nos nós” (node distributed schemes), VERMA (1996), VERMA e AZIZ (1996), PREVOST (2001).

A escolha desta abordagem se deu basicamente pela facilidade encontrada para associarmos as propriedades das rochas a subdomínios formados por agrupamentos de elementos, estratégia esta, muito comum em geradores de malhas não-estruturadas (CARVALHO, 2001).

Para o caso bidimensional, a equação que define um problema elíptico num meio heterogêneo e anisotrópico pode ser escrita como:

$$\nabla \cdot (\underline{K}(\bar{x}) \nabla u(\bar{x})) = 0 \quad \text{com} \quad \bar{x} = (x, y) \in \Omega \subset \mathbb{R}^2, \quad (4.46)$$

onde:

$$\underline{K}(\bar{x}) = \underline{K} = \begin{pmatrix} K_{xx} & K_{xy} \\ K_{yx} & K_{yy} \end{pmatrix}, \quad (4.47)$$

é uma matriz simétrica que pode ser descontínua através de fronteiras internas do domínio  $\Omega$ . Para que o problema definido pela Eq. (4.46) seja considerado elíptico, assumimos adi-

cionalmente que  $K_{xx}K_{yy} > K_{xy}^2$  (CRUMPTON et al., 1995). Integrando a Eq. (4.46) e aplicando o teorema de Green-Gauss temos:

$$\int_{\Omega} \nabla \cdot (\underline{K} \nabla u) \partial \Omega = \int_{\Gamma} (\underline{K} \nabla u) \cdot \vec{n} \partial \Gamma = 0. \quad (4.48)$$

No método dos elementos finitos tradicional, para o caso heterogêneo e anisotrópico, a definição dos fluxos sobre as arestas localizadas na interface entre diferentes materiais (no nosso caso, diferentes rochas) é ambígua (HELMIG e HUBER, 1998). Se os gradientes calculados de acordo com a Eq. (4.24) forem utilizados diretamente para o cálculo dos fluxos, valores incorretos serão obtidos para os mesmos nas superfícies de controle adjacentes às discontinuidades entre diferentes materiais. Já que, para a construção de parte do fluxo na interface do volume de controle, utilizamos o gradiente nodal equivalente ao obtido pelo MEF (BARTH, 1994), é necessário que modifiquemos nosso esquema original. Com o objetivo de resolvermos este problema, nós utilizamos uma estratégia em que calculamos os gradientes em cada subdomínio de maneira independente.

Primeiramente consideraremos que as propriedades físicas do meio descontínuo (ex. a rocha), tais como porosidade e permeabilidade, estão associadas a sub-domínios  $\Omega_r$ , com  $r = 1, 2, \dots, R$ . Para cada sub-domínio físico, armazenamos uma lista de arestas e nós e seus correspondentes coeficientes geométricos. Considerando a malha bidimensional da Fig. (4.9), é necessário incluímos os seguintes coeficientes geométricos adicionais:

$$\vec{D}_{IJ_L} = A_L \vec{n}_L \text{ e } \vec{D}_{IJ_M} = A_M \vec{n}_M. \quad (4.49)$$

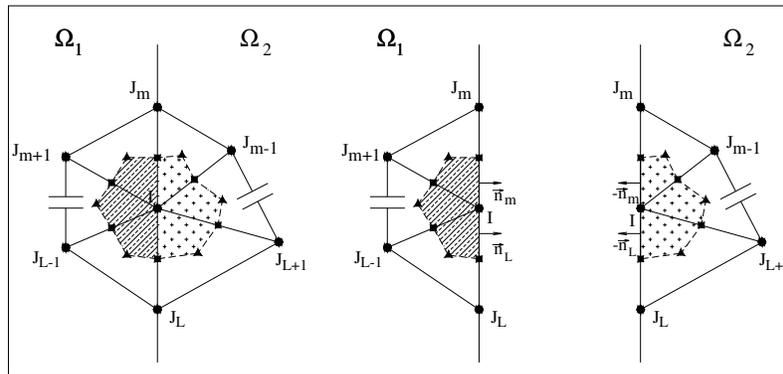


Figura 4.9. Volume de controle subdividido por dois tipos diferentes de rocha.

Estes coeficientes geométricos estão associados às faces (arestas em 2-D) que separam os diferentes materiais. Se utilizarmos a aproximação da Eq. (4.21) para reconstruirmos os gradientes e conseqüentemente os fluxos nos termos de contorno, obteremos uma aproximação de segunda ordem para os fluxos no interior de cada material, lidando tranqüilamente com a discontinuidade nos fluxos decorrente da discontinuidade nos materiais. Desta forma, para meios descontínuos, podemos escrever:

$$\nabla \hat{u}_I^{\Omega_r} = \frac{1}{V_I^{\Omega_r}} \left[ \sum_{L=1}^{NN(\Omega_r)} \frac{(\hat{u}_I + \hat{u}_{J_L})}{2} \bar{C}_{IJ_L}^{\Omega_r} + \sum_{L=1}^{NN(\Gamma_{RE})} \frac{(5\hat{u}_I + \hat{u}_{J_L})}{6} \bar{D}_{IJ_L}^{\Omega_r} + \sum_{L=1}^{NN(\Gamma_{RI})} \frac{(5\hat{u}_I + \hat{u}_{J_L})}{6} \bar{D}_{IJ_L}^{\Omega_r} \right]. \quad (4.50)$$

Na Eq. (4.50),  $\nabla u_I^{\Omega_r}$  é o gradiente nodal e  $V_I^{\Omega_r}$  é o volume de controle do nó  $I$  associado ao subdomínio  $\Omega_r$ ,  $\bar{C}_{IJ_L}^{\Omega_r}$  e  $\bar{D}_{IJ_L}^{\Omega_r}$  se referem aos coeficientes geométricos da aresta  $IJ_L$  associados ao mesmo subdomínio  $\Omega_r$ . É importante notar que nesta abordagem por subdomínio,  $\bar{D}_{IJ_L}^{\Omega_r}$  se refere tanto às arestas nas interfaces entre diferentes materiais, quanto às arestas do contorno externo do domínio. Por outro lado,  $\Gamma_{RE}$  e  $\Gamma_{RI}$  referem-se respectivamente, a laços realizados sobre arestas de contornos externos e de interfaces entre diferentes sub-domínios de tal forma que  $\Gamma_r = \Gamma_{RE} \cup \Gamma_{RI}$ . No caso tridimensional, considerando-se elementos tetraédricos, a Eq. (4.50) pode ser reescrita como:

$$\nabla \hat{u}_I^{\Omega_r} = \frac{1}{V_I^{\Omega_r}} \left[ \sum_{J_L=1}^{NN(\Omega_r)} \frac{(\hat{u}_I + \hat{u}_{J_L})}{2} \bar{C}_{IJ_L}^{\Omega_r} + \sum_{J_L=1}^{NN(\Gamma_{RE})} \frac{(6\hat{u}_I + \hat{u}_{J_L} + \hat{u}_{J_H})}{8} \bar{D}_{IJ_L J_H}^{\Omega_r} + \sum_{J_L=1}^{NN(\Gamma_{RI})} \frac{(6\hat{u}_I + \hat{u}_{J_L} + \hat{u}_{J_H})}{8} \bar{D}_{IJ_L J_H}^{\Omega_r} \right]. \quad (4.51)$$

Neste caso,  $\Gamma_{RE}$  e  $\Gamma_{RI}$  referem-se a laços realizados sobre as faces dos elementos tetraédricos localizadas sobre contornos externos e internos, respectivamente.

Se considerarmos a aproximação mais simples para os fluxos nas interfaces entre diferentes materiais e para contornos externos, teremos a seguinte equação, a qual pode ser obtida totalmente a partir da estrutura de dados por aresta como:

$$\nabla \hat{u}_I^{\Omega_r} = \frac{1}{V_I^{\Omega_r}} \left[ \sum_{L=1}^{NN(\Omega_r)} \frac{(\hat{u}_I + \hat{u}_{J_L})}{2} \bar{C}_{IJ_L}^{\Omega_r} + \sum_{L=1}^{NN(\Gamma_{RE})} \hat{u}_I \bar{D}_{IJ_L}^{\Omega_r} + \sum_{L=1}^{NN(\Gamma_{RI})} \hat{u}_I \bar{D}_{IJ_L}^{\Omega_r} \right]. \quad (4.52)$$

Vale salientar novamente, que a aproximação acima é válida tanto para problemas bidimensionais quanto para problemas tridimensionais, porém em ambos os casos, ela não é de segunda ordem no espaço para nós sobre o contorno e para os nós adjacentes ao contorno, de modo que um campo linear  $u$  não será recuperado exatamente a partir desta aproximação (MALAN, 2002).

Utilizando o método apresentado na seção (4.4.3) com as modificações introduzidas anteriormente, podemos escrever a forma discreta da Eq. (4.45) para um nó  $I$  genérico da malha como:

$$\int_{\Gamma_I} \tilde{K} \nabla u \cdot \bar{n} d\Gamma_I \cong \sum_{r=1}^{Ndom} \left[ \sum_{L=1}^{NN(\Omega_r)} \tilde{K}^{\Omega_r} \left( \frac{(\nabla \hat{u}_I^{\Omega_r} + \nabla \hat{u}_{J_L}^{\Omega_r})}{2} - \left( \frac{(\nabla \hat{u}_I^{\Omega_r} + \nabla \hat{u}_{J_L}^{\Omega_r})}{2} \cdot \bar{L}_{IJ_L} \right) \bar{L}_{IJ_L} + \frac{(\hat{u}_{J_L} - \hat{u}_I)}{|\Delta_{IJ_L}|} \bar{L}_{IJ_L} \right) \right] \cdot \bar{C}_{IJ_L}^{\Omega_r} + \sum_{R=1}^{Ndom} \left( \sum_{L=1}^{NN(\Gamma_R)} (\tilde{K}^{\Omega_r} \hat{u}_{J_L}^{\Omega_r}) \cdot \bar{D}_{IJ_L}^{\Omega_r} \right). \quad (4.53)$$

Na Eq. (4.53),  $\nabla \hat{u}_I^{\Omega_r}$  e  $\nabla \hat{u}_{J_L}^{\Omega_r}$  são calculados utilizando-se as expressões dadas pelas Eqs. (4.50) até (4.52) dependendo da precisão desejada. É importante enfatizar que a Eq. (4.53) é construída a partir das contribuições de cada subdomínio de maneira independente de modo a garantir que os gradientes, e conseqüentemente os fluxos, sejam contínuos dentro de cada subdomínio.

É importante notar ainda que no desenvolvimento da Eq. (4.53) nós tratamos o tensor  $\tilde{K}^{\Omega_r}$  como um tensor cheio (full tensor), não fazendo nenhuma restrição que limitasse o nosso método de resolução a problemas isotrópicos ou mesmo ortotrópicos, com  $K_{xy}^{\Omega_r} = K_{yx}^{\Omega_r} = 0$ . Na verdade, diferentemente dos métodos DFVC usuais ou métodos conservativos que se baseiam apenas nos dois valores nodais associados a uma aresta para a construção do fluxo na interface do volume de controle, nós nos utilizamos de um estêncil estendido para a correta obtenção dos termos de difusão cruzada. A despeito de ainda ser amplamente utilizada na literatura e na prática da simulação de reservatórios, a aproximação de dois pontos implica em erros graves na aproximação dos fluxos nas interfaces dos volumes de controle sempre que a malha não é ortogonal ou sempre que os termos cruzados ( $K_{xy}^{\Omega_r}$ ,  $K_{yx}^{\Omega_r}$ ) se tornam importantes, como no caso da aplicação de técnicas de transferência de escala (EDWARDS e ROGERS, 1998).

#### 4.4.4 Exemplos

Para avaliarmos a acurácia do procedimento descrito no presente capítulo para a solução de problemas com coeficientes descontínuos e anisotrópicos, apresentamos a solução de três problemas (benchmarks) encontrados na literatura (REES, 2004; CRUMPTON et al., 1995; HYMAN et al., 1997). A discretização dos termos fontes existentes nos exemplos 2 e 3, tanto para meios homogêneos quanto para meios heterogêneos, é apresentada ainda neste capítulo na seção (4.7.1).

Antes de resolvermos os três problemas seguintes, definimos o erro assintótico de truncamento como (HYMAN et al., 1997):

$$\|E_h\| = Ch^q + O(h^{q+1}), \quad (4.54)$$

onde,  $h$  é o espaçamento da malha,  $q$  é a ordem do erro,  $C$  é uma constante que representa a taxa de convergência que é independente de  $h$ , e  $\|\cdot\|$  é alguma norma especificada. Nos exemplos 2 e 3 os erros de truncamento são calculados numa seqüência de malhas cuja ma-

lha inicial tem um número de subdivisões  $N = (8 \times 8)$  e as malhas seguintes têm  $(16 \times 16)$ ,  $(32 \times 32)$  e  $(64 \times 64)$  subdivisões, respectivamente. Neste caso, a taxa de convergência  $q$  é estimada a partir da seguinte expressão:

$$q \cong \log_2 \frac{\|E_h\|}{\|E_{h/2}\|}. \quad (4.55)$$

Para os problemas apresentados, estas taxas de convergência foram estimadas utilizando-se três diferentes normas: a norma do máximo  $\|E\|_{MAX}$ , a norma  $L_2$ ,  $\|E\|_{L_2}$ , e a norma RMS (Root Mean Square),  $\|E\|_{RMS}$ , conforme definido em HYMAN et al. (1997) e CRUMPTON et al. (1995), respectivamente. Estas normas são calculadas através das seguintes expressões:

$$\|E\|_{MAX} = \|\hat{u} - u\|_{L_{MAX}} = MAX \|\hat{u}_I - u_I\| \quad I = 1, \dots, NP, \quad (4.56)$$

$$\|E\|_{L_2} = \|\hat{u} - u\|_{L_2} = \left( \sum_{I=1}^{NP} ((\hat{u} - u)^2 V_I) \right)^{1/2}, \quad (4.57)$$

$$\|E\|_{RMS} = \|\hat{u} - u\|_{L_{RMS}} = \left( \sum_{I=1}^{NP} (\hat{u} - u)^2 / NP \right)^{1/2}. \quad (4.58)$$

Nas equações anteriores,  $NP$  é o número total de nós  $I$  da malha.

**Exemplo 1.  $\underline{K}$  descontínuo e diagonal.**

Neste exemplo, consideraremos a equação elíptica  $\nabla \cdot (\underline{K} \nabla P) = 0$  com  $\underline{K} = k \underline{I}$ , onde  $k$  representa um coeficiente de difusão escalar descontínuo (ex. permeabilidade),  $\underline{I}$  é a matriz identidade, e  $P$  é uma variável escalar (ex. pressão). Este problema encontra-se descrito em detalhes em REES (2004). Nesta referência, o problema foi resolvido através de um método de volumes finitos com estrutura de dados por aresta, sendo que o autor lida com meios heterogêneos (nenhuma referência a meios anisotrópicos) de uma maneira completamente diferente da abordagem que adotamos no presente trabalho. O procedimento apresentado em REES (2004) consiste basicamente em três etapas: inicialmente assume-se que o coeficiente  $k$  está associado aos elementos da malha (método baseado na célula); na segunda etapa, o coeficiente  $k$  é associado aos nós da malha usando uma média ponderada pelos volumes dos elementos que concorrem num dado nó. Posteriormente, os valores de  $k$  são associados às arestas das malhas a partir da média aritmética dos valores nodais correspondentes obtidos na primeira etapa. Os coeficientes assim obtidos são usados diretamente nas equações de balanço para o cálculo dos fluxos através de diferentes materiais. A despeito

de considerarmos esta estratégia um procedimento válido de aproximação, nós acreditamos firmemente que o nosso procedimento para o cálculo dos fluxos através das superfícies de controle adjacentes às interfaces entre diferentes materiais tem uma base física muito mais sólida, sendo que, assim como nos métodos MPFA (AAVATSMARK et al., 1998a; AAVATSMARK et al., 1998b) os fluxos/velocidades usados nos cálculos das equações de balanço são obtidos exatamente, no caso de uma variação linear do campo de pressão.

### 1.1 Domínio dividido horizontalmente

Inicialmente consideraremos um domínio quadrado de lado unitário dividido horizontalmente em duas partes iguais conforme mostrado na Fig. (4.10a). O coeficiente  $k$ , que representa a permeabilidade do meio, é dado por  $k_A = 10.0$ , para o subdomínio A, e  $k_B = 50.0$  para o subdomínio B. As condições de contorno são  $P_{inf} = 1.0$  na parte inferior e  $P_{sup} = 0.0$  na parte superior e condições homogêneas de Neumann nas faces laterais do domínio. Para este problema, utilizamos uma malha triangular formada por sete elementos (apenas duas subdivisões na direção  $y$ ) conforme mostrado na Fig. (4.10b), onde apresentamos ainda os contornos para o campo de pressão obtido.

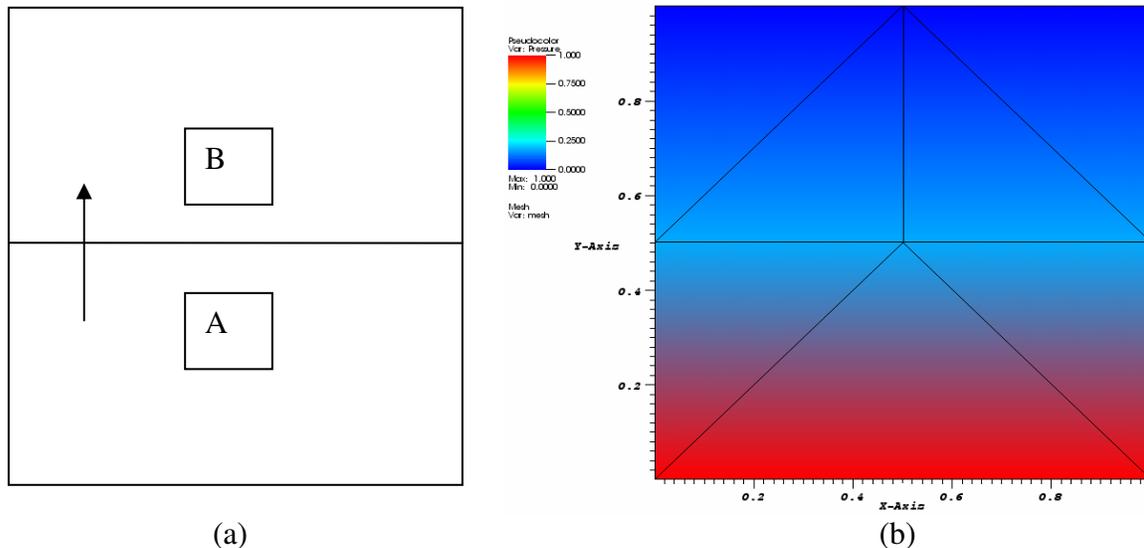


Figura 4.10 – (a) Domínio quadrado dividido horizontalmente em dois materiais diferentes; (b) malha triangular utilizada para a discretização do domínio e os contornos do campo de pressão  $P$ .

A solução exata para este problema, na interface entre os dois materiais, *i.e.*, em  $y = 0.5$ , é dada por  $P = 1/6$ . As velocidades nos dois subdomínios são iguais, sendo dadas por  $v_A = v_B = -k(\partial P/\partial y) = 100/6$  (REES, 2004). Utilizando o procedimento descrito em (REES, 2004), os erros relativos máximos para a pressão e para a velocidade, ou seja,  $E_{rmax}^P = \max|(u - \hat{u})/u|$  com  $u = P$  e  $u = v$ , são dados por  $E_{rmax}^P \cong 83.501\%$ , para as pressões nos três nós localizados sobre a interface entre os dois materiais, e  $E_{rmax}^v \cong 51.041\%$

para as velocidades calculadas nos pontos médios das arestas da malha. Por outro lado, utilizando o procedimento desenvolvido no presente trabalho, tanto o campo de pressões quanto o campo de velocidades são calculados exatamente até a precisão da máquina.

### 1.2 Domínio dividido verticalmente

No segundo problema, o domínio quadrado é dividido em duas partes verticais conforme mostrado na Fig. (4.11a). As condições de contorno são as mesmas do problema anterior, *i.e.*  $P_{inf} = 1.0$  na parte inferior do domínio e  $P_{sup} = 0.0$  na parte superior do domínio e condições homogêneas de Neumann nas faces laterais do domínio. Neste caso, a solução exata para a pressão nodal na interface dos dois materiais em  $y = 0.5$  é dada por  $P = 0.5$ . As velocidades nos subdomínios A e B são dadas, respectivamente, por  $v_A = -k_A (\partial P / \partial y) = 10.0$  e  $v_B = -k (\partial P / \partial y) = 50.0$ . Utilizando o procedimento descrito em REES, (2004), os erros relativos para a pressão nodal e para as velocidades são dados, respectivamente por,  $E_{r,max}^P \cong 7.838\%$  e  $E_{r,max}^v \cong 3.839\%$ . Novamente, utilizando nosso método de aproximação, as pressões e as velocidades são calculadas de maneira exata. A Figura (11b) mostra a malha utilizada, bem como o campo de pressões associado.

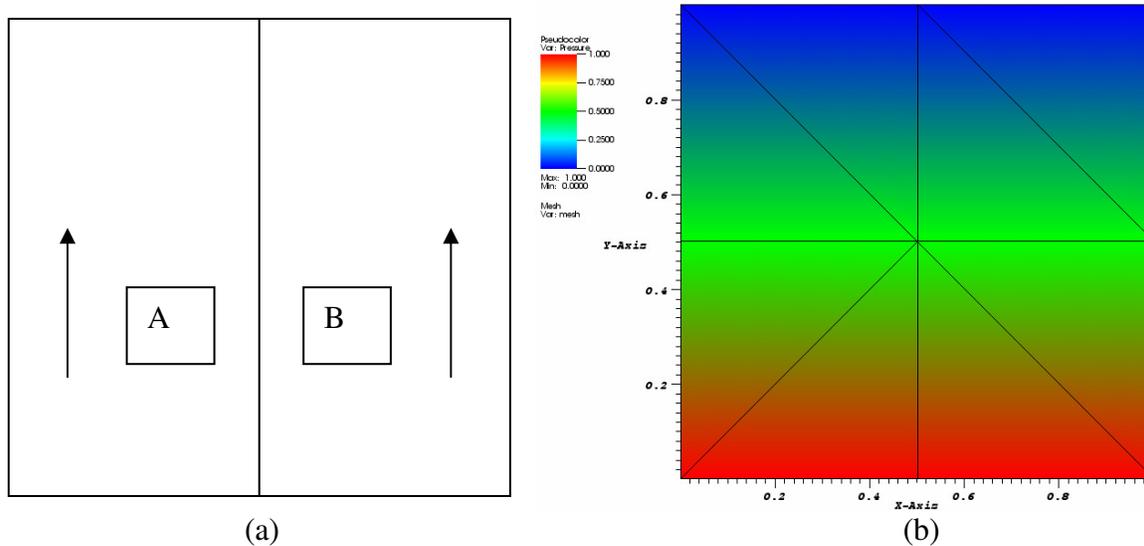


Figura 4.11 – (a) Domínio quadrado dividido verticalmente em dois materiais diferentes; (b) malha triangular utilizada para a discretização do domínio e o campo de pressão  $P$ .

Uma observação interessante é que, no primeiro exemplo (1.1), os erros relativos máximos, tanto para o campo de pressão quanto para o campo de velocidades, obtidos utilizando-se o método descrito em REES (2004) são muito maiores que os cometidos utilizando o mesmo método para a solução do segundo problema (exemplo 2). Isto pode ser facilmente explicado notando-se que, no primeiro exemplo, caso estivéssemos utilizando um método de diferenças finitas, a permeabilidade equivalente na interface entre os diferentes materiais seria calculada pela média harmônica entre as permeabilidades dos dois materiais adjacentes, de modo que a aproximação das permeabilidades por médias aritméticas ponde-

radas pelos volumes de controle leva, neste caso, a erros de primeira ordem no cálculo dos fluxos (velocidade X área da superfície de controle) nas superfícies de controle conforme indicado por EDWARDS (1998). Por outro lado, no exemplo (1.2), os fluxos exatos são proporcionais à largura de cada domínio, de modo que a aproximação proposta em REES (2004), representa de maneira bem melhor o fenômeno físico de interesse.

Finalmente, vale salientar que nosso método é construído de modo a garantir a continuidade dos fluxos nas interfaces dos volumes de controle sem a necessidade de nenhum tipo de média ou ponderação explícita, deste modo, as soluções que obtivemos não padecem dos problemas encontrados pela aproximação proposta em REES (2004).

**Exemplo 2.  $\tilde{K}$  contínuo e não diagonal.**

Este problema foi originalmente apresentado em CRUMPTON et al. (1995), sendo também resolvido em HYMAN et al. (1997). O domínio é um quadrado unitário com condições de contorno numéricas de Dirichlet obtidas a partir da solução exata, a qual é dada por  $u = e^{xy}$ . De forma concisa, o problema é descrito por:

$$\nabla(\tilde{K}\nabla u) = -2(1 + x^2 + xy + y^2)e^{xy}, \quad (4.59)$$

onde  $\tilde{K}$  é dado por:

$$\tilde{K} = \begin{pmatrix} 2 & 1 \\ 1 & 2 \end{pmatrix}. \quad (4.60)$$

Apenas para efeito de comparação, nas tabelas 4.3, 4.4 e 4.5, respectivamente, reproduzimos os resultados obtidos e utilizando o método de nove pontos de CRUMPTON et al. (1995) e os métodos “Cell Node” e “Cell Surface” de HYMAN et al. (1997).

Tabela 4.3 – Erros e taxas de convergência para o exemplo 2 (CRUMPTON et al., 1995).

Divisões N	$\ E\ _{RMS}$	$q_{RMS}$
8	1.16e-003	-----
16	2.89e-004	2.0050
32	7.28e-005	1.9891
64	1.83e-005	1.9921

Tabela 4.4 – Erros e taxas de convergência para o exemplo 2 pelo método “Cell-Node” (HYMAN et al., 1997).

Divisões N	$\ E\ _{L_2}$	$\ E\ _{MAX}$	$q_{L_2}$	$q_{MAX}$
16	1.06e-003	3.74e-003	-----	-----
32	2.58e-004	9.66e-004	2.0386	1.9529
64	6.36e-005	2.45e-004	2.0203	1.9792

Tabela 4.5 – Erros e taxas de convergência para o exemplo 2 Método “Cell-Surface” (HYMAN et al., 1997).

Divisões N	$\ E\ _{L_2}$	$\ E\ _{MAX}$	$q_{L_2}$	$q_{MAX}$
16	1.68e-003	5.11e-003	-----	-----
32	4.15e-004	1.35e-003	2.0173	1.9204
64	9.73e-005	3.48e-004	2.0926	1.9558

Nas Figuras. (4.12a) e (4.12b) apresentamos, respectivamente, a malha triangular e a superfície extrudada para a função  $u(x, y)$  na malha com (8x8) subdivisões, e as isolinhas para a malha com (64x64) divisões. Na tabela 4.6 apresentamos as taxas de convergência para malhas refinadas a partir da subdivisão dos elementos de maneira sucessiva, *i.e.*  $N = (8 \times 8)$ ,  $(16 \times 16)$ ,  $(32 \times 32)$  e  $(64 \times 64)$ , respectivamente.

Conforme podemos observar pela análise das tabelas 4.1 até 4.4, neste exemplo, todos os métodos apresentaram comportamento similar com respeito às taxas de convergência sendo que o MVFA apresentou resultados um pouco melhores (*i.e.* erros menores) que os do método de CRUMPTON et al. (1995), e que os de ambos os métodos apresentados por HYMAN et al. (1998).

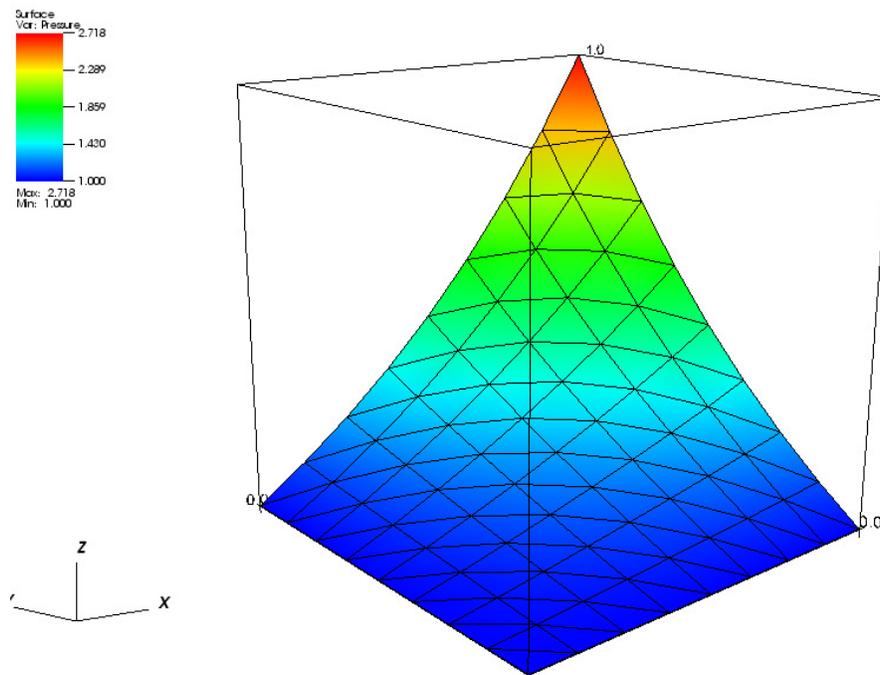


Figura 4.12 – Malha triangular com (8x8) sub-divisões e superfície “extrudada” na direção Z, para a variável u.

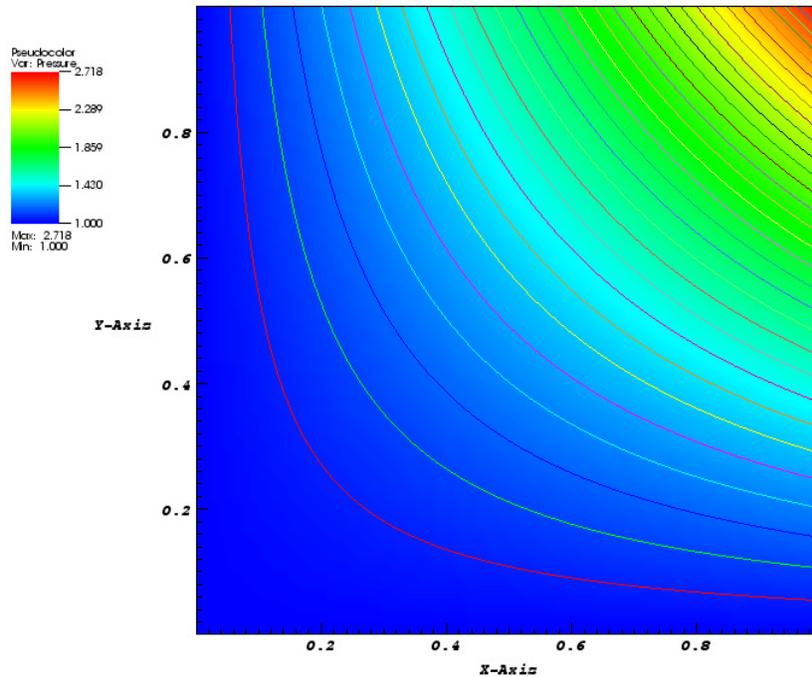


Figura 4.13 –Isolinhas da variável  $u$  para a malha com  $(64 \times 64)$  divisões.

Tabela 4.6 – Erros e taxas de convergência para o exemplo 2 obtidas pelo MVFA.

Divisões N	$\ E\ _{RMS}$	$\ E\ _{L_2}$	$\ E\ _{MAX}$	$q_{RMS}$	$q_{L_2}$	$q_{MAX}$
8	7.839e-004	7.028e-004	3.0e-003	-----	-----	-----
16	1.850e-004	1.769e-004	1.0e-003	2.0827	1.9896	1.5850
32	3.862e-005	3.877e-005	3.434e-004	2.2605	2.1904	1.8047
64	9.272e-006	9.272e-006	8.958e-005	2.0584	2.0642	1.9390

Na Figura (4.13) apresentamos, para o exemplo 2, o comportamento dos erros calculados em diferentes normas, conforme descrito em CRUMPTON et al. (1995) e HYMAN et al. (1997).

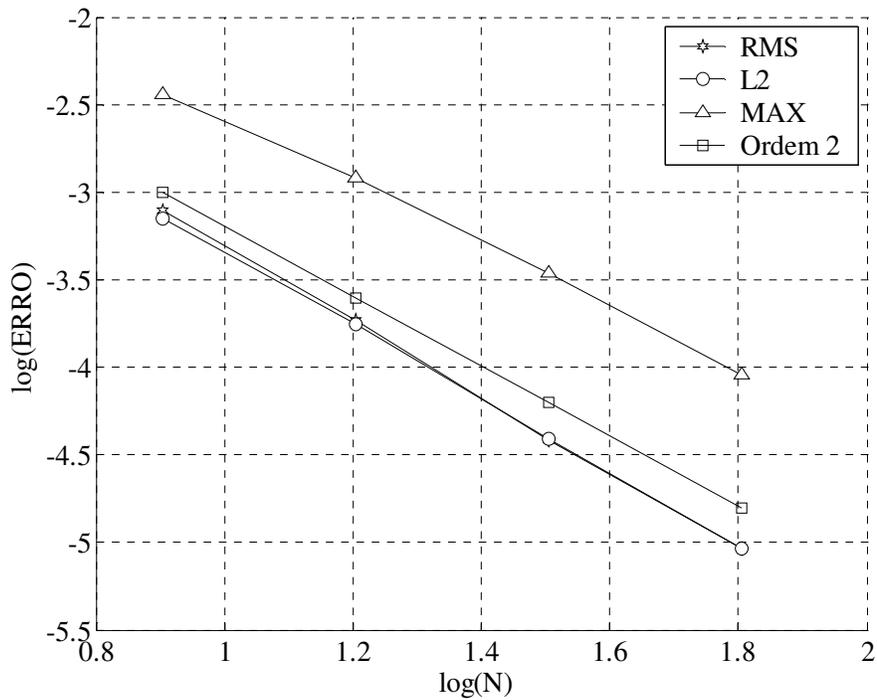


Figura 4.14 – Comportamento do erro usando diferentes normas para o exemplo com  $\underline{K}$  contínuo e não-diagonal.

**Exemplo 3.  $\underline{K}$  descontínuo e não-diagonal.**

Este problema foi retirado de CRUMPTON et al. (1995), sendo parcialmente resolvido em HYMAN et al. (1997). O domínio é um quadrado com dimensões  $[-1,1] \times [-1,1]$  com condições de contorno numéricas de Dirichlet obtidas a partir da solução exata. Este problema é descrito por:

$$\nabla \cdot (\underline{K} \nabla u) = f(x, y), \tag{4.61}$$

onde o termo fonte distribuído é dado por:

$$f(x, y) = \begin{cases} [-2\text{sen}(y) - \cos(y)]\alpha x - \text{sen}(y) & \text{para } x \leq 0 \\ 2\alpha \exp(x)\cos(y) & \text{para } x > 0 \end{cases}, \tag{4.62}$$

e o tensor  $\underline{K}$  é fornecido por:

$$\tilde{K} = \begin{cases} \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1 \end{pmatrix} & \text{para } x < 0 \\ \alpha \begin{pmatrix} 2 & 1 \\ 1 & 2 \end{pmatrix} & \text{para } x > 0 \end{cases}, \quad (4.63)$$

onde  $\alpha$  é a intensidade da descontinuidade entre as diferentes regiões. A solução exata para este problema é dada por:

$$u(x, y) = \begin{cases} [2\text{sen}(y) + \cos(y)]\alpha x + \text{sen}(y) & \text{para } x \leq 0 \\ \exp(x)\cos(y) & \text{para } x > 0 \end{cases}. \quad (4.64)$$

Resolvemos este problema para  $\alpha = 1.0$ ,  $\alpha = 10.0$ ,  $\alpha = 100.0$  e  $\alpha = 1000.0$ , usando uma seqüência de malhas triangulares não-estruturadas que, neste exemplo, foram geradas diretamente sobre o domínio computacional com um espaçamento tal que as subdivisões das malhas eram aproximadamente de (8x8), (16x16), (32x32) e (64x64). Novamente, apenas para efeito de comparação, apresentamos nas tabelas 4.7 até 4.10, os erros e as taxas de convergência obtidas com o método de nove pontos de CRUMPTON et al. (1995), para os quatro diferentes valores de  $\alpha$  utilizados. Nas tabelas 4.11 e 4.12, apresentamos os resultados obtidos em HYMAN et al. (1997) para o método “Cell Node” e “Cell Surface” apenas com  $\alpha = 1.0$ , já que não são disponibilizados os resultados para os outros três valores de  $\alpha$  em HYMAN et al. (1997).

Tabela 4.7 – Erros e taxas de convergência para o exemplo 3 com  $\alpha = 1.0$  (CRUMPTON et al., 1995).

Divisões N	$\ E\ _{RMS}$	$\ E\ _{L_2}$	$\ E\ _{MAX}$	$q_{RMS}$	$q_{L_2}$	$q_{MAX}$
8	3.33e-003		-----	-----	-----	-----
16	9.37e-004		-----	1.8294	-----	-----
32	2.45e-004		-----	1.9353	-----	-----
64	6.25e-005		-----	1.9709	-----	-----

Tabela 4.8 – Erros e taxas de convergência para o exemplo 3 com  $\alpha = 10.0$  (CRUMPTON et al., 1995).

Divisões N	$\ E\ _{RMS}$	$\ E\ _{L_2}$	$\ E\ _{MAX}$	$q_{RMS}$	$q_{L_2}$	$q_{MAX}$
8	1.64e-002	-----	-----	-----	-----	-----
16	4.35e-003	-----	-----	1.9146	-----	-----
32	1.11e-003	-----	-----	1.9705	-----	-----
64	2.81e-004	-----	-----	1.9819	-----	-----

Tabela 4.9 – Erros e taxas de convergência para o exemplo 3 com  $\alpha = 100.0$  (CRUMPTON et al., 1995).

Divisões N	$\ E\ _{RMS}$	$\ E\ _{L_2}$	$\ E\ _{MAX}$	$q_{RMS}$	$q_{L_2}$	$q_{MAX}$
8	1.81e-002	-----	-----	-----	-----	-----
16	4.74e-003	-----	-----	1.9330	-----	-----
32	1.21e-003	-----	-----	1.9699	-----	-----
64	3.04e-004	-----	-----	1.9929	-----	-----

Tabela 4.10 – Erros e taxas de convergência para o exemplo 3 com  $\alpha = 1000.0$  (CRUMPTON et al., 1995).

Divisões N	$\ E\ _{RMS}$	$\ E\ _{L_2}$	$\ E\ _{MAX}$	$q_{RMS}$	$q_{L_2}$	$q_{MAX}$
8	1.83e-000	-----	-----	-----	-----	-----
16	4.79e-001	-----	-----	1.9337	-----	-----
32	1.22e-001	-----	-----	1.9731	-----	-----
64	3.07e-002	-----	-----	1.9906	-----	-----

Tabela 4.11 – Erros e taxas de convergência para o exemplo 3 pelo método “Cell-Node” com  $\alpha = 1.0$  (HYMAN et al., 1997).

Divisões N	$\ E\ _{L_2}$	$\ E\ _{MAX}$	$q_{L_2}$	$q_{MAX}$
16	1.06e-003	3.74e-003	-----	-----
32	2.58e-004	9.66e-004	2.0386	1.9529
64	6.36e-005	2.45e-004	2.0203	1.9792

Tabela 4.12 – Erros e taxas de convergência para o exemplo 3 pelo método “Cell-Surface” com  $\alpha = 1.0$  (HYMAN et al., 1997).

Divisões N	$\ E\ _{L_2}$	$\ E\ _{MAX}$	$q_{L_2}$	$q_{MAX}$
16	1.68e-003	5.11e-003	-----	-----
32	4.15e-004	1.35e-003	2.0173	1.9204
64	9.73e-005	3.48e-004	2.0926	1.9558

Nas Figuras (4.14a), (4.14b), (4.14c) e (4.14d) apresentamos os contornos da função  $u(x, y)$  obtidos com as malhas (64x64) para os diferentes valores de  $\alpha$  ( $\alpha = 1.0, \alpha = 10.0, \alpha = 100.0$  e  $\alpha = 1000.0$ ). Nas tabelas 4.13, 4.14, 4.15 e 4.16 e nas Figs. (4.15), (4.16), (4.17) e (4.18) apresentamos os erros e as taxas de convergência para a sequência de malhas (8x8), (16x16), (32x32) e (64x64) com  $\alpha = 1.0, \alpha = 10.0, \alpha = 100.0$  e  $\alpha = 1000.0$ , respectivamente, obtidas com o método dos volumes finitos por aresta (MV-FA).

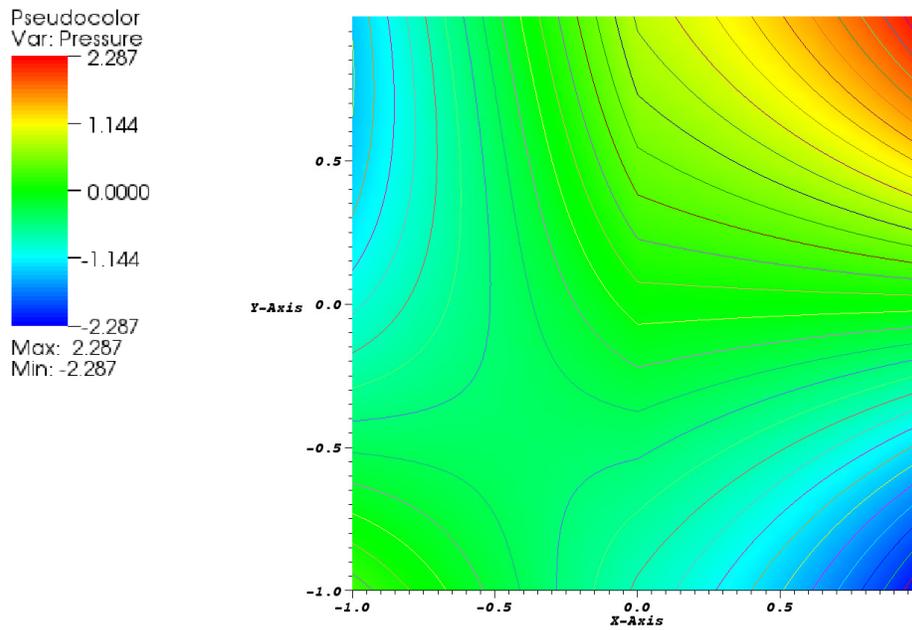


Figura 4.15 – Contornos da função  $u(x, y)$  obtidos com a malha (64x64) para  $\alpha = 1.0$ .

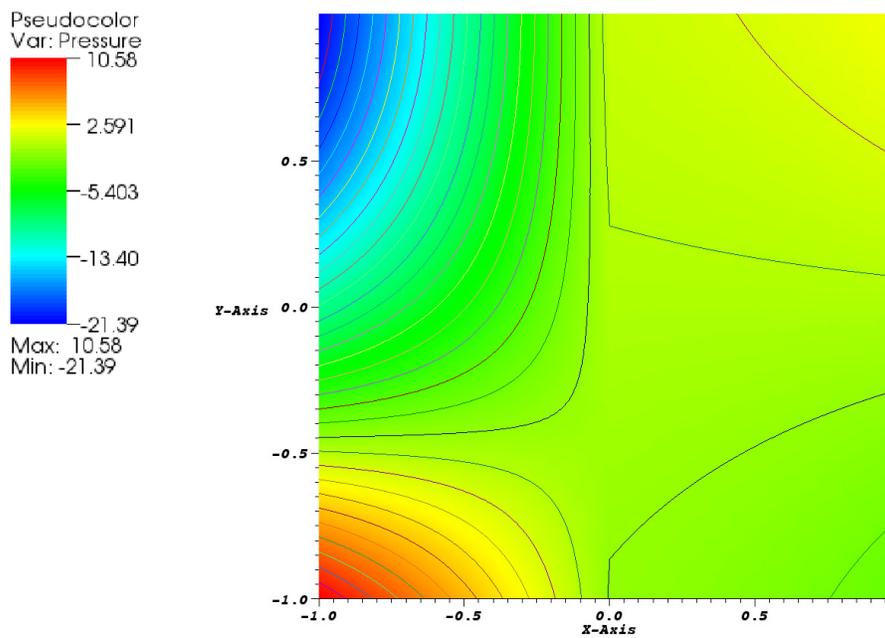


Figura 4.16 – Contornos da função  $u(x, y)$  obtidos com a malha (64x64) para  $\alpha = 10.0$ .

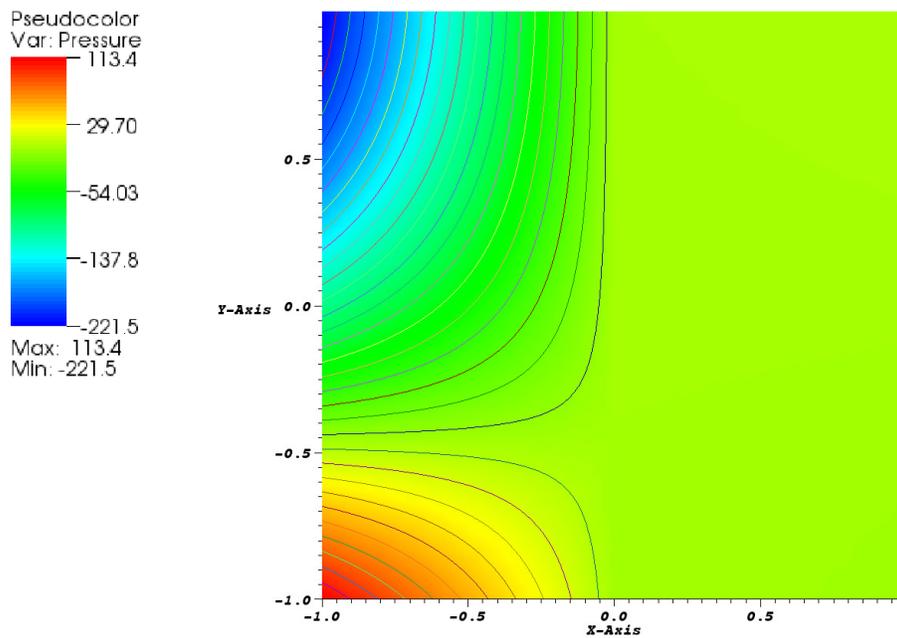


Figura 4.17 – Contornos da função  $u(x, y)$  obtidos com a malha (64x64) para  $\alpha = 100.0$ .

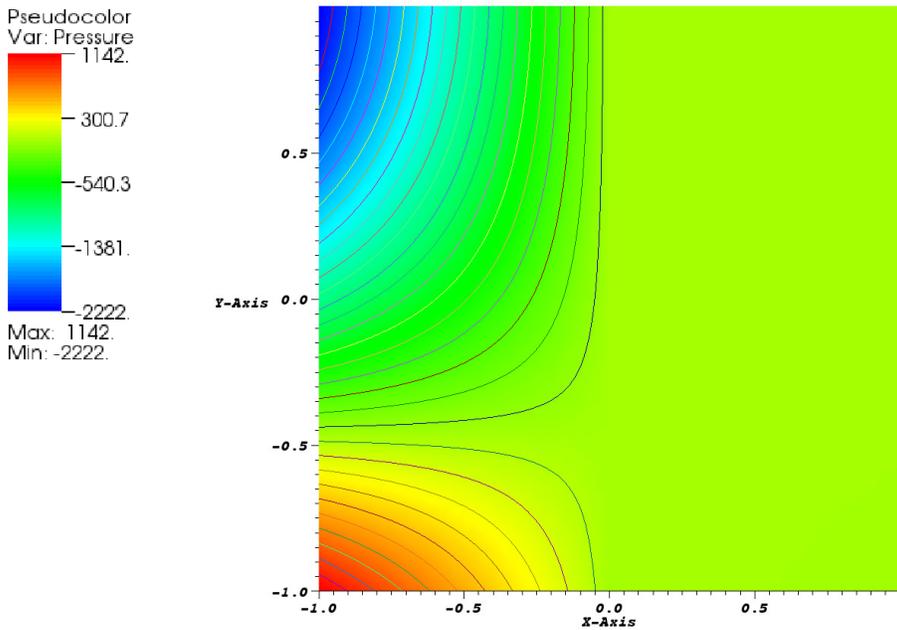


Figura 4.18 – Contornos da função  $u(x, y)$  obtidos com a malha (64x64) para  $\alpha = 1000.0$ .

Nas Figuras (4.14c) e (4.14d) fica claro que o aumento do coeficiente de descontinuidade  $\alpha$  faz com que surja uma barreira, que aparece nitidamente a partir de  $\alpha = 100.0$ , entre as duas regiões com valores de  $\tilde{K}$  diferentes.

Tabela 4.13 – Erros e taxas de convergência para o MVFA no exemplo 3, com  $\alpha = 1.0$ .

Divisões N	$\ E\ _{RMS}$	$\ E\ _{L_2}$	$\ E\ _{MAX}$	$q_{RMS}$	$q_{L_2}$	$q_{MAX}$
8	3.4e-003	6.0e-003	8.7e-003	-----	-----	-----
16	6.70e-004	1.2e-003	1.9e-003	2.3733	2.2683	2.1954
32	1.49e-004	2.89e-004	5.34e-004	2.1645	2.1149	1.8446
64	3.33e-005	6.56e-005	1.31e-004	2.1633	2.1383	2.0293

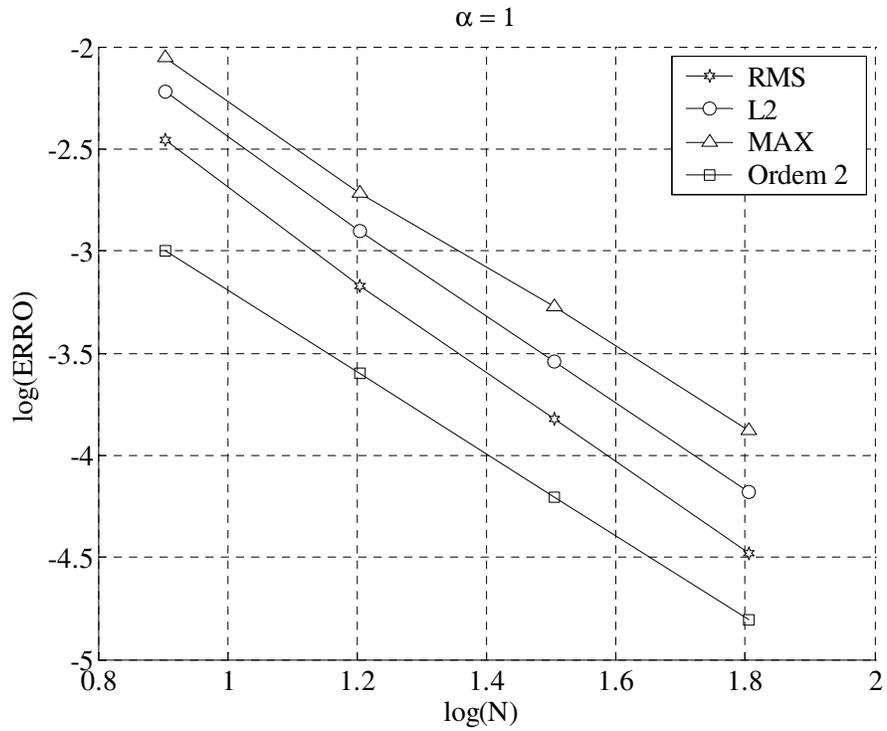


Figura 4.19 – Comportamento do erro usando diferentes normas para o exemplo com  $\mathcal{K}$  descontínuo e não diagonal com intensidade de descontinuidade  $\alpha = 1.0$  no MVFA.

Tabela 4.14 – Erros e taxas de convergência para o MVFA no exemplo 3, com  $\alpha = 10.0$ .

Divisões N	$\ E\ _{RMS}$	$\ E\ _{L_2}$	$\ E\ _{MAX}$	$q_{RMS}$	$q_{L_2}$	$q_{MAX}$
8	5.60e-003	1.0 e-002	2.19e-002	-----	-----	-----
16	1.0e-003	1.9e-003	5.60e-003	2.4501	2.3649	1.9482
32	2.10e-004	4.15e-004	1.5e-003	2.3066	2.2346	1.8704
64	4.25e-005	8.46e-005	4.06e-004	2.3083	2.2955	1.9348

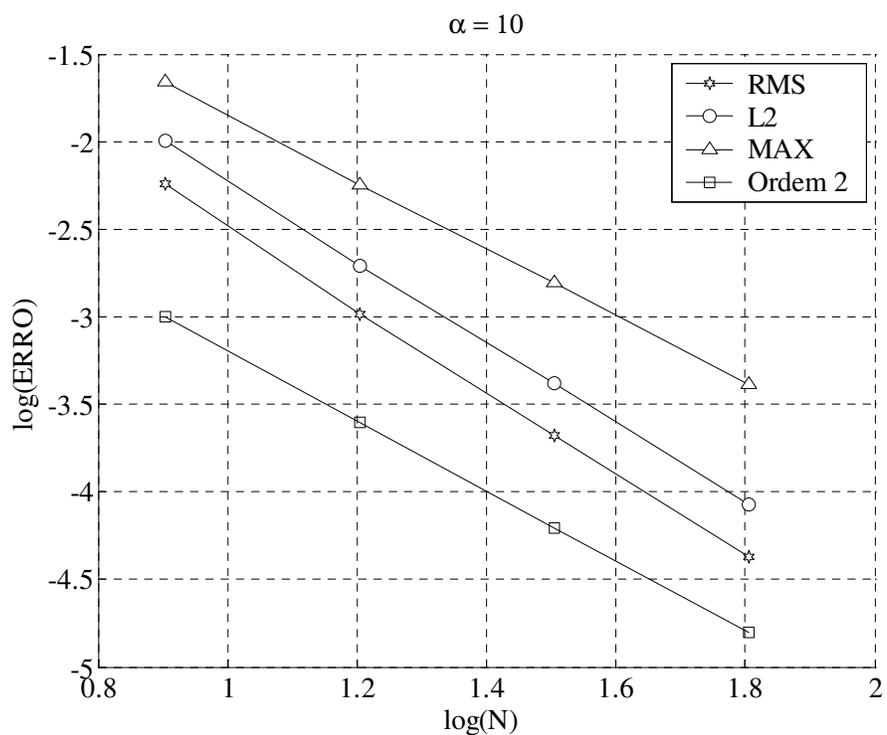


Figura 4.20 – Comportamento do erro usando diferentes normas para o exemplo com  $K$  descontínuo e não diagonal com intensidade de descontinuidade  $\alpha = 10.0$  no MVFA.

Tabela 4.15 – Erros e taxas de convergência para o MVFA no exemplo 3, com  $\alpha = 100.0$ .

Divisões N	$\ E\ _{RMS}$	$\ E_{L_2}\ $	$\ E\ _{MAX}$	$q_{RMS}$	$q_{L_2}$	$q_{MAX}$
8	4.38e-002	7.83e-002	2.28e-001	-----	-----	-----
16	8.40e-003	1.57e-002	5.25 e-002	2.3710	2.3138	2.1165
32	1.40 e-003	2.80e-003	1.57 e-002	2.5866	2.4787	1.7371
64	2.44e-004	4.95e-004	4.10 e-003	2.5279	2.5131	1.9395

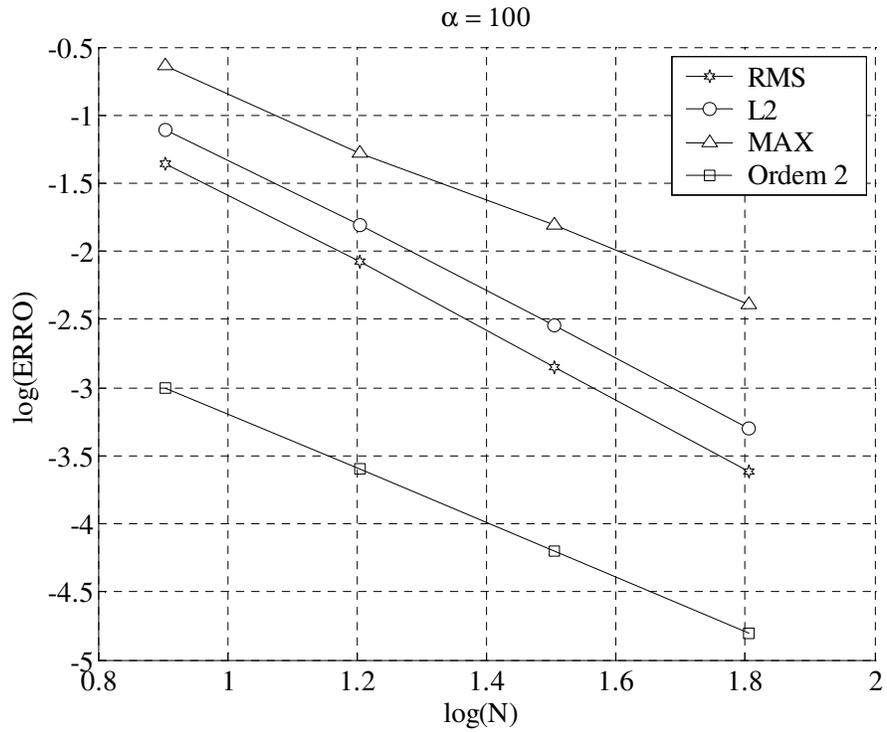


Figura 4.21 – Comportamento do erro usando diferentes normas para o exemplo com  $K$  descontínuo e não diagonal com intensidade de descontinuidade  $\alpha = 100.0$ , no MVFA.

Tabela 4.16 – Erros e taxas de convergência para o MVFA no exemplo 3, com  $\alpha = 1000.0$ .

Divisões N	$\ E\ _{RMS}$	$\ E\ _{L_2}$	$\ E\ _{MAX}$	$q_{RMS}$	$q_{L_2}$	$q_{MAX}$
8	4.38e-001	7.84e-001	2.29e-000	-----	-----	-----
16	8.54e-002	1.59e-001	5.21e-001	2.3580	2.3017	2.1345
32	1.40e-002	2.82e-002	1.58e-001	2.6030	2.4943	1.7226
64	2.40 e-003	4.90e-003	4.11 e-002	2.5251	2.5105	1.9400

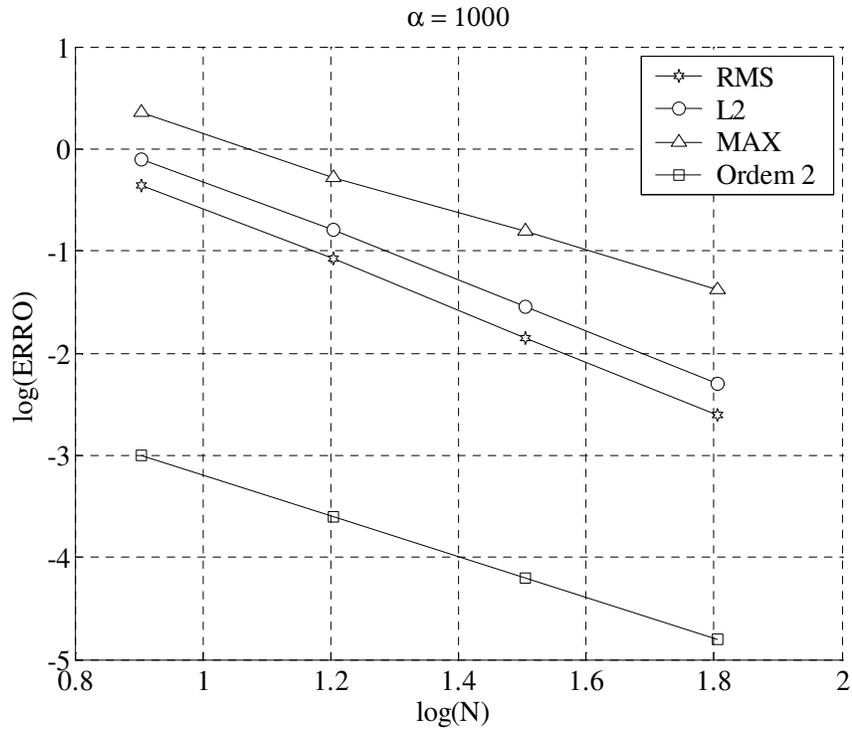


Figura 4.22 – Comportamento do erro usando diferentes normas para o exemplo com  $K$  descontínuo e não diagonal com intensidade de descontinuidade  $\alpha = 1000.0$  no MVFA.

Neste exemplo é relativamente fácil notar, pela análise das tabelas 4.7 até 4.16, bem como pelas Figs. (4.15) até (4.18), que o MVFA teve comportamento similar ao método de CRUMPTON et al. (1995) e ao método “Cell-surface”, sendo ainda nitidamente superior ao método “Cell-node”, ambos apresentados em HYMAN et al. (1997).

## 4.5 Problemas Advectivos

### 4.5.1 A Equação de Transporte Linear

Equações diferenciais de advecção ou de advecção-difusão aparecem num amplo espectro de problemas da física-matemática, onde, o movimento de ondas ou o transporte advectivo é importante. Entre suas múltiplas aplicações, podemos citar: o estudo da dinâmica dos gases, a acústica, a ótica, a biomecânica, a geofísica e o fluxo multifásico e multi-componente em meios porosos. Como exemplo importante e de nosso interesse, podemos citar a equação de saturação que é, em geral, conforme vimos no capítulo 2, uma equação de advecção-difusão (parabólica) que pode se degenerar numa equação puramente hiperbólica no caso bastante comum de podemos desprezar os efeitos capilares. É amplamente conhecido na literatura que a utilização de métodos de diferença centrada (ex. diferenças finitas centradas, elementos finitos Galerkin ou volumes finitos usual) para a discretização de termos de transporte advectivo produz oscilações espúrias nas soluções numéricas (EWING, 1983; HIRSCH, 1988; HIRSCH, 1990; TANNEHILL et al., 1997; FORTUNA, 2000; LEVEQUE, 2002). Nos pacotes computacionais típicos utilizados na indústria do petróleo, o método mais comum para se tratar os termos advectivos existentes nas equações de transporte é o método de ponderação a montante, também conhecido como método “upwind” (EWING, 1983; HIRSCH, 1988; ERTEKIN et al., 2001). A idéia básica por trás deste método, é introduzir as propriedades físicas de propagação da informação na formulação discreta. O método de ponderação à montante de primeira ordem possui propriedades interessantes com respeito a monotonicidade e suavidade das soluções nas vizinhanças de choques. Um problema grave no método de ponderação a montante, é que o excesso de difusão numérica utilizada para eliminar as oscilações numéricas acaba por afetar sobremaneira a precisão deste método, tornando-o de primeira ordem no espaço ao longo de todo o domínio (EWING, 1983; HIRSCH, 1988; LYRA e MORGAN, 2002).

Diversas alternativas têm sido propostas na literatura para suplantiar os problemas associados à discretização de termos advectivos tanto por esquemas de diferenças centradas quanto por esquemas de ponderação à montante. De maneira geral, estas estratégias baseiam-se em combinar, de alguma maneira, esquemas de alta ordem (diferenças centrais) que mantém a segunda ordem da aproximação onde a solução do problema é suave, e esquemas de ordem mais baixa (ponderação à montante) que garantem a ausência de oscilações espúrias na presença de choques.

Inicialmente, tomaremos como exemplo a equação de transporte linear escrita na sua forma conservativa:

$$\frac{\partial u}{\partial t} + \nabla \cdot \vec{F}(u) = 0, \quad (4.65)$$

onde,  $\nabla \cdot \vec{F}(u) = \vec{v}u$  e  $\vec{v} = cte$ .

Integrando diretamente a equação de transporte, Eq. (4.65), temos:

$$\int_{\Omega} \frac{\partial u}{\partial t} \partial\Omega = - \int_{\Omega} \nabla \cdot \vec{F}(u) \partial\Omega. \quad (4.66)$$

Usando o teorema de Green-Gauss e considerando a equação escrita para um volume de controle  $I$ , nós obtemos o seguinte esquema semi-discreto:

$$\frac{\partial u}{\partial t} V_I = - \int_{\Gamma_I} \vec{F}(u) \cdot \vec{n} \partial\Gamma_I. \quad (4.67)$$

Desconsiderando os termos de contorno, o termo do lado direito da Eq. (4.67) pode ser aproximado por:

$$\int_{\Gamma_I} \vec{F}(u) \cdot \vec{n} \partial\Gamma_I \cong \sum_{J_L=1}^{NN(\Omega)} \hat{F}_{IJ_L}(\hat{u}_{IJ_L}) \cdot \vec{C}_{IJ_L}, \quad (4.68)$$

onde:

$$\hat{F}_{IJ_L} \cdot \vec{C}_{IJ_L} = \left( \frac{\hat{u}_I + \hat{u}_{J_L}}{2} \right) \vec{v} \cdot \vec{C}_{IJ_L}. \quad (4.69)$$

O termo  $\hat{F}_{IJ_L} = \left[ (\hat{u}_I + \hat{u}_{J_L}) / 2 \right] \vec{v}$  é uma aproximação para função de fluxo no ponto médio da aresta  $IJ_L$ . Usando a discretização usual de volumes finitos com a aproximação de dois pontos para o termo de fluxo no meio da aresta, podemos escrever:

$$\hat{F}_{IJ_L}(\hat{u}_{IJ_L}) = \frac{\vec{F}_I(\hat{u}_I) + \vec{F}_{J_L}(\hat{u}_{J_L})}{2}. \quad (4.70)$$

onde  $\vec{F}_I(\hat{u}_I) = \hat{u}_I \vec{v}$  e  $\vec{F}_{J_L}(\hat{u}_{J_L}) = \hat{u}_{J_L} \vec{v}$ .

Substituindo a Eq. (4.70) na Eq. (4.68), podemos escrever:

$$\int_{\Gamma_I} \vec{F}(u) \cdot \vec{n} \partial\Gamma_I \cong \sum_{J_L=1}^{NN(\Omega)} \left( \frac{\vec{F}_I(\hat{u}_I) + \vec{F}_{J_L}(\hat{u}_{J_L})}{2} \right) \cdot \vec{C}_{IJ_L}. \quad (4.71)$$

A Eq. (4.71) é equivalente a uma discretização de diferenças centradas ou de Galerkin para o termo de fluxo advectivo, possuindo erro de truncamento de 2ª ordem no espaço. Como este tipo de aproximação produz oscilações numéricas não físicas, é necessário que utilizemos alguma estratégia para eliminar tais oscilações que, em muitos casos, tornam o procedimento até mesmo instável.

## 4.5.2 Método de Godunov

Conforme mencionamos anteriormente, a utilização de esquemas similares a métodos de diferenças centradas para a discretização de termos advectivos em equações de transporte provoca o surgimento de oscilações espúrias nas soluções numéricas. O método de Godunov (HIRSCH, 1990; TANNEHILL et al., 1997; LEVEQUE, 2002) foi desenvolvido nos final dos anos 50 no contexto do estudo da dinâmica dos gases, tendo revolucionado o campo da dinâmica dos fluidos computacional devido ao fato de resolver este problema a partir de três etapas relativamente simples, as quais mencionamos brevemente a seguir (HIRSCH, 1990; TANNEHILL et al., 1997):

1. Inicialmente, definimos uma aproximação discreta (constante) da solução no interior do volume de controle (projeção);
2. Obtemos a solução exata local do problema de Riemann (ver apêndice A) na interface entre dois volumes de controle adjacentes (evolução);
3. Ponderamos os estados da variável transportada entre dois volumes de controle adjacentes  $\hat{u}^+$  e  $\hat{u}^-$  após um determinado intervalo de tempo  $\Delta t$ .

Os fluxos através das interfaces dos volumes de controle são então calculados, produzindo uma aproximação conservativa e sem oscilações numéricas. Por outro lado, além de ser um método de primeira ordem no espaço (HIRSCH, 1990), a principal limitação do método de Godunov diz respeito à dificuldade da obtenção da solução exata para o problema de Riemann, o qual leva a solução de um sistema de equações não-lineares que é geralmente resolvido através de métodos iterativos, tornando o esquema caro do ponto de vista computacional (LYRA, 1994; LEVEQUE, 2002).

A fim de superar o problema de termos de resolver o problema de Riemann exatamente, diferentes alternativas têm sido propostas na literatura. De maneira geral, estes esquemas fazem uso de resolvedores aproximados para o problema de Riemann, de modo que apenas a segunda etapa (*i.e.* “evolução”) seja alterada no método de Godunov original (HIRSCH, 1990; TANNEHILL et al., 1997; LYRA, 1994; LEVEQUE, 2002).

Um esquema extremamente popular na literatura é o método de ROE, (1981). Neste esquema, o fluxo na interface do volume de controle é calculado como:

$$\begin{aligned} \int_{\Gamma_I} \vec{F}(u) \cdot \vec{n} \, \partial \Gamma_I &\cong \sum_{L=1}^{NN} \hat{F}_{IJ_L}(\hat{u}_{IJ_L}) \cdot \vec{C}_{IJ_L} \\ &= \sum_{L=1}^{NN} \frac{1}{2} \left[ \left( \vec{F}_I(\hat{u}_I) + \vec{F}_{J_L}(\hat{u}_{J_L}) \right) \cdot \vec{C}_{IJ_L} - |A_{IJ_L}| (\hat{u}_{J_L} - \hat{u}_I) \right]. \end{aligned} \quad (4.72)$$

O termo  $A_{IJ_L}$  denota a chamada matriz de Roe calculada na direção  $IJ_L$  (HIRSCH, 1990; TANNEHILL et al., 1997). No caso da Eq.(4.72),  $|A_{IJ_L}| = \alpha_{IJ_L}$ , onde  $\alpha_{IJ_L} = |\vec{v}| |\vec{C}_{IJ_L}|$ .

### 4.5.3 Métodos TVD (Total Variation Diminishing)

Um conceito importante surge da propriedade matemática de que a variação total “TV” (total variation) de qualquer solução física admissível de uma lei de conservação escalar não deve aumentar (LEVEQUE, 2002). De fato, para uma lei de conservação escalar, a solução exata é constante ao longo das linhas características (TANNEHILL et al., 1997; LEVEQUE, 2002).

Considere-se a variação total para uma dada função  $u$ , que é solução do problema descrito pela Eq. (4.65) com as condições iniciais e de contorno apropriadas:

$$TV = \int_{-\infty}^{\infty} \left| \frac{\partial u}{\partial x} \right| dx. \quad (4.73)$$

Na forma discreta, esta equação pode ser escrita como:

$$TV(\hat{u}) = \sum_I |\hat{u}_{I+1} - \hat{u}_I|. \quad (4.74)$$

Um método numérico é dito “Total Variation Diminishing”, ou simplesmente TVD, se:

$$TV(\hat{u}^{n+1}) \leq TV(\hat{u}^n). \quad (4.75)$$

Métodos numéricos que satisfazem a condição anterior preservam a monotonicidade, sendo, portanto, livre de oscilações. HARTEN (1983), provou que:

1. Todo esquema numérico monótono é TVD;
2. Todo esquema TVD preserva a monotonicidade.

A idéia central por trás da construção de um método de alta resolução e que seja TVD, é tentar obter uma aproximação de ordem mais alta em regiões suaves do escoamento, evitando ainda oscilações nas proximidades de gradientes acentuados, apresentando nestas regiões propriedades similares àquelas de métodos monótonos de ordem mais baixa como os métodos de ponderação à montante. Em tais esquemas a solução é de segunda ordem em regiões suaves da solução e de primeira ordem próximo à “descontinuidades”. A transição para métodos de ordem mais alta é feita a partir da utilização de funções limitadoras de inclinação (slope limiters) para as variáveis dependentes  $u$  ou a partir da limitação do fluxo  $\bar{F}(u)$  de maneira adaptativa. Segundo TANEHILL et al. (1997), BORIS e BROOK (1973) foram os primeiros a desenvolver funções limitadoras não lineares adicionando a diferença entre os fluxos de primeira ordem e os fluxos de segunda ordem para evitar o surgimento de oscilações associadas a esquemas de segunda ordem. O trabalho de VAN LEER (1974), que foi um marco no assunto, baseou sua formulação numa extensão do método de Godunov (HIRSCH, 1990; TANEHILL et al., 1997; LEVEQUE, 2002), em que um procedimento geométrico de limitação do valor extrapolado da variável dependente  $u$  para as interfa-

ces dos volumes de controle é utilizado com o objetivo de prevenir o aparecimento de oscilações.

A seguir apresentaremos dois métodos que utilizaremos para a discretização de termos advectivos presentes na equação anterior e nas equações de transporte de fluidos em meios porosos (nosso objeto de estudo), utilizando uma estrutura de dados por aresta possuindo as características numéricas desejadas mencionadas anteriormente, ou seja, ser de segunda ordem no espaço em regiões suaves do escoamento sem permitir o aparecimento de oscilações nas vizinhanças de regiões de altos gradientes. Até onde sabemos, utilizamos pela primeira vez na literatura um método de difusão numérica artificial, proposto inicialmente por JAMESON et al. (1981), e posteriormente modificado por PERAIRE et al. (1993) e LYRA (1994) para a utilização com malhas não-estruturadas e com estrutura de dados por aresta. Também, adaptamos pela primeira vez para a solução de problemas de transporte de contaminantes em meios porosos e para a simulação de escoamentos bifásicos de água e óleo em reservatórios de petróleo, um esquema MUSCL (Monotone Upstream Scheme for Conservation Laws), proposto inicialmente por VAN LEER (1974).

#### 4.5.4 Métodos MUSCL (Monotone Upstream Scheme for Conservation Laws)

Conforme mencionamos anteriormente, os métodos geométricos de VAN LEER (1974) se fundamentam numa extensão do método de Godunov, a partir da utilização de uma aproximação de maior ordem para  $\hat{u}_{I_L}$  nas superfícies de controle, de maneira a obtermos uma melhor aproximação para os fluxos  $\hat{F}(\hat{u}_{I_L})$  nestas interfaces. Adicionalmente, os valores de  $u$  são limitados a partir da utilização de funções limitadoras de inclinação, de maneira a evitarmos oscilações associadas aos esquemas de maior ordem (LYRA, 1994).

Inicialmente escrevemos os valores extrapolados das variáveis nas interfaces dos volumes de controle utilizando uma expansão modificada em série de Taylor da função  $u$  como (HIRSCH, 1990):

$$\hat{u}_{I_L}^+ = \hat{u}_I + \frac{\delta \hat{u}}{2} + \frac{k}{4} \delta_I^2 \hat{u}, \quad (4.76)$$

$$\hat{u}_{I_L}^- = \hat{u}_{J_L} - \frac{\delta \hat{u}}{2} + \frac{k}{4} \delta_{J_L}^2 \hat{u}, \quad (4.77)$$

onde,  $\delta_I \hat{u} = \hat{u}_{J_L} - \hat{u}_I$  e  $\delta_I^2 \hat{u} = \hat{u}_{J_L} - 2\hat{u}_I + \hat{u}_{I_E}$ .

As Eqs. (4.76) e (4.77) podem ser reescritas como:

$$\hat{u}_{I_L}^+ = \hat{u}_I + \frac{sl}{4} \left[ (1-k) \Delta u_I^- + (1+k) (\hat{u}_{J_L} - \hat{u}_I) \right], \quad (4.78)$$

$$\hat{u}_{I_L}^- = \hat{u}_{J_L} - \frac{sl}{4} \left[ (1-k) \Delta u_I^+ + (1+k) (\hat{u}_{J_L} - \hat{u}_I) \right], \quad (4.79)$$

Onde os operadores de diferenças atrasadas e de diferenças avançadas são definidos como:

$$\Delta u_I^- = \hat{u}_I - \hat{u}_{I^E} = 2\overline{IJ}_L \cdot \nabla \hat{u}_I - (\hat{u}_{J_L} - \hat{u}_I), \quad (4.80)$$

$$\Delta u_{J_L}^+ = \hat{u}_{J_L} - \hat{u}_{J_L^D} = 2\overline{IJ}_L \cdot \nabla \hat{u}_{J_L} - (\hat{u}_{J_L} - \hat{u}_I). \quad (4.81)$$

Nas equações anteriores, os subscritos  $(-)$  e  $(+)$  são utilizados para indicar, respectivamente, os lados à esquerda e à direita da superfície de controle,  $\overline{IJ}_L$  é o vetor unitário na direção da aresta (i.e.  $\overline{IJ}_L = \vec{L}_{IJ_L} / \Delta_{IJ_L}$ ), e o parâmetro  $sl$  é o termo limitador de inclinação, de modo que, se  $sl = 0$ , o esquema se reduz ao método de primeira ordem (Godunov), enquanto que, para  $sl = 1$ , obtemos o método de ordem mais alta. Portanto, a função que define o valor de  $sl$  deve ser tal que, em regiões suaves do escoamento, ela assuma o valor  $sl = 1$ , enquanto que em regiões de altos gradientes ela assume o valor  $sl = 0$ . Finalmente os valores  $\hat{u}_{I^E}$  e  $\hat{u}_{J_L^D}$  são obtidos a partir da reconstrução do gradiente ao longo da aresta  $IJ_L$  em nós fictícios  $I^E$  e  $J_L^D$  que distam dos nós  $I$  e  $J_L$  conforme mostra a Fig. (4.19).

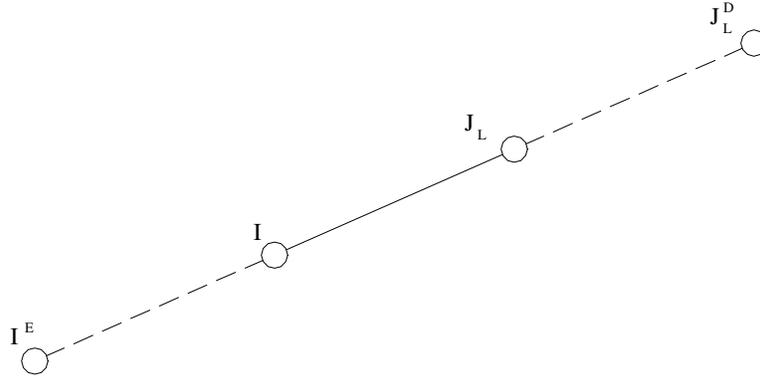


Figura 4.23 – Construção de um estêncil estendido a partir da utilização dos nós fictícios  $I^E$  e  $J_L^D$  associados a uma aresta  $IJ_L$ .

As Figuras (4.20a) e (4.20b) mostram o funcionamento esquemático do processo de construção da aproximação de ordem mais alta e posterior limitação dos valores de  $\hat{u}_{J_L}^+$  e  $\hat{u}_{I_L}^-$  utilizados no cálculo dos fluxos  $\vec{F}_{J_L}^+(\hat{u}_{J_L}^+)$  e  $\vec{F}_I^-(\hat{u}_{I_L}^-)$ .

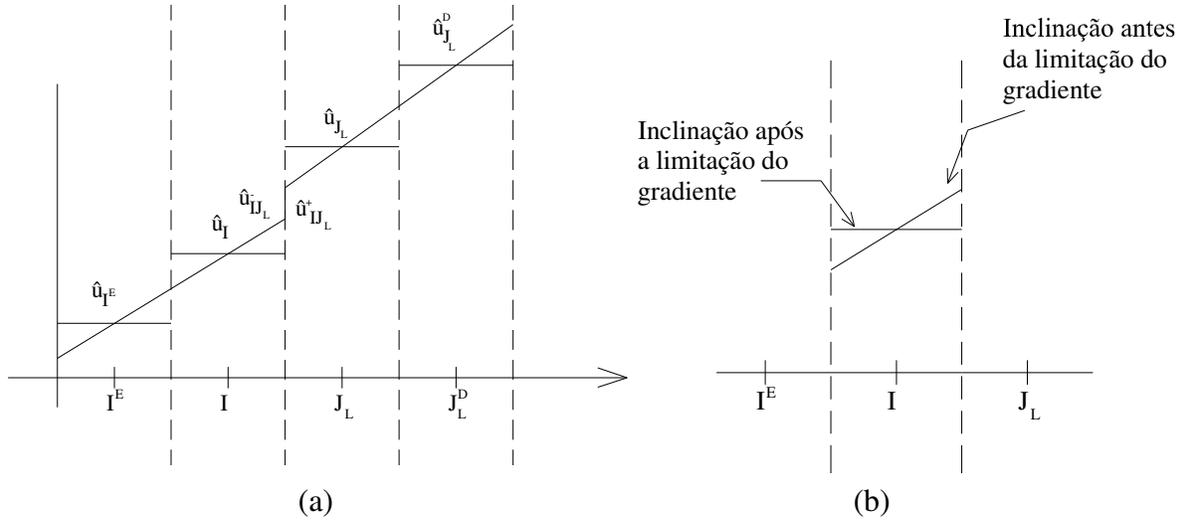


Figura 4.24– Método MUSCL-TVD: a) aproximação de maior ordem (linear) construída a partir da extrapolação da variável  $u$  na interface do volume de controle; b) limitação do gradiente necessária para evitar oscilações em regiões de choques.

No caso de problemas unidimensionais, de acordo com a escolha do parâmetro  $k$ , esquemas diferentes com diferentes ordens de aproximação são obtidos:

$$\begin{cases} k = -1 & \Rightarrow \text{método de ponderação a montante de segunda ordem,} \\ k = 0 & \Rightarrow \text{método de Fromm,} \\ k = 1/3 & \Rightarrow \text{método de ponderação a montante de terceira ordem,} \\ k = 1 & \Rightarrow \text{método de diferenças centradas com três pontos.} \end{cases}$$

Diversas funções limitadoras de inclinação,  $sl$ , podem ser utilizadas (HIRSCH, 1990; LYRA e MORGAN, 2002), sendo que no presente trabalho nos restringiremos à função limitadora de Van Albada, que apresenta uma baixa difusão da frente transportada, representando muito bem o perfil descrito pela função fluxo (este ponto é particularmente importante no caso da função fluxo fracional), sem, por outro lado, ser excessivamente compressivo como a função limitadora “Superbee” (LÖHNER, 2001). Abaixo apresentamos a função limitadora de Van Albada, tendo em vista uma implementação por aresta:

$$sl_I = \max \left( 0, \frac{2\Delta u_I^- \Delta u_{J_L} + \varepsilon}{(\Delta u_I^-)^2 + (\Delta u_{J_L})^2 + \varepsilon} \right) \quad \text{and} \quad sl_{J_L} = \max \left( 0, \frac{2\Delta u_{J_L}^+ (\Delta u_{J_L})^2 + \varepsilon}{(\Delta u_{J_L}^+)^2 + (\Delta u_{J_L})^2 + \varepsilon} \right). \quad (4.82)$$

Na Equação (4.82),  $\Delta u_{J_L} = \hat{u}_{J_L} - \hat{u}_I$  e  $\varepsilon$  é um coeficiente pequeno,  $\varepsilon \leq O(\Delta u_{J_L})^2$ , utilizado apenas para evitar o surgimento de zero no denominador.

Tendo obtido as aproximações para a função  $u$  nas superfícies de controle, *i.e.*  $\hat{u}_{IJ_L}^+$  e  $\hat{u}_{IJ_L}^-$ , através da utilização das funções limitadoras de gradiente, podemos escrever os fluxos numéricos de alta ordem, correspondentes aos de primeira ordem na Eq. (4.72), como:

$$\hat{F}_{IJ_L} \cdot \vec{C}_{IJ_L} = \frac{1}{2} \left[ \left( \vec{F}_I^- (\hat{u}_{IJ_L}^-) + \vec{F}_{J_L}^+ (\hat{u}_{IJ_L}^+) \right) \cdot \vec{C}_{IJ_L}^{\Omega_R} - \alpha_{IJ_L} (\hat{u}_{J_L}^- - \hat{u}_I^+) \right]. \quad (4.83)$$

Na equação anterior,  $\vec{F}_I^- (\hat{u}_{IJ_L}^-)$  e  $\vec{F}_{J_L}^+ (\hat{u}_{IJ_L}^+)$  são funções dos valores extrapolados obtidos através das Eqs. (4.78) e (4.79). Inserindo a Eq. (4.83) na Eq. (4.72) temos:

$$\begin{aligned} \int_{\Gamma_I} \vec{F}(u) \cdot \vec{n} \, \partial \Gamma_I &\cong \sum_{L=1}^{NN(\Omega)} \hat{F}_{IJ_L} (\hat{u}_{IJ_L}) \cdot \vec{C}_{IJ_L} \\ &\sum_{L=1}^{NN(\Omega)} \frac{1}{2} \left[ \left( \vec{F}_I^- (\hat{u}_{IJ_L}^-) + \vec{F}_{J_L}^+ (\hat{u}_{IJ_L}^+) \right) \cdot \vec{C}_{IJ_L} - \alpha_{IJ_L} (\hat{u}_{J_L}^- - \hat{u}_I^+) \right]. \end{aligned} \quad (4.84)$$

Uma discussão detalhada sobre métodos MUSCL-TVD, bem como das diferentes funções limitadoras de inclinação em malhas estruturadas pode ser encontrada em HIRSCH (1990). Para uma melhor compreensão sobre a metodologia MUSCL e métodos que satisfazem a condição TVD em geral em malhas não estruturadas, recomendamos LYRA (1994), LYRA e MORGAN (2002) e DARWISH e MOUKALED (2003).

#### 4.5.5 Métodos de Difusão Numérica Artificial (DNA)

A formulação que apresentaremos no presente trabalho foi originalmente proposta por JAMESON et al. (1981) com as modificações introduzidas por PERAIRE et al. (1993) e discutidas em LYRA (1994) e LYRA e MORGAN (2002). Este método é baseado na utilização de um termo de “viscosidade artificial” responsável pela estabilização do esquema e que combina, de forma adaptativa, termos dissipativos de segunda ordem e de quarta ordem. A idéia básica do método é utilizar o termo dissipativo de segunda ordem nas regiões de gradientes altos, e introduzir os termos de quarta ordem nas regiões de gradientes suaves apenas para estabilizar o esquema.

Neste método, desconsiderando os termos de contorno, o termo do lado direito da Eq. (4.67) é aproximado por:

$$\int_{\Gamma_I} \vec{F}(u) \cdot \vec{n} \, \partial \Gamma_I \cong \sum_{L=1}^{NN(\Omega)} \hat{F}_{IJ_L} (\hat{u}_{IJ_L}) \cdot \vec{C}_{IJ_L} + AD. \quad (4.85)$$

Na Eq. (4.85),  $AD$  representa o termo de dissipação numérica artificial, o qual pode ser calculado através da seguinte expressão:

$$AD = -\frac{\alpha_{IJ_L}}{2} \left[ \xi_{IJ_L}^{(2)} \Delta \hat{u}_{IJ_L} + \xi_{IJ_L}^{(4)} \left( \Delta \hat{u}_{IJ_L} - \left( |\Delta_{IJ_L}| \nabla \hat{u}_{IJ_L} \cdot \bar{L}_{IJ_L} \right) \right) \right]. \quad (4.86)$$

O gradiente  $\nabla \hat{u}_{IJ_L}$  sobre a aresta é obtido utilizando simplesmente a média aritmética entre os valores nodais, de modo a termos:

$$\nabla \hat{u}_{IJ_L} = \frac{\nabla \hat{u}_I + \nabla \hat{u}_{J_L}}{2}, \quad (4.87)$$

onde os gradientes nodais são calculados usando a Eq. (4.24). Os parâmetros  $\xi_{IJ_L}^{(2)}$  e  $\xi_{IJ_L}^{(4)}$  se adaptam às condições do escoamento, sendo calculados por:

$$\xi_{IJ_L}^{(2)} = \mu^{(2)} \max(\Upsilon_I, \Upsilon_{J_L}), \quad (4.88)$$

$$\xi_{IJ_L}^{(4)} = \max(0, \mu^{(4)} - \xi_{IJ_L}^{(2)}), \quad (4.89)$$

e ainda:

$$\Upsilon_I = \frac{|\hat{u}_{J_L} - 2\hat{u}_I + \hat{u}_{I_L}|}{(1-\theta)(|\hat{u}_{J_L} - S_I| + |\hat{u}_I - \hat{u}_{I_L}|) + \theta(\hat{u}_{J_L} + 2\hat{u}_I + \hat{u}_{I_L}) + \varepsilon}, \quad (4.90)$$

para o nó  $I$ , e:

$$\Upsilon_{J_L} = \frac{|\hat{u}_{J_L^R} - 2\hat{u}_{J_L} + \hat{u}_I|}{(1-\theta)(|\hat{u}_{J_L^R} - \hat{u}_{J_L}| + |\hat{u}_{J_L} - \hat{u}_I|) + \theta(\hat{u}_{J_L^R} + 2\hat{u}_{J_L} + \hat{u}_I) + \varepsilon}, \quad (4.91)$$

para o nó  $J_L$ .

Nas Eqs. (4.88) a (4.91),  $\mu^{(2)}$  e  $\mu^{(4)}$  e o coeficiente de ponderação  $\theta$  ( $0 \leq \theta \leq 1$ ) são parâmetros definidos pelo usuário e  $\varepsilon$  é um coeficiente pequeno ( $\varepsilon = 10^{-6}$ ) utilizado apenas para evitar o aparecimento de zero no denominador. Os fatores  $\Upsilon_I$  e  $\Upsilon_{J_L}$  são sensores projetados para detectar discontinuidades. Para as equações escalares que pretendemos lidar neste trabalho, a escolha natural do parâmetro  $\alpha_{IJ_L}$  recai sobre o módulo da velocidade de transporte no meio da aresta. Para detalhes adicionais sobre o método, recomendamos LYRA (1994) e LYRA e MORGAN (2002). As Eqs. (4.90) e (4.91) foram escritas de modo que os sensores  $\Upsilon_I$  e  $\Upsilon_{J_L}$  têm valor significativo apenas em regiões de gradientes elevados com o objetivo de reduzir ou eliminar oscilações locais. Por outro lado, para preservar a acurácia de segunda ordem em regiões suaves do escoamento, e para controlar a quan-

tidade de difusão numérica artificial a ser adicionada, o termo de dissipação numérica artificial é desativado (*i.e.*  $\xi_{U_L}^{(4)} \equiv 0$ ) na presença de gradientes elevados enquanto que o fator de segunda ordem  $\xi_{U_L}^{(2)}$  é ativado, pois apenas o termo de segunda ordem é desejado próximo ao choque, sendo que o termo de quarta ordem deve ser evitado, porque pode causar oscilações indesejáveis.

## 4.6 Discretização Temporal (Método de Euler-Explícito)

Uma equação diferencial parcial homogênea que representa um fenômeno transiente pode ser escrita na seguinte forma geral:

$$\frac{\partial u}{\partial t} + \mathfrak{M}(u) = 0, \quad (4.92)$$

onde, no nosso caso,  $\mathfrak{M}(u)$  é um operador diferencial que pode representar um problema de convecção, difusão, ou convecção-difusão.

Integrando a Eq. (4.92) no espaço, e re-arrumando os termos, chegamos a:

$$\int_{\Omega} \frac{\partial u}{\partial t} \partial\Omega = - \int_{\Omega} \mathfrak{M}(u) \partial\Omega. \quad (4.93)$$

Usando o teorema do valor médio para o primeiro termo da Eq. (4.93), podemos escrever:

$$\int_{\Omega} \frac{\partial u}{\partial t} \partial\Omega \cong \frac{\partial \bar{u}}{\partial t} \int_{\Omega} \partial\Omega = \left. \frac{\partial \hat{u}}{\partial t} \right|_I V_I. \quad (4.94)$$

Substituindo a Eq. (4.94) na Eq. (4.93), obtemos a seguinte equação:

$$\left. \frac{\partial \hat{u}}{\partial t} \right|_I V_I = - \int_{\Omega_I} \mathfrak{M}(\hat{u}) \partial\Omega_I. \quad (4.95)$$

A Eq. (4.95) pode ser escrita de uma maneira mais geral como:

$$\left. \frac{\partial \hat{u}}{\partial t} \right|_I = R(\hat{u}_I^n), \quad (4.96)$$

onde  $R(\hat{u}_I^n)$  é um resíduo que é determinado totalmente pela discretização espacial do termo do lado direito da Eq. (4.95).

O procedimento mais simples para integração temporal explícita consiste em adotarmos um esquema de diferenças avançadas, em que apenas dois instantes de tempo são considerados, de modo que podemos escrever:

$$\left. \frac{\partial \hat{u}}{\partial t} \right|_I = \frac{\hat{u}^{n+1} - \hat{u}^n}{\Delta t} = R(\hat{u}_I^n), \quad (4.97)$$

ou ainda, re-arrumando os termos, temos:

$$\hat{u}_I^{n+1} = \hat{u}_I^n + \Delta t R(\hat{u}_I^n). \quad (4.98)$$

Procedimentos alternativos que envolvem dois ou mais estágios podem ser construídos a fim de aumentar a acurácia na discretização temporal (LYRA, 1994). O método de Euler explícito é um esquema de discretização temporal explícito e de primeira ordem no tempo, devendo satisfazer um critério rígido de estabilidade (CFL) (HIRSCH, 1988). Apesar deste fato, em todos os problemas resolvidos neste trabalho, fizemos uso do mesmo, devido a seu baixo custo computacional e sua facilidade de implementação, além do fato principal de desejarmos nos concentrar nos efeitos das diferentes técnicas de discretização espacial nas soluções numéricas obtidas.

## 4.7 Termos Fonte, Condições Iniciais e de Contorno

### 4.7.1 Termo Fonte Pontual e Termo Fonte Distribuído

Termos fonte pontuais ou distribuídos são muito comuns na simulação de fluxo em meios porosos. Tipicamente, termos fonte pontuais são utilizados para representar poços injetores ou produtores cujas dimensões são desprezíveis com respeito ao tamanho dos volumes de controle, pelo menos 1/10 vezes menor (EWING, 1983). Por outro lado, os termos de fonte distribuídos podem ser usados para representar o decaimento radioativo de contaminantes em aquíferos ou reações químicas ou mesmo poços com dimensões consideráveis quando comparados com os volumes de controle utilizados na discretização (GEIGER et al., 2004).

Considerando como exemplo a equação de Poisson temos:

$$\nabla^2 u = Q. \quad (4.99)$$

onde,  $Q = Q(\bar{x}, t, u)$ .

Integrando a Eq. (4.99) ao longo de todo domínio  $\Omega$  temos:

$$\int_{\Omega} \nabla^2 u \, \partial\Omega = \int_{\Omega} Q \, \partial\Omega. \quad (4.100)$$

O termo de difusão do lado esquerdo da Eq. (4.100) é discretizado com as técnicas apresentadas anteriormente neste capítulo. Caso estejamos nos referindo a um termo fonte pontual, para um nó  $I$  genérico da malha, o lado direito da Eq. (4.100) é calculado como:

$$\int_{\Omega_I} Q d\Omega_I = Q_I^*, \quad (4.101)$$

onde,  $Q_I^*$  é um termo de fonte (ex. um poço) concentrado no nó  $I$ . Para uma melhor representação destes termos de fonte concentrados, particularmente no contexto de fluxos em meios porosos, um modelo de poço, tal como o de PEACEMAN (1977), pode ser adicionalmente utilizado.

Ainda para a equação de Poisson, no caso de fontes distribuídas, o termo de fonte é calculado como:

$$\int_{\Omega_I} Q d\Omega_I \equiv \bar{Q}V_I = Q_I V_I. \quad (4.102)$$

REES et al. (2004) e LEWIS e MALAN (2005) afirmam que a aproximação acima é formalmente de segunda ordem no espaço. Se o termo fonte distribuído for calculado para um nó que se encontra na interface entre múltiplos domínios, a expressão anterior deve ser reescrita como:

$$\int_{\Omega_I} Q d\Omega_I = \sum_{r=1}^{Ndom} \int_{\Omega_{r(I)}} Q_r d\Omega_{r(I)} \equiv \sum_{r=1}^{Ndom} \bar{Q}^{\Omega_r} V_I^{\Omega_r} = \sum_{r=1}^{Ndom} Q_I^{\Omega_r} V_I^{\Omega_r}, \quad (4.103)$$

onde,  $Q_I^{\Omega_r}$  representa a parcela do termo de fonte distribuído associado ao nó  $I$  no subdomínio  $\Omega_r$ .

Para uma equação de advecção-reação não-linear, tal como a equação de saturação, é necessário que sejamos cuidadosos ao modelarmos a irrupção de água no poço produtor (Breakthrough) utilizando termos fontes pontuais. Neste caso, em que o termo fonte pontual está associado a um nó que representa, por exemplo, um poço produtor, várias estratégias podem ser utilizadas a fim de evitar problemas na discretização destes termos (LEVEQUE, 2002).

Devido à simplicidade de implementação, no presente trabalho utilizamos uma formulação de passo fracional em que dividimos o problema original em dois subproblemas que são resolvidos em duas etapas. Na primeira etapa, resolvemos a equação de advecção pura e, posteriormente, incluímos o termo de fonte, conforme descrevemos de maneira breve a seguir.

Considerando uma versão modificada da Eq. (4.65) na qual incluímos o termo de reação, temos:

$$\frac{\partial u}{\partial t} + \nabla \cdot \bar{F}(u) = Q. \quad (4.104)$$

A solução da equação acima, para os nós com termos de fonte pontuais, é feita então, em duas etapas:

Etapa 1: Obtenção de um valor intermediário  $\hat{u}_I^*$  a partir da solução da equação de advecção:

$$\hat{u}_I^* = \hat{u}_I^n + \Delta t R(\hat{u}_I^n), \quad (4.105)$$

Etapa 2: Utilizando, por exemplo, o método de Euler explícito, obtenção do valor final  $\hat{u}_I^{n+1}$  no instante  $n+1$  a partir da inclusão dos termos de reação:

$$\hat{u}_I^{n+1} = \hat{u}_I^* + \Delta t Q^n. \quad (4.106)$$

A formulação acima garante uma aproximação de primeira ordem no espaço e no tempo para a solução no nó e nos seus vizinhos mais próximos. Para maiores detalhes sobre este procedimento, recomendamos LEVEQUE, (2002).

## 4.7.2 Condições Iniciais e de Contorno

A despeito do tipo de equação que estejamos tratando neste trabalho, difusão, convecção ou convecção-difusão, é necessário que implementemos de maneira adequada as condições de contorno usuais.

a) Condição de contorno de Dirichlet: O valor da função é prescrito ao longo do contorno  $\Gamma_D$ .

$$u = \bar{u} \quad \Gamma_D \quad X \quad u \quad (4.107)$$

Em problemas de fluxo em meio porosos, no caso de termos, por exemplo, pressão, concentração ou saturação prescritos, é suficiente que substituamos o valor funcional de  $u_I$  por  $\bar{u}_I$  (o valor prescrito), sempre que necessário, isto é, para  $\forall I \in \Gamma_D$ . Desta forma a equação do nó  $I$  com valor funcional prescrito é simplesmente eliminada do sistema de equações a ser resolvido.

b) Condição de contorno de Neumann: O valor do gradiente (fluxo) normal da função é conhecido em  $\Gamma_N$ .

$$\nabla u \cdot \bar{n} = \frac{\partial \bar{u}}{\partial n} \quad \Gamma_N \quad X \quad u. \quad (4.108)$$

onde  $\partial\bar{u}/\partial n$  é o valor do fluxo prescrito no contorno  $\Gamma_N$ . No método dos volumes finitos, esta condição é implementada de maneira bastante natural. No caso de estarmos resolvendo, por exemplo, a Eq. (4.45), esta condição de contorno é implementada simplesmente como:

$$\nabla\hat{u}_{IJ_L}^\Gamma \cdot \vec{D}_{IJ_L} = \nabla\hat{u}_{IJ_L}^\Gamma \cdot \frac{\vec{D}_{IJ_L}}{|\vec{D}_{IJ_L}|} \left| \vec{D}_{IJ_L} \right|, \quad (4.109)$$

mas:

$$\nabla\hat{u}_{IJ_L}^\Gamma \cdot \frac{\vec{D}_{IJ_L}}{|\vec{D}_{IJ_L}|} = \nabla\hat{u}_{IJ_L}^\Gamma \cdot \vec{n}_{IJ_L} = \frac{\partial\bar{u}}{\partial n} \Big|_{IJ_L}, \quad (4.110)$$

de modo que:

$$\nabla\hat{u}_{IJ_L}^\Gamma \cdot \vec{D}_{IJ_L} = \frac{\partial\bar{u}}{\partial n} \Big|_{IJ_L} \left| \vec{D}_{IJ_L} \right|. \quad (4.111)$$

Portanto, nas equações discretas, devemos substituir a expressão aproximada, diretamente pelo valor prescrito sem nenhuma complicação adicional. Desta forma, substituindo o termo de fluxo no contorno pelo fluxo prescrito nas arestas que pertencem ao contorno  $\Gamma_N$ , a Eq. (4.45) pode ser reescrita como:

$$\begin{aligned} \sum_{L=1}^{NN(\Omega)} \nabla\hat{u}_{IJ_L}^\Omega \cdot \vec{C}_{IJ_L} + \sum_{L=1}^{NN(\Gamma)} \nabla\hat{u}_{IJ_L}^\Gamma \cdot \vec{D}_{IJ_L} = \sum_{L=1}^{NN(\Omega)} \left( \frac{\nabla\hat{u}_I + \nabla\hat{u}_{J_L}}{2} - \left( \frac{\nabla\hat{u}_I + \nabla\hat{u}_{J_L}}{2} \cdot \vec{L}_{IJ_L} \right) \vec{L}_{IJ_L} \right. \\ \left. + \frac{(\hat{u}_{J_L} - \hat{u}_I)}{\Delta_{IJ_L}} \vec{L}_{IJ_L} \right) + \sum_{L=1}^{NN(\Gamma)} \frac{\partial\bar{u}}{\partial n} \Big|_{IJ_L} \left| \vec{D}_{IJ_L} \right|. \end{aligned} \quad (4.112)$$

## 5. TRANSPORTE DE CONTAMINANTES EM AQÜÍFEROS

### 5.1 Introdução

No presente capítulo, apresentamos alguns problemas uni e bidimensionais relativos ao transporte de contaminantes em meios porosos utilizando as formulações apresentadas no capítulo 4, tanto para a discretização dos termos elípticos quanto para a discretização dos termos advectivos. Faremos uma breve análise entre as diferentes formas de tratar os termos advectivos, comparando a utilização de um método de segunda ordem sem termo de estabilização, com um método de primeira ordem e com os métodos de ordem mais alta apresentados na seção (4.6). A idéia básica é verificarmos o impacto da utilização das estratégias de maior ordem na qualidade das soluções numéricas finais obtidas de modo a validarmos as formulações implementadas.

Na análise deste tipo de problema, um número adimensional importante é o número de “Peclet da malha”, o qual, para a direção  $x$ , é definido como:

$$Pe = \frac{v\Delta x}{D_L}. \quad (5.1)$$

onde,  $\Delta x$  representa o espaçamento médio do elemento na direção  $x$ .

Um caso limite para este problema é aquele em que a velocidade do escoamento é zero e apenas a dispersão hidrodinâmica é responsável pelo transporte do contaminante, de tal forma que  $Pe = 0$ . Por outro lado, se a dispersão hidrodinâmica é tão pequena que podemos considerar  $D_L = 0$ ,  $Pe = \infty$ . Nestes casos, o fenômeno é puramente advectivo de modo que o contaminante move-se à mercê do movimento do fluido.

Se, para efeito de simplificação, desprezarmos os termos de dispersão cruzada,  $D_{xy} = D_{yx}$ , a equação fundamental utilizada nos exemplos a serem analisados, é a Eq.(2.52) que descreve o transporte de um soluto contaminante num escoamento com velocidade uniforme, e que reproduzimos a seguir por completeza:

$$\frac{\partial C}{\partial t} = \frac{\partial}{\partial x} \left( D_{xx} \frac{\partial C}{\partial x} \right) + \frac{\partial}{\partial y} \left( D_{yy} \frac{\partial C}{\partial y} \right) + \frac{\partial}{\partial z} \left( D_{zz} \frac{\partial C}{\partial z} \right) - v_x \frac{\partial C}{\partial x} - v_y \frac{\partial C}{\partial y} - v_z \frac{\partial C}{\partial z} + q_c. \quad (5.2)$$

Conforme vimos no capítulo 2, a equação anterior representa um problema de advecção-difusão-reação. Para problemas restritos ao plano  $x$ - $y$  e no caso do escoamento ser unidimensional com velocidade  $\vec{v} = v\vec{i}$ , esta equação se reduz a:

$$\frac{\partial C}{\partial t} = \frac{\partial}{\partial x} \left( D_{xx} \frac{\partial C}{\partial x} \right) + \frac{\partial}{\partial y} \left( D_{yy} \frac{\partial C}{\partial y} \right) - v \frac{\partial C}{\partial x} + q_c. \quad (5.3)$$

Neste caso, o caráter bidimensional do fenômeno é decorrente fundamentalmente do termo de dispersão já que o escoamento ocorre apenas em uma direção. Finalmente, assumiremos que o termo fonte ou sumidouro  $q_C$  representa o decaimento radioativo do contaminante transportado de tal forma que  $q_C = -\gamma C$ .

## 5.2 Formulação Discreta

Se integrarmos a Eq. (5.3) no espaço temos:

$$\int_{\Omega} \frac{\partial C}{\partial t} \partial\Omega = \int_{\Omega} \left( \frac{\partial}{\partial x} \left( D_{xx} \frac{\partial C}{\partial x} \right) + \frac{\partial}{\partial y} \left( D_{yy} \frac{\partial C}{\partial y} \right) \right) \partial\Omega - \int_{\Omega} v \frac{\partial C}{\partial x} \partial\Omega + \int_{\Omega} -\gamma C \partial\Omega. \quad (5.4)$$

Utilizando o teorema da divergência de Green-Gauss chegamos a:

$$\int_{\Omega} \frac{\partial C}{\partial t} \partial\Omega = \int_{\Gamma} \left( D_{xx} \frac{\partial C}{\partial x} + D_{yy} \frac{\partial C}{\partial y} \right) \cdot \vec{n} \partial\Gamma - \int_{\Gamma} (vC) \vec{n} \partial\Gamma + \int_{\Omega} -\gamma C \partial\Omega. \quad (5.5)$$

Se restringirmos nossa investigação apenas a problemas de transporte em meios homogêneos, a forma semi-discreta da Eq. (5.5) pode ser escrita como:

$$\begin{aligned} \frac{\partial C}{\partial t} V_I = & \sum_{L=1}^{NN^{(\Omega)}} (D\nabla C)_{IJ_L}^{\Omega} \cdot \vec{C}_{IJ_L} + \sum_{L=1}^{NN^{(\Gamma)}} (D\nabla C)_{IJ_L}^{\Gamma} \cdot \vec{D}_{IJ_L} \\ & - \left( \sum_{L=1}^{NN^{(\Omega)}} (vC)_{IJ_L}^{\Omega} \cdot \vec{C}_{IJ_L} + \sum_{L=1}^{NN^{(\Gamma)}} (vC)_{IJ_L}^{\Gamma} \cdot \vec{D}_{IJ_L} \right) - \gamma C V_I. \end{aligned} \quad (5.6)$$

Como desejamos avaliar apenas o impacto das diferentes técnicas de discretização espacial na solução dos problemas, em todos os exemplos, a discretização temporal é feita utilizando o método de Euler explícito (ver seção 4.6), de modo que:

$$\begin{aligned} C^{n+1} = C^n + \frac{\Delta t}{V_I} & \left[ \left( \sum_{L=1}^{NN^{(\Omega)}} (D\nabla C)_{IJ_L}^{\Omega} \cdot \vec{C}_{IJ_L} + \sum_{L=1}^{NN^{(\Gamma)}} (D\nabla C)_{IJ_L}^{\Gamma} \cdot \vec{D}_{IJ_L} \right) \right. \\ & \left. - \left( \sum_{L=1}^{NN^{(\Omega)}} (vC)_{IJ_L}^{\Omega} \cdot \vec{C}_{IJ_L} + \sum_{L=1}^{NN^{(\Gamma)}} (vC)_{IJ_L}^{\Gamma} \cdot \vec{D}_{IJ_L} \right) - \gamma C V_I \right]^n. \end{aligned} \quad (5.7)$$

O segundo termo do lado direito da Eq. (5.7) é um termo de difusão o qual é discretizado utilizando a formulação híbrida (volumes finitos - diferenças centradas) descrita em detalhes na seção (4.5). O terceiro termo do lado direito desta equação é o termo de trans-

porte advectivo o qual pode ser discretizado utilizando diferentes técnicas numéricas (HIRSCH, 1990; LEVEQUE, 1992). Nos exemplos apresentados a seguir faremos alguns experimentos numéricos em que comparamos algumas das possíveis estratégias que podem se utilizadas para a discretização do termo de transporte advectivo. Com este objetivo nos utilizamos das seguintes formulações:

1. “Método dos Volumes Finitos Central” (MVFC): neste caso, conforme feito em REES (2004) e REES et al. (2005), fazemos uso diretamente da regra do ponto médio para o cálculo dos fluxos advectivos, sem nenhum tipo de estabilização ou difusão numérica artificial.
2. “Método de Ponderação à Montante de 1ª Ordem” (ROE): Esta formulação conservativa é equivalente ao método de ponderação à montante de primeira ordem (HIRSCH, 1990).
3. Métodos de Alta Ordem: Neste caso, utilizaremos as duas opções descritas no capítulo 4:
  - 3.1 “O Método de Difusão Numérica Artificial” (DNA);
  - 3.2 A formulação MUSCL-TVD.

Finalmente, o termo de fonte é discretizado de acordo com a Eq. (4.102). No caso de lidarmos com meios heterogêneos a formulação anterior deve ser modificada de acordo com as técnicas apresentadas na seção (4.4.3).

### ***Escolha dos Parâmetros Numéricos para os Métodos de Alta Ordem***

Conforme vimos no capítulo 4, tanto no método DNA quanto no método MUSCL-TVD é necessário que decidamos sobre os valores a serem adotados para alguns parâmetros de ajuste das formulações.

No caso da formulação DNA, são três os fatores deixados à mercê do analista  $(\theta, \mu_2, \mu_4)$ . Basicamente, estes parâmetros permitem ao analista um controle direto sobre a quantidade de difusão numérica a ser introduzida na formulação. Após alguma experimentação numérica (omitida no presente texto) decidimos utilizar em todos os exemplos deste capítulo,  $\theta = 0$ ,  $\mu_2 = 0.65$  e  $\mu_4 = 0.3$ . Esta escolha foi feita a partir do compromisso entre a capacidade do método em capturar adequadamente as regiões de elevados gradientes versus a acurácia geral do método em regiões de baixos gradientes. A escolha de  $\theta = 0$  foi feita com o objetivo único de limitarmos o número de parâmetros livres a serem considerados, sendo que estes valores devem estar limitados a  $0 \leq \theta \leq 1$ . Já a escolha de  $\mu_2 = 0.65$  foi feita de maneira “conservadora” de modo a garantir uma baixa difusão numérica com o mínimo possível de perturbação na região suave da solução. Finalmente, o termo  $\mu_4$ , que representa um termo de difusão de “background” de quarta ordem possui uma influência menor na solução servindo apenas para estabilizar o esquema nas regiões de baixos gradientes.

Para o método MUSCL-TVD parte da escolha da quantidade de difusão numérica utilizada para estabilizar o esquema já é feita quando da escolha da função limitadora do gradiente. Como mencionado no capítulo 4, diferentes funções poderiam ter sido utilizadas, dentre as quais podemos destacar a “Superbee”, a “Minmod” e a de “Van Albada”. A Superbee

(HIRSCH, 1990), tem características extremamente compressivas, sendo a mais eficiente na captura de perfis que apresentem regiões de elevados gradientes bem definidos sem apresentar ondas de expansão. Devido ao seu caráter excessivamente compressivo, em muitos casos, esta função produz resultados físicos não realísticos deformando em demasia o perfil representado (DARWISH E MOULKALED, 2003). A função Minmod é reconhecida pelo fato de ser excessivamente difusiva, e a função de Van-Albada (utilizada no presente trabalho), se comporta de modo intermediário entre as funções Superbee e Minmod.

Após alguns experimentos numéricos nossa escolha recaiu sobre a função limitadora de Van-Albada devido a sua robustez na representação de diferentes perfis para as quantidades transportadas, bem como pelo seu caráter intermediário entre as funções Superbee e Minmod no que diz respeito à quantidade de difusão numérica introduzida no esquema.

No caso da metodologia MUSCL-TVD, outro fator a ser escolhido, é o parâmetro  $k$  que define a ordem de aproximação para a variável extrapolada nas superfícies de controle. Os dois valores mais comumente utilizados são:  $k = -1$  e  $k = 1/3$ , que no caso unidimensional representam, respectivamente, os métodos de ponderação à montante de segunda ordem e o método de ponderação à montante de terceira ordem. Os resultados obtidos após alguma experimentação numérica foram bastante similares, sendo que nossa escolha recaiu sobre  $k = 1/3$ , apenas para obtermos, em teoria, uma ordem superior de aproximação.

## 5.3 Exemplos

### 5.3.1 Transporte Unidimensional de Contaminantes Numa Coluna de Areia a Partir de Uma Fonte a Montante

No primeiro exemplo, adaptado de NE-ZHENG SUN (1995), consideraremos o transporte unidimensional de um soluto contaminante cuja concentração é dada por  $C$  e que é injetado a montante numa coluna de areia homogênea e isotrópica com  $120\text{ m}$  de comprimento e  $15\text{ m}$  de altura, conforme mostrado na Fig. (5.1).

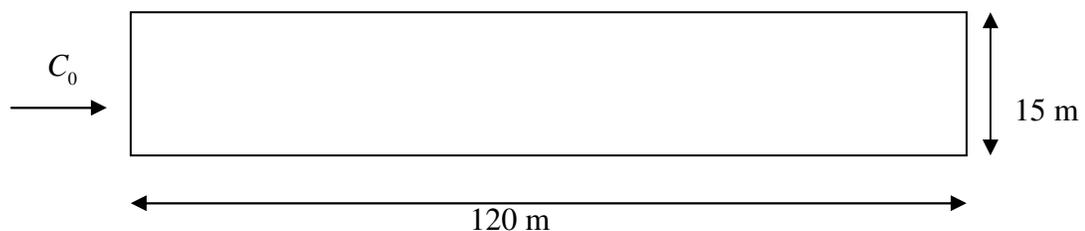


Figura 5.1 – Injeção constante de um soluto contaminante a montante de uma coluna de areia homogênea e isotrópica.

Neste exemplo, na ausência de termos de fonte ou sumidouro, a Eq. (5.3) pode ser escrita como:

$$\frac{\partial C}{\partial t} = D_L \frac{\partial^2 C}{\partial x^2} - v \frac{\partial C}{\partial x} \quad 0 < x < 120. \quad (5.8)$$

onde,  $D_L = D_{xx}$  é o coeficiente de dispersão longitudinal. Neste caso, as condições iniciais e de contorno são dadas por:

$$\begin{aligned} C(x, 0) &= 0.0 \text{ (g/m}^3\text{)} & 0 < x \leq 120 \\ C(0, t) &= C_0 \text{ (g/m}^3\text{)} & t \geq 0 \\ C(120, t) &= 0.0 \text{ (g/m}^3\text{)} & t \geq 0. \end{aligned} \quad (5.9)$$

A solução analítica deste problema, apresentada em NE-ZHENG SUN (1995), é fornecida por:

$$C(x, t) = \frac{C_0}{2} \left\{ \operatorname{erfc} \left[ \frac{x - vt}{2\sqrt{D_L t}} \right] + \exp \left( \frac{vx}{D_L} \right) \operatorname{erfc} \left[ \frac{x + vt}{2\sqrt{D_L t}} \right] \right\}, \quad (5.10)$$

onde, na Eq. (5.10), “*erfc*” é a função erro complementar e “*exp*” é a função exponencial.

#### **a) Problema fortemente difusivo**

De acordo com NE-ZHENG SUN (1995), os dados para este problema são:  $C(0, t) = 10.0 \text{ g/m}^3$ ,  $v = 1.0 \text{ m/d}$ ,  $D_L = 10.0 \text{ m}^2/\text{d}$ . Inicialmente, para a discretização espacial, utilizaremos uma malha não-estruturada triangular cujo espaçamento médio entre nós adjacentes é  $\Delta x \cong 7.5 \text{ m}$  de modo a termos 16 subdivisões ao longo do eixo  $x$ , fornecendo um número de Peclet,  $Pe = 0.75$ , conforme mostrado na Fig. (5.2). O intervalo de tempo utilizado foi de  $\Delta t = 0.1 \text{ d}$ . Na Figuras (5.3), mostramos a malha triangular não-estruturada utilizada para a discretização espacial do domínio mostrado na Fig. (5.2). Nas Figuras (5.3) e (5.4) apresentamos, respectivamente, os contornos de concentração do contaminante obtidos com o método MUSCL-TVD em  $t = 30 \text{ d}$ , bem como a solução analítica e os resultados numéricos para os perfis de concentração também no instante  $t = 30 \text{ d}$ , com o MVFC, com o método de ROE, e com os métodos DNA, e MUSCL-TVD.

Neste caso, em que o termo difusivo, associado à dispersão longitudinal predomina sobre o termo de transporte advectivo, o número de Peclet ( $Pe < 2.0$ ) é considerado baixo, de tal modo que o MVFC equivalente ao método de diferença centradas deve apresentar resultados numéricos livres de oscilações espúrias (NE-ZHENG SUN, 1995).

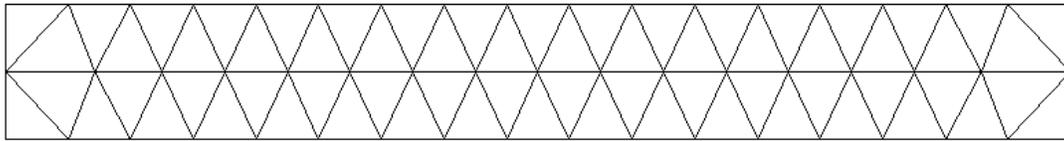


Figura 5.2 – Malha triangular não-estruturada com 16 subdivisões (ao longo da linha central da coluna de areia) utilizada na discretização espacial do problema do transporte 1-D de contaminantes.

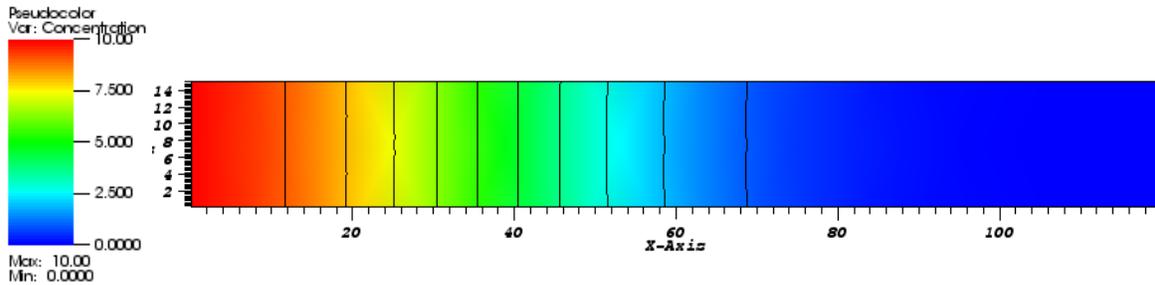


Figura 5.3 – Contornos de concentração obtidos pelo método MUSCL-TVD para o problema do transporte 1-D de contaminantes em  $t = 30d$  com  $Pe = 0.75$ .

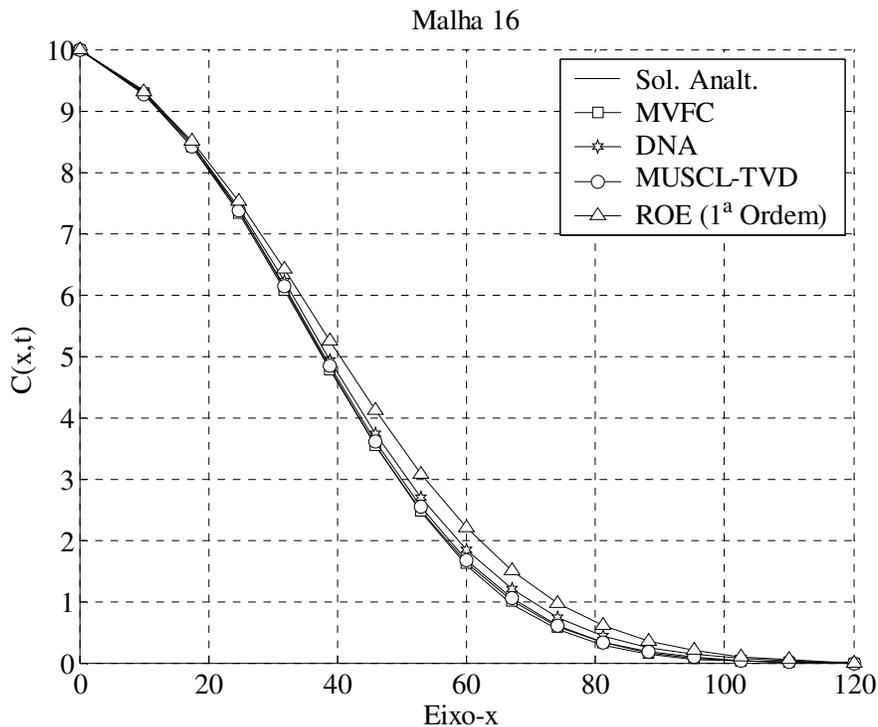


Figura 5.4 – Perfis de concentração para o problema do transporte 1-D de contaminantes em  $t = 30d$ . Solução analítica e soluções numéricas para malha com 16 subdivisões ao longo da linha central da coluna de areia ( $Pe = 0.75$ ).

Conforme esperado, todos os métodos utilizados, incluindo o MVFC, comportaram-se muito bem com respeito à estabilidade da solução, não apresentando oscilações espúrias. Os métodos MVFC, MUSCL-TVD e DNA apresentaram soluções qualitativamente equivalentes, por outro lado, o método de ROE, que é um método mais difusivo, forneceu uma solução menos acurada que todos os outros métodos testados.

**b) Refinamento de malha: problema fortemente difusivo**

A fim de observarmos o comportamento das soluções aproximadas obtidas com os diferentes métodos numéricos, a partir do sucessivo refinamento da malha, nas Figs. (5.5), (5.6) e (5.7), apresentamos as soluções numéricas obtidas com o MVFC, com o método de ROE e com os métodos DNA e MUSCL-TVD para uma seqüência de malhas, obtidas a partir da subdivisão uniforme dos elementos triangulares da malha original. Neste caso, nos utilizamos de malhas com 32, 64 e 128 subdivisões ao longo do eixo dos  $x$ , respectivamente. O intervalo de tempo utilizado foi de  $\Delta t = 0.01d$  para todas as malhas. Devemos notar que, ao mantermos os dados físicos de entrada iguais aos do exemplo anterior e refinarmos sucessivamente a malha, o número de Peclet ( $Pe = (v\Delta x)/D_L$ ) é reduzido de tal forma que:  $Pe = 0.375$ ,  $Pe = 0.1875$  e  $Pe = 0.09375$  para as malhas com 32, 64 e 128 subdivisões, respectivamente.

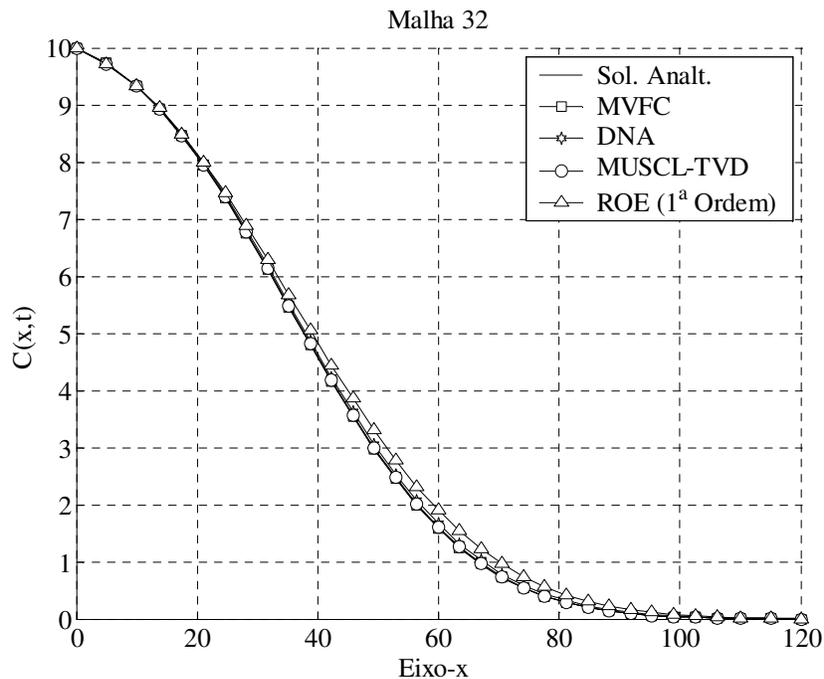


Figura 5.5 – Perfis de concentração para o problema do transporte 1-D de contaminantes em  $t = 30d$ . Solução analítica e soluções numéricas para malha com 32 subdivisões ao longo da linha central da coluna de areia ( $Pe = 0.375$ ).

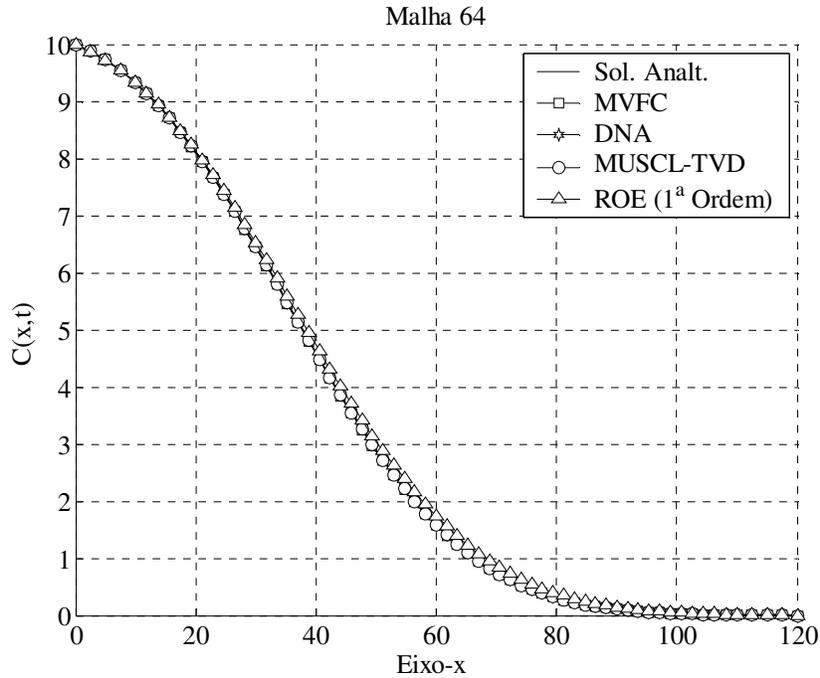


Figura 5.6 – Perfis de concentração para o problema do transporte 1-D de contaminantes em  $t = 30d$ . Solução analítica e soluções numéricas para malha com 64 subdivisões ao longo da linha central da coluna de areia ( $Pe = 0.1875$ ).

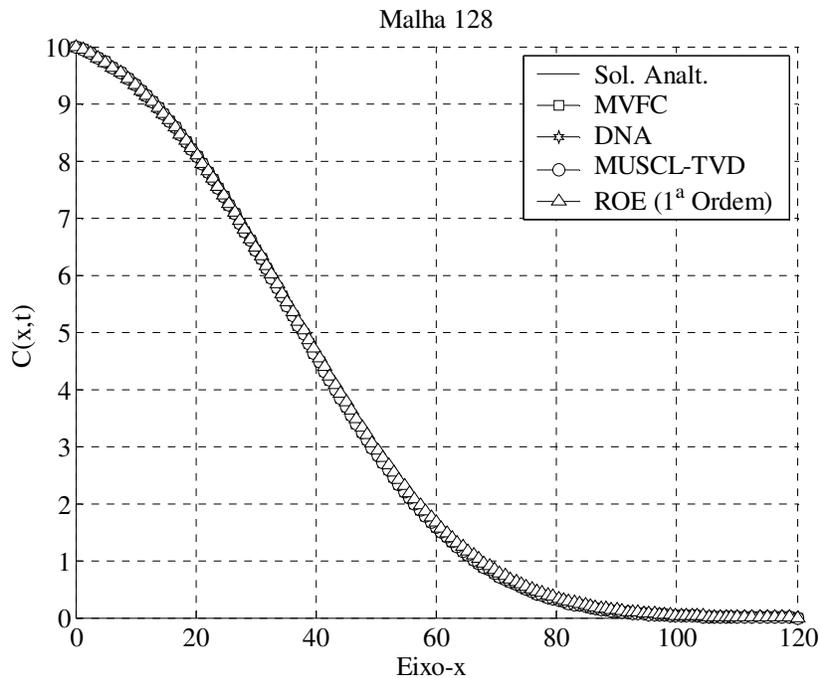


Figura 5.7 – Perfis de concentração para o problema do transporte 1-D de contaminantes em  $t = 30d$ . Solução analítica e soluções numéricas para malha com 128 subdivisões ao longo da linha central da coluna de areia ( $Pe = 0.1875$ ).

Fica claro pela análise das Figs. (5.5), (5.6) e (5.7) que todos os métodos analisados apresentam soluções fisicamente coerentes, acompanhando os perfis de concentração corretamente ao longo do domínio. Tanto o MVFC quanto os métodos DNA e MUSCL-TVD apresentam excelentes resultados, que são quase que indistinguíveis da solução analítica já a partir da malha com 32 subdivisões, enquanto que o método de ROE só apresenta resultados comparáveis a partir da malha com 128 subdivisões.

### c) Problema fortemente advectivo

Neste problema, os dados físicos são os mesmos que os utilizados para o problema apresentado anteriormente a menos do coeficiente de difusão, o qual é dado por  $D_L = 0.05 \text{ m}^2/d$ . Para a discretização espacial, utilizaremos inicialmente a mesma malha triangular não-estruturada com 16 subdivisões ao longo do eixo x, apresentada no exemplo (a), de modo que, o termo de transporte advectivo predomina sobre o termo difusivo, produzindo um número de Peclet dado por  $Pe = 150.0$ . O intervalo de tempo utilizado foi de  $\Delta t = 0.01d$ . Neste caso, podemos observar claramente pela Fig. (5.8), o aparecimento de oscilações indesejáveis na solução numérica produzida pelo MVFC, enquanto que tanto o método de ROE quanto os métodos de alta resolução MUSCL-TVD e DNA apresentam soluções sem a presença de oscilações. Vale ainda notar que os métodos MUSCL-TVD e DNA apresentam soluções mais acuradas que o método de ROE, com menor difusão numérica, de modo a capturar a região de elevado gradiente de maneira mais adequada.

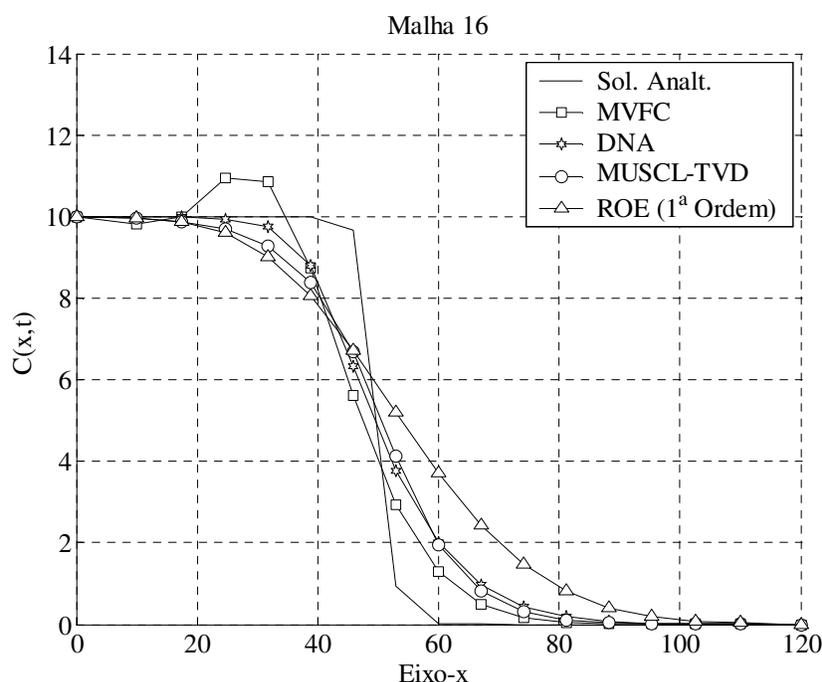


Figura 5.8 – Perfis da concentração para o problema do transporte 1-D de contaminantes em  $t = 50d$ . Solução analítica e soluções numéricas para malha com 16 subdivisões ao longo da linha central da coluna de areia ( $Pe = 150.0$ ).

**d) Refinamento de malha: problema fortemente advectivo**

Novamente observamos o comportamento das soluções aproximadas obtidas com os diferentes métodos numéricos, a partir do sucessivo refinamento da malha. Nas Figuras. (5.9), (5.10) e (5.11), apresentamos, respectivamente, as soluções numéricas obtidas com o MVFC, com o método de ROE e com os métodos DNA e MUSCL-TVD para a mesma seqüência de malhas utilizadas no exemplo (b). O mesmo intervalo de tempo fixo,  $\Delta t = 0.01d$ , foi utilizado para todas as malhas. Com o refinamento das malhas, o número de Peclet da malha ( $Pe = (v\Delta x)/D_L$ ) é modificado de tal forma que  $Pe = 75$ ,  $Pe = 37.5$  e  $Pe = 18.75$  para as malhas com 32, 64 e 128 subdivisões, respectivamente.

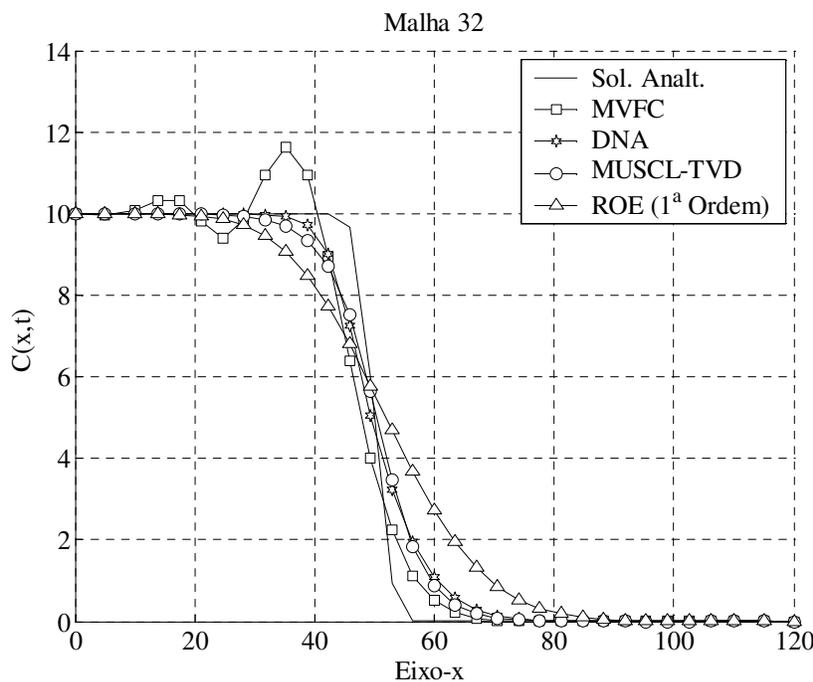


Figura 5.9 – Perfis da concentração para o problema do transporte 1-D de contaminantes em  $t = 50d$ . Solução analítica e soluções numéricas para malha com 32 subdivisões ao longo da linha central da coluna de areia ( $Pe = 75.0$ ).

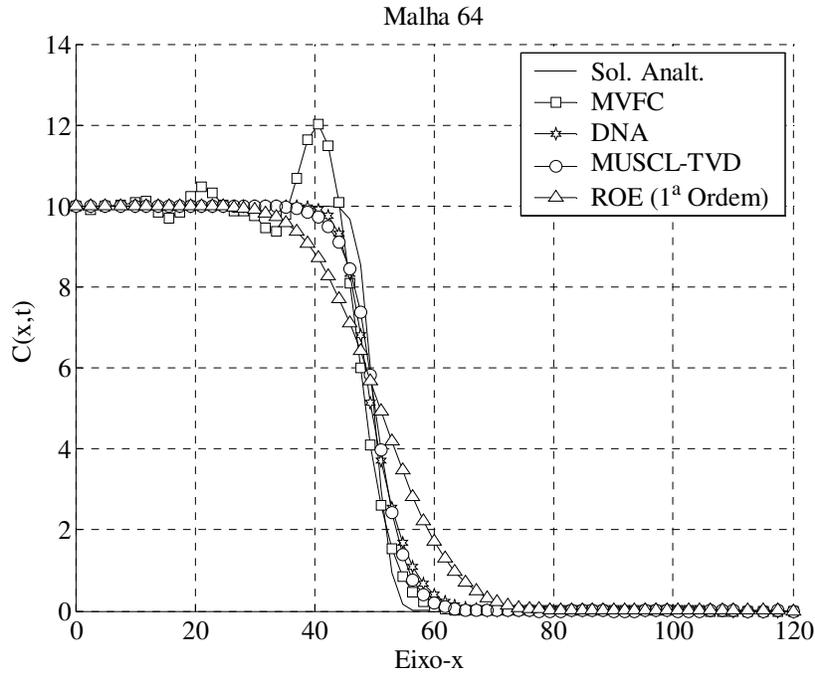


Figura 5.10 – Perfis da concentração para o problema do transporte 1-D de contaminantes em  $t = 50d$ . Solução analítica e soluções numéricas numa malha com 64 subdivisões ao longo da linha central da coluna de areia ( $Pe = 37.5$ ).

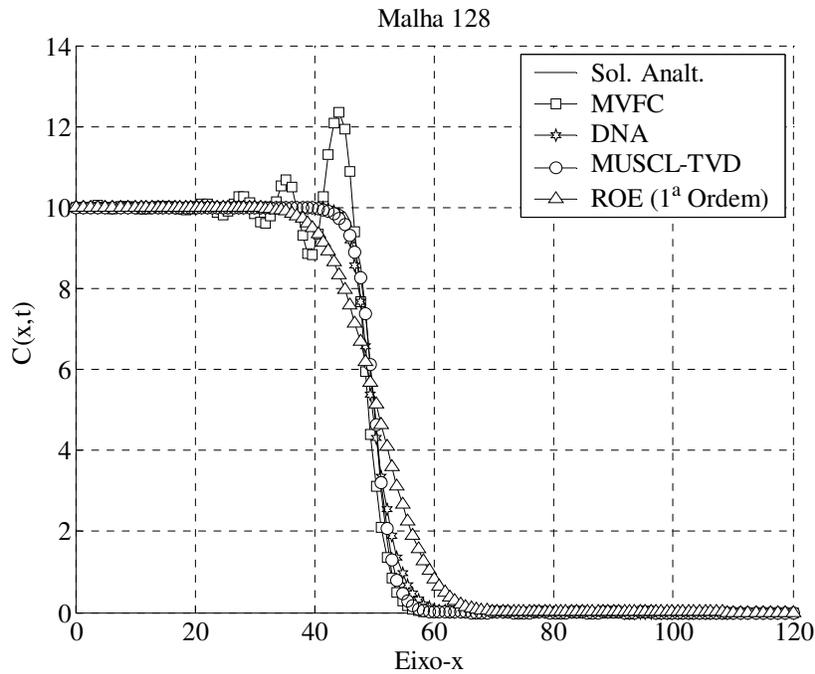


Figura 5.11 – Perfis de concentração para o problema do transporte 1-D de contaminantes em  $t = 50d$ . Solução analítica e soluções numéricas para malha com 128 subdivisões ao longo da linha central da coluna de areia ( $Pe = 18.75$ ).

Com a exceção do MVFC, o sucessivo refinamento das malhas faz com que todos os três métodos convirjam para a solução física correta, livre de oscilações espúrias. Além disso, novamente, fica clara a vantagem dos métodos de alta resolução, DNA e MUSCL-TVD sobre o método de primeira ordem de ROE no que diz respeito à representação acurada da frente de concentração.

### 5.3.2 Transporte Unidimensional de Contaminantes Numa Coluna de Areia a Partir de Uma Fonte a Montante com Decaimento Radioativo

Neste exemplo, para a mesma configuração geométrica do exemplo anterior, consideraremos o efeito do decaimento exponencial radioativo do contaminante ao longo do tempo conforme descrito no capítulo 2 e detalhado em NE-ZHENG SUN (1995), de tal forma que a Eq. (5.3) pode ser escrita como:

$$\frac{\partial C}{\partial t} = D_L \frac{\partial^2 C}{\partial x^2} - v \frac{\partial C}{\partial x} - \gamma C \quad 0 < x < 120. \quad (5.11)$$

A solução analítica para este problema, também fornecida em NE-ZHENG SUN (1995), é dada por:

$$C(x,t) = \frac{C_0}{2} \exp\left(\frac{vx}{2D_L}\right) \left\{ \exp\left[-\frac{x}{2D_L} \sqrt{v^2 + 4\gamma D_L}\right] \operatorname{erfc}\left[\frac{x - t\sqrt{v^2 + 4\gamma D_L}}{2\sqrt{D_L t}}\right] - \exp\left[\frac{x}{2D_L} \sqrt{v^2 + 4\gamma D_L}\right] \operatorname{erfc}\left[\frac{x + t\sqrt{v^2 + 4\gamma D_L}}{2\sqrt{D_L t}}\right] \right\}. \quad (5.12)$$

Tanto as condições iniciais e de contorno, quanto o coeficiente de dispersão hidrodinâmica e a velocidade do escoamento são os mesmos do problema anterior para o caso fortemente advectivo, *i.e.*  $v = 1.0 \text{ m/d}$  e  $D_L = 0.05 \text{ m}^2/\text{d}$ . Para a discretização espacial utilizamos a mesma seqüência de malhas não-estruturadas triangulares usadas no problema anterior com 32, 64 e 128 subdivisões ao longo da linha média que divide a coluna de areia.

Nesta análise, utilizamos apenas os métodos de ROE, DNA e MUSCL-TVD. Nas Figuras (5.12), (5.13) e (5.14), apresentamos os perfis de concentração do contaminante para três diferentes valores do coeficiente de decaimento radioativo  $\gamma = 0.02d^{-1}$ ,  $\gamma = 0.05d^{-1}$  e  $\gamma = 0.5d^{-1}$ , no instante  $t = 50d$ .

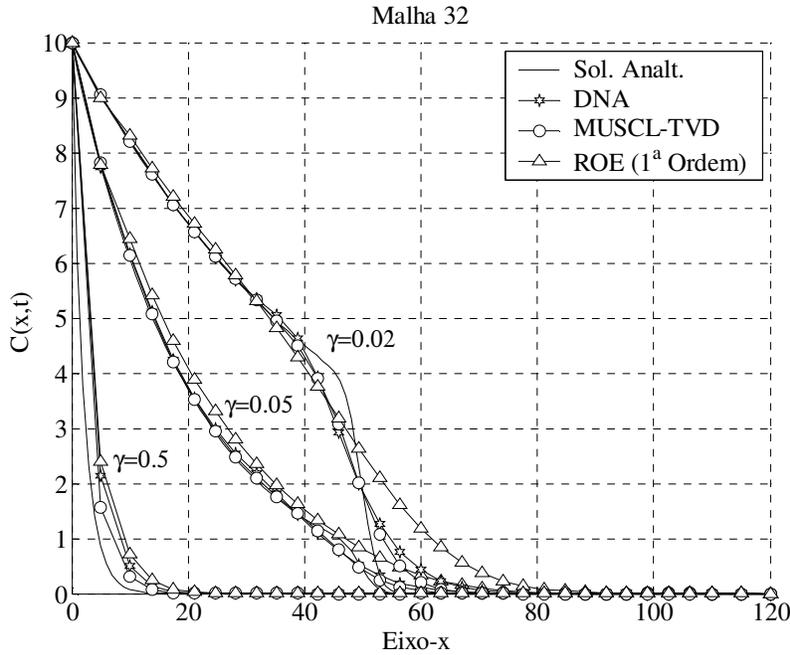


Figura 5.12 – Perfis de concentração para o problema do transporte 1-D de contaminantes com decaimento radioativo em  $t = 50 d$ . Solução analítica e soluções numéricas numa malha com 32 subdivisões ao longo da linha central da coluna de areia ( $Pe = 75.0$ ).

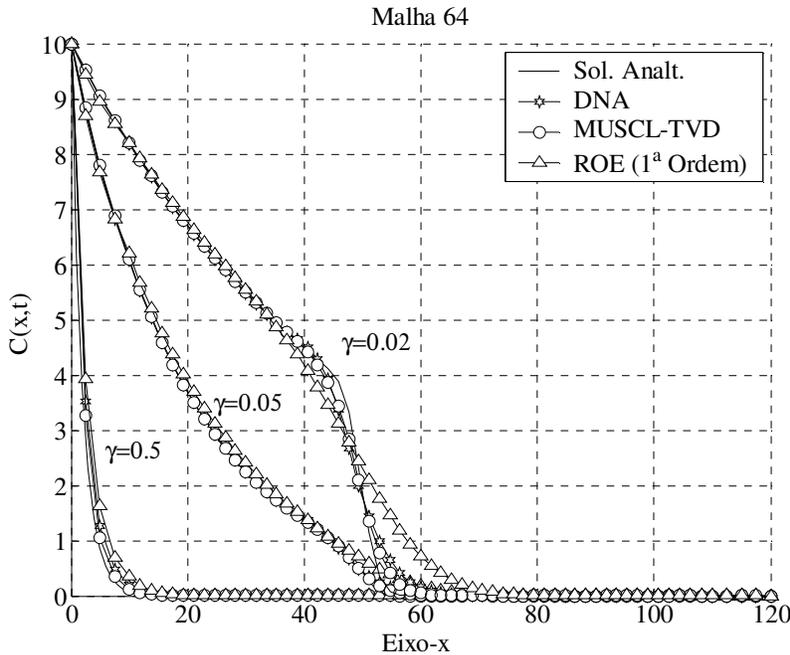


Figura 5.13 – Perfis de concentração para o problema do transporte 1-D de contaminantes com decaimento radioativo em  $t = 50 d$ . Solução analítica e soluções numéricas numa malha com 64 subdivisões ao longo da linha central da coluna de areia ( $Pe = 37.5$ ).

Este problema é particularmente interessante, pois evidencia a capacidade da metodologia aqui apresentada para tratar termos de fonte não lineares distribuídos ao longo do domínio. O termo de decaimento radioativo introduz uma maior difusão física no problema fazendo com que a frente de concentração se disperse mais rapidamente que no exemplo anterior. Na verdade, à medida que o termo de decaimento radioativo aumenta, o contaminante é consumido mais rapidamente, de modo que para  $\gamma = 0.5d^{-1}$  praticamente não existe mais contaminante no instante considerado ( $t = 50d$ ).

Conforme observamos pelas Figs. (5.12), (5.13) e (5.14), os métodos DNA e MUSCL-TVD representaram bastante bem os perfis de concentração do contaminante, mesmo para a malha com 32 subdivisões, sendo que, na malha com 128 divisões, a solução acompanha quase que perfeitamente os referidos perfis para os diferentes valores de  $\gamma$ . Por outro lado, neste caso, o método de ROE se mostrou muito difusivo, sendo particularmente ineficiente para representar os referidos perfis de concentração, mesmo com o refinamento sucessivo das malhas.

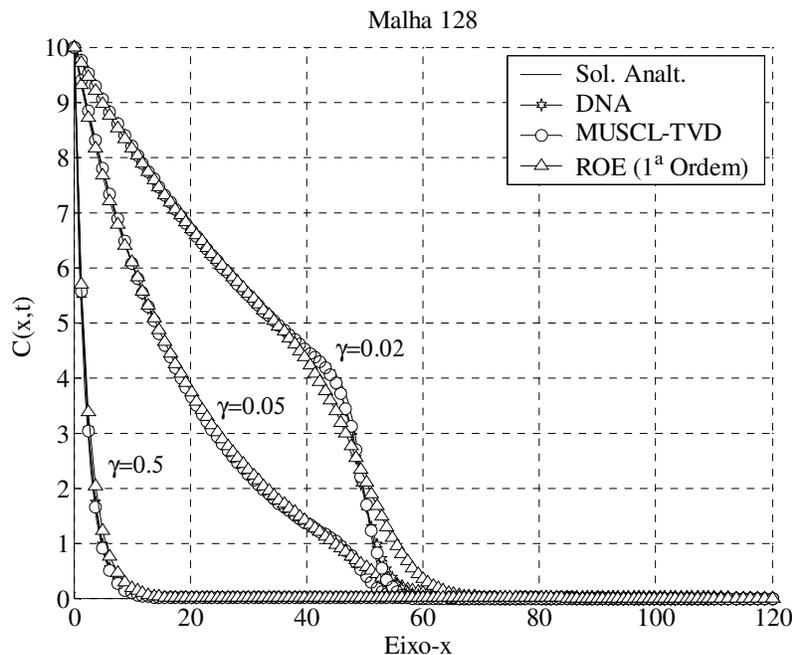


Figura 5.14 – Perfis de concentração para o problema do transporte 1-D de contaminantes com decaimento radioativo em  $t = 50d$ . Solução analítica e soluções numéricas obtidas numa malha com 128 subdivisões ao longo da linha central da coluna de areia ( $Pe = 18.75$ ).

### 5.3.3 Transporte Bidimensional de Contaminantes Num Aquífero com Uma Fonte Localizada à Montante

No terceiro exemplo adimensional adaptado de YEH (1986) e reproduzido em REES (2004) e REES et al. (2004), um contaminante é injetado a uma taxa constante numa faixa a montante de um aquífero. Neste caso, desconsideramos o termo de fonte sumidouro, de maneira que a Eq. (5.3) pode ser simplificada para:

$$\frac{\partial C}{\partial t} = \frac{\partial}{\partial x} \left( D_{xx} \frac{\partial C}{\partial x} \right) + \frac{\partial}{\partial y} \left( D_{yy} \frac{\partial C}{\partial y} \right) - v \frac{\partial C}{\partial x}. \quad (5.13)$$

A velocidade do escoamento é constante e dada por  $v = 1.0 \text{ m/d}$  e o meio poroso é homogêneo e isotrópico, e ainda  $D_{xx} = D_{yy} = D$ . A geometria para este problema é apresentada na Fig. (5.15).

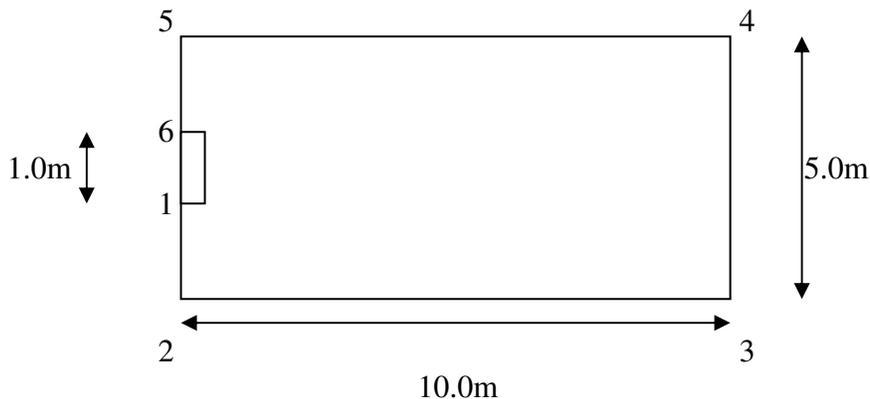


Figura 5.15. – Geometria para o transporte de contaminantes a partir de uma faixa a montante de um aquífero homogêneo e isotrópico.

As condições iniciais e de contorno para o problema são dadas por:

$$C_0 = 0.0 \left( g/m^3 \right) \quad 0 \leq x \leq 10 \quad 0 \leq y \leq 5 \quad \text{em } t=0d$$

$$C = 1.0 \left( g/m^3 \right) \quad t \geq 0 \quad \text{no lado 1-6}$$

$$C = 0.0 \left( g/m^3 \right) \quad t \geq 0 \quad \text{nos lados 1-2 e 5-6}$$

$$\frac{\partial C}{\partial x} = 0.0 \left( g/m^4 \right) \quad t \geq 0 \quad \text{no lado 3-4}$$

$$\frac{\partial C}{\partial y} = 0.0 \left( g/m^4 \right) \quad t \geq 0 \quad \text{nos lados 2-3 e 4-5}$$

Para a solução deste problema, YEH (1986) utilizou-se de um método de elementos finitos “fully upwind” totalmente implícito e REES (2004) e REES et al. (2004) utilizaram

duas formulações explícitas do método dos volumes finitos por aresta. Basicamente, em REES (2004) e REES et al. (2004) foram comparados os resultados obtidos utilizando-se o método de volumes finitos repetidos (ver capítulo 4 para maiores detalhes) e pelo MVFC, para a discretização dos termos elípticos sem nenhum tratamento especial dos termos advectivos.

Neste estudo adotamos duas malhas, uma mais grosseira com  $(\Delta x = 0.5m)$ , e outra mais refinada com  $(\Delta x = 0.2m)$ . Em ambos os casos mantivemos o número de Peclet da malha constante,  $Pe = (v\Delta x)/D = 0.05$ , de modo que  $D = 10.0m^2/d$  para a malha menos refinada e  $D = 4.0m^2/d$  para a malha mais refinada. O intervalo de tempo utilizado foi de  $\Delta t = 0.02d$  em ambas as malhas. As Figuras (5.16a) e (5.16b), mostram as duas malhas triangulares não-estruturadas utilizadas. A malha mais grossa tem 267 nós e 470 elementos e a malha mais fina tem 1463 nós e 2772 elementos triangulares.

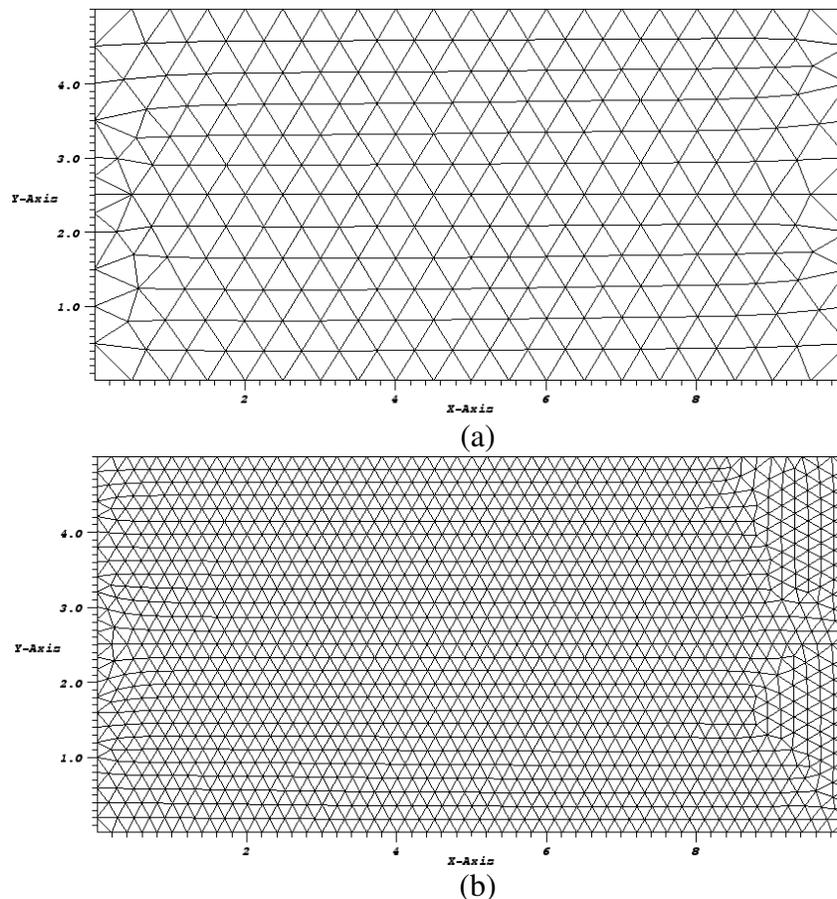


Figura 5.16 – Malhas utilizadas para a discretização do domínio para o problema do transporte 2-D de contaminantes num aquífero: (a) malha triangular mais grosseira com 267 nós e 470 elementos; (b) malha refinada com 1463 nós e 2772 elementos triangulares.

As Figuras (5.17) e (5.18) apresentam, respectivamente, os contornos de concentração em  $t = 1d$  e  $t = 4d$  obtidos com o método MUSCL-TVD para a malha menos refinada. Já

as Figuras (5.19) e (5.20) apresentam os contornos de concentração nos instantes  $t = 1d$  e  $t = 4d$ , obtidos com o método MUSCL-TVD para a malha mais refinada. Nas Figuras (5.21) e (5.22) apresentamos os resultados para o perfil de concentração do contaminante no instante  $t = 4d$  ao longo da linha  $y = 2.5m$  para ambas as malhas. Estes resultados foram obtidos com o MVFC, com o método de ROE, e com os métodos DNA e MUSCL-TVD, respectivamente.

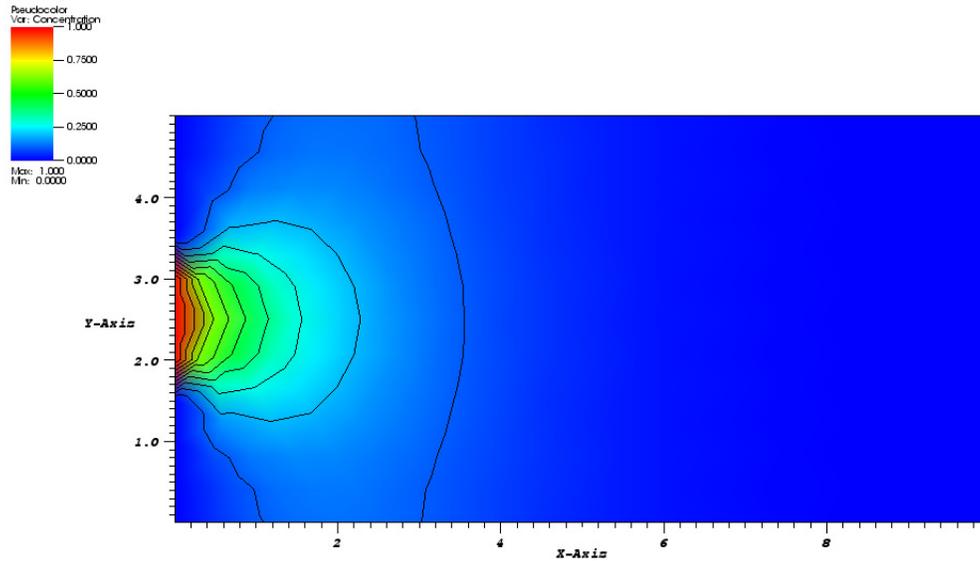


Figura 5.17 – Contornos de concentração obtidos com o método MUSCL-TVD para o problema do transporte 2-D de contaminantes num aquífero com  $Pe = 0.05$  em  $t = 1d$  para a malha com  $\Delta x = 0.5m$ .

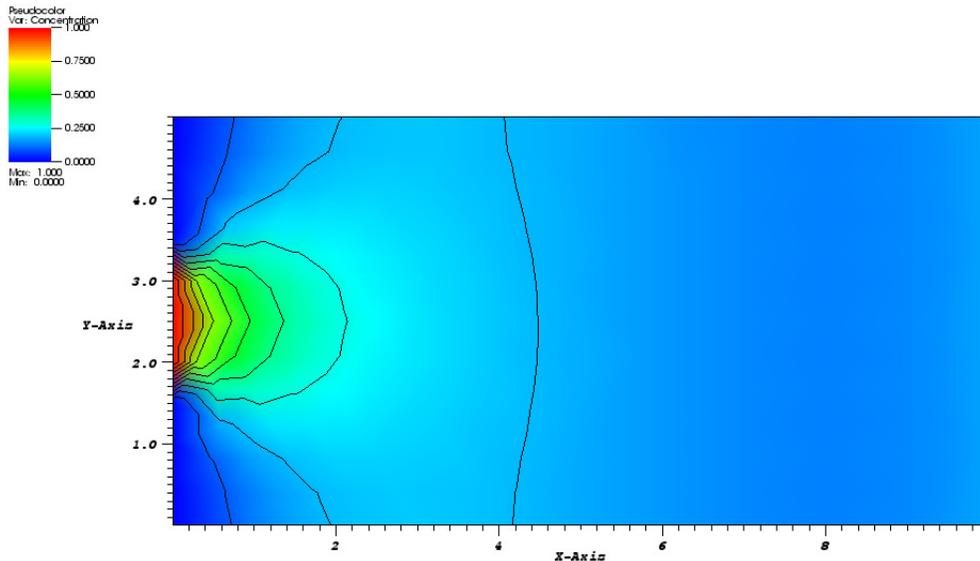


Figura 5.18 – Contornos de concentração obtidos com o método MUSCL-TVD para o problema do transporte 2-D de contaminantes num aquífero com  $Pe = 0.05$  em  $t = 4d$  para a malha com  $\Delta x = 0.5m$ .

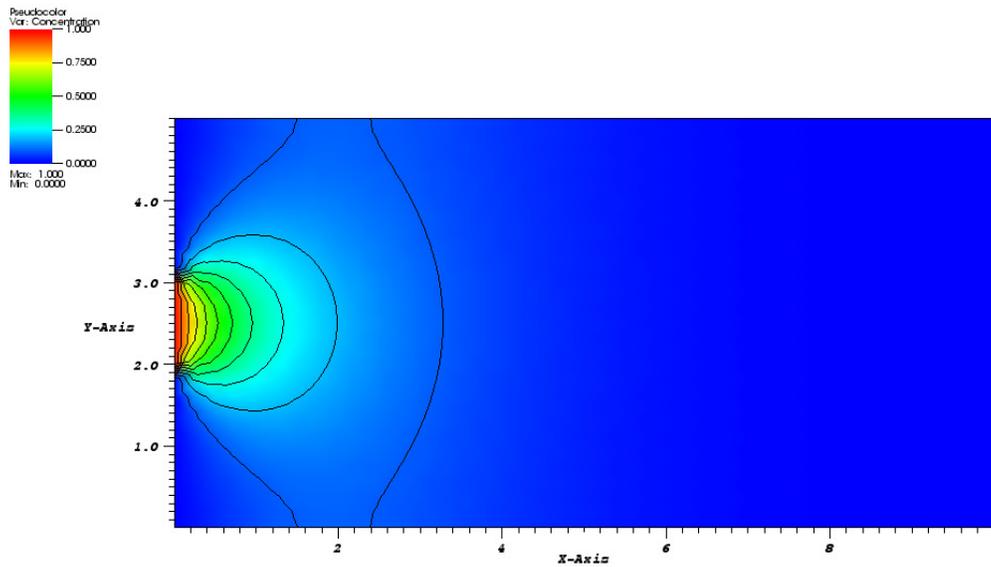


Figura 5.19 – Contornos de concentração obtidos com o método MUSCL-TVD para o problema do transporte 2-D de contaminantes num aquífero com  $Pe = 0.05$  em  $t = 1d$  para a malha com  $\Delta x = 0.2m$ .

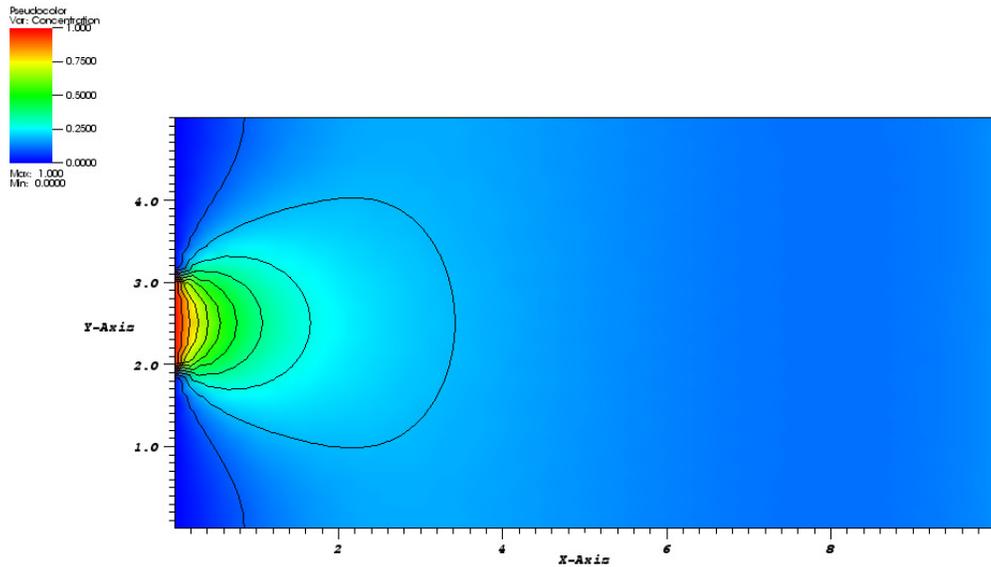


Figura 5.20 – Contornos de concentração obtidos com o método MUSCL-TVD para o problema do transporte 2-D de contaminantes num aquífero com  $Pe = 0.05$  em  $t = 4d$  para a malha com  $\Delta x = 0.2m$ .

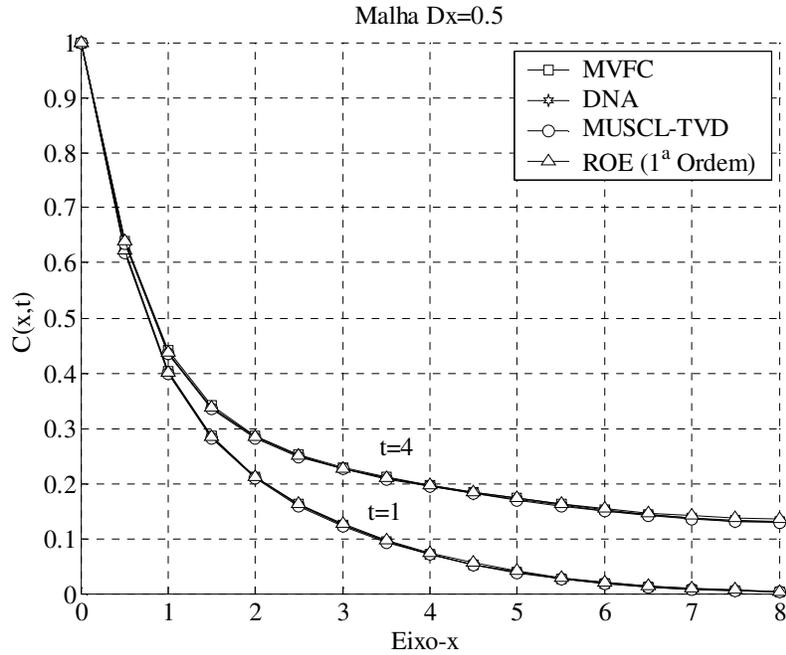


Figura 5.21 – Perfis de concentração para o problema do transporte 2-D de contaminantes num aquífero com  $Pe=0.05$ , em  $t=1d$  e  $t=4d$  para a malha com  $\Delta x=0.5m$ .

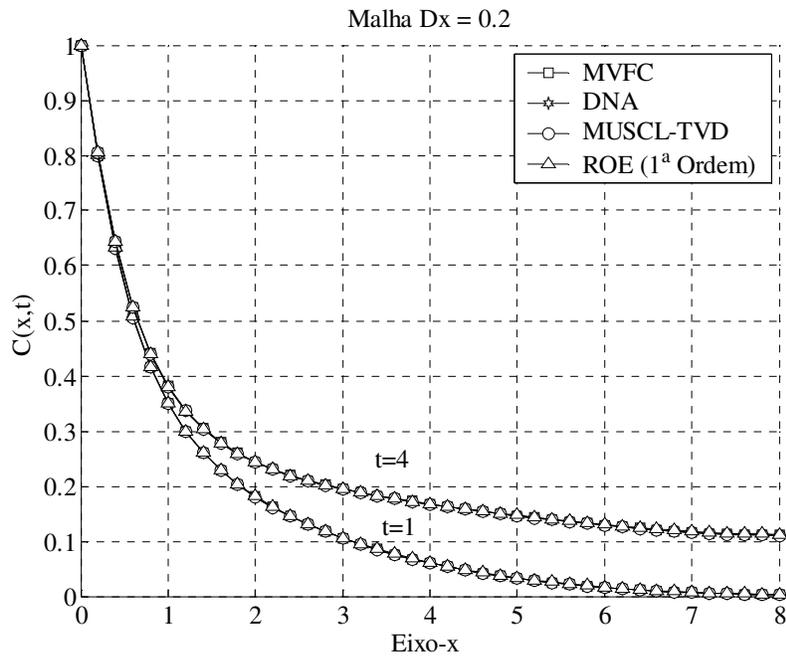


Figura 5.22 – Perfis de concentração para o problema do transporte 2-D de contaminantes num aquífero com  $Pe=0.05$ , em  $t=1d$  e  $t=4d$  para a malha com  $\Delta x=0.2m$ .

Conforme podemos observar pelas Figs (5.17) até (5.20), devido ao valor muito baixo para o número de Peclet da malha, tanto na malha mais grossa com  $D = 10.0m^2/d$  quanto na malha mais fina com  $D = 4.0m^2/d$ , rapidamente o contaminante se espalha ao longo da direção transversal à direção do escoamento, mesmo o escoamento sendo unidimensional. Além disso, em ambas as malhas, conforme podemos notar pelas Figs. (5.21) e (5.22), tanto os resultados obtidos com o MVFC, DNA e MUSCL-TVD estão em excelente concordância entre si, como com os melhores resultados apresentados em REES (2004) e REES et al. (2004). Neste caso, em que predominam os termos difusivos, mesmo o método de ponderação à montante de 1ª ordem (ROE) apresentou resultados muito bons quando comparado aos outros três métodos.

### 5.3.4 Transporte Bidimensional de Contaminantes a Partir de Um Pulso Transiente Localizada a Montante

No quarto exemplo, também adaptado de REES (2004), nós consideramos a mesma geometria do problema anterior. Por outro lado, diferentemente do exemplo 5.3.3, no qual a injeção do contaminante era feita de maneira contínua, a fonte de contaminação age durante um dado período de tempo ( $\Delta t = 1d$ ) após o qual se extingue. Neste problema consideraremos apenas o problema fortemente advectivo com  $Pe = 50.0$ . Para o caso fortemente advectivo, o pulso de contaminantes desloca-se com pouco amortecimento devido à dispersão hidrodinâmica através do meio poroso. Para a discretização espacial, utilizamos duas malhas com  $\Delta x = 0.5m$  e  $\Delta x = 0.2m$ . Os intervalos de tempo utilizados para as duas malhas foram, respectivamente,  $\Delta t = 0.25d$  e  $\Delta t = 0.1d$ . Na malha menos refinada,  $D = 0.01m^2/d$ , e na malha mais refinada,  $D = 0.004m^2/d$ , de modo que o Peclet da malha se mantém constante em ambos os casos ( $Pe = 50.0$ ). Para simularmos a injeção transiente de contaminantes, modificaremos as condições de contorno do problema anterior de forma a termos:

$$\begin{aligned}
 C_0 &= 0.0(g/m^3) && \text{em } t=0 \\
 C &= \begin{cases} 1.0(g/m^3) & \text{para } 0 \leq t \leq 1 \\ 0.0(g/m^3) & \text{para } t > 1 \end{cases} && \text{no lado 1-6} \\
 C &= 0.0(g/m^3) && \text{nos lados 1-2 e 5-6} \\
 \frac{\partial C}{\partial x} &= 0.0(g/m^4) && \text{no lado 3-4} \\
 \frac{\partial C}{\partial y} &= 0.0(g/m^4) && \text{nos lados 2-3 e 4-5}
 \end{aligned}$$

As Figuras (5.23) e (5.24) apresentam os perfis de concentração para as duas malhas com diferentes espaçamentos em dois instantes distintos de tempo ( $t = 2.0d$  e  $t = 6.0d$ ). É

interessante notar que o amortecimento do pulso contaminante observado nas referidas figuras está predominantemente ligado ao fenômeno de difusão numérica associada à estabilização da discretização dos termos advectivos na equação de transporte de contaminantes, já que o coeficiente de dispersão hidrodinâmica é pequeno em ambas as malhas. Nas Figuras (5.25), (5.26), (5.27) e (5.28) apresentamos os contornos de concentração em  $t = 2.0d$  e em  $t = 6.0d$  para os métodos de ROE e DNA, respectivamente.

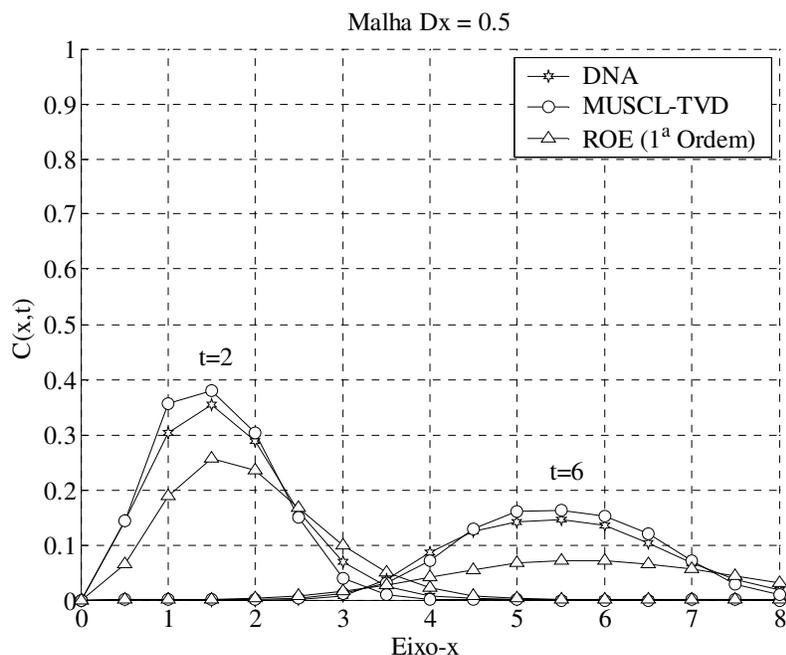


Figura 5.23 – Perfis de concentração para o problema do transporte 2-D de um pulso de contaminantes num aquífero em  $t = 2d$  e  $t = 6d$  para a malha com  $\Delta x = 0.5m$ .

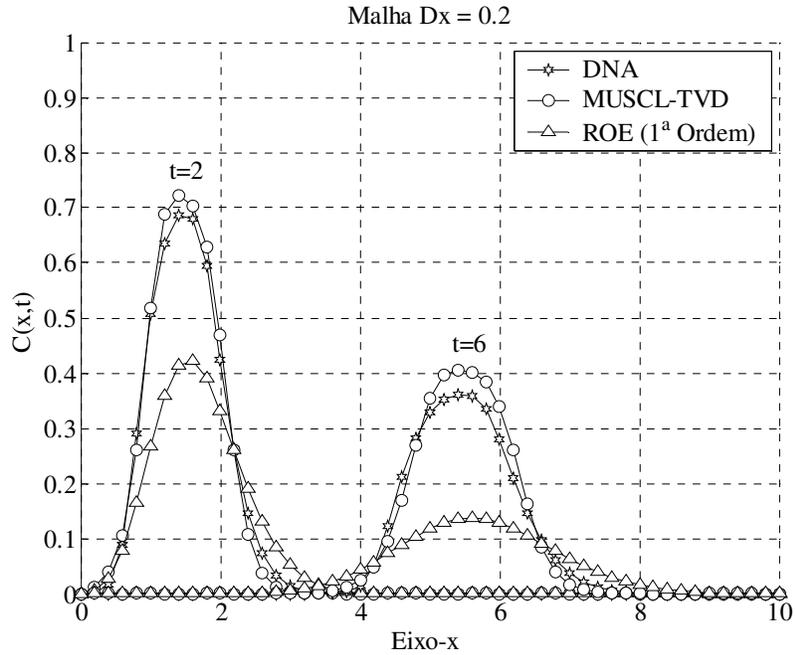


Figura 5.24 – Perfis de concentração para o problema do transporte 2-D de um pulso de contaminantes num aquífero em  $t = 2d$  e  $t = 6d$  para a malha com  $\Delta x = 0.2m$ .

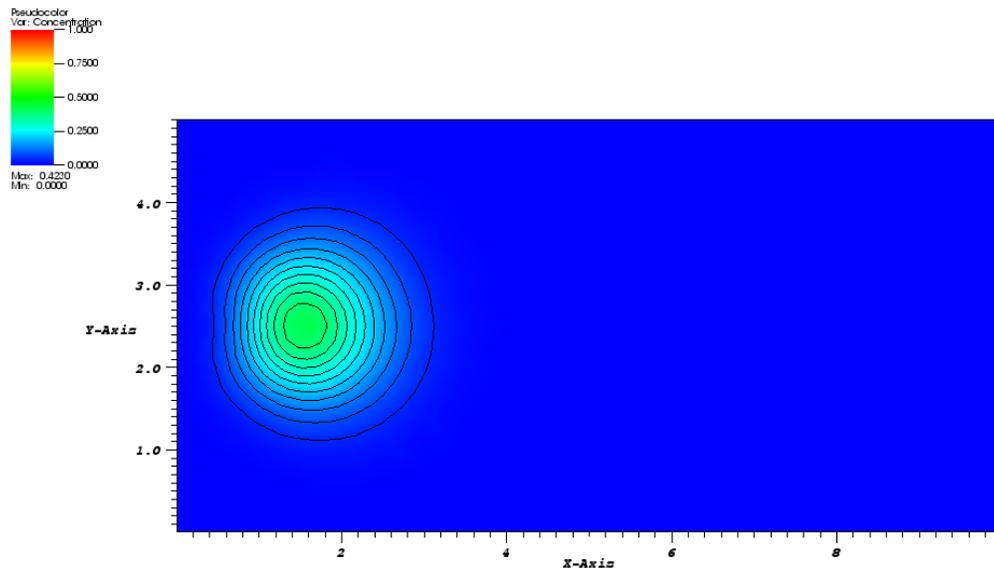


Figura 5.25 – Contornos de concentração obtidos com o método de ROE para o problema do transporte 2-D de um pulso de contaminantes num aquífero com  $Pe = 50.0$  em  $t = 2d$  para a malha com  $\Delta x = 0.2m$ .

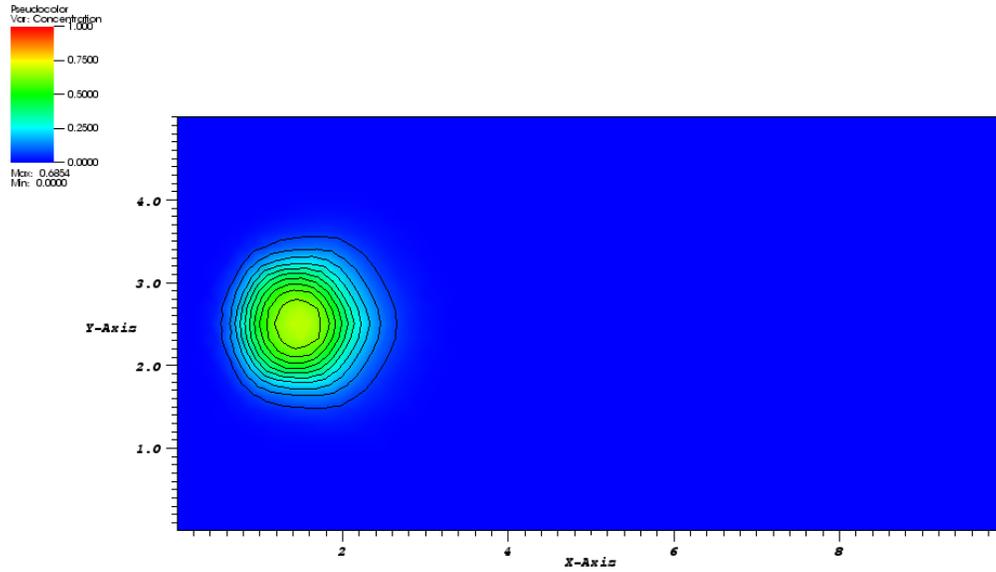


Figura 5.26 – Contornos de concentração obtidos com o método DNA para o problema do transporte 2-D de um pulso de contaminantes num aquífero com  $Pe = 50.0$  em  $t = 2d$  para a malha com  $\Delta x = 0.2m$ .

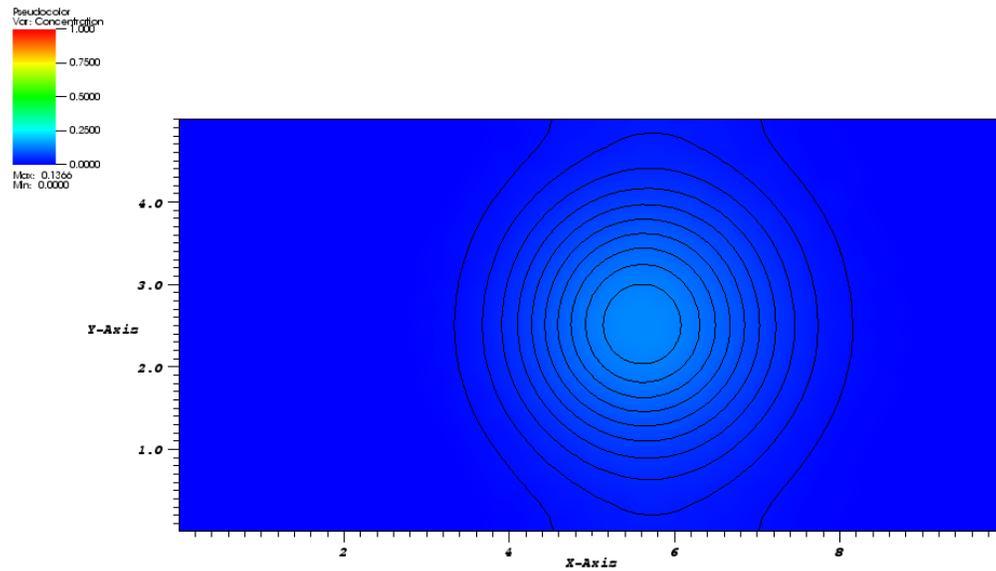


Figura 5.27 – Contornos de concentração obtidos com o método de ROE para o problema do transporte 2-D de um pulso de contaminantes num aquífero com  $Pe = 50.0$  em  $t = 6d$  para a malha com  $\Delta x = 0.2m$ .

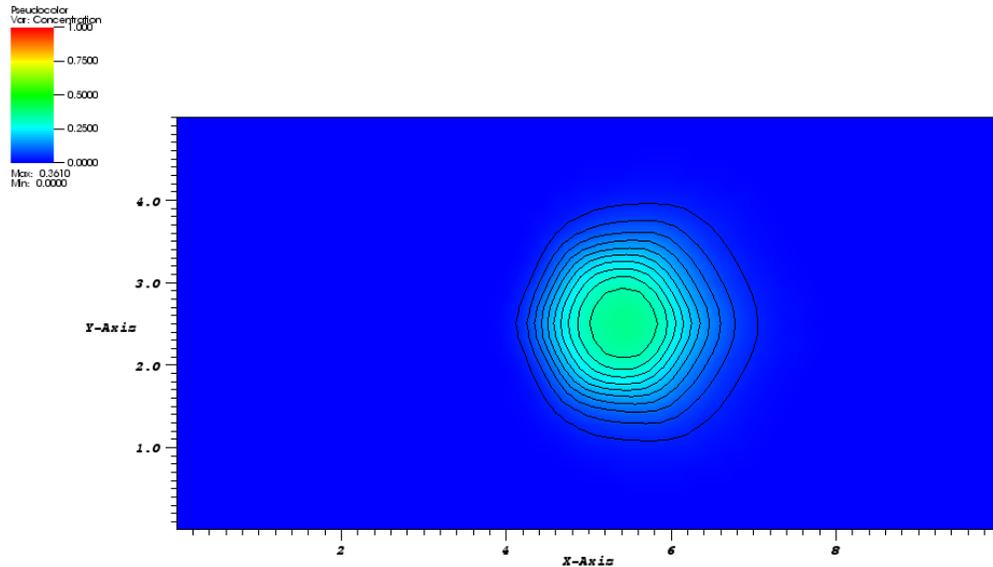


Figura 5.28 – Contornos de concentração obtidos com o método DNA para o problema do transporte 2-D de um pulso de contaminantes num aquífero com  $Pe = 50.0$  em  $t = 6d$  para a malha com  $\Delta x = 0.2m$ .

Apesar dos três métodos conservativos gerarem um pulso que se move com a velocidade correta (REES, 2004), novamente, pela análise das Figs. (5.23) até (5.28) fica evidente a maior acurácia dos métodos de alta ordem DNA e MUSCL-TVD quando comparados com o método de ROE. Neste caso fortemente advectivo, podemos notar que, em ambas as malhas, o método de ROE sofre bem mais com o excesso de difusão numérica artificial do que os métodos de ordem mais alta. Os resultados obtidos no presente trabalho são mais corretos do ponto de vista físico do que aqueles apresentados em REES (2004), estando livres das oscilações espúrias apresentadas no referido trabalho.

Vale ressaltar que para este tipo de problema, de caráter essencialmente advectivo, a utilização de procedimentos automáticos de adaptação de malha, de tal forma que a malha é refinada e desrefinada de acordo com o movimento do contaminante no meio poroso possibilitaria uma melhora sensível na solução a um custo computacional bem inferior àquele que obteríamos ao simplesmente refinarmos a malha de maneira uniforme ao longo do domínio (ARAÚJO, 2004).

### 5.3.5 Transporte Bidimensional de Contaminantes com Razão de Dispersividades Não-Unitária

Neste último exemplo, utilizaremos a mesma geometria e condições de contorno do exemplo 5.3.3. Porém, neste caso, avaliaremos o que ocorre quando os coeficientes de dispersão longitudinal ( $D_{xx} = D_L$ ) e transversal ( $D_{yy} = D_T$ ) são diferentes, *i.e.*  $D_L \neq D_T$ . Em todos os casos analisados,  $D_L = 4.0m^2/d$  e a malha utilizada na discretização espacial é a mesma malha mais refinada do exemplo 5.3.3 com  $\Delta x = 0.2m$ . Para efeito de ilustração,

consideraremos três diferentes valores para a razão entre os coeficientes de dispersão hidrodinâmica  $r = (D_L/D_T)$ :  $r = 1.0$ ,  $r = 10.0$  e  $r = 100.0$ , respectivamente. Na Figura (5.29) observamos os diferentes perfis de concentração ao longo da linha  $y = 2.5m$  para os três casos, em  $t = 2d$ . Nas Figuras (5.30), (5.31) e (5.32) apresentamos os contornos de concentração obtidos com o método MUSCL-TVD para o soluto contaminante em  $t = 2d$ .

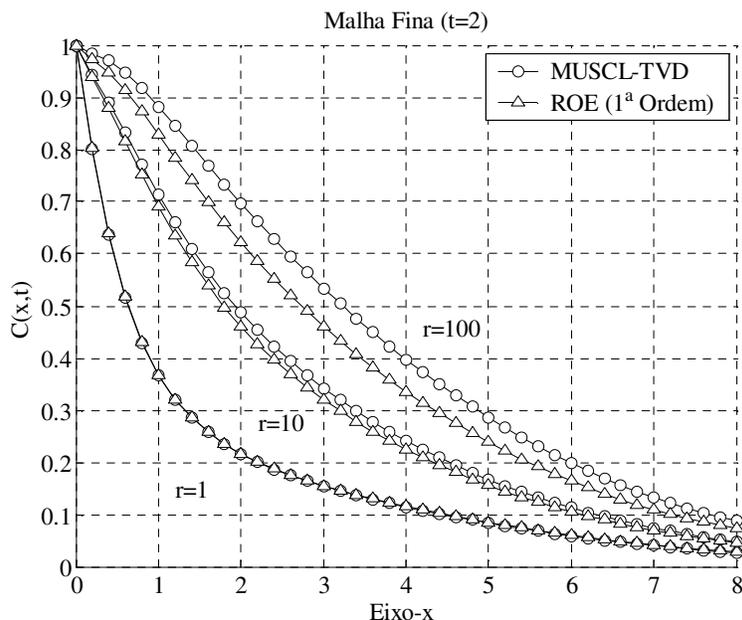


Figura 5.29 – Perfis de concentração para o problema do transporte de contaminantes 2-D com  $r = 1.0$ ,  $r = 10.0$  e  $r = 100.0$  em  $t = 2d$  para a malha com  $\Delta x = 0.2m$ .

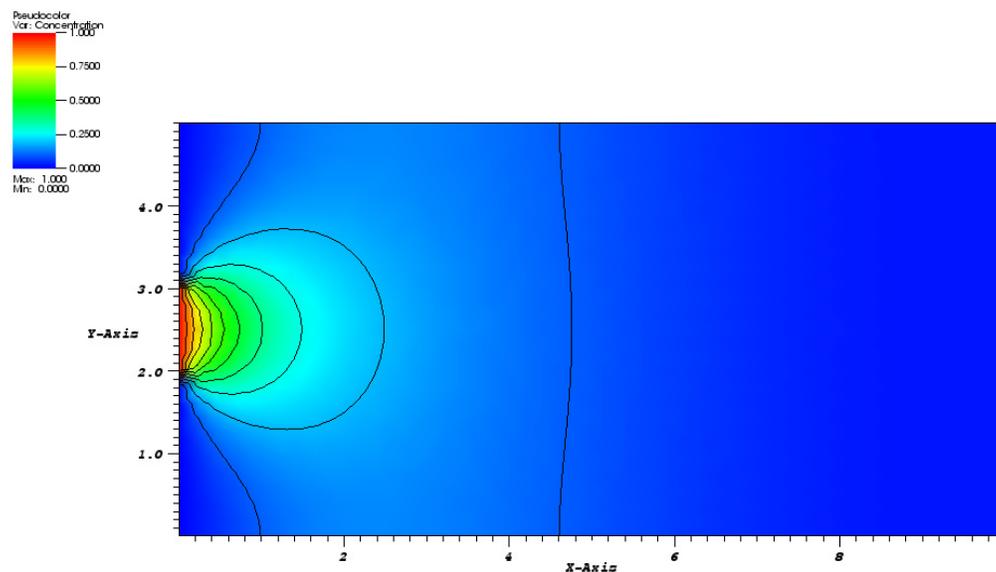


Figura 5.30 – Contornos de concentração obtidos com o método MUSCL-TVD para o problema do transporte de contaminantes 2-D com  $r = 1.0$  em  $t = 2d$ .

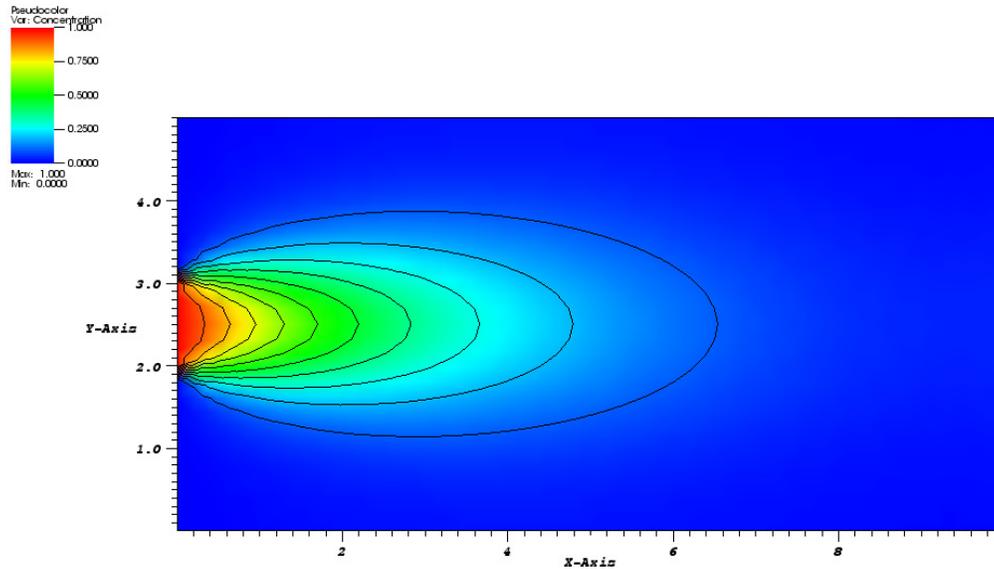


Figura 5.31 – Contornos de concentração obtidos com o método MUSCL-TVD para o problema do transporte de contaminantes 2-D com  $r = 10.0$  em  $t = 2d$ .

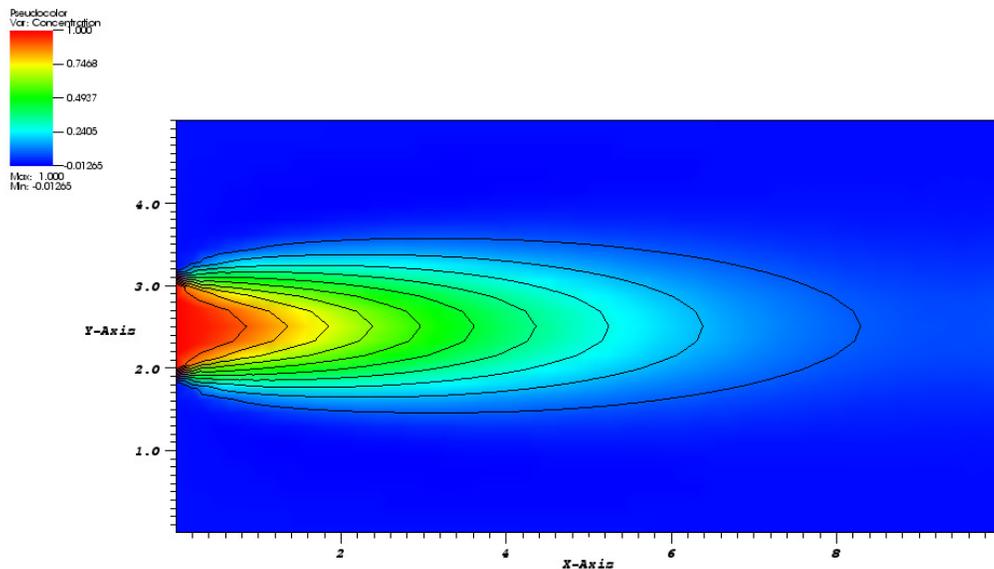


Figura 5.32 – Contornos de concentração obtidos com o método MUSCL-TVD para o problema do transporte de contaminantes 2-D com  $r = 100.0$  em  $t = 2d$ .

As Figuras (5.30), (5.31) e (5.32) indicam claramente que, à medida em que aumentamos a razão entre os coeficientes de dispersividade reduzindo o efeito do coeficiente de dispersividade transversal  $D_T$ , o contaminante tende a se concentrar ao longo do eixo dos  $x$  de maneira que a “pluma” de contaminação fica muito mais estreita reduzindo seu espalhamento na direção transversal ao escoamento. Um comportamento similar, para um problema análogo fisicamente, é apresentado em ZHENG e BENNETT (2002).

## 6. ESCOAMENTO BIFÁSICO EM MEIOS POROSOS

### 6.1 Introdução

Neste capítulo, apresentamos alguns exemplos uni, bi e tridimensionais relativos ao escoamento bifásico de óleo e água em meios porosos rígidos com o objetivo de validar as formulações numéricas apresentadas no capítulo 4. Daremos particular ênfase aos exemplos de escoamentos em meios heterogêneos. Novamente mostraremos o desempenho relativo dos diferentes métodos para o tratamento dos termos advectivos que caracterizam a equação de saturação, avaliando o impacto que a utilização das técnicas de maior ordem têm nas soluções finais obtidas. Nos exemplos apresentados no presente capítulo, nos restringiremos ao método de ponderação à montante de primeira ordem (ROE), e aos métodos de alta ordem, DNA e MUSCL-TVD. No caso da equação elíptica de pressão, apresentaremos a formulação matricial implícita correspondente a discretização por arestas (maiores detalhes no apêndice C). A fim de validarmos as técnicas de discretização espacial propostas, as equações de transporte serão resolvidas via uma metodologia IMPES (Implicit Pressure Explicit Saturation) tradicional (PEACEMAN, 1977; EWING, 1983; MATTAX e DALTON 1990; AZIZ, 1993). O método IMPES foi utilizado devido ao seu baixo custo computacional e a facilidade de implementação.

A seguir, reproduzimos as equações fundamentais para o caso do escoamento incompressível e imiscível de água e óleo em meios porosos rígidos, as quais são apresentadas em detalhes no capítulo 2.

*Pressão:*

$$\nabla \cdot \left( -\underline{K} \left( (\lambda_o + \lambda_w) \nabla p + \frac{(\lambda_o - \lambda_w)}{2} \nabla p_c - (\lambda_o \rho_o + \lambda_w \rho_w) g \nabla Z \right) \right) = Q. \quad (6.1)$$

*Velocidade Total:*

$$\vec{v} = -(\lambda_o + \lambda_w) \underline{K} \nabla p - \frac{(\lambda_o - \lambda_w)}{2} \underline{K} \nabla p_c + (\lambda_o \rho_o + \lambda_w \rho_w) g \underline{K} \nabla Z. \quad (6.2)$$

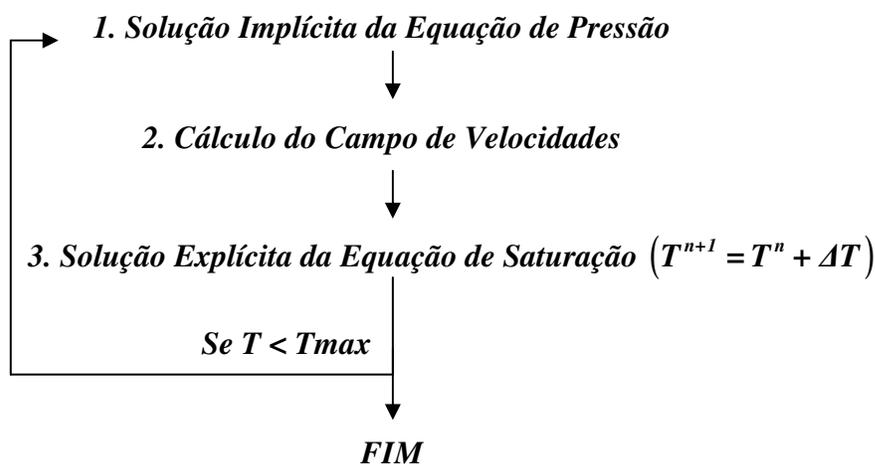
*Saturação*

$$\phi \frac{\partial S_w}{\partial t} = -\nabla \cdot (f_w \vec{v} - \underline{K} h_w \nabla S_w + \underline{K} \lambda_o f_w (\rho_w - \rho_o) g \nabla Z) + Q_w. \quad (6.3)$$

## 6.2 Método IMPES

A metodologia IMPES consiste numa solução seqüencial das equações de transporte fluido em meios porosos. Nesta formulação, dada uma distribuição inicial de saturação de fluidos no reservatório, calculamos o campo de pressão através da Eq. (6.1), e posteriormente, a partir deste campo de pressões, calculamos o campo de velocidades na Eq. (6.2), o qual utilizamos como dado de entrada para o cálculo do campo de saturações da Eq. (6.3), de maneira que as equações de pressão e saturação são acopladas (fracamente) através do campo de velocidades. Com a nova distribuição de saturação, retornamos para a equação de pressão, repetindo o processo até o instante de tempo desejado.

De maneira esquemática temos:



As principais vantagens da metodologia IMPES são sua simplicidade de implementação, e o seu baixo custo computacional, associado à solução explícita da equação de saturação. Por outro lado, esta mesma solução explícita da equação de saturação pode impor severas restrições no intervalo de tempo a ser usado durante a integração temporal, particularmente quando o termo de capilaridade, que é um termo de difusão, é importante. Tal limitação no intervalo de avanço no tempo pode se constituir numa restrição tão severa que efetivamente inviabiliza a utilização do método IMPES devido às constantes atualizações no campo de velocidades. Em geral, nestes casos procura-se utilizar formulações “Seqüenciais Implícitas”, “Totalmente Implícitas” em que a equação de saturação é resolvida implicitamente, ou “Adaptativa Explícita-Implícita”, em que sempre que possível se utilizam, de maneira combinada, a metodologia IMPES e o método Totalmente Implícito (EWING, 1983; SOUZA et al., 2004; THIELE et al. 2004). Por outro lado, a fim de suplantar tal restrição, versões modificadas da técnica IMPES têm sido propostas na literatura (CHEN et al., 2004 e HURTADO et al., 2004). De maneira geral, estas metodologias modificadas, baseiam-se no fato de que os campos de pressão e velocidades variam relativamente pouco ao longo do tempo, de modo que a integração temporal da equação de saturação pode ser feita algumas vezes até que seja necessário atualizar o campo de pressões e, conseqüentemente, o campo de velocidades. Como o cálculo implícito do campo de pressões é respon-

sável pela maior parte do tempo gasto na solução do sistema de equações formado pelas Eqs. (6.1), (6.2) e (6.3), o tempo de solução cai drasticamente viabilizando a solução de problemas considerados relativamente difíceis de serem resolvidos com o método IMPES original (CHEN et al., 2004).

Apesar de termos implementado uma versão simplificada da metodologia IMPES modificada no nosso programa, em que o número de passos de tempo em que resolvemos apenas a equação de saturação é limitado de maneira “ad-hoc” pelo usuário (normalmente quatro ou cinco vezes), nos exemplos apresentados nesta seção utilizamos apenas o método IMPES tradicional, a fim de nos concentrarmos essencialmente nos efeitos das diferentes técnicas de discretização espacial apresentadas no presente trabalho.

## 6.3 Formulação Discreta

### 6.3.1 Equação de Pressão

Para efeito de simplificação, e sem perda de generalidade, consideraremos apenas os problemas em que podemos desprezar os efeitos da gravidade e de capilaridade. Nestas condições, a Eq. (6.1) pode ser reescrita como:

$$\nabla \cdot (-\lambda_r \underline{K} \nabla p) = Q, \quad (6.4)$$

onde  $\lambda_r = \lambda_o + \lambda_w$  é a mobilidade total do fluido.

Integrando a Eq. (6.4), temos:

$$\int_{\Omega} \nabla \cdot (-\lambda_r \underline{K} \nabla p) \partial\Omega = \int_{\Omega} Q \partial\Omega. \quad (6.5)$$

Aplicando o teorema de Green-Gauss obtemos:

$$-\int_{\Gamma} (\lambda_r \underline{K} \nabla p) \cdot \vec{n} \partial\Gamma = \int_{\Omega} Q \partial\Omega. \quad (6.6)$$

Em meios porosos heterogêneos e anisotrópicos, a Eq. (6.4) é uma equação elíptica com coeficientes descontínuos. Seguindo o procedimento descrito no capítulo 4 a Equação (6.6) pode ser escrita para os nós que definem uma aresta  $IJ_L$  como:

$$\sum_{r=1}^{Ndom} \left[ \sum_{L=1}^{NN(\Omega_r)} - \left( \tilde{K}^{\Omega_r} \lambda_T^{I_L} \right) \left( \frac{(\nabla \hat{p}_I^{\Omega_r} + \nabla \hat{p}_{J_L}^{\Omega_r})}{2} - \left( \frac{(\nabla \hat{p}_I^{\Omega_r} + \nabla \hat{p}_{J_L}^{\Omega_r})}{2} \cdot \bar{L}_{I_L} \right) \bar{L}_{I_L} + \right. \right. \\ \left. \left. \frac{(\hat{p}_{J_L} - \hat{p}_I)}{|\Delta_{I_L}|} \bar{L}_{I_L} \right) \right] \cdot \bar{C}_{I_L}^{\Omega_r} = \sum_{r=1}^{Ndom} Q_I^{\Omega_r} V_I^{\Omega_r}, \quad (6.7)$$

para um nó  $I$ , e:

$$\sum_{r=1}^{Ndom} \left[ \sum_{L=1}^{NN(\Omega_r)} \left( \tilde{K}^{\Omega_r} \lambda_T^{I_L} \right) \left( \frac{(\nabla \hat{p}_I^{\Omega_r} + \nabla \hat{p}_{J_L}^{\Omega_r})}{2} - \left( \frac{(\nabla \hat{p}_I^{\Omega_r} + \nabla \hat{p}_{J_L}^{\Omega_r})}{2} \cdot \bar{L}_{I_L} \right) \bar{L}_{I_L} + \right. \right. \\ \left. \left. \frac{(\hat{p}_{J_L} - \hat{p}_I)}{|\Delta_{I_L}|} \bar{L}_{I_L} \right) \right] \cdot \bar{C}_{I_L}^{\Omega_r} = \sum_{r=1}^{Ndom} Q_{J_L}^{\Omega_r} V_{J_L}^{\Omega_r}. \quad (6.8)$$

para um nó  $J_L$ .

Nas Equações (6.7) e (6.8), assumimos um reservatório com fluxo nulo através das fronteiras externas, de maneira que o termo de fluxo nos contornos é identicamente nulo, *i.e.*  $-(\tilde{K}^{\Omega_r} \lambda_T^{I_L} \nabla \hat{p}_{I_L}^{\Omega_r}) \cdot \bar{D}_{I_L}^{\Omega_r} = 0$ . O termo de mobilidade total no ponto médio da aresta,  $\lambda_T^{I_L}$ , deve ser aproximado utilizando a regra do ponto médio a fim de garantirmos uma aproximação de segunda ordem (MALAN, 2002), ou seja:

$$\lambda_T^{I_L} = \frac{\lambda_T^I + \lambda_T^{J_L}}{2}. \quad (6.9)$$

Se escrevermos as equações anteriores para todas as arestas da malha na forma matricial, chegamos a:

$$\left( [E]_{np \times (np \times ndim)}^G [F]_{(np \times ndim) \times np}^G + [G]_{np \times np}^G \right) [\hat{p}]_{np}^G = [Q]_{np}^G \quad (6.10)$$

onde, “np” representa o número de pontos da malha, e “ndim” é o número de dimensões do problema, com  $ndim = 1, 2, 3$ , para problemas uni, bi e tridimensionais, respectivamente.

Deste modo, as matrizes globais e o vetor do termo de fonte para a discretização da equação de pressão podem ser escritos como:

$$[G]_{np \times np}^G = \sum_{r=1}^{Ndom} \sum_{I_L \in \Omega_r} [G]_{(2 \times 2)}^{I_L(\Omega_r)}, \quad (6.11)$$

$$[F]_{(np \times ndim) \times np}^G = \sum_{r=1}^{Ndom} \left( \sum_{IJ_L \in \Omega_r} [F]_{(2ndim \times 2)}^{IJ_L(\Omega_r)} + \sum_{IJ_L \in \Gamma_r} [F]_{(2ndim \times 2)}^{IJ_L(\Gamma_r)} \right), \quad (6.12)$$

$$[E]_{np \times (np \times ndim)}^G = \sum_{r=1}^{Ndom} \sum_{IJ_L \in \Omega_r} [E]_{(2ndim \times 2)}^{IJ_L(\Omega_r)}, \quad (6.13)$$

$$[Q]_{np}^G = \sum_{r=1}^{Ndom} \sum_{IJ_L \in \Omega_r} [Q]_{(2 \times 1)}^{IJ_L(\Omega_r)}. \quad (6.14)$$

Escrevendo a Eq. (6.10) de maneira mais compacta, temos:

$$[A]_{np \times np}^G [\hat{p}]_{np}^G = [Q]_{np}^G \quad (6.15)$$

A Equação (6.15) representa a formulação matricial implícita por arestas para o problema elíptico descrito pela Eq. (6.4). O superíndice ( $G$ ) indica matrizes globais. O termo de fonte  $[Q]_{np}^G$  pode incluir termos pontuais ou distribuídos sobre o domínio. A matriz  $[F]_{(np \times ndim) \times np}^G$  é a matriz dos gradientes nodais que é calculada no primeiro laço sobre as arestas. A matriz  $[G]_{np \times np}^G$ , montada num segundo laço sobre as arestas, é uma matriz quadrada e simétrica equivalente à matriz de discretização de termos elípticos do método DFVC numa malha dual de Voronoi (VERMA, 1996). A matriz  $[E]_{np \times (np \times ndim)}^G$ , também montada no segundo laço sobre as arestas, é uma matriz retangular responsável pela projeção dos gradientes num plano normal à aresta  $IJ_L$ . A matriz  $[A]_{np \times np}^G$  é uma matriz quadrada e, em geral, não simétrica, que é montada em dois laços sobre as arestas, onde a assimetria provém dos termos de difusão cruzada associados ao produto  $[E]_{np \times (np \times nd)}^G [F]_{(np \times nd) \times np}^G$ .

Conforme mencionado no capítulo 1, esta formulação foi implementada no ambiente MATLAB o qual fornece uma biblioteca com diversos resolvidores para sistemas de equações lineares (Gauss, Gradiente Conjugado, GMRES, etc). Para a solução do sistema de equações descrito pela Eq. (6.13), utilizamos um resolvidor direto esparsa de Gauss. Alguns (poucos) experimentos numéricos que realizamos favoreceram a escolha de tal método em detrimento do método GMRES, o qual é usualmente utilizado na solução de sistemas de equações com matrizes não-simétricas. Tal fenômeno ocorreu, provavelmente, devido às dimensões relativamente pequenas dos problemas resolvidos no presente capítulo.

Maiores detalhes sobre as características das matrizes apresentadas nesta seção podem ser encontrados no apêndice C.

### 6.3.2 Campo de Velocidades

Conforme mencionamos anteriormente, na metodologia IMPES, após o cálculo do campo de pressões devemos calcular o campo de velocidades que será utilizado como dado de entrada na equação de saturação. No nosso caso, este campo de velocidades é associado às arestas da malha. Se desprezarmos os termos de gravidade e de capilaridade, esta velocidade é calculada explicitamente como:

$$\vec{v}_{IJ_L}^{\Omega_r} = -(\tilde{K}^{\Omega_r} \lambda_T^{IJ_L}) \left( \frac{(\nabla \hat{p}_I^{\Omega_r} + \nabla \hat{p}_{J_L}^{\Omega_r})}{2} - \left( \frac{(\nabla \hat{p}_I^{\Omega_r} + \nabla \hat{p}_{J_L}^{\Omega_r})}{2} \cdot \vec{L}_{IJ_L} \right) \vec{L}_{IJ_L} + \frac{(\hat{p}_{J_L} - \hat{p}_I)}{|\Delta_{IJ_L}|} \vec{L}_{IJ_L} \right). \quad (6.16)$$

As velocidades assim calculadas satisfazem exatamente a equação de pressão original sem a necessidade da utilização de nenhuma técnica de pós-processamento do campo de velocidades.

### 6.3.3 Equação de Saturação

Desprezando novamente os termos gravitacionais e de capilaridade, podemos escrever a Eq. (6.3), como:

$$\phi \frac{\partial S_w}{\partial t} = -\nabla \cdot f_w \vec{v} + Q_w, \quad (6.17)$$

ou ainda,

$$\phi \frac{\partial S_w}{\partial t} = -\nabla \cdot \vec{F}_w + Q_w, \quad (6.18)$$

onde  $\vec{F}_w = f_w \vec{v}$  é a função de fluxo.

Considerando novamente um meio heterogêneo e anisotrópico, podemos integrar a Eq. (6.18) no espaço, de maneira a obtermos a seguinte equação semi-discreta:

$$\frac{\partial S_w}{\partial t} \sum_{r=1}^{Ndom} \phi^{\Omega_r} V_I^{\Omega_r} = - \sum_{r=1}^{Ndom} \left( \sum_{L=1}^{NN(\Omega_r)} \vec{F}_{IJ_L}^{\Omega_r} \cdot \vec{C}_{IJ_L}^{\Omega_r} + \sum_{L=1}^{NN(\Gamma_r)} \vec{F}_{IJ_L}^{\Gamma_r} \cdot \vec{D}_{IJ_L}^{\Omega_r} + Q_I^{\Omega_r} V_I^{\Omega_r} \right). \quad (6.19)$$

Utilizando o método de Euler explícito e rearranjado os termos, podemos escrever:

$$\hat{S}_w^{n+1} = \hat{S}_w^n - \sum_{r=1}^{Ndom} \frac{\Delta t}{\phi^{\Omega_r} V_I^{\Omega_r}} \left( \sum_{L=1}^{NN(\Omega_r)} \vec{F}_{IJ_L}^{\Omega_r} \cdot \vec{C}_{IJ_L}^{\Omega_r} + \sum_{L=1}^{NN(\Gamma_r)} \vec{F}_{IJ_L}^{\Gamma_r} \cdot \vec{D}_{IJ_L}^{\Omega_r} + Q_I^{\Omega_r} V_I^{\Omega_r} \right)^n, \quad (6.20)$$

onde, o termo de fluxo no contorno é, em geral, nulo, assumindo que não ocorre fluxo através das fronteiras externas do reservatório.

A Equação (6.18) é uma equação hiperbólica não linear, onde a não linearidade provém da dependência entre a função de fluxo fracional e o campo de saturações, *i.e.*  $\hat{f}_w^n(\hat{S}_w^n)$ .

Para efeito comparativo, a discretização do termo advectivo na Eq. (6.20) foi feita utilizando-se as três diferentes técnicas já exploradas no capítulo 5. O Método MVFC não foi utilizado devido a sua total inadequação para a discretização de equações de caráter essencialmente hiperbólico. Desta feita, analisaremos apenas o desempenho dos seguintes métodos:

1. Método de 1ª ordem (ROE);
2. Métodos de Alta Ordem:
  - 2.1 O Método DNA;
  - 2.2 O Método MUSCL-TVD.

### ***Método de Difusão Numérica Artificial (DNA)***

No caso de utilizarmos o método DNA, com uma estrutura de dados por aresta, o termo de fluxo no interior de cada subdomínio,  $\hat{F}_{IJ_L(w)}^{\Omega_r} \cdot \bar{C}_{IJ_L}^{\Omega_r}$ , é calculado como:

$$\hat{F}_{IJ_L(w)}^{\Omega_r} \cdot \bar{C}_{IJ_L}^{\Omega_r} = \left( \frac{\hat{f}_{I(w)} + \hat{f}_{J_L(w)}}{2} \right) \bar{v}_{IJ_L}^{\Omega_r} \cdot \bar{C}_{IJ_L}^{\Omega_r} + AD, \quad (6.21)$$

onde, na Eq. (6.21), a velocidade  $\bar{v}_{IJ_L}^{\Omega_r}$  é calculada explicitamente em função do campo de pressões no instante  $n$ , a partir da Eq. (6.16).

O termo AD é o termo de difusão numérica artificial que, neste caso, é calculado como:

$$AD = -\frac{\alpha_{IJ_L}^{\Omega_r} |\bar{C}_{IJ_L}^{\Omega_r}|}{2} \left[ \xi_{IJ_L}^{(2)} \Delta \hat{S}_{IJ_L(w)} + \xi_{IJ_L}^{(4)} \left( \Delta \hat{S}_{IJ_L(w)} - \left( |\Delta_{IJ_L}| \nabla \hat{S}_{IJ_L(w)} \cdot \bar{L}_{IJ_L} \right) \right) \right], \quad (6.22)$$

onde, os coeficientes  $\xi_{IJ_L}^{(2)}$  e  $\xi_{IJ_L}^{(4)}$ , os quais são funções dos parâmetros livres  $\theta$ ,  $\mu_2$  e  $\mu_4$ , são calculados conforme descrito na seção (4.5). Neste caso, o coeficiente  $\alpha_{IJ_L}^{\Omega_r}$  é aproximado como:

$$\alpha_{IJ_L}^{\Omega_r} = \left| \bar{v}_{IJ_L}^{\Omega_r} \right| \left| \Delta \hat{f}_{IJ_L(w)} / \Delta \hat{S}_{IJ_L(w)} \right|, \quad (6.23)$$

onde,  $\Delta \hat{f}_{IJ_L(w)} / \Delta \hat{S}_{IJ_L(w)} = \left( \hat{f}_{J_L(w)} - \hat{f}_{I(w)} \right) / \left( \hat{S}_{J_L(w)} - \hat{S}_{I(w)} \right)$ .

Por outro lado, os gradientes  $\nabla \hat{S}_{IJ_L(w)}$  são calculados através da média aritmética como:

$$\nabla \hat{S}_{IJ_L(w)} = \frac{\nabla \hat{S}_{I(w)} + \nabla \hat{S}_{J_L(w)}}{2}. \quad (6.24)$$

Na Eq. (6.24), os gradientes nodais são calculado através de uma reconstrução do tipo Green-Gauss (Eq. (4.18)) mesmo para meios heterogêneos e anisotrópicos, porque, neste caso, os gradientes nodais não são utilizados para o cálculo de fluxos associados as propriedades da rocha.

### ***Método “Monotone Upstream Scheme for Conservation Laws” (MUSCL-TVD)***

Assim como na Eq. (4.83), o termo de fluxo  $\hat{F}_{IJ_L(w)}^{\Omega_r} \cdot \bar{C}_{IJ_L}^{\Omega_r}$  é calculado por:

$$\hat{F}_{IJ_L(w)}^{\Omega_r} \cdot \bar{C}_{IJ_L}^{\Omega_r} = \frac{1}{2} \left[ \left( \bar{F}_I^- (\hat{S}_{IJ_L}^-) + \bar{F}_{J_L}^+ (\hat{S}_{IJ_L}^+) \right) \cdot \bar{C}_{IJ_L}^{\Omega_r} - \alpha_{IJ_L}^{\Omega_r} (\hat{S}_{J_L}^- - \hat{S}_I^+) \right]. \quad (6.25)$$

onde, novamente  $\alpha_{IJ_L}^{\Omega_r} = \left| \bar{v}_{IJ_L}^{\Omega_r} \right| \left| \Delta \hat{f}_{IJ_L(w)} / \Delta \hat{S}_{IJ_L(w)} \right|$ , e a velocidade  $\bar{v}_{IJ_L}^{\Omega_r}$  é calculada de maneira adequada através da Eq. (6.16).

### ***Escolha dos parâmetros numéricos para os métodos de alta ordem***

Para o método MUSCL-TVD, novamente utilizaremos a função limitadora de gradientes de Van-Albada com parâmetro  $k = 1/3$ . No caso do método DNA, após alguma experimentação numérica (não apresentada no presente texto), utilizamos os seguintes valores para os parâmetros livres:  $\theta = 0$ ,  $\mu_2 = 1.1$  e  $\mu_4 = 0.85$ . Comparando com o caso do transporte de contaminantes do capítulo 5, foi necessário modificar o valor de  $\mu_2 = 0.65$  para  $\mu_2 = 1.1$ , pois valores inferiores causaram a formação de um “patamar” não físico nos perfis de saturação, de maneira muito similar aos patamares produzidos quando da utilização do método MUSCL-TVD com função limitadora Superbee. Para valores de  $\mu_2 \leq 0.65$ , este patamar não se reduziu de maneira apreciável, mesmo com o refinamento sucessivo das malhas.

## **6.4 Exemplos**

### **6.4.1 O Problema de Buckley-Leverett**

Este problema, que foi adaptado de PINTO (1991), consiste basicamente no deslocamento imiscível unidimensional de óleo por água ao longo de um meio poroso homogêneo

em que desprezamos os efeitos gravitacionais e de capilaridade. As saturações residuais de água e óleo são  $S_{rw} = S_{ro} = 0.1$  e a razão entre as viscosidades das fases é  $\mu_o/\mu_w = 1$ . As permeabilidades relativas e as saturações das fases se relacionam através das seguintes expressões quadráticas descritas no apêndice A:

$$k_{rw}(S_w) = \left( \frac{S_w - S_{wr}}{1 - S_{wr} - S_{or}} \right)^2, \quad k_{ro}(S_w) = \left( \frac{1 - S_w - S_{wr}}{1 - S_{wr} - S_{or}} \right)^2. \quad (6.26)$$

Neste exemplo, apenas a equação de saturação foi resolvida com as seguintes condições iniciais e de contorno:

$$\begin{aligned} S_w(x, 0) &= S_{rw} = 0.1 \quad \text{para} \quad 0 < x \leq 1, \\ S_w(0, t) &= 1.0 - S_{ro} \quad \text{para} \quad x = 0. \end{aligned} \quad (6.27)$$

Para este exemplo utilizamos os métodos de ROE, DNA e MUSCL-TVD. Nas Figuras (6.1) a (6.6), apresentamos as soluções obtidas em  $t = 0.5$ , para seis diferentes malhas unidimensionais com 8, 16, 32, 64, 128 e 256 divisões ao longo do eixo  $x$ . Seguindo PINTO (1991), os intervalos de tempo escolhidos para cada malha foram tais que  $C = (v\Delta t)/\Delta x = 0.05$ , onde  $v = |\vec{v}| = 1$ , e  $C$  é número de Courant (HIRSCH, 1988) para a equação de saturação. Como podemos observar pelas Figs. (6.1) até (6.6), mesmo para a malha mais grosseira, com apenas 8 subdivisões ao longo do eixo  $x$ , nenhum dos três métodos apresentou nenhum tipo de oscilação espúria, além disso, todos os métodos convergem adequadamente para a solução analítica à medida que refinamos as malhas. Conforme esperado, o método de ROE foi novamente o mais difusivo dos três. Tanto o método DNA quanto o método MUSCL-TVD apresentaram comportamentos parecidos, sendo que a partir da malha com 32 subdivisões ambos os métodos já representam de maneira bastante boa o perfil de saturação exato, enquanto que o método de ROE ainda apresenta soluções muito difusivas nesta malha. Na verdade, o método de ROE apresenta soluções “visualmente” pobres, mesmo nas malhas mais finas, com 128 e 256 subdivisões.

Neste caso, fica claro que a utilização dos métodos de ordem mais alta representou uma melhoria expressiva na acurácia com respeito ao método de ordem mais baixa. Sendo que o aumento do custo computacional associado às estratégias de ordem mais alta é relativamente baixo e plenamente justificado, LYRA (1994). Este aumento está associado ao cálculo dos gradientes nodais da saturação, tanto no caso do método MUSCL-TVD quanto no caso do método DNA, além da obtenção das variáveis extrapoladas na interface dos volumes de controle e ao processo de limitação da inclinação no método MUSCL-TVD, e o cálculo do termo de difusão numérica artificial no caso do método DNA.

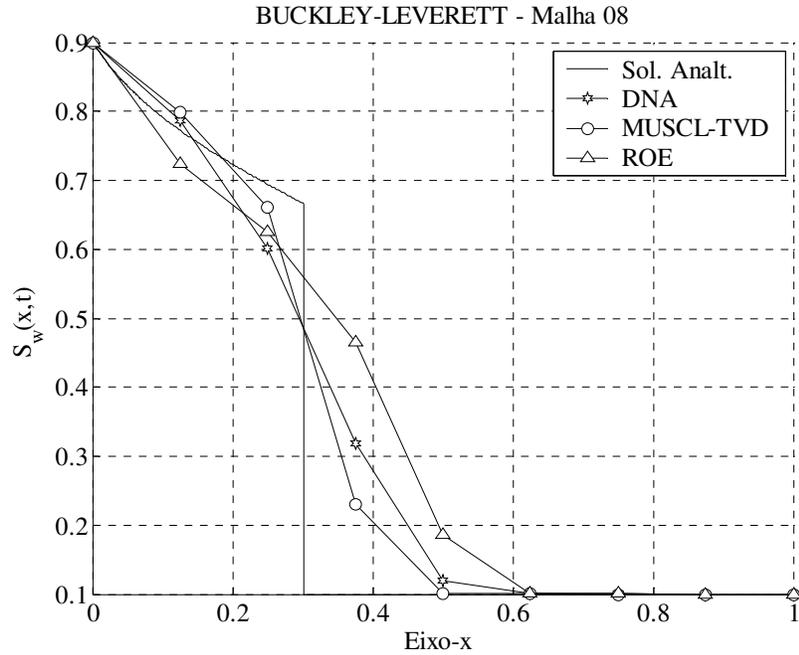


Figura 6.1 – Comparação entre os perfis de saturação de água para o problema de 1-D de Buckley-Leverett numa malha com 8 subdivisões ao longo do eixo  $x$  em  $t = 0.2$ . Solução analítica e soluções aproximadas obtidas com diferentes métodos numéricos.

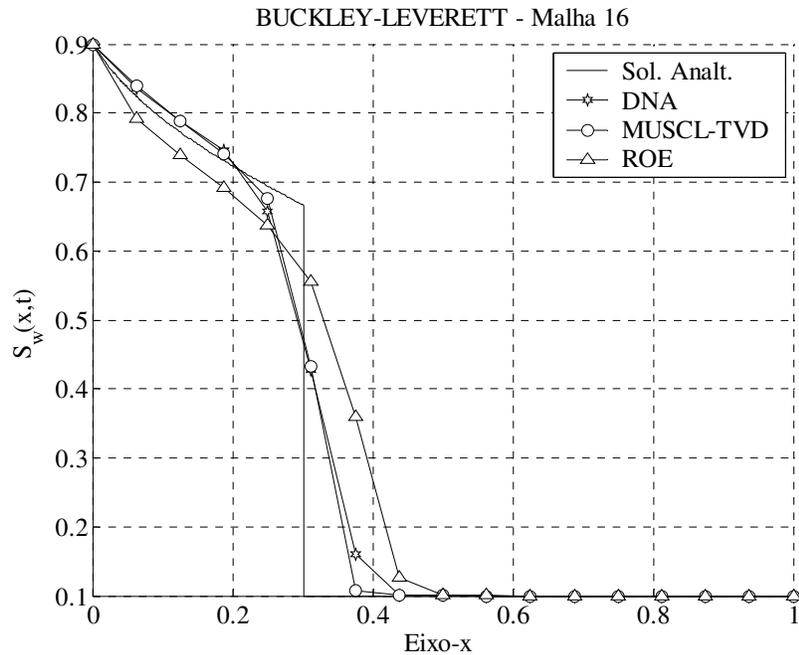


Figura 6.2 – Comparação entre os perfis de saturação de água para o problema de 1-D de Buckley-Leverett numa malha com 16 subdivisões ao longo do eixo  $x$  em  $t = 0.2$ . Solução analítica e soluções aproximadas obtidas com diferentes métodos numéricos.

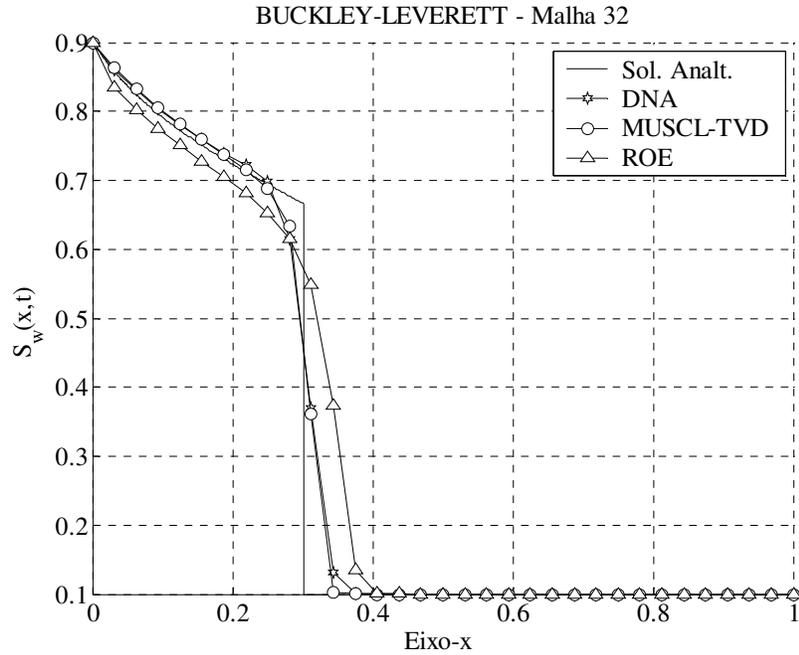


Figura 6.3 – Comparação entre os perfis de saturação de água para o problema de 1-D de Buckley-Leverett numa malha com 32 subdivisões ao longo do eixo  $x$  em  $t = 0.2$ . Solução analítica e soluções aproximadas obtidas com diferentes métodos numéricos.

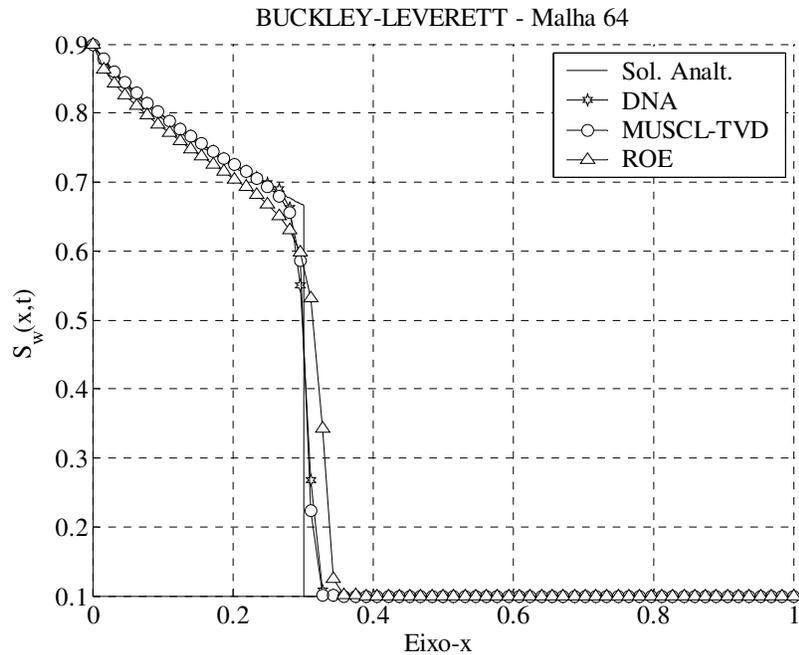


Figura 6.4 – Comparação entre os perfis de saturação de água para o problema de 1-D de Buckley-Leverett numa malha com 64 subdivisões ao longo do eixo  $x$  em  $t = 0.2$ . Solução analítica e soluções aproximadas obtidas com diferentes métodos numéricos.

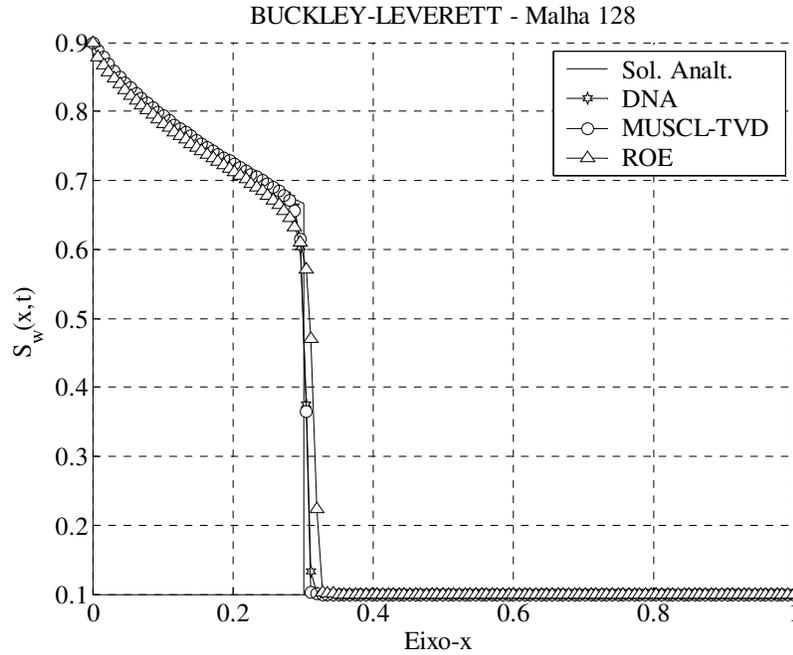


Figura 6.5 – Comparação entre os perfis de saturação de água para o problema de 1-D de Buckley-Leverett numa malha com 128 subdivisões ao longo do eixo  $x$  em  $t = 0.2$ . Solução analítica e soluções aproximadas obtidas com diferentes métodos numéricos.

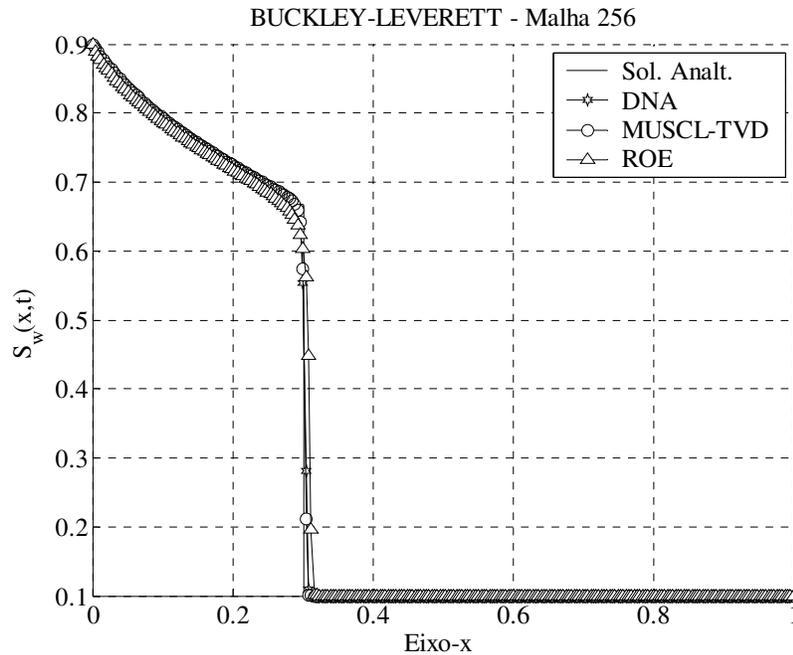


Figura 6.6 – Comparação entre os perfis de saturação de água para o problema de 1-D de Buckley-Leverett numa malha com 256 subdivisões ao longo do eixo  $x$  em  $t = 0.2$ . Solução analítica e soluções aproximadas obtidas com diferentes métodos numéricos.

### 6.4.2 Problema de 1/4 de Cinco Poços Bidimensional com uma Zona de Baixa Permeabilidade

Neste problema, adaptado de HELMIG (1997), existe uma região quadrilateral de baixa permeabilidade entre os poços injetor e produtor, de modo a separar o escoamento em duas partes. As saturações residuais do óleo e da água no reservatório são  $S_{or} = S_{wr} = 0.0$  e as propriedades dos fluidos são  $\mu_w = \mu_o = 0.001 \text{ kg/m.s}$  e  $\rho_w = \rho_o = 1000 \text{ kg/m}^3$ . A porosidade é constante através do reservatório  $\phi = 0.2$  e a razão entre as permeabilidades  $R_{K_1/K_2} = 1000$ , com  $K_1 = 10^{-7} \text{ Dm}^2$  na região de permeabilidade mais alta e  $K_2 = 10^{-10} \text{ Dm}^2$  na região de permeabilidade mais baixa. As condições de contorno nos poços injetor e produtor, respectivamente, são:  $P_i = 2.10^5 \text{ Pa}$  e  $S_i = 1.0$  no poço injetor e  $Q_p = -10.368 \text{ m}^3/d$  no poço produtor. A Figura (6.7) apresenta a geometria do problema. Nas Figuras (6.8a) e (6.8b), apresentamos as duas malhas não-estruturadas triangulares que utilizamos para a discretização espacial do domínio. A malha menos refinada da Fig. (6.8a), cujo espaçamento médio é  $h_1 \cong 18.75 \text{ m}$ , possui 308 nós e 550 elementos. A malha mais refinada da Fig. (6.8b), cujo espaçamento médio é  $h_2 \cong (h_1/2) = 9.375 \text{ m}$ , possui 1180 nós e 2230 elementos. Os intervalos de tempo adotados foram,  $\Delta t = 1d$  para a malha menos refinada e  $\Delta t = 0.5d$  para a malha mais refinada.

Nas Figuras (6.9) até (6.12) apresentamos os contornos para os campos de pressão extrudados na direção Z, em  $t = 200d$  e  $t = 600d$ , tanto para a malha menos, quanto para a malha mais refinada. Nestas figuras, tanto na malha menos refinada quanto na malha mais refinada, podemos notar a presença da barreira central quadrada que dificulta a passagem de fluidos.

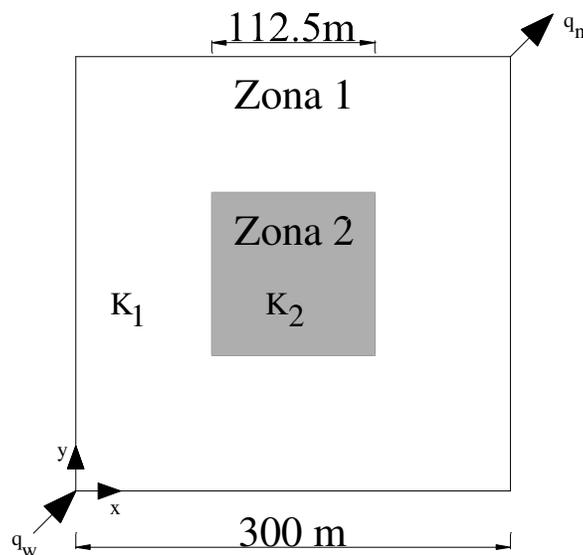


Figura 6.7 – Geometria para o problema 1/4 de cinco poços bidimensional, com uma zona central de baixa permeabilidade.

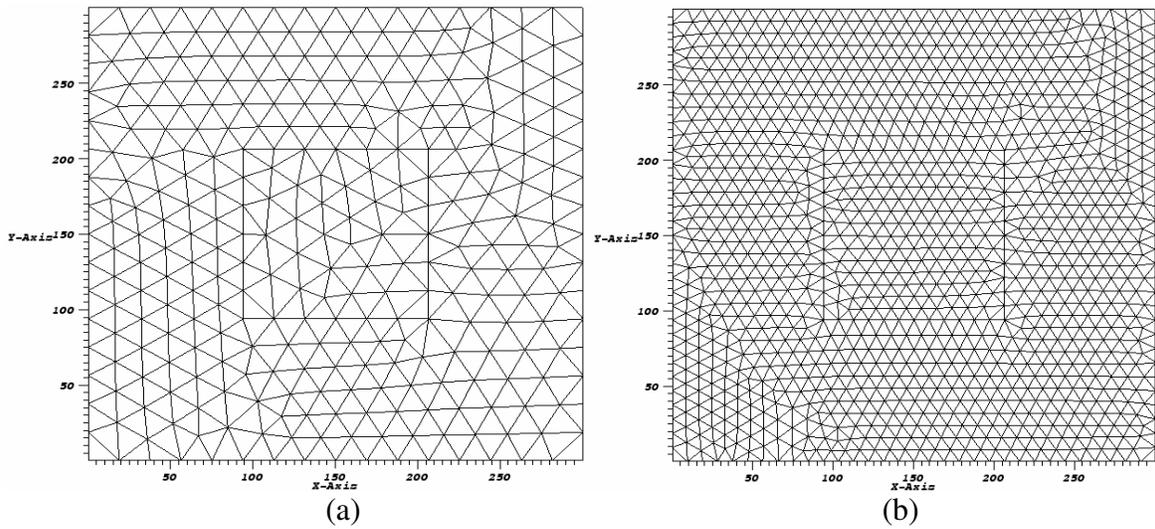


Figura 6.8 – Malhas triangulares utilizadas na discretização espacial da geometria da Fig. (6.7): a) malha menos refinada com 308 nós; b) malha mais refinada com 1180 nós.

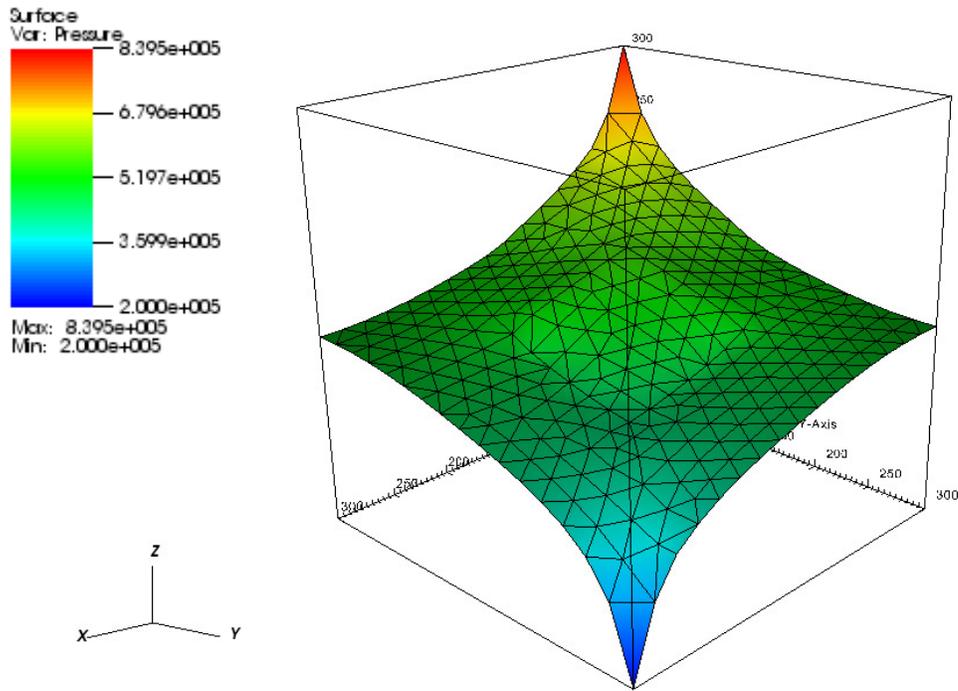


Figura 6.9 – Campo de pressões para o problema com uma zona central de baixa permeabilidade em  $t = 200d$  para a malha menos refinada com 308 nós.

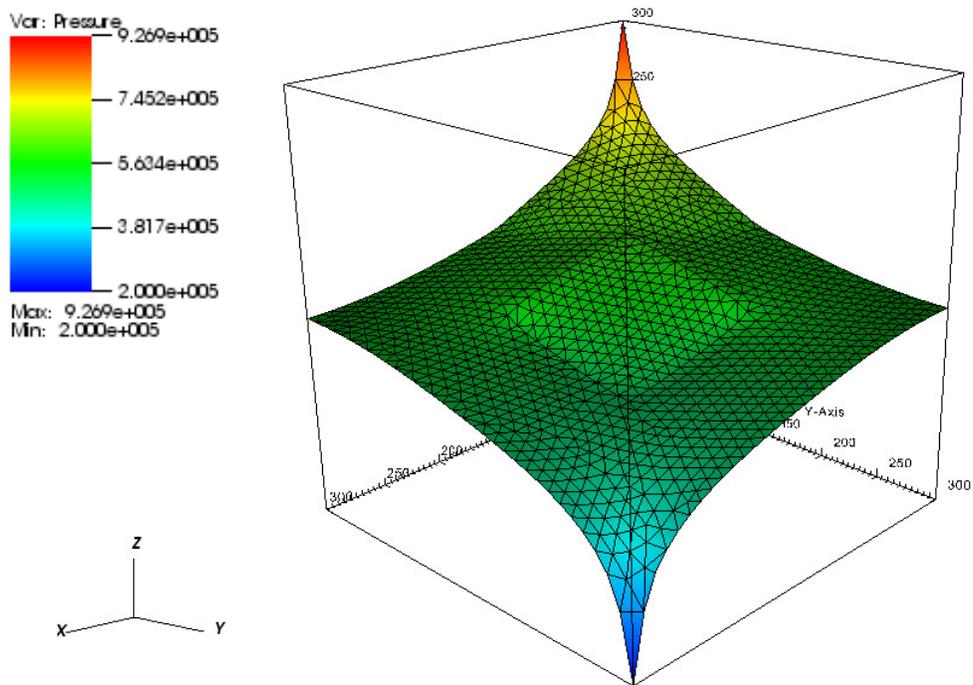


Figura 6.10 – Campo de pressões para o problema com uma zona central de baixa permeabilidade em  $t = 200d$  para a malha mais refinada com 1180 nós.

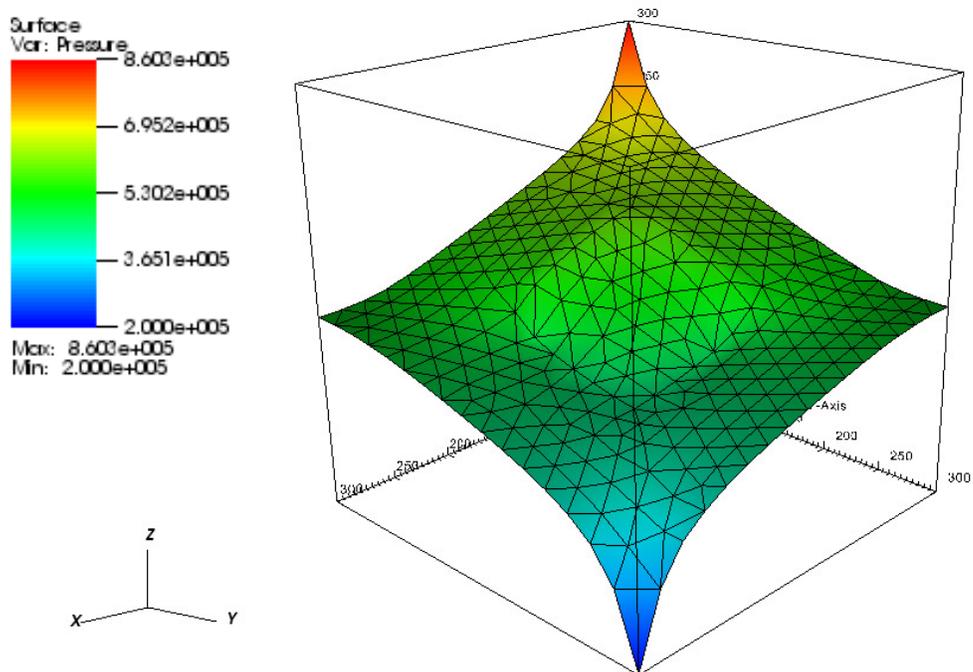


Figura 6.11 – Campo de pressões para o problema com uma zona central de baixa permeabilidade em  $t = 600d$  para a malha menos refinada com 308 nós.

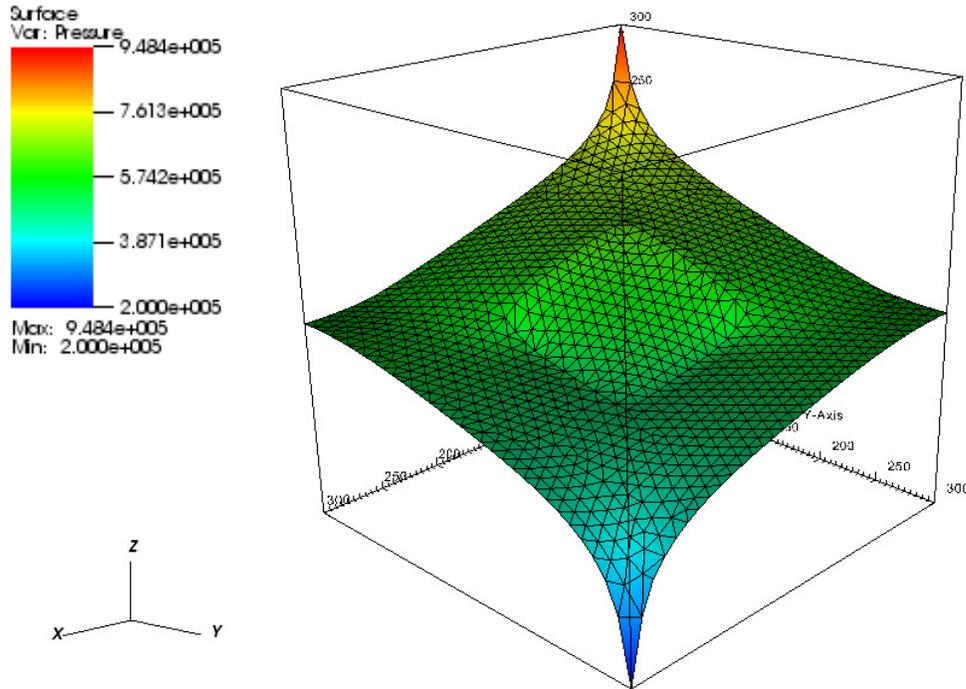


Figura 6.12 – Campo de pressões para o problema com uma zona central de baixa permeabilidade em  $t = 600d$  para a malha mais refinada com 1180 nós.

Nas Figuras (6.11), (6.12) e (6.13), apresentamos os contornos de saturação obtidos a partir da utilização do método DNA em  $t = 200d$ ,  $t = 400d$  e  $t = 600d$ , com ambas as malhas, respectivamente. Uma análise breve das Figuras (6.11) até (6.13), nos permite concluir que, tanto na malha menos refinada quanto na malha mais refinada, as soluções apresentam o mesmo comportamento, sendo que a representação da frente de saturação na malha mais fina é mais precisa que na malha mais grossa apresentando menor espalhamento ao longo do domínio. Em ambas as malhas, o MVFA fornece campos de velocidades em que a zona de baixa permeabilidade é bem representada, de tal maneira que praticamente nenhum fluido atravessa a mesma, conforme esperado.

Apenas para efeito de comparação entre os diferentes métodos, nas Figs. (6.14a) e (6.14b) apresentamos as soluções obtidas em  $t = 600d$  com os métodos de ROE e MUSCL-TVD obtidos na malha menos refinada da Fig. (6.8a). Novamente notamos que o comportamento do método MUSCL-TVD é essencialmente o mesmo do método DNA enquanto que o método de ROE apresenta uma frente de saturação bem mais difusa. Na Figura (6.17) apresentamos os perfis de saturação obtidos com os diferentes métodos na malha mais refinada da Fig.(6.10b) ao longo da linha diagonal que corta a geometria, partindo do poço injetor até o poço produtor em  $t = 600d$ . Neste caso, os valores de saturação não coincidentes com os nós foram obtidos a partir de interpolação linear. Conforme podemos observar o perfil de saturações avança normalmente ao longo da diagonal até cruzar a zona de baixa permeabilidade onde os valores de saturação são reduzidos bruscamente, para aproximadamente zero.

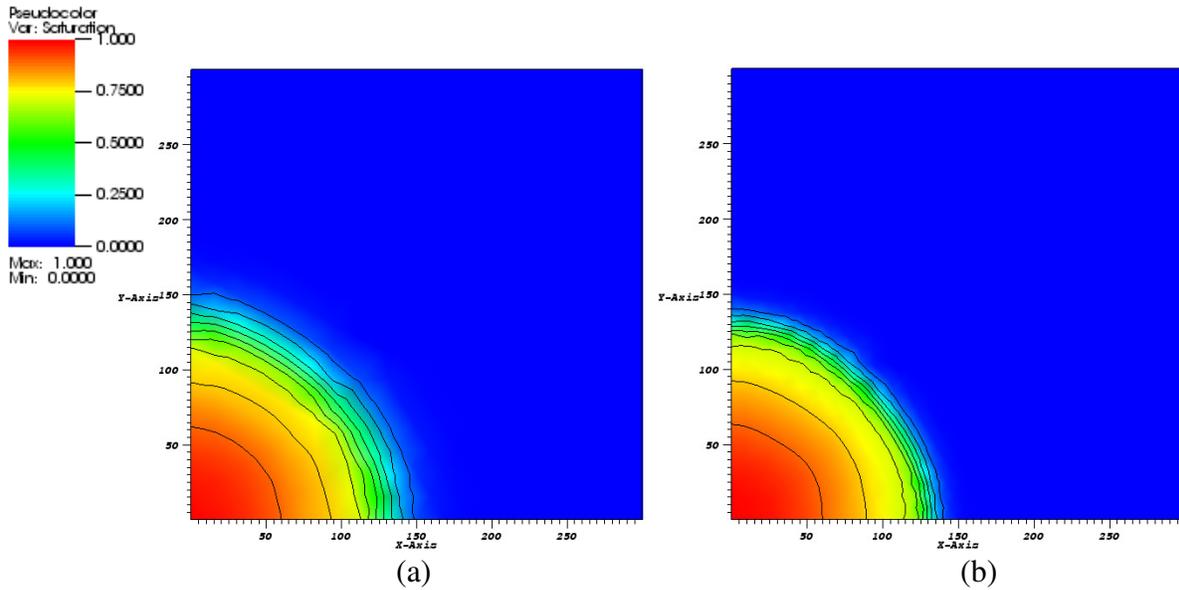


Figura 6.13 – Contornos de saturação para o problema com uma zona central de baixa permeabilidade em  $t = 200 d$ : a) malha menos refinada; b) malha mais refinada.

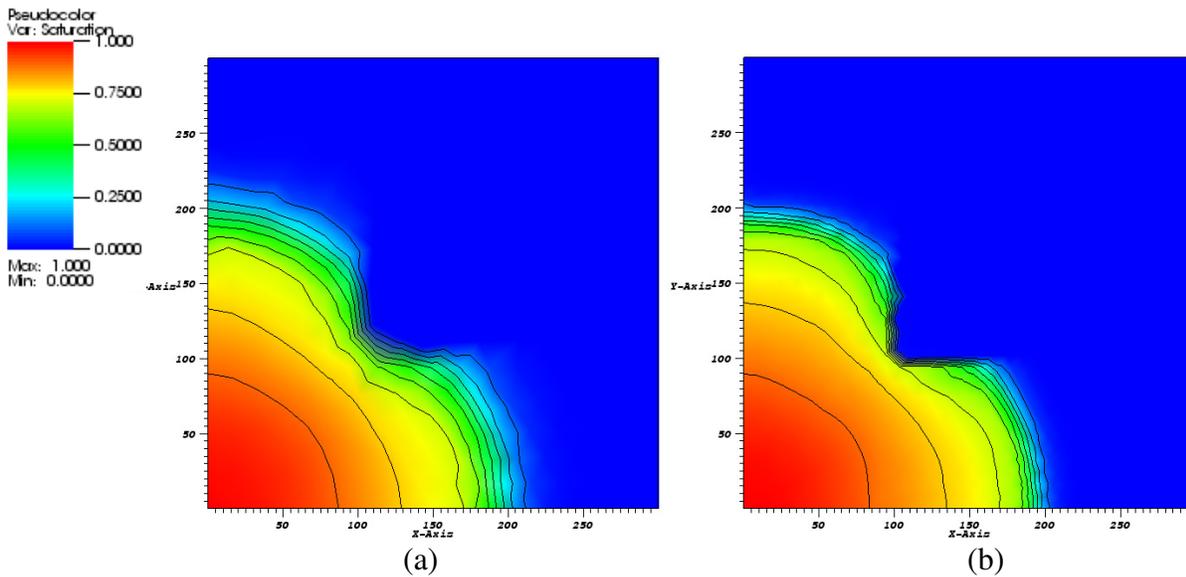


Figura 6.14 – Contornos de saturação obtidos pelo método DNA, para o problema com uma zona central de baixa permeabilidade em  $t = 400 d$ : a) malha menos refinada; b) malha mais refinada.

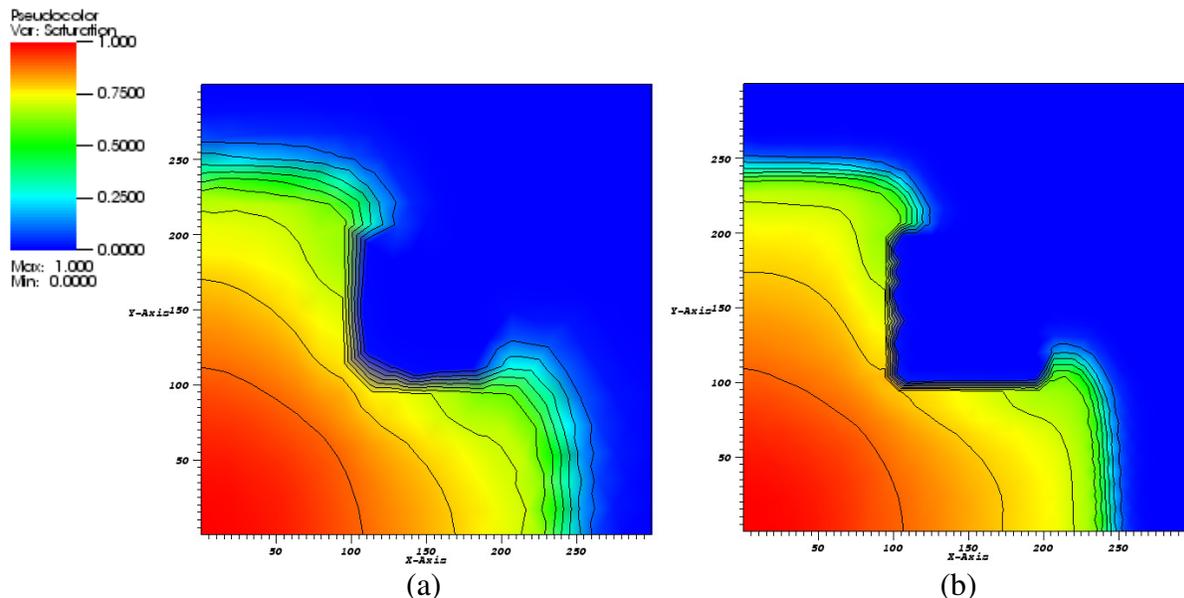


Figura 6.15 – Contornos de saturação obtidos pelo método DNA para o problema com uma zona central de baixa permeabilidade em  $t = 600 d$  : a) malha menos refinada; b) malha mais refinada.

Vale ressaltar que as soluções obtidas no presente trabalho são essencialmente “diferentes” daquelas apresentadas em HELMIG (1997). Após uma consulta ao referido autor, verificamos que nossas soluções estavam corretas. O autor nos informou ainda que o seu livro sofrerá as devidas retificações na próxima edição.

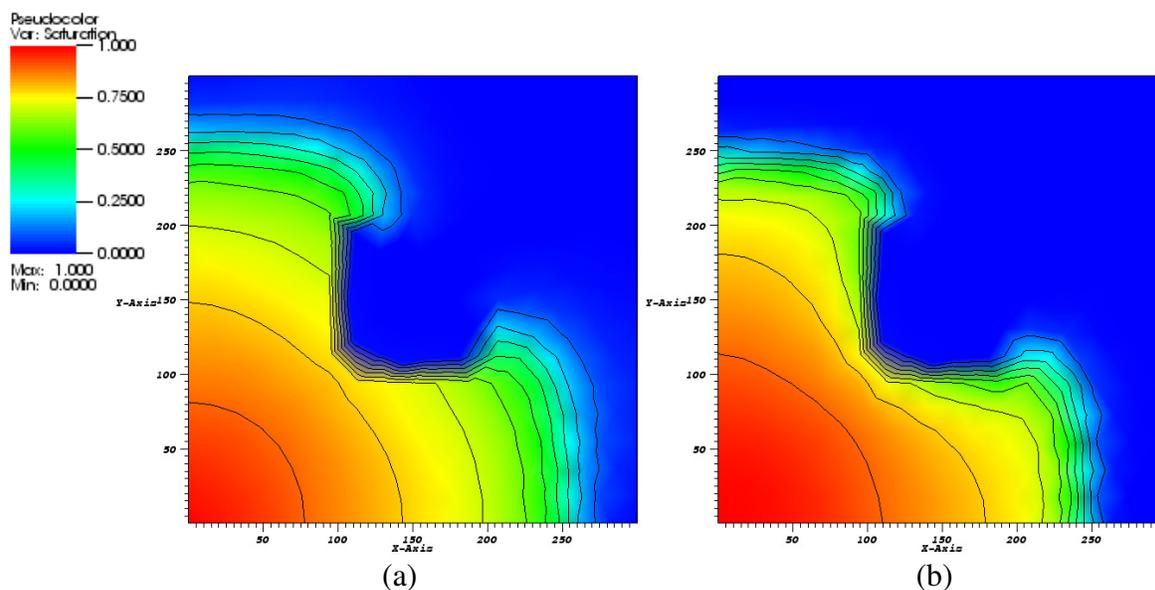


Figura 6.16 – Contornos de saturação obtidos com diferentes métodos, para o problema com uma zona central de baixa permeabilidade em  $t = 600 d$ , com a malha menos refinada: a) método de ROE; b) método MUSCL-TVD.

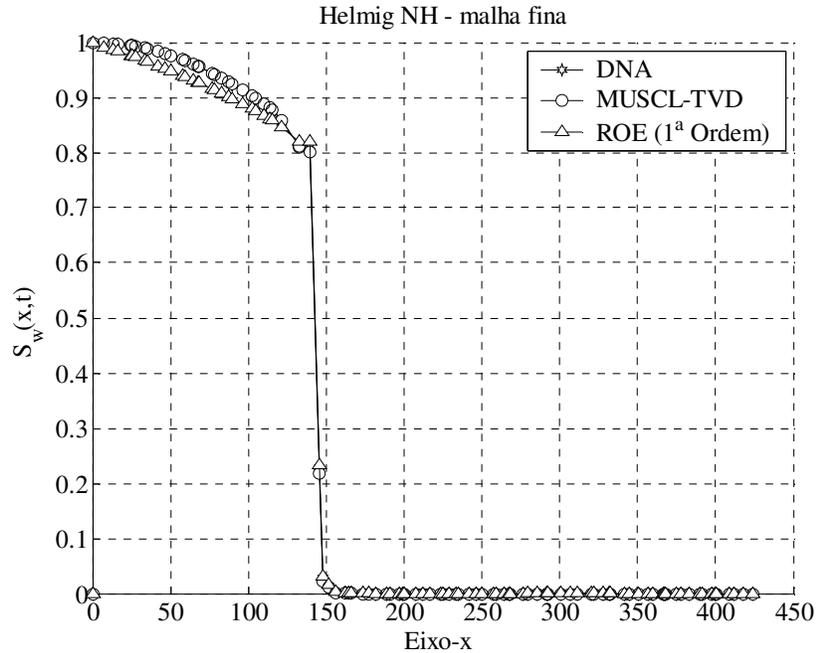


Figura 6.17 – Perfis de saturação para o problema com uma zona central de baixa permeabilidade ao longo da diagonal que liga o poço injetor ao poço produtor, em  $t = 600d$  para a malha mais refinada (solução obtida com o método DNA).

### 6.4.3 Escoamento Confinado Através de uma Região com duas Barreiras Perpendiculares

Neste problema, cuja geometria apresentada na Fig. (6.18) foi adaptada de GARCIA (1997), água é injetada no lado esquerdo do domínio computacional com o objetivo de “varrer” o óleo residente. O escoamento fluido ocorre devido à diferença de pressão entre as paredes externas da região confinada que possui duas barreiras perpendiculares cujas permeabilidades relativas são extremamente baixas quando comparadas com o restante do domínio. As propriedades dos fluidos no reservatório são:  $\mu_w = 0.001 \text{ kg/m.s}$ ,  $\mu_o = 0.004 \text{ kg/m.s}$  e  $\rho_w = \rho_o = 1000 \text{ kg/m}^3$ . A porosidade nas barreiras é  $\phi = 0.2$  e  $\phi = 0.35$  no restante do reservatório. A permeabilidade  $K_2 = 10^{-4} \text{ } \mu\text{m}^2$  no reservatório, e no interior das barreiras  $K_1 = 10^{-10} \text{ } \mu\text{m}^2$ , de modo que a razão entre as permeabilidades é de  $R_{K_1/K_2} = 10^6$ . Neste caso, as condições de contorno para as equações de pressão e saturação são, respectivamente,  $P_L = 5.10^3 \text{ Pa}$  e  $S_L = 0.9$  na face esquerda, e  $P_R = 1.10^3 \text{ Pa}$  na face direita do reservatório. Assim como no exemplo anterior, utilizamos duas malhas triangulares não-estruturadas, as quais são apresentadas na Fig. (6.19). Uma menos refinada com 156 nós e 266 elementos (Fig. 6.19a), e uma malha mais refinada com 1845 nós e 3528

elementos (Fig. 6.19b). Neste caso, os intervalos de tempo adotados foram,  $\Delta t = 0.2d$  para a malha menos refinada e  $\Delta t = 0.1d$  para a malha mais refinada.

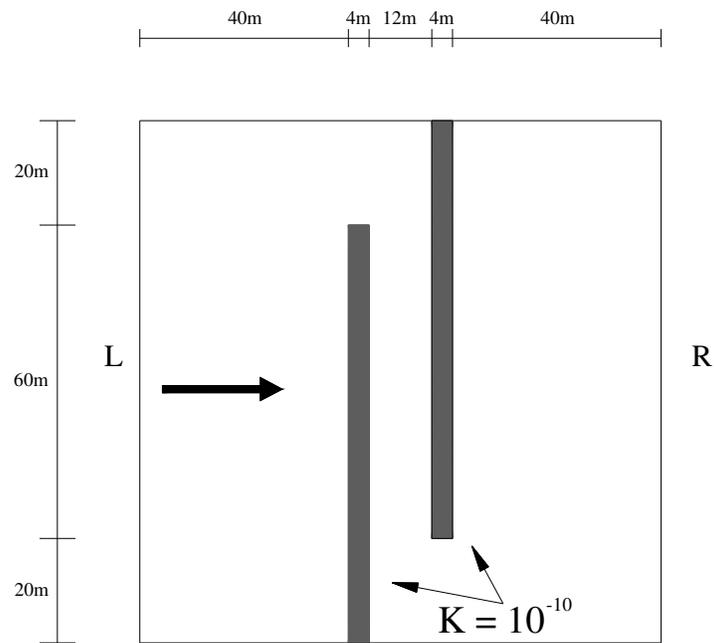


Figura 6.18 – Geometria para o problema do escoamento confinado através de uma região com duas barreiras perpendiculares.

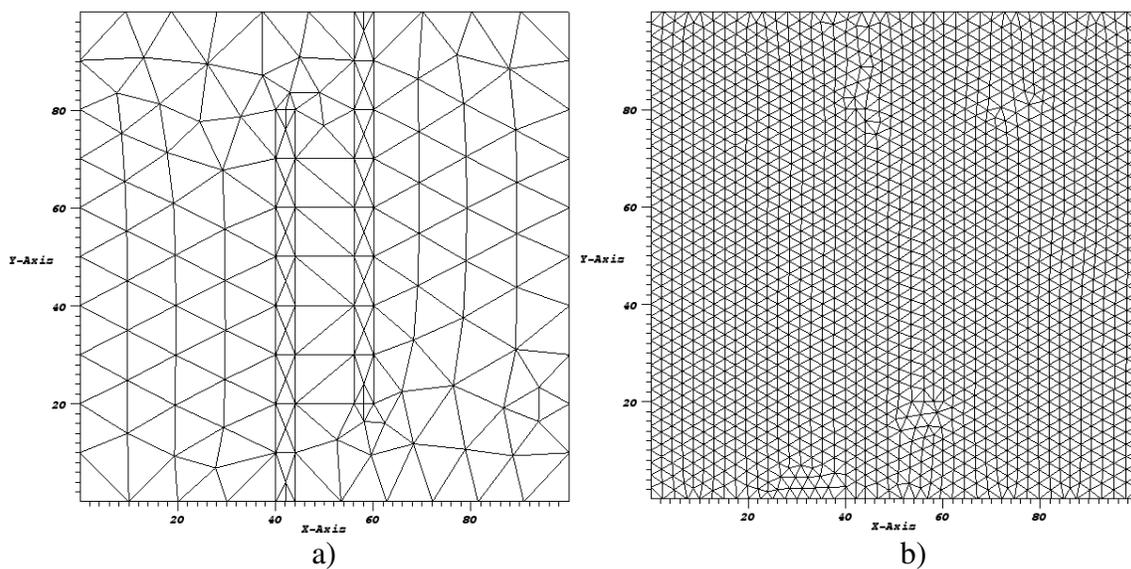


Figura 6.19 – Malhas triangulares não-estruturadas utilizadas para o problema do escoamento confinado: a) malha menos refinada com 156 nós e 266 elementos; b) malha mais refinada com 1845 nós e 3528 elementos.

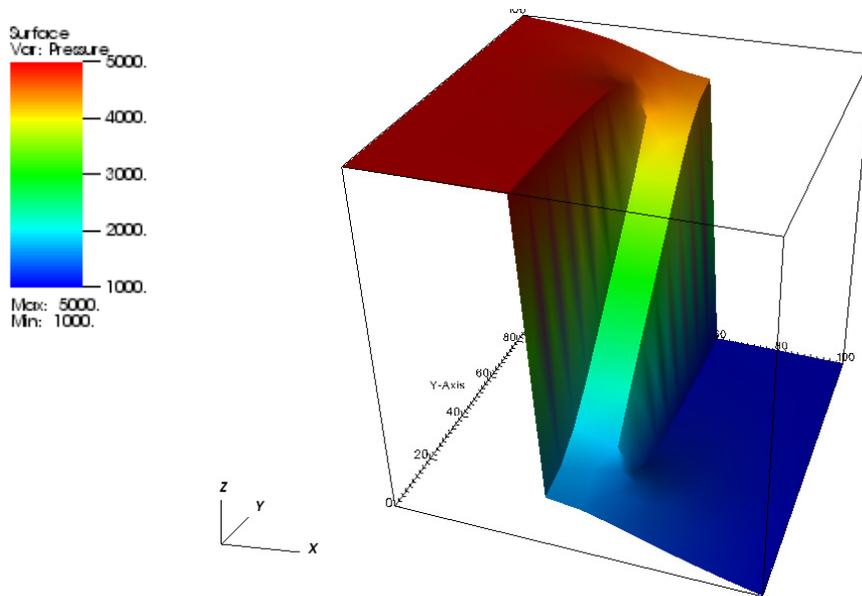


Figura 6.20 – Campo de pressões “extrudado” na direção Z, em  $t = 28d$  para a malha menos refinada com 156 nós.

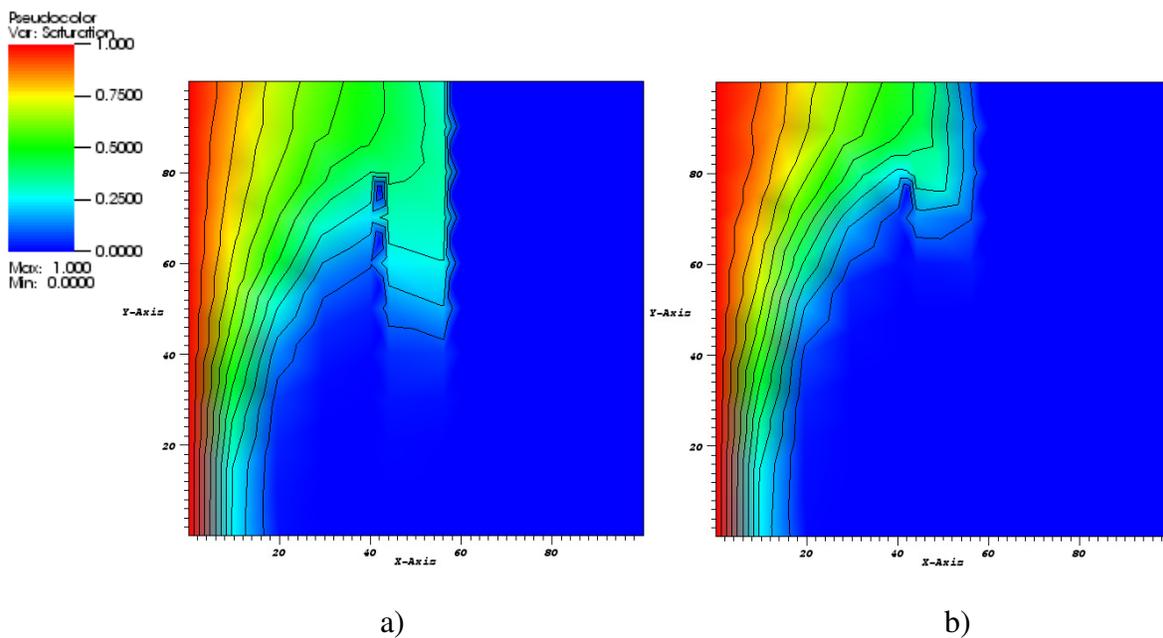


Figura 6.21 – Campos de saturações, em  $t = 28d$  para a malha menos refinada com 156 nós e 266 elementos: a) método de ROE; b) método MUSCL-TVD.

Na Figura (6.20) apresentamos o campo de pressões obtido no instante  $t = 28d$ . Nas Figuras (6.21a) e (6.21b), apresentamos os contornos de saturação obtidos pelo método de ROE e pelo método MUSCL-TVD na malha menos refinada, em dois instantes de tempo diferentes,  $t = 28d$  e  $t = 48d$ . Nas Figuras (6.22a) e (6.22b) apresentamos os contornos de

saturação em  $t = 48 d$  obtidos pelo método MUSCL-TVD para a malha menos refinada e para a malha mais refinada, respectivamente.

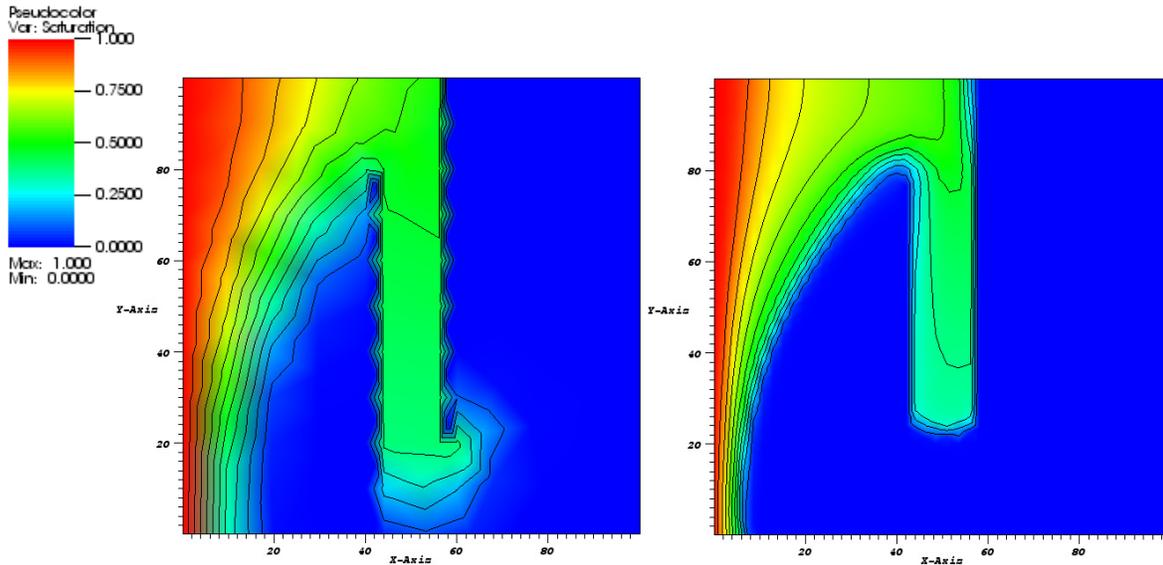


Figura 6.22 – Contornos de saturação, obtidos com o método MUSCL-TVD, em  $t = 48 d$  :  
a) malha menos refinada com 156 nós e 266 elementos b) malha mais refinada com 1845 nós e 3528 elementos.

Na Figura (6.20) fica claro que, mesmo numa malha bastante grosseira, o método MV-FA é capaz de representar de maneira acurada o campo de pressões na região confinada. O declive acentuado representa a queda relativamente brusca de pressões que é formada ao longo do canal devido à presença das barreiras de baixa permeabilidade.

Nas Figuras (6.21a) e (6.22a), o fluxo aparente através das barreiras em alguns trechos específicos se deve ao fato do programa de visualização estar interpolando valores em arestas que atravessam inteiramente a barreira, conforme observamos na Fig. (6.19a). De fato, podemos observar que, conforme esperado, não existe escoamento através das barreiras de baixa permeabilidade independente da metodologia utilizada para a discretização da equação hiperbólica de saturação (ROE ou MUSCL-TVD), deixando claro que o campo de velocidades também foi calculado de maneira acurada “respeitando” a brusca variação no campo de permeabilidades, existente entre as barreiras e o restante do reservatório.

Analisando ainda os contornos de saturação das Figs. (6.21a) e (6.21b), observamos que, para a mesma densidade de malha, o método de ROE apresenta novamente uma solução menos precisa e com mais difusão que o método MUSCL-TVD, o que se verifica pelo maior “espalhamento” observado no perfil de saturações da Fig. (6.21a) se comparado com o perfil de saturações da Fig. (6.21b).

Nas Figuras (6.22a) e (6.22b), observamos que o refinamento da malha produziu soluções bem mais acuradas e com menor difusão numérica, de modo que, na malha mais fina da Fig. (6.22b), o espalhamento do campo de saturações é ainda menor quando comparado com o campo de saturações obtido com a malha mais grosseira em  $t = 48 d$ .

#### 6.4.4 Estudo do Efeito de Orientação de Malha para o Caso de ¼ de Cinco Poços Bidimensional com Razão de Viscosidade Adversa

*Exemplo 1. Problema de ¼ de Cinco Poços com Razão de Viscosidade Moderadamente Adversa  $M = 4.0$ .*

Este exemplo é uma versão adimensionalizada do clássico problema de ¼ de cinco poços, no qual um poço injetor de água está rodeado por quatro poços produtores de óleo. Para este problema, que adaptamos de DURLOFSKY (1993) e SOUZA et al. (2004), as saturações residuais de água e óleo são  $S_{rw} = S_{ro} = 0.0$  e o meio poroso é considerado homogêneo e isotrópico com  $K = \tilde{I}$  através de todo o domínio. Assumimos ainda que a porosidade é constante sendo que seu valor real não é relevante já que a utilizamos apenas para adimensionalizar o tempo. As viscosidades da água e do óleo são, respectivamente,  $\mu_w = 1.0$  e  $\mu_o = 4.0$ , de modo que a razão entre as viscosidades é  $M = (\mu_o / \mu_w) = 4.0$ . As condições de contorno são  $S_i = 1.0$  no poço injetor e pressões nos cantos diagonais superior esquerdo e inferior direito  $P_{se} = P_{id} = 0.0$ . DURLOFSKY (1993) resolveu este problema, que apresenta um efeito de orientação de malhas moderado devido a razão entre as viscosidades  $M > 1.0$ , utilizando uma formulação híbrida, em que o problema pressão-velocidade foi resolvido a partir do método dos elementos finitos mistos e a equação de saturação foi resolvida utilizando um método de volumes finitos de ordem mais alta. Para avaliar o efeito de orientação de malhas, DURLOFSKY (1993) utilizou duas malhas estruturadas e uniformes com 400 elementos triangulares, uma cujos elementos são orientados segundo a direção do escoamento (malha alinhada) e outra, cujos elementos são orientados transversalmente ao escoamento. No presente trabalho usamos malhas com (16x16) subdivisões e três configurações topológicas diferentes: a) malhas totalmente não-estruturadas sem nenhuma direção preferencial para o escoamento; b) malhas alinhadas a direção do escoamento; c) malhas transversais a direção do escoamento. Em todos os casos analisados, utilizamos o método MUSCL-TVD. As Figuras (6.23), (6.24) e (6.25) apresentam, respectivamente, as três configurações topológicas de malhas com (16x16) subdivisões e os contornos de saturação em  $t = 0.1$  VPI, obtidos com cada tipo de malha. Nas Figuras (6.26) e (6.27) apresentamos, respectivamente, o volume de óleo acumulado e o óleo recuperado, normalizado pelo volume total injetado, ambos obtidos com os três tipos de malhas, isto é, alinhada, transversal e não-estruturada. Além disso, apenas para efeito de comparação, em ambos os casos, acrescentamos as soluções obtidas por DURLOFSKY (1993) para uma malha transversal com 400 (20x20) triângulos. Conforme apontado por DURLOFSKY (1993), teoricamente, as soluções deveriam ser as mesmas a despeito da configuração da malha. Porém, como mostram as Figs. (6.23), (6.24) e (6.25), observamos um efeito moderado de orientação de malha nos perfis de saturação apresentados. A partir da análise das Figs. (6.27) e (6.28), tomando como base os resultados obtidos com a malha não-estruturada, que, não apresenta efeito de orientação de malha, podemos notar que os resultados obtidos com os três tipos de malhas são bastante semelhantes quando comparados entre si e quando comparados com os resultados de DURLOFSKY (1993).

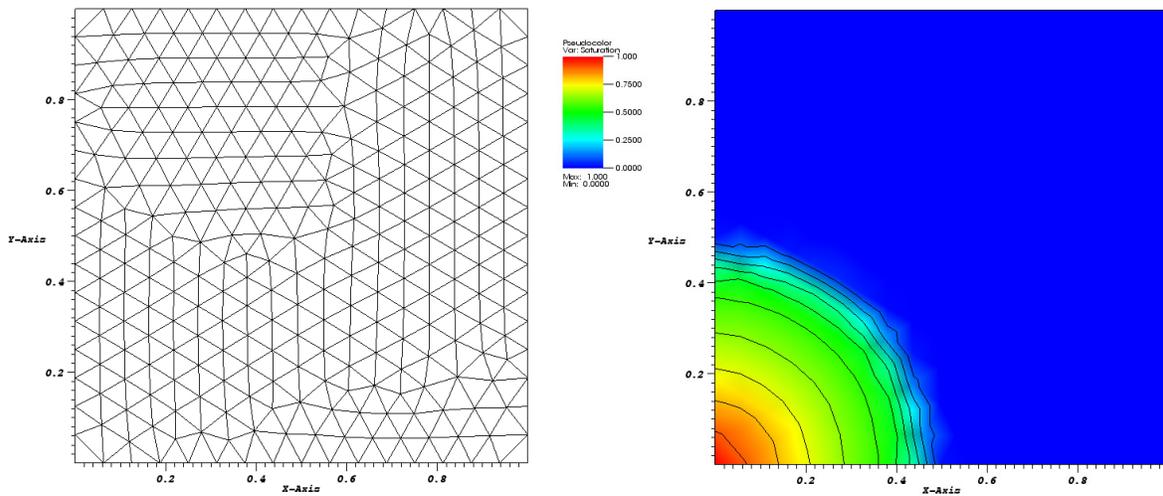


Figura 6.23 – Problema  $\frac{1}{4}$  de cinco poços com razão entre viscosidades  $M = 4.0$ : a) malha não-estruturada com  $(16 \times 16)$  subdivisões; b) contornos de saturação, obtidos com o método MUSCL-TVD, em  $t = 0.1$  VPI.

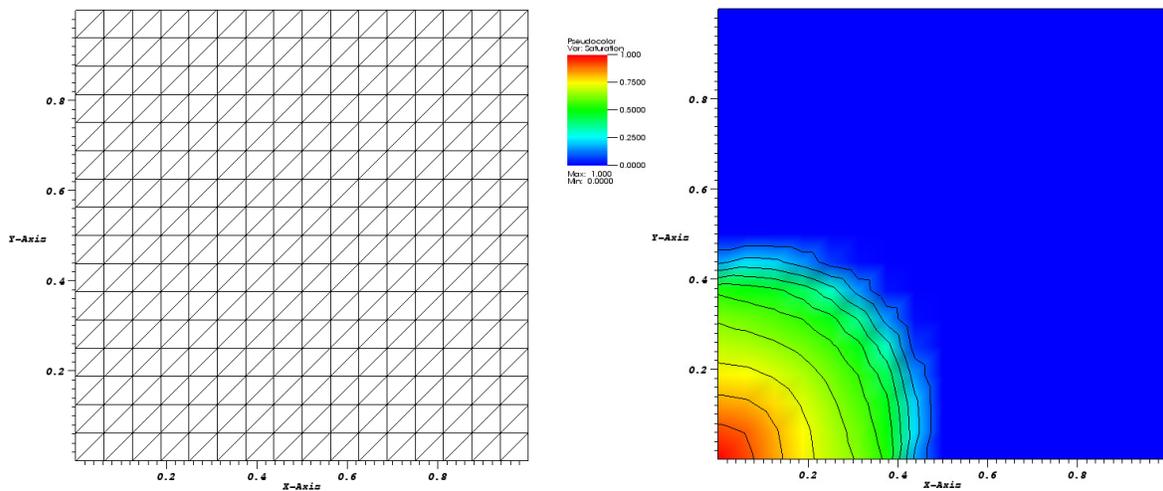


Figura 6.24 – Problema  $\frac{1}{4}$  de cinco poços com razão entre viscosidades  $M = 4.0$ : a) malha alinhada com  $(16 \times 16)$  subdivisões; b) contornos de saturação obtidos com o método MUSCL-TVD, em  $t = 0.1$  VPI.

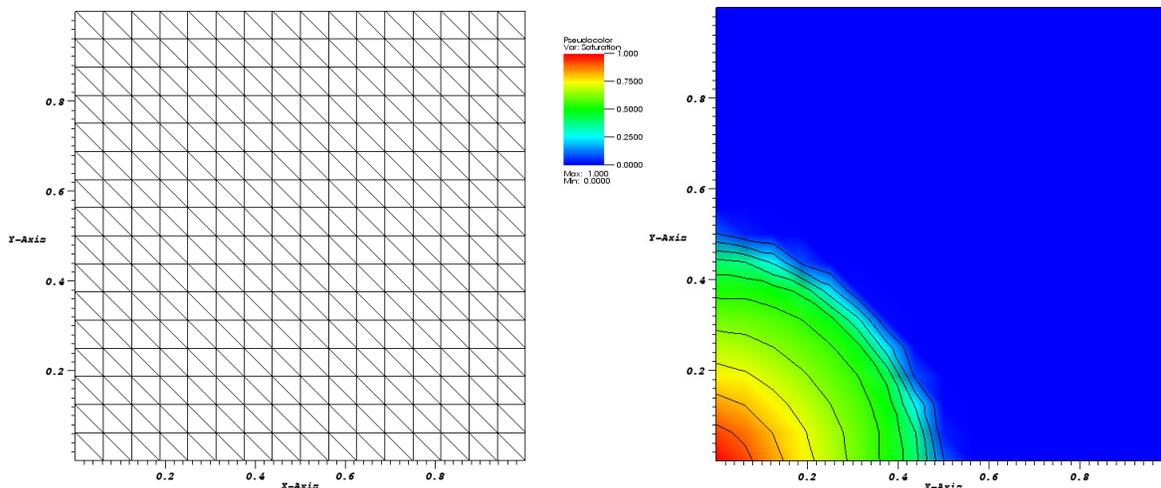


Figura 6.25 – Problema ¼ de cinco poços com razão entre viscosidades  $M = 4.0$ : a) malha transversal com  $(16 \times 16)$  subdivisões; b) contornos de saturação obtidos com o método MUSCL-TVD, em  $t = 0.1$  VPI.

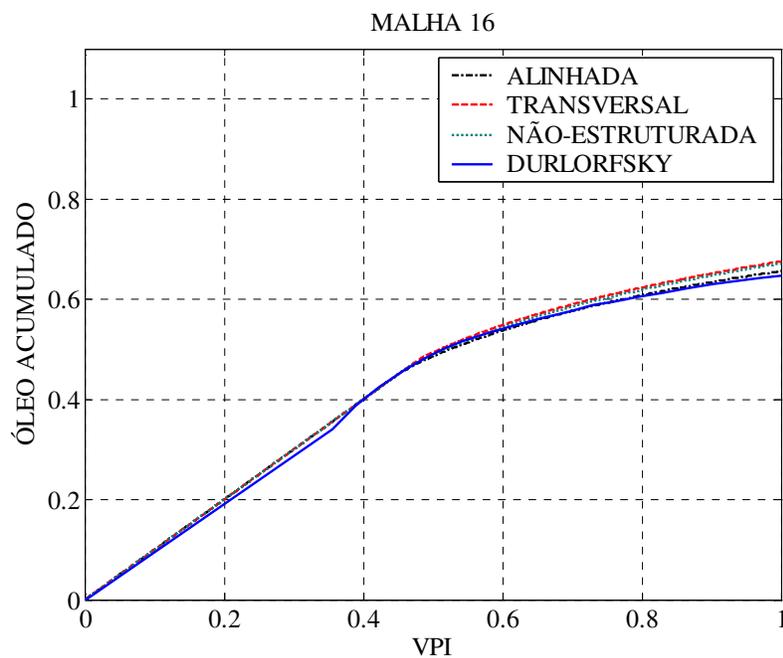


Figura 6.26 – Óleo acumulado para o problema ¼ de cinco poços com razão entre viscosidades  $M = 4.0$ , para uma malha com  $(16 \times 16)$  subdivisões.

Na Figura (6.27), observamos que, para a malha alinhada, o resultado obtido no presente trabalho apresenta um tempo de irrupção de água no poço produtor (Breakthrough) um pouco antecipado se comparado com os resultados obtidos com a malha não-estruturada. Por outro lado, os resultados obtidos com a malha transversal, tanto na presente tese quanto no trabalho de DURLOFSKY (1993), apresentam um pequeno atraso para a irrupção de água no poço produtor.

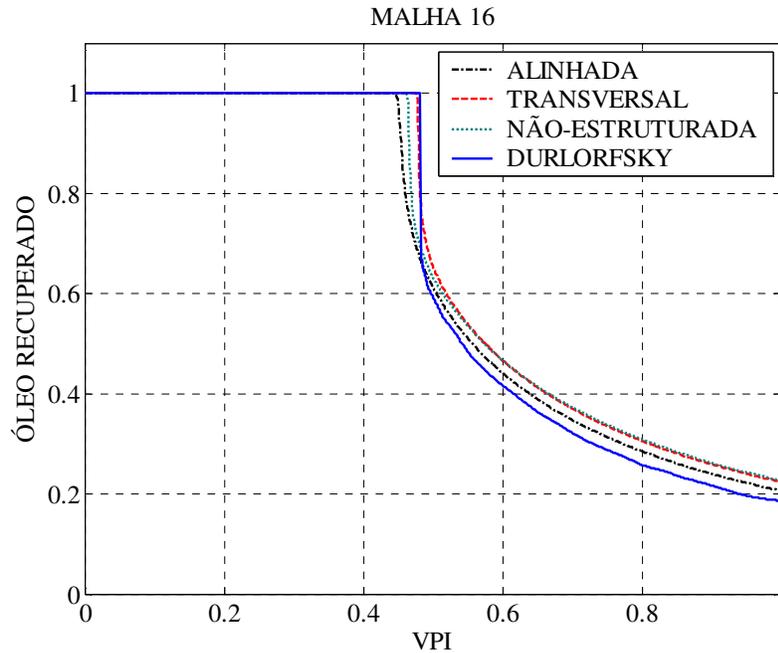


Figura 6.27 – Óleo recuperado para o problema  $\frac{1}{4}$  de cinco poços com razão entre viscosidades para uma malha com  $(16 \times 16)$  subdivisões.

**Exemplo 2: Problema de  $\frac{1}{4}$  de Cinco Poços com Razão de Viscosidade Bastante Adversa  $M = 40.0$ .**

Neste caso, fazemos uma pequena modificação no problema de DURLOFSKY (1993) utilizando como viscosidade do óleo  $\mu_o = 40.0$ , de modo que  $M = (\mu_o / \mu_w) = 40.0$ . Todos os outros dados são mantidos iguais aos do problema anterior (Exemplo 1, seção 6.4.4), isto é, as saturações residuais de água e óleo são  $S_{rw} = S_{ro} = 0.0$ , o meio poroso é considerado homogêneo e isotrópico com  $K = \underline{I}$  através de todo o domínio,  $S_i = 1.0$  no poço injetor e as pressões nos cantos diagonais esquerdo superior e direito inferior são  $P_{se} = P_{id} = 0.0$ . Novamente, consideramos as três malhas triangulares com  $(16 \times 16)$  subdivisões do exemplo anterior, sendo uma alinhada com o escoamento, outra transversal e a última totalmente não-estruturada. Nas Figuras (6.28) e (6.29) apresentamos, respectivamente, as curvas de óleo acumulado e de óleo recuperado para os diferentes tipos de malhas. Mesmo neste caso

bem mais severo, com  $M = 40.0$ , as soluções não divergem muito entre si na malha transversal e na malha não-estruturada, sendo visualmente muito similares tanto do ponto de vista da quantidade de óleo acumulada quanto da fração de óleo recuperada. Por outro lado, na Fig. (6.29) notamos que, na malha alinhada, houve uma antecipação ainda maior para o tempo de irrupção de água no poço produtor (Breakthrough) que no exemplo anterior ( $M = 4.0$ ), indicando que o algoritmo utilizado não está totalmente livre dos efeitos de orientação de malha, particularmente nos casos mais severos com razões de viscosidades muito elevadas.

Vale ressaltar que, os resultados obtidos utilizando o método de difusão numérica artificial (não apresentados no presente trabalho), tanto para o caso com  $M = 4.0$ , quanto para o caso com  $M = 40.0$ , foram essencialmente os mesmos que os obtidos com o método MUSCL-TVD, enquanto que os resultados obtidos com o método de 1ª ordem de ROE, além de serem mais difusivos, foram mais suscetíveis ao efeito de orientação de malha.

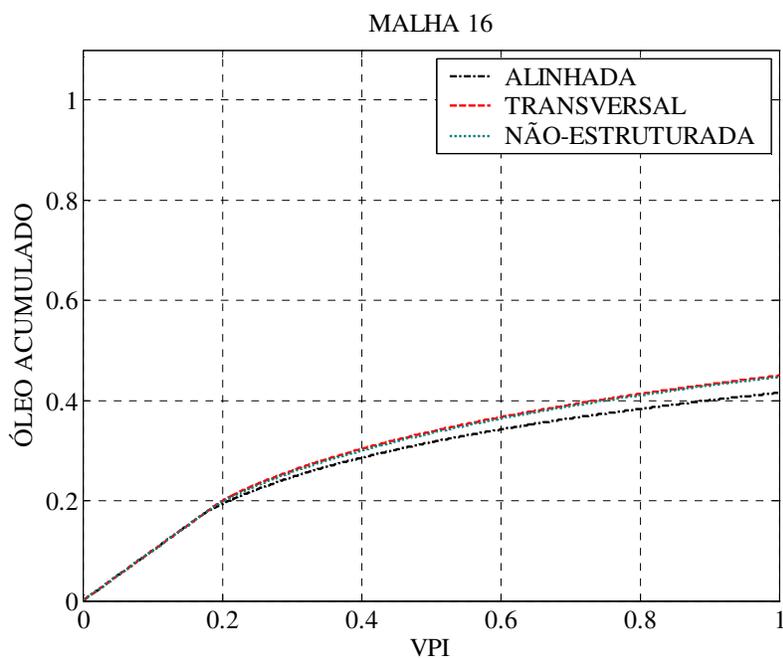


Figura 6.28 – Óleo acumulado para o problema de  $\frac{1}{4}$  de cinco poços com razão entre viscosidades bastante adversa,  $M = 40.0$ , para uma malha com  $(16 \times 16)$  subdivisões.

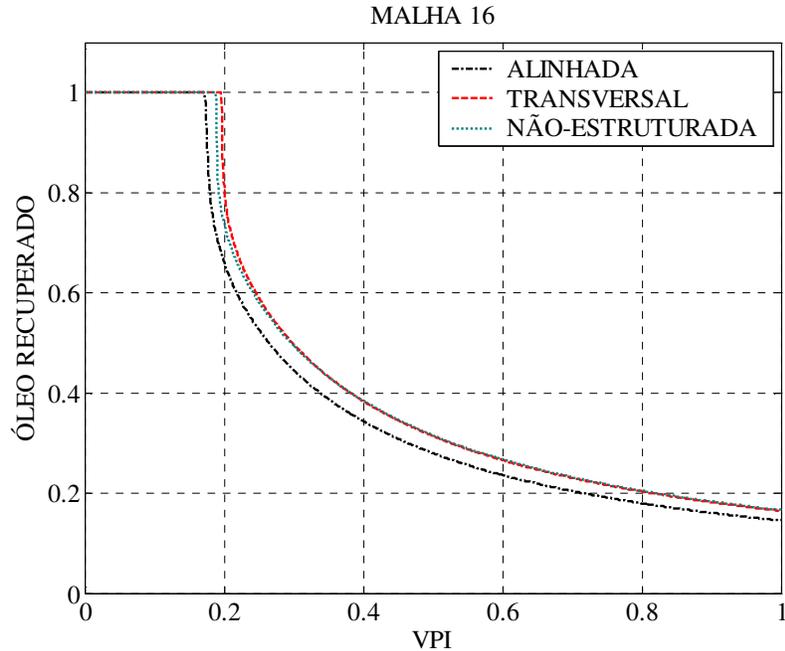


Figura 6.29 – Óleo recuperado para o problema de  $\frac{1}{4}$  de cinco poços com razão entre viscosidades bastante adversa,  $M = 40.0$ , para uma malha com  $(16 \times 16)$  subdivisões.

#### 6.4.5 Problema de $\frac{1}{4}$ de Cinco Poços Numa Geometria Tridimensional com Razão de Viscosidade Adversa

Neste exemplo, assumindo novamente um meio poroso homogêneo e isotrópico com  $K = \underline{I}$  através de todo o domínio e as mesmas características do problema anterior (6.4.4), isto é, as saturações residuais de água e óleo são  $S_{rw} = S_{ro} = 0.0$ , a porosidade é constante, a razão entre as viscosidades é  $M = (\mu_o / \mu_w) = 4.0$ . Mais uma vez, as condições de contorno são  $S_i = 1.0$  no poço injetor e pressões nos cantos diagonais esquerdo e direito  $P_{se} = P_{id} = 0.0$ . Consideramos um domínio computacional na forma de uma “caixa” tridimensional com dimensões de  $1 \times 1 \times 0.05$ . Na Figura (6.30), apresentamos a malha tetraédrica utilizada com 3635 elementos e 1054 nós. A Figura (6.31) apresenta o campo de pressões em  $t = 0.01$  VPI (volume poroso injetado). As Figuras (6.32) e (6.33) mostram, respectivamente, os contornos de saturação nos instantes  $t = 0.01$  e  $t = 0.1$  VPI. Os resultados obtidos, mesmo utilizando a integração de um ponto para os fluxos no contorno conforme indicado no capítulo 4, apresentam boa concordância com os resultados apresentados em SOUZA et al. (2004).

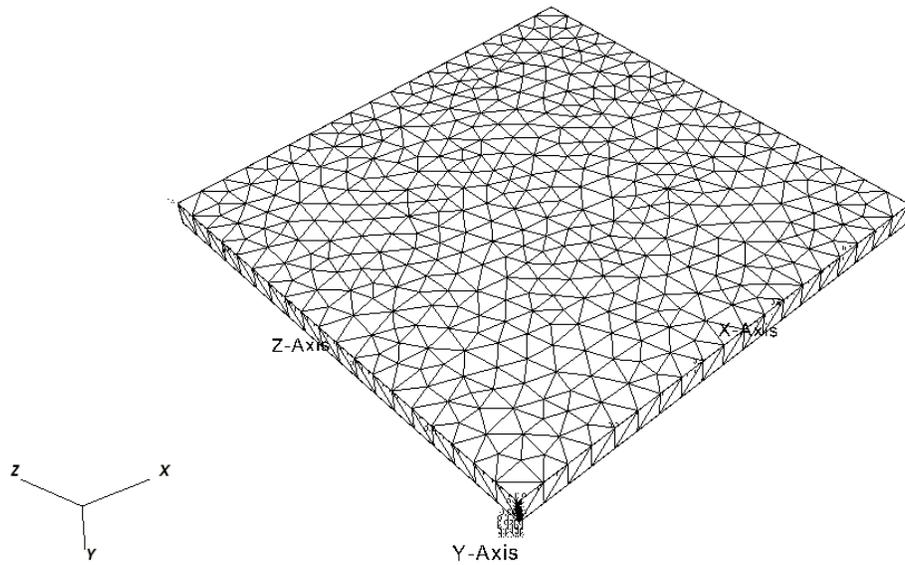


Figura 6.30 – Malha tetraédrica utilizada no exemplo de ¼ de cinco poços tridimensional.

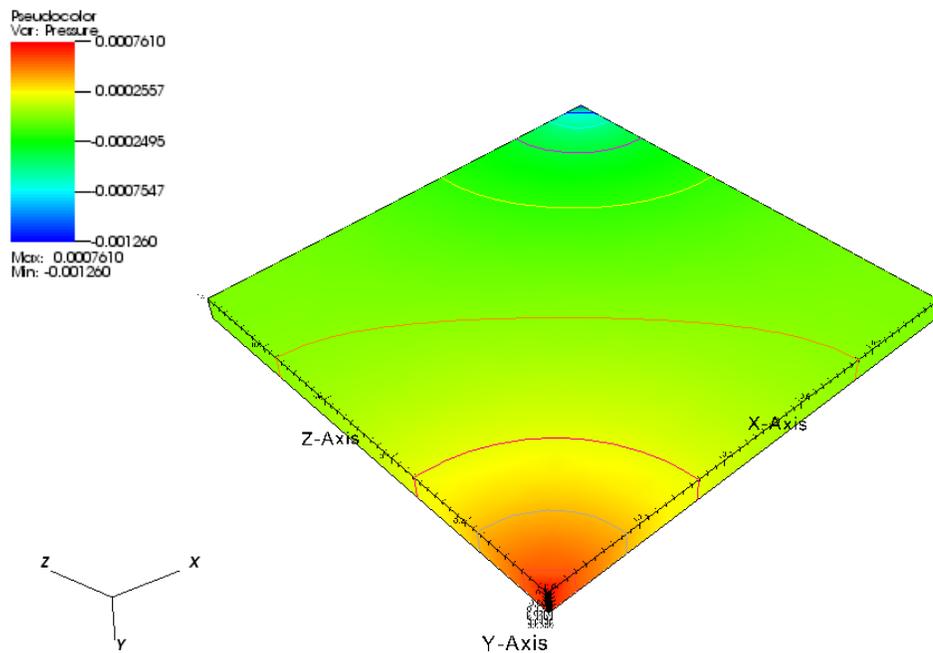


Figura 6.31 – Contornos de pressão para  $t = 0.01$  VPI no exemplo de ¼ de cinco poços tridimensional.

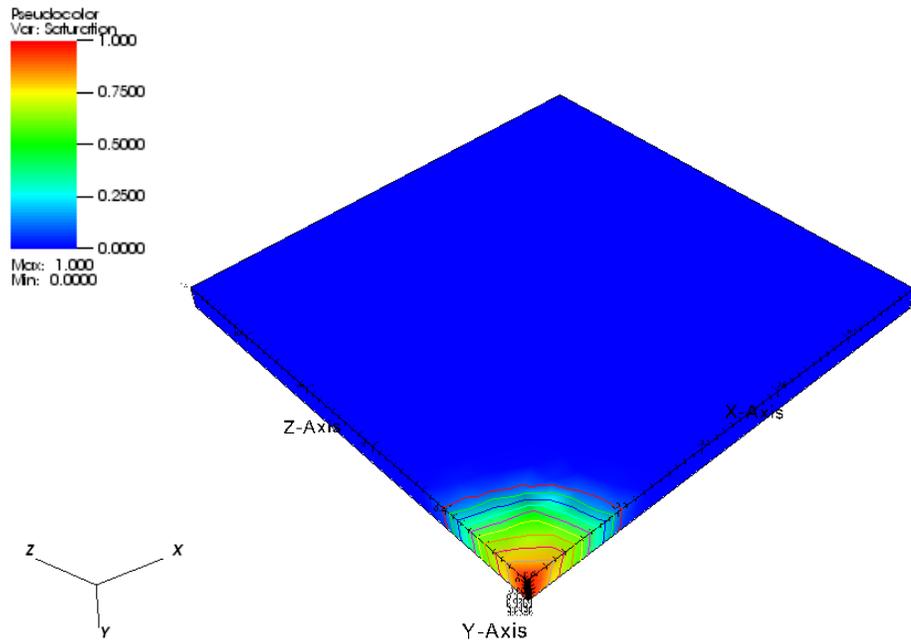


Figura 6.32 – Contornos de saturação para  $t = 0.01$  VPI no exemplo de  $\frac{1}{4}$  de cinco poços tridimensional.

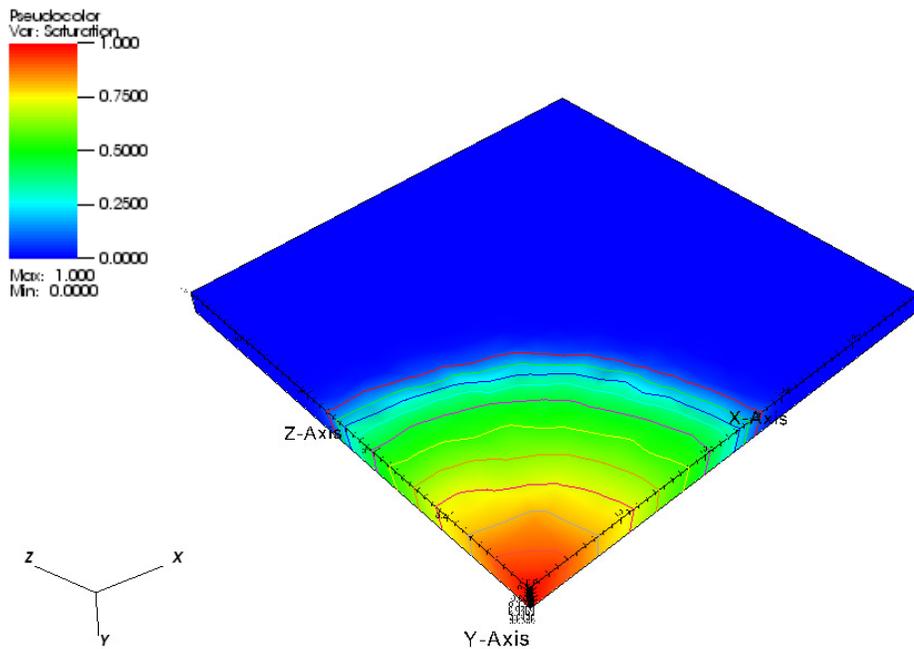


Figura 6.33 – Contornos de saturação para  $t = 0.1$  VPI para o exemplo de  $\frac{1}{4}$  de cinco poços tridimensional.

## 7. CONCLUSÕES E TRABALHOS FUTUROS

### 7.1 Conclusões

No presente trabalho apresentamos em detalhes uma formulação do método dos volumes finitos por aresta (MVFA), com volumes de controle centrados nos nós e construídos pelo método das medianas. Utilizamos esta formulação para a solução de problemas de escoamento de fluidos incompressíveis em meios porosos rígidos, heterogêneos e anisotrópicos. Toda a formulação foi implementada utilizando uma estrutura de dados por aresta, que é amplamente reconhecida na literatura como sendo mais eficiente que a tradicional estrutura de dados por elementos comumente utilizada no método dos elementos finitos, tanto do ponto de vista de economia de memória, quanto do uso de CPU (LOHNER, 1994; LUO et al., 1995; LYRA, 1994; LOHNER, 2001, REES et al., 2004).

Para a discretização conservativa das equações de transporte de fluidos em meios porosos heterogêneos e anisotrópicos, utilizamos uma formulação unificada de volumes finitos, em que os termos de difusão foram calculados em dois laços nas arestas da malha e os termos advectivos foram tratados a partir da utilização de técnicas de primeira ordem e técnicas de ordem mais alta com e sem estabilização, estas últimas garantem maior acurácia a um custo computacional razoável (HIRSCH, 1990; LYRA, 1994; TANEHILL, 1997).

Realizamos uma série de experimentos computacionais, em que comparamos os resultados obtidos com o MVFA e outras formulações na solução de problemas elípticos em meios heterogêneos e anisotrópicos. Para todos os casos analisados, o MVFA apresentou, de maneira geral, soluções tão boas ou melhores que as encontradas na literatura. Em particular, a metodologia que adotamos para tratar coeficientes descontínuos a partir de uma estrutura de dados por aresta apresentou resultados tanto para a pressão quanto para o fluxo, bastante superiores à outra metodologia existente na literatura (REES, 2004).

No estudo do transporte de contaminantes em aquíferos, utilizamos como modelo a equação de convecção-difusão-reação linear. Neste caso, em que nos restringimos a problemas uni e bidimensionais em meios porosos homogêneos, foram consideradas diversas situações físicas diferentes, incluindo o estudo de problemas fortemente difusivos ou fortemente advectivos. Também consideramos a existência de termos fonte ou sumidouro associados ao decaimento radioativo do contaminante transportado. Finalmente, consideramos o efeito de diferentes valores para a razão entre os coeficientes de dispersão longitudinal e transversal no transporte do soluto contaminante. Nestes casos, conforme esperado, as duas metodologias de alta ordem implementadas para a discretização dos termos advectivos (DNA e MUSCL-TVD) apresentaram resultados equivalentes ao MVFC (diferenças centrais sem estabilização) em problemas com número de Peclet relativamente baixos e foram amplamente superiores ao mesmo, nos casos com elevado número de Peclet, onde o MVFC não era nem mesmo estável. Além disso, os métodos de alta ordem foram bastante superiores ao método de ponderação à montante de 1ª ordem, que ainda hoje é bastante utilizado na simulação do transporte de contaminantes em meios porosos. Em particular, podemos

citar o exemplo com termo fonte (sumidouro) associado ao decaimento radioativo do contaminante. Para este exemplo, mesmo com um refinamento sucessivo das malhas, o método de 1ª ordem apresentou resultados muito difusivos quando comparados a ambos os métodos de alta ordem.

No estudo do escoamento bifásico de óleo e água em meios porosos, utilizamos uma metodologia IMPES aplicada em conjunto com uma formulação de fluxo fracional. Avaliámos a acurácia das metodologias de alta ordem para a solução da equação de saturação quando comparadas com a formulação de 1ª ordem. Para tal, utilizamos o clássico problema de Buckley-Leverett, que apresenta, como principal característica, um perfil de saturação composto por uma onda de rarefação seguida por uma onda de choque. Novamente, as formulações de alta ordem (DNA e MUSCL-TVD) foram claramente superiores ao método de 1ª ordem apresentando um comportamento muito menos difusivo.

Através de dois exemplos bidimensionais, verificamos a capacidade de nossa metodologia para tratar de maneira unificada, problemas de escoamento bifásico em meios porosos heterogêneos. Nos dois problemas estudados, o MVFA foi capaz de representar a descontinuidade no meio poroso de maneira bastante acurada, mesmo em meios em que a razão entre os coeficientes de permeabilidade chegava a  $10^6$ .

A partir de um problema bastante simples, mostramos o potencial da metodologia para simulação de escoamentos em geometrias tridimensionais.

Finalmente, é importante salientar que, dada sua generalidade, é perfeitamente possível estender muitas das técnicas apresentadas no presente trabalho para outras aplicações da dinâmica dos fluidos computacional, particularmente àquelas que envolvam o escoamento multifásico em meios heterogêneos e anisotrópicos com características geométricas complexas.

## 7.2 Trabalhos Futuros

Como extensões imediatas do nosso trabalho, podemos mencionar:

1. Extensão do simulador para o transporte de contaminantes em aquíferos para geometrias tridimensionais.
2. Utilização de técnicas de integração temporal de ordem mais alta, particularmente as técnicas de Runge-Kutta de 2ª e 3ª ordem.
3. Aperfeiçoamento do modelo físico de fluxo bifásico (com inclusão dos termos de gravidade e de capilaridade).
4. Utilização das estratégias de adaptação de malhas: redefinição local e global de malhas (remeshing) e adaptação  $h$ , para a solução mais eficiente, tanto do problema de transporte de contaminantes em aquíferos quanto para a simulação do escoamento bifásico de água e de óleo em reservatórios de petróleo.

5. Implementação de toda a formulação desenvolvida em computadores paralelos de memória distribuída (Clusters de Pcs), a fim de simularmos problemas complexos em geometrias tridimensionais de grande porte (esta etapa já foi iniciada!).
6. Estudo e implementação de técnicas de análise de erros por arestas.
7. Aprofundamento do estudo do efeito da orientação de malhas na modelagem e simulação de escoamentos bifásicos em meios porosos com a metodologia apresentada no presente trabalho.

Para o futuro próximo, visando dar continuidade ao trabalho desenvolvido na presente tese, indicamos os seguintes tópicos para pesquisa:

8. Estudo comparativo de técnicas de alta ordem que tenham características multidimensionais, e que, portanto, eliminem ou minimizem efeitos de orientação de malhas, e que possam ser implementadas de maneira eficiente a partir de uma estrutura de dados por arestas.
9. Implementação das seguintes metodologias:
  - 8.1 “Seqüencial Implícita”: Formulação segregada em que, assim como a equação de pressão, a equação de saturação também é resolvida de maneira implícita permitindo a utilização de intervalos de tempo maiores.
  - 8.2 “Totalmente implícita”: Formulação em que as equações de transporte são rearranjadas de maneira que pressão e saturação são incógnitas simultâneas das mesmas equações, permitindo a utilização de intervalos de tempo que, independente da complexidade física do problema, são limitados apenas pela precisão da aproximação.
10. Utilização de técnicas de Multimalhas (Multigrid) para o aumento da eficiência na solução dos sistemas de equações provenientes da discretização pelo MVFA.
11. Adaptação da metodologia desenvolvida para lidarmos com o modelo Black-Oil e outros modelos composicionais mais complexos.

## APÊNDICE A

### Equação de Buckley-Leverett

Considerando novamente a equação de Buckley-Leverett, Eq. (2.37), e assumindo que tanto a água quanto o óleo possuem a mesma viscosidade, e que esta viscosidade é constante, a velocidade total,  $\bar{v} = \bar{v}_w + \bar{v}_o$ , para o escoamento considerado também é constante, *i.e.*  $\bar{v} = cte$ .

Conforme mencionado na seção (2.1), as linhas características de uma equação hiperbólica são linhas em que uma determinada propriedade se mantém constante. Definindo uma linha característica a partir da coordenada  $\xi$  de tal modo que possamos definir a solução da Eq. (2.37) como  $S_w(x, t) = S_w(x(\xi), t(\xi))$ , é possível escrever:

$$\frac{dS_w}{d\xi} = \frac{\partial S_w}{\partial x} \frac{dx}{d\xi} + \frac{\partial S_w}{\partial t} \frac{dt}{d\xi}. \quad (\text{A.1})$$

Se, por conveniência, considerarmos que  $\bar{v}$  e  $\phi$  são unitários, temos que  $f = f_w$  de forma que:

$$\phi \frac{\partial S_w}{\partial t} + \frac{\partial f}{\partial x} = \frac{\partial S_w}{\partial t} + \frac{\partial f_w}{\partial S_w} \frac{\partial S_w}{\partial x} = 0. \quad (\text{A.2})$$

Igualando as Eqs. (A.1) e (A.2), termo a termo, temos:

$$\frac{dS_w}{d\xi} = 0, \quad (\text{A.3})$$

$$\frac{dt}{d\xi} = 1, \quad (\text{A.4})$$

$$\frac{dx}{d\xi} = \frac{\partial f_w}{\partial S_w} = \frac{df_w}{dS_w}. \quad (\text{A.5})$$

Onde, podemos notar que as Eqs. (A.3), (A.4) e (A.5) representam uma família de linhas retas no plano  $x-t$ .

Integrando as Eqs. (A.4) e (A.5) temos:

$$\int_{t_0}^t dt = \int_{\xi_0}^{\xi} d\xi \quad \text{ou} \quad \Delta t = \Delta \xi, \quad (\text{A.6})$$

$$\int_{x_0}^x dx = \int_{\xi_0}^{\xi} (df_w/dS_w) d\xi \quad \text{ou} \quad x = (df_w/dS_w) \Delta \xi + x_0. \quad (\text{A.7})$$

Substituindo a Eq. (A.6) na Eq. (A.7), chegamos a:

$$x = (df_w/dS_w) \Delta t + x_0. \quad (\text{A.8})$$

A Eq. (2.54) pode ser reescrita tomando-se  $x_0 = 0$ , como:

$$t = \frac{x}{(df_w/dS_w)} + t_0. \quad (\text{A.9})$$

A partir da Eqs. (A.8) e (A.9), vemos como a função de fluxo fracional  $f_w(k_{rw})$ , e portanto a permeabilidade relativa, comandam o deslocamento de uma fase fluida (óleo) pela outra (água).

### ***Relação entre Permeabilidade Relativa e Saturação***

A relação entre permeabilidade relativa e saturação da fase molhante é altamente dependente do fluido em questão, e particularmente do relacionamento entre o fluido molhante e a matriz porosa (BEAR, 1972; HELMIG, 1997) sendo, normalmente, determinado experimentalmente de tal forma que estes dados experimentais são ajustados a polinômios de graus variados, HELMIG (1997) e BINNING e CELIA (1999). Como exemplo, podemos considerar um modelo quadrático bastante utilizado na literatura (HELMIG, 1997), o qual é apresentado a seguir:

$$k_{rw}(S_w) = \left( \frac{S_w - S_{wr}}{1 - S_{wr} - S_{or}} \right)^2, \quad (\text{A.10})$$

$$k_{ro}(S_w) = \left( \frac{1 - S_w - S_{wr}}{1 - S_{wr} - S_{or}} \right)^2. \quad (\text{A.11})$$

Nas Eqs. (A.10) e (A.11),  $S_{wr}$  e  $S_{or}$  são as saturações residuais de água e óleo, respectivamente.

### ***O Problema de Riemann***

Consideraremos novamente a equação de Buckley-Leverett na sua forma conservativa (*i.e.* escrita em termos da função de fluxo):

$$\frac{\partial S_w}{\partial t} + \frac{\partial f}{\partial x} = 0. \quad (\text{A.12})$$

Para que possamos concluir à definição do problema de transporte dado pela Eq (A.12) é necessário que especifiquemos condições iniciais e de contorno adequadas. Com este objetivo, escrevemos:

$$S_w(x, 0) = \begin{cases} 1 - S_{or} & \text{para } x \leq x_0, \\ S_{wr} & \text{para } x > x_0, \end{cases} \quad (\text{A.13})$$
$$S_w(x_0, t) = \bar{S}_w.$$

As Eq. (A.12) e (A.13) definem um problema de Riemann, no qual uma certa quantidade da substância é transportada de maneira descontínua através de um dado domínio, (LEVEQUE, 1992; LYRA, 1994; HELMIG, 1997; LEVEQUE, 2002).

Diferentemente das equações de Euler por exemplo, devido ao caráter côncavo da função de fluxo fracional, as curvas características do problema de Buckley-Leverett apresentam tanto, ondas de compressão  $d^2 f/dx \leq 0$ , quanto de rarefação,  $d^2 f/dx \geq 0$ . Soluções clássicas para o problema de Buckley-Leverett, tais como a de Weldge, podem ser encontradas na literatura, FANCHI (2001). A Figura (A.1), adaptada de HELMIG (1997), mostra que, para um mesmo ponto, múltiplas características e, portanto, múltiplas soluções podem existir o que representa um fenômeno não-físico. Por outro lado, apenas uma solução representa o processo físico real. Esta intersecção de linhas características se dá porque, ao definirmos as linha características, não impusemos nenhuma restrição para os valores possíveis das saturações a montante ( $S_w^u$ ) e a jusante ( $S_w^d$ ) do choque. Para selecionarmos a solução real dentre as várias existentes, utilizamos normalmente a condição de Rankine-Hugoniot e a condição de entropia, LEVEQUE (1992), LYRA (1994), e LEVEQUE (2002).

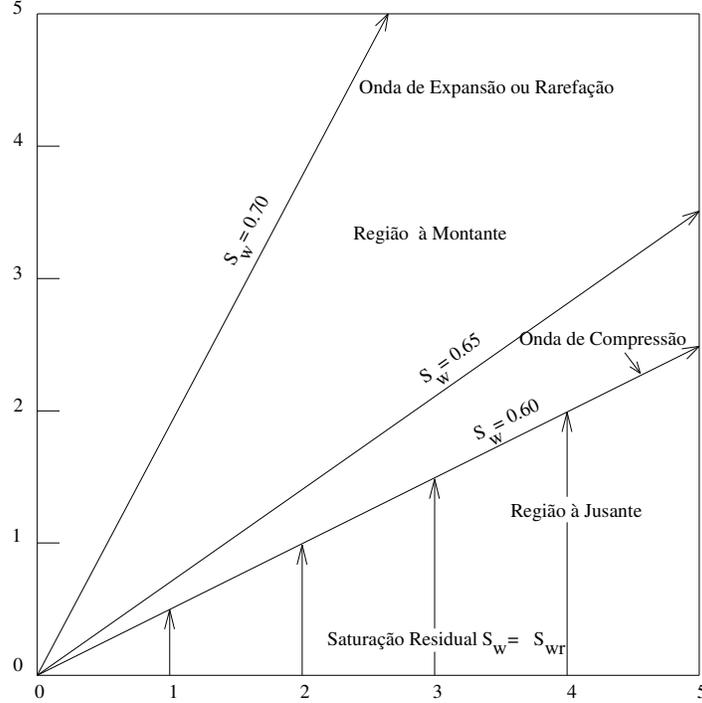


Figura A.1 – Múltiplos valores para a saturação (situação não-física).

### Condição de Rankine-Hugoniot

Esta condição é simplesmente uma condição de continuidade dos fluxos imposta ao longo de uma descontinuidade na solução. Para isto, é necessário que a saturação salte do seu valor a montante do choque para o valor a jusante. Considerando o volume de controle da Fig. (A.2), podemos escrever a condição de Rankine-Hugoniot para a equação de Buckley-Leverett como:

$$\begin{aligned} & \left[ \left( v^{frente}(t + \Delta t) - x_1 \right) S_w^u + \left( x_2 - v^{frente}(t + \Delta t) \right) S_w^d \right] - \\ & \left[ \left( v^{frente}t - x_1 \right) S_w^u + \left( x_2 - v^{frente}t \right) S_w^d \right] = \left( f(S_w^u) - f(S_w^d) \right) \int_t^{t+\Delta t} dt. \end{aligned} \quad (A.14)$$

Na Equação (A.14) os super-índices  $S_w^u$ ,  $S_w^d$  representam os valores da saturação de água a montante e a jusante do choque. Rearranjando os termos chegamos a:

$$\begin{aligned} & \left( v^{frente}(t + \Delta t) - x_1 - v^{frente}t + x_1 \right) S_w^u + \\ & \left( x_2 - v^{frente}(t + \Delta t) - x_2 + v^{frente}t \right) S_w^d = \left( f(S_w^u) - f(S_w^d) \right) \Delta t. \end{aligned} \quad (A.15)$$

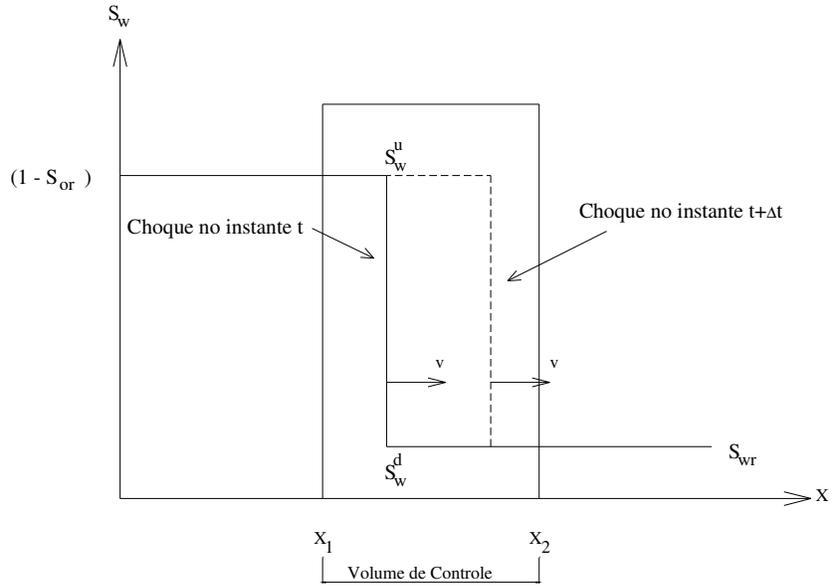


Figura A.2 – Volume de controle ao longo de um choque.

E ainda:

$$v^{frente} \Delta t S_w^u - v^{frente} \Delta t S_w^d = (f(S_w^u) - f(S_w^d)) \Delta t. \quad (A.16)$$

Finalmente podemos escrever:

$$v^{frente} = \frac{f(S_w^u) - f(S_w^d)}{S_w^u - S_w^d} = \frac{\Delta f_w}{\Delta S_w}. \quad (A.17)$$

Desta forma, fica estabelecido que a velocidade de propagação da frente de saturação (“o choque”) é essencialmente dependente do fluxo fracional de água. Portanto, a condição de continuidade de Rankine-Hugoniot estabelece qual critério deve ser satisfeito para que a velocidade do choque corresponda ao processo físico em questão.

Por outro lado, vale notar que esta condição por si só não permite calcular qual solução  $S_w$  representa de fato a frente de saturação.

### ***Condição de Entropia***

A condição de entropia é vista como uma forma de corrigirmos o erro físico cometido ao desprezarmos os efeitos difusivos (gravidade e capilaridade) na obtenção da equação hiperbólica de Buckley-Leverett (HIRSCH, 1988; LEVEQUE, 2002). Ela estabelece que a velocidade do escoamento a montante do choque deve ser maior que a velocidade a jusante do mesmo, ou seja:

$$v^u > v^d. \quad (\text{A.18})$$

Note que, se esta condição não for satisfeita a frente de saturação se expande indefinidamente até desaparecer.

A condição de entropia foi amplamente estudada na literatura para equações hiperbólicas em geral (HIRSCH, 1988; LEVEQUE, 1992; LYRA, 1994; TANNEHILL et al., (1997); LEVEQUE, 2002).

De modo geral, esta condição pode ser expressa como:

$$v^u \geq v^{frente} \geq v^d, \quad (\text{A.19})$$

ou ainda, para a equação de Buckley-Leverett, temos (HELMIG, 1997):

$$\frac{f(S_w) - f(S_w^u)}{S_w - S_w^u} \geq v^{frente} \geq \frac{f(S_w) - f(S_w^d)}{S_w - S_w^d}. \quad (\text{A.20})$$

Concluimos então, uma solução  $S_w(x, t)$  será uma solução física para o problema de propagação da frente de saturação apenas se ela satisfizer a condição expressa pela Eq. (A.20). Maiores detalhes sobre o desenvolvimento matemático e as implicações físicas e matemáticas, tanto da condição de Rankine-Hugoniot, quanto da condição de entropia podem ser encontradas em HIRSCH (1988), LEVEQUE (1992), LYRA (1994), TANNEHILL et al. (1997) e LEVEQUE (2002).

## APÊNDICE B

### Inconsistência do Esquema de Dois Pontos Numa Malha Triangular Genérica

A seguir, mostraremos que a discretização espacial da equação de Laplace utilizando apenas dois pontos ao longo de uma aresta da malha, é inconsistente em malhas triangulares gerais com volumes de controle construídos pelo método das medianas.

Considerando o problema descrito por  $\nabla^2 u = 0$ , escreveremos a equação nodal para o nó 1 da malha estruturada triangular apresentada na Fig. (B.1). Nesta figura podemos observar que as superfícies de controle e as arestas da malha primal não são ortogonais entre si.

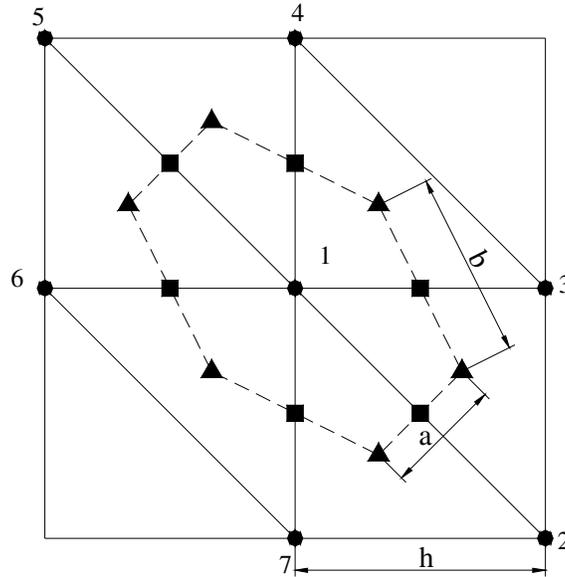


Figura B.1 – Volume de controle construído pelo método das medianas para o nó 1, numa malha triangular genérica: observe que as superfícies de controle e as arestas da malha primal não são ortogonais entre si.

Usando séries de Taylor, podemos escrever a função  $u$  nos nós 2, 3, 4, 5, 6 e 7 como:

$$u_2 = u_1 + h \frac{\partial u}{\partial x} - h \frac{\partial u}{\partial y} + \frac{h^2}{2} \frac{\partial^2 u}{\partial x^2} + \frac{(h\sqrt{2})^2}{2} \frac{\partial^2 u}{\partial x \partial y} + \frac{h^2}{2} \frac{\partial^2 u}{\partial y^2} + O(h^3), \quad (\text{B.1})$$

$$u_3 = u_1 + h \frac{\partial u}{\partial x} + \frac{h^2}{2} \frac{\partial^2 u}{\partial x^2} + O(h^3), \quad (\text{B.2})$$

$$u_4 = u_1 + h \frac{\partial u}{\partial y} + \frac{h^2}{2} \frac{\partial^2 u}{\partial y^2} + O(h^3), \quad (\text{B.3})$$

$$u_5 = u_1 - h \frac{\partial u}{\partial x} + h \frac{\partial u}{\partial y} + \frac{h^2}{2} \frac{\partial^2 u}{\partial x^2} + \frac{(h\sqrt{2})^2}{2} \frac{\partial^2 u}{\partial x \partial y} + \frac{h^2}{2} \frac{\partial^2 u}{\partial y^2} + O(h^3), \quad (\text{B.4})$$

$$u_6 = u_1 - h \frac{\partial u}{\partial x} + \frac{h^2}{2} \frac{\partial^2 u}{\partial x^2} + O(h^3), \quad (\text{B.5})$$

$$u_7 = u_1 - h \frac{\partial u}{\partial y} + \frac{h^2}{2} \frac{\partial^2 u}{\partial y^2} + O(h^3). \quad (\text{B.6})$$

Utilizando a formulação de dois pontos apresentada no capítulo 4 para a discretização do termo elíptico, Eq. (4.9), a equação aproximada para o nó 1 da malha da Fig. (B.1) pode então ser escrita como:

$$\begin{aligned} & \frac{\hat{u}_2 - \hat{u}_1}{\sqrt{2}h} + \frac{\hat{u}_3 - \hat{u}_1}{h} + \frac{\hat{u}_4 - \hat{u}_1}{h} + \frac{\hat{u}_5 - \hat{u}_1}{\sqrt{2}h} + \frac{\hat{u}_6 - \hat{u}_1}{h} + \frac{\hat{u}_7 - \hat{u}_1}{h} = \\ & \left\{ \frac{\left[ \hat{u}_1 + h \frac{\partial \hat{u}}{\partial x} - h \frac{\partial \hat{u}}{\partial y} + \frac{h^2}{2} \left( \frac{\partial^2 \hat{u}}{\partial x^2} + 2 \frac{\partial^2 \hat{u}}{\partial x \partial y} + \frac{\partial^2 \hat{u}}{\partial y^2} \right) \right] - \hat{u}_1}{\sqrt{2}h} \right\} \frac{h\sqrt{2}}{3} + \\ & \left\{ \frac{\left[ \hat{u}_1 + h \frac{\partial \hat{u}}{\partial x} + \frac{h^2}{2} \frac{\partial^2 \hat{u}}{\partial x^2} \right] - \hat{u}_1}{h} \right\} \frac{h\sqrt{5}}{3} + \left\{ \frac{\left[ \hat{u}_1 + h \frac{\partial \hat{u}}{\partial y} + \frac{h^2}{2} \frac{\partial^2 \hat{u}}{\partial y^2} \right] - u_1}{h} \right\} \frac{h\sqrt{5}}{3} + \\ & \left\{ \frac{\left[ \hat{u}_1 - h \frac{\partial \hat{u}}{\partial x} + h \frac{\partial \hat{u}}{\partial y} + \frac{h^2}{2} \left( \frac{\partial^2 \hat{u}}{\partial x^2} + 2 \frac{\partial^2 \hat{u}}{\partial x \partial y} + \frac{\partial^2 \hat{u}}{\partial y^2} \right) \right] - \hat{u}_1}{\sqrt{2}h} \right\} \frac{h\sqrt{2}}{3} + \\ & \left\{ \frac{\left[ \hat{u}_1 - h \frac{\partial \hat{u}}{\partial x} + \frac{h^2}{2} \frac{\partial^2 \hat{u}}{\partial x^2} \right] - \hat{u}_1}{h} \right\} \frac{h\sqrt{5}}{3} + \left\{ \frac{\left[ \hat{u}_1 - h \frac{\partial \hat{u}}{\partial y} + \frac{h^2}{2} \frac{\partial^2 \hat{u}}{\partial y^2} \right] - \hat{u}_1}{h} \right\} \frac{h\sqrt{5}}{3}. \end{aligned} \quad (\text{B.7})$$

Rearranjando os termos obtemos:

$$\begin{aligned}
& \left( \frac{\hat{u}_2 - \hat{u}_1 + \hat{u}_5 - \hat{u}_1}{\sqrt{2}h} \right) \frac{h\sqrt{2}}{3} + \\
& \left( \frac{\hat{u}_3 - \hat{u}_1 + \hat{u}_4 - \hat{u}_1 + \hat{u}_5 - \hat{u}_1 + \hat{u}_6 - \hat{u}_1 + \hat{u}_7 - \hat{u}_1}{h} \right) \frac{h\sqrt{5}}{3} = \\
& \left\{ \frac{\hat{u}_1 + h \frac{\partial \hat{u}}{\partial x} - h \frac{\partial \hat{u}}{\partial y} + \frac{h^2}{2} \left( \frac{\partial^2 \hat{u}}{\partial x^2} + 2 \frac{\partial^2 \hat{u}}{\partial x \partial y} + \frac{\partial^2 \hat{u}}{\partial y^2} \right) - \hat{u}_1}{\sqrt{2}h} \right. \\
& \left. + \frac{\hat{u}_1 - h \frac{\partial \hat{u}}{\partial x} + h \frac{\partial \hat{u}}{\partial y} + \frac{h^2}{2} \left( \frac{\partial^2 \hat{u}}{\partial x^2} + 2 \frac{\partial^2 \hat{u}}{\partial x \partial y} + \frac{\partial^2 \hat{u}}{\partial y^2} \right)}{\sqrt{2}h} \right\} \frac{h\sqrt{2}}{3} + \\
& \left\{ \frac{\left[ \hat{u}_1 + h \frac{\partial \hat{u}}{\partial x} + \frac{h^2}{2} \frac{\partial^2 \hat{u}}{\partial x^2} \right] - \hat{u}_1 + \left[ \hat{u}_1 - h \frac{\partial \hat{u}}{\partial x} + \frac{h^2}{2} \frac{\partial^2 \hat{u}}{\partial x^2} \right] - \hat{u}_1}{h} \right. \\
& \left. + \frac{\left[ \hat{u}_1 + h \frac{\partial \hat{u}}{\partial y} + \frac{h^2}{2} \frac{\partial^2 \hat{u}}{\partial y^2} \right] - \hat{u}_1 + \left[ \hat{u}_1 - h \frac{\partial \hat{u}}{\partial y} + \frac{h^2}{2} \frac{\partial^2 \hat{u}}{\partial y^2} \right] - \hat{u}_1}{h} \right\} \frac{h\sqrt{5}}{3}. \tag{B.8}
\end{aligned}$$

Após alguma manipulação algébrica, e novamente rearranjando os termos, chegamos a:

$$\begin{aligned}
& \left( \frac{\hat{u}_2 - \hat{u}_1 + \hat{u}_5 - \hat{u}_1}{\sqrt{2}h} \right) \frac{h\sqrt{2}}{3} + \left( \frac{\hat{u}_3 - \hat{u}_1 + \hat{u}_4 - \hat{u}_1 + \hat{u}_5 - \hat{u}_1 + \hat{u}_6 - \hat{u}_1 + \hat{u}_7 - \hat{u}_1}{h} \right) \frac{h\sqrt{5}}{3} = \\
& \frac{h^2}{3} \left\{ \left( \frac{\partial^2 \hat{u}}{\partial x^2} + 2 \frac{\partial^2 \hat{u}}{\partial x \partial y} + \frac{\partial^2 \hat{u}}{\partial y^2} \right) + \left( \frac{\partial^2 \hat{u}}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 \hat{u}}{\partial y^2} \right) \sqrt{5} \right\}. \tag{B.9}
\end{aligned}$$

O lado direito da Eq. (B.9) pode ser reescrito como:

$$\frac{h^2}{3} \left\{ \left( \frac{\partial^2 \hat{u}}{\partial x^2} + 2 \frac{\partial^2 \hat{u}}{\partial x \partial y} + \frac{\partial^2 \hat{u}}{\partial y^2} \right) + \left( \frac{\partial^2 \hat{u}}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 \hat{u}}{\partial y^2} \right) \sqrt{5} \right\} = \frac{h^2 (1 + \sqrt{5})}{3} \left( \frac{\partial^2 \hat{u}}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 \hat{u}}{\partial y^2} \right) + \frac{2h^2}{3} \frac{\partial^2 \hat{u}}{\partial x \partial y}. \tag{B.10}$$

Como podemos observar na Eq. (B.10), para a malha com a configuração da Fig. (B.1), a discretização do Laplaciano (*i.e.*,  $\partial^2 u / \partial x^2 + \partial^2 u / \partial y^2$ ) utilizando apenas dois pontos, inclui o termo de derivada cruzada  $\partial^2 \hat{u} / \partial x \partial y$  ponderado por um peso que depende do tamanho do elemento da malha. Isto equivale a utilizarmos uma discretização consistente e de segunda ordem para a equação da forma:

$$\frac{\partial^2 u}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 u}{\partial y^2} + \frac{\partial^2 u}{\partial x \partial y} = 0. \quad (\text{B.11})$$

Neste caso, fica claro que a formulação de dois pontos é inadequada para a avaliação do fluxo no ponto médio da aresta e conseqüentemente para a discretização do Laplaciano. Em problemas isotrópicos, no caso de malhas em que as superfícies de controle são ortogonais a aresta, o termo cruzado desaparece, tornando os esquemas de dois pontos adequados para a discretização do laplaciano.

## APÊNDICE C

### Detalhamento da Formulação Matricial Implícita Para a Equação Elíptica de Pressão

Neste apêndice, detalhamos o processo de obtenção das matrizes de aresta para a discretização implícita do problema elíptico de pressão descrito pela Eq. (6.15). Como nosso processo de discretização do termo elíptico envolve dois passos, primeiramente apresentaremos as equações matriciais associadas ao cálculo do gradiente, e em seguida apresentaremos as matrizes associadas a discretização do termo elíptico e do vetor do termo de fonte.

#### *Matriz do Gradiente* $[F]$

Como os termos de contornos externos  $\Gamma_{RE}$  são calculados de maneira análoga aos termos de contornos internos  $\Gamma_{RI}$ , por simplicidade de notação, utilizaremos simplesmente  $\Gamma_r$  para indicar os termos de contorno num domínio  $\Omega_r$ .

Escrevendo a equação do gradiente nodal de pressão para dois nós genéricos associados a uma aresta  $IJ_L$ , e se considerarmos apenas as contribuições desta aresta para as equações nodais, podemos escrever:

$$\nabla \hat{p}_I^{IJ_L} = \frac{1}{V_I} \left( \frac{\hat{p}_I + \hat{p}_{J_L}}{2} \bar{C}_{IJ_L}^{\Omega_r} + \hat{p}_I \bar{D}_{IJ_L}^{\Omega_r} \right), \quad (C.1)$$

$$\nabla \hat{p}_{J_L}^{IJ_L} = \frac{1}{V_{J_L}} \left( \frac{\hat{p}_I + \hat{p}_{J_L}}{2} (-\bar{C}_{IJ_L}^{\Omega_r}) + \hat{p}_{J_L} \bar{D}_{IJ_L}^{\Omega_r} \right), \quad (C.2)$$

onde nos utilizamos do fato de que  $\bar{C}_{IJ_L} = -\bar{C}_{J_L I}$  e  $\bar{D}_{IJ_L} = \bar{D}_{J_L I}$ .

As Equações (C.1) e (C.2) podem ser reescritas em forma matricial compacta como:

$$[\nabla \hat{p}]_{(\text{ndim},x1)}^{IJ_L} = [F]_{(2\text{ndim},x2)}^{IJ_L} [\hat{p}]_{(2x1)}^{IJ_L}, \quad (C.3)$$

onde a matriz  $[F]_{(2\text{ndim},x2)}^{IJ_L}$  é dada por:

$$[F]_{(2\text{ndim},x2)}^{J_L} = \begin{pmatrix} \frac{1}{2V_I}(\bar{C}_{J_L}^{\Omega_r} + 2\bar{D}_{J_L}^{\Omega_r}) & \frac{1}{2V_I}\bar{C}_{J_L}^{\Omega_r} \\ -\frac{1}{2V_{J_L}}\bar{C}_{J_L}^{\Omega_r} & -\frac{1}{2V_{J_L}}(\bar{C}_{J_L}^{\Omega_r} - 2\bar{D}_{J_L}^{\Omega_r}) \end{pmatrix}. \quad (\text{C.4})$$

Podemos ainda separar as contribuições do domínio e do contorno, respectivamente como:

$$[\nabla\hat{p}]_{(\text{ndim},x1)}^{J_L} = \left( [F]_{(2\text{ndim},x2)}^{J_L(\Omega_r)} + [F]_{(2\text{ndim},x2)}^{J_L(\Gamma_r)} \right) [\hat{p}]_{(2,x1)}^{J_L}, \quad (\text{C.5})$$

onde as matrizes,  $[F]_{(2\text{ndim},x2)}^{J_L(\Omega_r)}$  e  $[F]_{(2\text{ndim},x2)}^{J_L(\Gamma_r)}$  são dadas por:

$$[F]_{(2\text{ndim},x2)}^{J_L(\Omega_r)} = \frac{\bar{C}_{J_L}^{\Omega_r}}{2} \begin{pmatrix} \frac{1}{V_I} & \frac{1}{V_I} \\ -\frac{1}{V_{J_L}} & \frac{1}{V_{J_L}} \end{pmatrix}, \quad (\text{C.6})$$

$$[F]_{(2\text{ndim},x2)}^{J_L(\Gamma_r)} = \begin{pmatrix} \frac{\bar{D}_{J_L}^{\Omega_r}}{V_I} & 0 \\ 0 & \frac{\bar{D}_{J_L}^{\Omega_r}}{V_{J_L}} \end{pmatrix}. \quad (\text{C.7})$$

A Eq. (C.5) é válida tanto para o problema bidimensional quanto tridimensional devido à utilização da aproximação simplificada (de um ponto) para o fluxo no contorno. Para o caso bidimensional, no caso de desejarmos utilizar a aproximação mais acurada (de segunda ordem) para o termo de contorno, podemos reescrever as Eqs. (C.1) e (C.2), como:

$$\nabla\hat{p}_I^{J_L} = \frac{1}{V_I} \left( \frac{\hat{p}_I + \hat{p}_{J_L}}{2} \bar{C}_{J_L}^{\Omega_r} + \frac{5\hat{p}_I + \hat{p}_{J_L}}{6} \bar{D}_{J_L}^{\Omega_r} \right), \quad (\text{C.8})$$

$$\nabla\hat{p}_{J_L}^{J_L} = \frac{1}{V_{J_L}} \left( \frac{\hat{p}_I + \hat{p}_{J_L}}{2} (-\bar{C}_{J_L}^{\Omega_r}) + \frac{5\hat{p}_{J_L} + \hat{p}_I}{6} \bar{D}_{J_L}^{\Omega_r} \right). \quad (\text{C.9})$$

Em forma matricial, temos:

$$\begin{pmatrix} \nabla \hat{p}_I \\ \nabla \hat{p}_{J_L} \end{pmatrix}^{J_L} = \begin{pmatrix} \frac{1}{V_I} \left( \frac{\bar{C}_{J_L}^{\Omega_r}}{2} + \frac{5\bar{D}_{J_L}^{\Omega_r}}{6} \right) & \frac{1}{V_I} \left( \frac{\bar{C}_{J_L}^{\Omega_r}}{2} + \frac{\bar{D}_{J_L}^{\Omega_r}}{6} \right) \\ -\frac{1}{V_{J_L}} \left( \frac{\bar{C}_{J_L}^{\Omega_r}}{2} - \frac{\bar{D}_{J_L}^{\Omega_r}}{6} \right) & -\frac{1}{V_{J_L}} \left( \frac{\bar{C}_{J_L}^{\Omega_r}}{2} - \frac{5\bar{D}_{J_L}^{\Omega_r}}{6} \right) \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \hat{p}_I \\ \hat{p}_{J_L} \end{pmatrix}^{J_L}. \quad (\text{C.10})$$

Neste caso, a matriz com a contribuição do domínio,  $[F]_{(2\text{ndim}\times 2)}^{J_L(\Omega_r)}$  não é modificada e a matriz com a contribuição do contorno,  $[F]_{(2\text{ndim}\times 2)}^{J_L(\Gamma_r)}$ , deve ser reescrita como:

$$[F]_{(2\text{ndim}\times 2)}^{J_L(\Gamma_r)} = \begin{pmatrix} \frac{5\bar{D}_{J_L}^{\Omega_r}}{6V_I} & \frac{\bar{D}_{J_L}^{\Omega_r}}{V_I} \\ \frac{\bar{D}_{J_L}^{\Omega_r}}{V_{J_L}} & \frac{5\bar{D}_{J_L}^{\Omega_r}}{6V_{J_L}} \end{pmatrix}. \quad (\text{C.11})$$

Conforme mencionamos no capítulo 4, para obtermos uma aproximação de segunda ordem sobre os nós do contorno no caso tridimensional, devemos considerar todos os nós da face do elemento sobre o contorno. No caso de um elemento tetraédrico as contribuições para o gradiente provenientes do domínio são calculadas a partir das arestas da malha exatamente como na Eq. (C.6). Por outro lado, para um tetraedro cuja face de contorno é formada pelos nós  $I, J_L$  e  $J_H$ , as contribuições dos contornos podem ser escritas como:

$$\nabla \hat{p}_I^{J_L J_H(\Gamma_r)} = \left( \frac{6\hat{p}_I + \hat{p}_{J_L} + \hat{p}_{J_H}}{8V_I} \right) \bar{D}_{J_L J_H}^{\Omega_r}, \quad (\text{C.12})$$

$$\nabla \hat{p}_{J_L}^{J_L J_H(\Gamma_r)} = \left( \frac{\hat{p}_I + 6\hat{p}_{J_L} + \hat{p}_{J_H}}{8V_{J_L}} \right) \bar{D}_{J_L J_H}^{\Omega_r}, \quad (\text{C.13})$$

$$\nabla \hat{p}_{J_H}^{J_L J_H(\Gamma_r)} = \left( \frac{\hat{p}_I + \hat{p}_{J_L} + 6\hat{p}_{J_H}}{8V_{J_H}} \right) \bar{D}_{J_L J_H}^{\Omega_r}. \quad (\text{C.14})$$

Podemos então definir a matriz  $[F]_{9\times 3}^{J_L J_H(\Gamma_r)}$  que representa as contribuições das faces do contorno para cálculo do gradiente como:

$$[F]_{(9 \times 3)}^{IJ_L J_H(\Gamma_r)} = \begin{pmatrix} \frac{6\bar{D}_{IJ_L J_H}^{\Omega_r}}{8V_I} & \frac{\bar{D}_{IJ_L J_H}^{\Omega_r}}{8V_I} & \frac{\bar{D}_{IJ_L J_H}^{\Omega_r}}{8V_I} \\ \frac{\bar{D}_{IJ_L J_H}^{\Omega_r}}{8V_{J_L}} & \frac{6\bar{D}_{IJ_L J_H}^{\Omega_r}}{8V_{J_L}} & \frac{\bar{D}_{IJ_L J_H}^{\Omega_r}}{8V_{J_L}} \\ \frac{\bar{D}_{IJ_L J_H}^{\Omega_r}}{8V_{J_H}} & \frac{\bar{D}_{IJ_L J_H}^{\Omega_r}}{8V_{J_H}} & \frac{6\bar{D}_{IJ_L J_H}^{\Omega_r}}{8V_{J_H}} \end{pmatrix}. \quad (C.15)$$

No caso da aproximação mais simples para os termos de contorno, a matriz global do gradiente pode ser montada a partir das matrizes de aresta como:

$$[F]_{(np \times ndim) \times np}^G = \sum_{r=1}^{Ndom} \left( \sum_{IJ_L \in \Omega_r} [F]_{(2ndim \times 2)}^{IJ_L(\Omega_r)} + \sum_{IJ_L \in \Gamma_r} [F]_{(2ndim \times 2)}^{IJ_L(\Gamma_r)} \right). \quad (C.16)$$

No caso de utilizarmos a aproximação da aproximação mais acurada para os fluxos nos contornos, a matriz global para os gradientes deverá ser montada a partir das contribuições das arestas da malha e das faces do contorno como:

$$[F]_{(np \times ndim) \times np}^G = \sum_{r=1}^{Ndom} \left( \sum_{IJ_L \in \Omega_r} [F]_{(2ndim \times 2)}^{IJ_L(\Omega_r)} + \sum_{IJ_L J_H \in \Gamma_r} [F]_{(9 \times 3)}^{IJ_L J_H(\Gamma_r)} \right). \quad (C.17)$$

### **Matrizes para os Termos Elípticos [E] e [G] e Termos de Fonte [Q]**

Escrevendo as equações discretas resultantes da discretização da equação elíptica de pressão (Eqs. (6.7) e (6.7)) em meios heterogêneos e anisotrópicos para uma aresta genérica da malha  $IJ_L$ , e se para um dado domínio considerarmos apenas as contribuições desta aresta para as equações nodais, temos:

$$-\left( \underline{K}^{\Omega_r} \lambda_T^{IJ_L} \right) \left[ \frac{(\nabla \hat{p}_I^{\Omega_r} + \nabla \hat{p}_{J_L}^{\Omega_r})}{2} - \left( \frac{(\nabla \hat{p}_I^{\Omega_r} + \nabla \hat{p}_{J_L}^{\Omega_r})}{2} \cdot \bar{L}_{IJ_L} \right) \bar{L}_{IJ_L} + \frac{(\hat{p}_{J_L} - \hat{p}_I)}{|\Delta_{IJ_L}|} \bar{L}_{IJ_L} \right] \cdot \bar{C}_{IJ_L}^{\Omega_r} = Q_I^{\Omega_r} V_I^{\Omega_r}, \quad (C.18)$$

para um nó  $I$ , e:

$$\left( \underline{K}^{\Omega_r} \lambda_T^{IJ_L} \right) \left[ \frac{(\nabla \hat{p}_I^{\Omega_r} + \nabla \hat{p}_{J_L}^{\Omega_r})}{2} - \left( \frac{(\nabla \hat{p}_I^{\Omega_r} + \nabla \hat{p}_{J_L}^{\Omega_r})}{2} \cdot \bar{L}_{IJ_L} \right) \bar{L}_{IJ_L} + \frac{(\hat{p}_{J_L} - \hat{p}_I)}{|\Delta_{IJ_L}|} \bar{L}_{IJ_L} \right] \cdot \bar{C}_{IJ_L}^{\Omega_r} = Q_{J_L}^{\Omega_r} V_{J_L}^{\Omega_r}, \quad (C.19)$$

para um nó  $J_L$ .

As Eqs. (C.18) e (C.19) podem ser escritas de forma matricial compacta como:

$$[E]_{(\text{ndim} \times 2 \text{ndim})}^{J_L(\Omega_r)} [\nabla \hat{p}]_{(2 \text{ndim} \times 1)}^{J_L(T)} + [G]_{2 \times 2}^{J_L(\Omega_r)} [\hat{p}]_{2 \times 1}^{J_L} = [Q]_{2 \times 1}^{J_L(\Omega_r)}. \quad (\text{C.20})$$

Neste caso, as matrizes  $[E]_{(\text{ndim} \times 2 \text{ndim})}^{J_L(\Omega_r)}$ ,  $[G]_{2 \times 2}^{J_L(\Omega_r)}$  e  $[Q]_{2 \times 1}^{J_L(\Omega_r)}$  são definidas como:

$$[G]_{(2 \text{ndim} \times 2 \text{ndim})}^{J_L(\Omega_r)} = -\tilde{K}^{\Omega_r} \lambda_T^{J_L} \frac{\tilde{L}_{J_L} \cdot \tilde{C}_{J_L}^{\Omega_r}}{|\Delta_{J_L}|} \begin{pmatrix} 1 & -1 \\ -1 & 1 \end{pmatrix}. \quad (\text{C.21})$$

$$[E]_{(2 \times 2 \text{ndim})}^{J_L(\Omega_r)} = \frac{-\tilde{K}^{\Omega_r} \lambda_T^{J_L}}{2} \begin{pmatrix} \left( \tilde{I} - \tilde{L}_{J_L} (\tilde{L}_{J_L})^T \right) & \left( \tilde{I} - \tilde{L}_{J_L} (\tilde{L}_{J_L})^T \right) \\ \left( \tilde{L}_{J_L} (\tilde{L}_{J_L})^T - \tilde{I} \right) & \left( \tilde{L}_{J_L} (\tilde{L}_{J_L})^T - \tilde{I} \right) \end{pmatrix} \cdot \tilde{C}_{J_L}^{\Omega_r}. \quad (\text{C.22})$$

$$[Q]_{(2 \times 1)}^{J_L(\Omega_r)} = \begin{pmatrix} Q_I^{\Omega_r} V_I^{\Omega_r} / NN_I \\ Q_{J_L}^{\Omega_r} V_{J_L}^{\Omega_r} / NN_{J_L} \end{pmatrix}, \quad (\text{C.23})$$

onde,  $NN_I$  e  $NN_{J_L}$  são o número de arestas que concorrem nos nós  $I$  e  $J_L$ , respectivamente.

Portanto, as matrizes globais e o vetor do termo de fonte para a discretização da equação de pressão podem ser escritos como:

$$[G]_{\text{np} \times \text{np}}^G = \sum_{r=1}^{N_{\text{dom}}} \sum_{J_L \in \Omega_r} [G]_{(2 \times 2)}^{J_L(\Omega_r)}, \quad (\text{C.24})$$

$$[E]_{\text{np} \times (\text{np} \times \text{ndim})}^G = \sum_{r=1}^{N_{\text{dom}}} \sum_{J_L \in \Omega_r} [E]_{(2 \text{ndim} \times 2)}^{J_L(\Omega_r)}, \quad (\text{C.25})$$

$$[Q]_{\text{np}}^G = \sum_{r=1}^{N_{\text{dom}}} \sum_{J_L \in \Omega_r} [Q]_{(2 \times 1)}^{J_L(\Omega_r)}. \quad (\text{C.26})$$

onde as matrizes  $[G]_{(2 \times 2)}^{J_L(\Omega_r)}$ ,  $[E]_{(2 \times 2 \text{ndim})}^{J_L(\Omega_r)}$  e o vetor  $[Q]_{(2 \times 1)}^{J_L(\Omega_r)}$  são fornecidos pelas Eqs. (C.21), (C.22) e (C.23).

## BIBLIOGRAFIA

- AAVATSMARK, I.; BARKVE, T.; BØE, Ø.; MANNSETH, T. *Discretization on Unstructured Grids for Inhomogeneous, Anisotropic Media. Part I: Derivation of The Methods*. SIAM J. Sci. Comput. v. 19, p. 1700-1716, 1998a.
- AAVATSMARK, I.; BARKVE, T.; BØE, Ø.; MANNSETH, T. *Discretization on Unstructured Grids for Inhomogeneous, Anisotropic Media. Part II: Discussion and Numerical Results*. SIAM J. Sci. Comput. v. 19, p. 1717-1736, 1998b.
- ARAÚJO, F. S. *Procedimentos Adaptativos na Simulação de Reservatórios de Petróleo em Volumes Finitos*. 109 f. Dissertação de Mestrado em Engenharia - Universidade Federal de Pernambuco (UFPE), Recife, Pernambuco, 2004.
- ARAÚJO, F. S.; LYRA, P. R. M.; CARVALHO, D. K. E. *Mesh Adaptive Procedures for Reservoir Fluid Flow Simulation*. Congresso Ibero-Latino Americano em Métodos Computacionais em Engenharia (CILAMCE 2004), Recife, 2004a.
- ARAÚJO, F. S.; LYRA, P. R. M.; CARVALHO, D. K. E. *Um Estudo Comparativo de Dois Procedimentos de Adaptação de Malhas ao Resolver Problemas Modelos De Reservatórios Através de uma Formulação co MVF com Estrutura de Dados por Aresta*. Congresso Nacional de Engenharia Mecânica (CONEM 2004), Belém do Pará, 2004b.
- AZIZ, K., In: *Notes for Petroleum Reservoir Simulation*. Stanford University, Stanford, 1993.
- BARTH, T. J. In: *Computational Fluid Dynamics: Aspects of Unstructured Grids and Finite Volume Solvers for the Euler and Navier-Stokes Equations*. NASA Ames Research Center, Moffet Field, 1994.
- BARTH, T. J.; LINTON, W. S. *An Unstructured Mesh Newton Solver for Compressible Fluid Flow and Its Parallel Implementation*. Technical Report, AIAA-95-0221, p. 1-16, 1995.
- BEAR, J. *Dynamics of Fluids in Porous Media*. Dover, New York, 1972.
- BINNING, P.; CELIA, M. A. *Practical Implementation of the Fractional Flow Approach to Multi-Phase Flow Simulation*. Advances in Water Resources, v. 22, p. 461-478, 1999.
- BORIS, J.; BROOK, D. *Flux-Corrected Transport: I SHASTA. A Fluid Corrected Transport Algorithm that Works*. Journal of Computational Physics. v. 11, p. 38-69, 1973.
- BUCKLEY, S. E.; LEVERETT, M. C. *Mechanism of fluid displacement in porous media*. Petroleum Technology, p. 107-116, 1942.

- CAO, H. *Development of techniques for general purpose simulators*. Ph.D. Tese de Doutorado, Stanford University, 2002.
- CARVALHO, D. K. E. *Um Sistema Computacional para Geração e Adaptação de Malhas Não-Estruturadas Bidimensionais*. 78 f. Dissertação de Mestrado em Engenharia Mecânica - Universidade Federal de Pernambuco (UFPE), Recife-PE, 2001.
- CARVALHO, D. K. E. *Um Sistema Computacional Flexível para Geração e Adaptação de Malhas Não-Estruturadas Triangulares, Quadrilaterais e Mistas Bidimensionais*. Congresso Nacional de Engenharia Mecânica (CONEM 2002), João Pessoa, 2002a (em CD-ROM).
- CARVALHO, D. K. E.; LYRA, P. R. M.; WILLMERSDORF. *Towards A Numerical Reservoir Simulator Using an Unstructured Finite Volume Formulation with the Aid of High Performance Tools*. Segundo Workshop dos Programas de Formação de Recursos Humanos para o Setor de Petróleo e Gás da UFPE, Recife-PE. p.31-35, 2002b.
- CARVALHO, D. K. E.; LYRA, P. R. M.; WILLMERSDORF. *A First Step Towards a Petroleum Reservoir Simulator Using an Edge -Based Unstructured Finite Volume Formulation*. 2º Congresso Brasileiro de P&D em Petróleo e Gás Natural, Rio De Janeiro. 2003a.
- CARVALHO, D. K. E.; LYRA, P. R. M.; WILLMERSDORF; LIMA, R. C. F.; GUIMARÃES, C. S. C. *Uma formulação do Método dos Volumes Finitos em Malhas Não-Estruturadas para a Solução de Problemas de Difusão e Convecção-Difusão Bidimensionais*. 55ª Reunião Anual da Sociedade Brasileira para o Progresso da Ciência (SBPC 2003), Recife, 2003b.
- CARVALHO, D. K. E.; LYRA, P. R. M.; WILLMERSDORF, R. B.; ARAÚJO, F. S. *Solving Biphasic Immiscible Flows Through an Unstructured Edge-Based Finite Volume Formulation*. Congresso Íbero-Latino Americano em Métodos Computacionais em Engenharia (CILAMCE 2004), Recife-PE, 2004a.
- CARVALHO, D. K. E.; LYRA, P. R. M.; WILLMERSDORF, R. B.; ARAÚJO, F. S. *An Unstructured Edge-Based Finite Volume Formulation for the Solution of the Biphasic Flow of Oil and Water Through an IMPES Procedure*. Congresso Nacional de Engenharia Mecânica (CONEM 2004). Belém do Pará, 2004b (Em CD-ROM).
- CARVALHO, D. K. E.; WILLMERSDORF, R. B.; LYRA, P. R. M. *A Node-Centered Finite Volume Formulation for the Solution of Two-Phase Flows in Non-Homogeneous Porous Media*. International Journal for Numerical Methods in Fluids, p. 1-18, 2005a, (aceito, aguardando publicação).
- CARVALHO, D. K. E.; LYRA, P. R. M.; WILLMERSDORF, R. B.; ARAÚJO, F. S. *An Unstructured Edge-Based Finite Volume Formulation for Solving Immiscible Two-*

*Phase Flows in Porous Media*. Communications in Numerical Methods in Engineering, DOI: 10.1002/CNM.790, 2005b (no prelo).

CARVALHO, D. K. E.; LYRA, P. R. M.; WILLMERSDORF, R. B. *A Node Centered Finite Volume Formulation for the Solution of Oil – Water Displacements In Non-Homogeneous Porous Media*. 3º Congresso Brasileiro de P&D em Petroleo e Gás Natural. Salvador, 2005c, (Em CD-ROM).

CARVALHO, D. K. E.; LYRA, P. R. M.; WILLMERSDORF, R. B. *Two and Three Dimensional Simulation of Immiscible Two-Phase Flows in Porous Media Using an Edge-Based Control Volume Formulation*. Congresso Ibero-Latino Americano Em Métodos Computacionais Em Engenharia (CILAMCE 2005), Guarapari. 2005d (Em CD-ROM).

CHAVENT, G.; JAFFRE, J. In: *Mathematical Models and Finite Elements for Reservoir Simulation: Single Phase, Multiphase and Multicomponent Flows Through Porous Media*. Amsterdam, North-Holland, 1986.

CHEN, Z.; EWING, R.; ESPEDAL, M. *Multiphase Flow Simulation with Various Boundary Conditions*. Computational Methods in Water Resources Kluwer Academic Publishers, Netherlands, pp. 925-932, 1994.

CHEN, Z.; EWING, R. *Comparison Of Various Formulations Of Three-Phase Flow In Porous Media*. Journal of Computational Physics, v. 132, p. 362-373, 1997.

CHEN, Z.; HUAN, G.; LI, B.; LI, W.; ESPIN, D. *Comparison Of Practical Approaches To Reservoir Simulation*. 2<sup>nd</sup> Meeting on Reservoir Simulation, Buenos Aires, Argentina, 2002 (em CD-ROM).

CHEN, Z.; HUAN, G. *Numerical Experiments with Various Formulations for Two Phase Flow in Petroleum Reservoir*. Transport in Porous Media, v. 51, p. 89-102, 2003.

CHEN, Z.; HUAN, G.; LI, B. *An Improved IMPES Method For Two-Phase Flow in Porous Media*. Transport in Porous Media, v. 54, p. 361-376, 2004.

CRANK, J., In: *The Mathematics of Diffusion*. New York, Oxford University Press, 1973.

CRUMPTON, P. I. *Discretization and Multigrid Solution of Elliptic Equations with Mixed Derivative Terms and Strongly Discontinuous Coefficients*. Journal of Computational Physics, v. 116, p. 343-358, 1995.

CRUMPTON, P. I.; MOINIER, P.; GILES, M. B. T. J. *An Unstructured Algorithm for High Reynolds Number Flows on Highly Stretched Grids*. In: C. Taylor and J. T. Cross, (eds.), *Numerical Methods In Laminar and Turbulent Flow*, Pineridge Press, p. 561-572, 1997.

- DARWISH, M. S., MOULKALED, F. *TVD Schemes for Unstructured Grids*. International Journal of Heat and Mass Transfer. v. 46, p. 599-611, 2003.
- DOUGLAS JR. J. *Finite Difference Methods for Two-Phase Incompressible Flow in Porous Media*. Journal of Numerical Analysis (SIAM), v. 20, p. 681-697, 1983.
- DURLOFSKY, L. J. *A Triangle Based Mixed Finite Element-Finite Volume Technique for Modeling Two Phase Flow Through Porous Media*. Journal of Computational Physics, v. 105, p. 252-266, 1993.
- EDWARDS, M. G. *Cross Flow Tensors And Finite Volume Approximations with Deferred Correction*. Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering, v. 151, p. 143-161, 1998.
- EDWARDS, M. G.; ROGERS C. F. *Finite Volume Discretization with Imposed Flux Continuity for the General Tensor Pressure Equation*. Computational Geosciences 2, v. 2, p. 259-290, 1998.
- EDWARDS, M. G. *M-Matrix Flux Splitting for General Full Tensor Discretization Operators on Structured and Unstructured Grids*. Journal of Computational Physics, v. 160, p. 1-28, 2000.
- ERTEKIN, T.; ABOU-KASSEM, J. H.; KING, G. R. In: *Basic Applied Reservoir Simulation*. Richardson, TX, Society of Petroleum Engineers (SPE), 2001.
- EYMARD, R.; GALLOUET, T.; HERBIN, R. In: *Finite Volume Methods*, LATP (Pré-Publicação), Marselha, 1997.
- EYMARD, R. In: R.Herbin and D. Kröner, (eds.). *Finite Volume for Complex Applications III: Problems and Perspectives*. Two-Phase Flow in Porous Media and Finite Volume Schemes. Hermes Penton Science, p. 65-79, 2002.
- EWING, R. E. In: EWING, R. E. (editor), *The Mathematics of Reservoir Simulation*. Philadelphia, SIAM, 1983.
- FANCHI, J. R. In: *Principles of Applied Reservoir Simulation*. Boston, Gulf Professional Publishing, 2001.
- FORTUNA, A. O. In: *Técnicas Computacionais para Dinâmica dos Fluidos: Conceitos Básicos e Aplicações*. São Paulo, EDUSP, 2000.
- GARCIA, E. L. M. *Formulações Bi e Tri Dimensionais do Método dos Elementos Finitos para a Simulação Paralela de Escoamentos em Reservatórios de Petróleo*. Tese de Doutorado em Engenharia Civil - Universidade Federal do Rio de Janeiro (UFRJ), Rio de Janeiro-RJ, 1997.

- GEIGER, S.; MATTHAI, K.; ROBERTS S.; ZOPPOU, C. *Combining Finite Volume and Finite Element Methods to Simulate Fluid Flow in Geologic Media*. Australian & New Zealand Industrial and Applied Mathematics Journal, v. 44, p. c180-c201, 2003.
- GEIGER, S.; ROBERTS S.; MATTHAI, K.; ZOPPOU, C.; BURRI, A. *Combining Finite Element and Finite Volume for Efficient Multiphase Flow Simulations in Highly Heterogeneous and Structuraly Complex Geologic Media*. Geofluids, v. 4, p. 284-299, 2004.
- GRESHO, P. M.; SANI, R. L. In: *Incompressible Flow and the Finite Element Method: Volume One, Advection-Diffusion*. New York, Wiley & Sons, 2000.
- GUIMARÃES, C. S. *Modelagem Computacional da Biotransferência de Calor no Tratamento por Hipertermia em Tumores de Duodeno Através do Método dos Volumes Finitos em Malhas Não-Estruturadas*. 82 f. Dissertação de Mestrado em Engenharia Mecânica - Universidade Federal de Pernambuco (UFPE), Recife, Pernambuco, 2003.
- GUIMARÃES, C. S. C.; LIMA, R. C. F.; LYRA, P. R. M.; CARVALHO, D. K. E. *Aplicação de Uma Ferramenta Computacional Utilizando o Método dos Volumes Finitos em Malhas Não-Estruturadas na Simulação do Tratamento por Hipertermia em Tumores de Duodeno*. 55ª Reunião Anual da Sociedade Brasileira para o Progresso da Ciência (SBPC, 2003), Recife, 2003.
- HARTEN, A. *High Resolution Schemes for Conservation Laws*. Journal of Computational Physics v. 49, p. 357-393, 1983.
- HELMIG, R. In: *Multiphase Flow and Transport Processes in the Subsurface (A Contribution to the Modeling of Hydrosystems)*. Springer, Berlin, Germany, 1997.
- HELMIG, R.; HUBER R. *Comparison of Galerkin-Type Discretization Techniques for Two-Phase Flow Problems in Heterogeneous Porous Media*. Advances in Water Resources, v. 21, p. 697-711, 1998.
- HIRSCH, C. In: *Numerical Computation of Internal and External Flows: Volume I, Fundamentals of Numerical Discretization*. New York, Wiley & Sons, 1988.
- HIRSCH, C. In: *Numerical Computation of Internal and External Flows: Volume II, Computational Methods for Inviscid and Viscous Flows*. New York, Wiley & Sons, 1990.
- HUGUES, T. In: *The Finite Element Method: Linear Static and Dynamic Element Analysis*. Dover, Mineola, New York, 2000.
- HURTADO, F. S. V.; MALISKA, C. R.; SILVA, A. F. C.; CORDAZZO, J.; AMBRUS, J.; CONTESSI, B. A. *An Element-Based Finite Volume Formulation for Simulating Two-Phase Immiscible Displacements in Core Samples*. Proceedings of the 10<sup>th</sup> Brazilian Congress of Thermal Sciences and Engineering (ENCIT 2004), Rio de Janeiro, 2004.

- HYMAN, J.; SHASHKOV, M.; STEINBERG, S. *The Numerical Solution of Diffusion Problems in Heterogeneous Non-Isotropic Materials*. Journal of Computational Physics, v. 132, p. 130-148, 1997.
- JAMESON, A.; SCHMIDT, W.; TURKEL, E. *Numerical Simulation of Euler Equations by Finite Volume Methods Unising Runge-Kutta Time Stepping Schemes*. Technical Report, 81-1259, AIAA, Paper, 1981.
- KARLSEN K. H.; LIE K.-A.; RISEBRO N. H. *A Fast Level Set Method for Reservoir Simulation*. Reports in Applied Mathematics, University of Bergen, p. 1-17, 1999.
- KARLSEN K. H.; LIE K. A.; RISEBRO N. H. *A Fast Marching Method for Reservoir Simulation*. Computational Geosciences, v. 4, p. 185-206, 2000.
- KOVARIK, K. In: *Numerical Models in Grounwater Pollution*. New York, Springer, 2000.
- KLAUSEN R. A.; EIGESTAD, G. T. *Multi-Point Flux Approximations and Finite Element Methods: Practical Aspects of Discontinuous Media*. 9<sup>th</sup> European Conference on the Mathematics of Oil Recovery. Cannes, France, 2004.
- LEVEQUE, R. J. In: *Numerical Methods for Conservation Laws*. Berlin, Birkhauser, 1992.
- LEVEQUE, R. J. In: *Finite Volume Methods for Hyperbolic Problems*. Cambridge, Cambridge University Press, 2002.
- LEWIS R. W., MALAN, A. G. *Continuum Thermodynamic Modeling of Drying Capillary Particulate Materials via an Edge-Based Algorithm*. Computer Methods in Applied Mechanics v. 194, p. 2043-2057, 2005.
- LI, R.; CHEN, Z.; WU, W. In: *Generalized Finite Differences Methods for Differential Equations: Numerical Analysis of Finite Volume Methods*. New York, Marcel Dekker, 2000.
- LI, B.; CHEN, Z.; HUAN, G. *Control Volume Function Approximation Methods and Their Applications to Modeling Porous Media Flow*. Advances in Water Resources, v. 26, p. 435-444, 2003a.
- LI, B.; CHEN, Z.; HUAN, G. *The Sequential Solution Method for Black Oil Reservoir Simulation on Unstructured Grids*. Journal of Computational Physics, v. 192, p. 36-72, 2003b.
- LIMA, R. C. F.; LYRA, P. R. M.; SILVA, G. M. L. L.; CARVALHO, D. K. E. *Análise Térmica dos Tecidos Oculares Dotados de Implantes Retinianos Através da Utilização do Método dos Volumes Finitos em Malhas Não-Estruturadas*. Congresso Ibero-

- Latino Americano em Métodos Computacionais em Engenharia (CILAMCE 2004), Recife. 2004.
- LÖHNER, R. *Edges, stars, superedges and chains*. Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering, v. 111, p. 255-263, 1994.
- LÖHNER, R. In: *Applied DFD Techniques: An Introduction Based on Finite Element Methods*. New York, Wiley & Sons, 2001.
- LOULA, A. F. D.; GARCIA, E. L. M.; COUTINHO, A. L. G. A. *Miscible Displacement Simulation by Finite Element Methods in Distributed Memory Machines*. Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering, v. 174, p. 339-354, 1999.
- LYRA, P. R. M. *Unstructured Grid Adaptive Algorithms for Fluid Dynamics and Heat Conduction*. 332 f. Tese de Doutorado em Engenharia Civil, University of Wales, Swansea, 1994.
- LYRA, P. R. M.; MORGAN K. *A Review and Comparative Study of Upwind Biased Schemes for Compressible Flow Computation. Part III: Multidimensional Extension on Unstructured Grids*. Arch. Comput. Meth. Engng, v. 9, p. 207-256, 2002.
- LYRA, P. R. M.; LIMA, R. C. F. DE, GUIMARÃES, C. S. C., CARVALHO, D. K. E. *An Edge-Based Unstructured Finite Volume Procedure for the Numerical Analysis of Heat Conduction Applications*. Journal of the Brazilian Society of Mechanical Engineering. Brazil, v., 26, p. 160-169, 2004a.
- LYRA, P. R. M.; LIMA, R. C. F.; ; CARVALHO, D. K. E.; SILVA, G. M. L. L. *An Axisymmetric Finite Volume Formulation for the Solution of Heat Conduction Problems Using Unstructured Meshes*. Journal of the Brazilian Society of Mechanical Science., v. 27, p. 1-18, 2005.
- LUO, H.; BAUM, J. D.; LÖHNER, R. *An Improved Finite Volume Scheme for Compressible Flows on Unstructured Grids*. Technical Report AIAA-95-0348, p. 1-9, 1995.
- MALAN, A. G. *Investigation into the Continuum Thermodynamic Modeling of Investment Casting Shell-Mould Drying*. Tese de Doutorado em Engenharia Civil, University of Wales, Swansea, 2002.
- MALISKA, C. R. In: *Transferência de Calor e Mecânica dos Fluidos Computacional*. Rio de Janeiro, Livros Técnicos e Científicos (LTC), 2004.
- MALTA, S. C.; LOULA, A. F. D.; GARCIA, E. L. M. *A Post-Processing Technique to Approximate the Velocity Field in Miscible Displacement Simulations*. Laboratório Nacional de Computação Científica, (LNCC) Relatórios de Pesquisa e Desenvolvimento, No. 24/93, 1993.

- MARTINS, M. A. D. *Solução Iterativa em Paralelo de Sistemas de Equações do Método dos Elementos Finitos Empregando Estruturas de Dados por Arestas*. Dissertação de Mestrado em Engenharia Civil, Universidade Federal do Rio de Janeiro, (UFRJ), Rio de Janeiro - RJ, 1996.
- MATTAX, C. C.; DALTON, R. L. In: *Reservoir Simulation*. Richardson, TX, Society of Petroleum Engineers (SPE), 1990.
- MISHEV, I. D. *Finite Volume Methods on Voronoi Meshes*. Numerical Methods in Partial Differential Equations, v. 14, p. 193 – 212, 1998.
- MORTON, K. W., In: *Numerical Solution of Convection-Diffusion Problems*. London, Chapman & Hall, 1996.
- NORDBOTTEN, J. M., EIGESTAD G. T. *Discretization On Quadrilateral Grids With Improved Monotonicity Properties*. Journal of Computational Physics, v. 203, p. 744-760, 2005.
- NE-ZHENG SUN. *Mathematical Modeling of Ground Water Pollution*. Springer, 1995.
- PATANKAR, S. V., In: *Numerical Heat Transfer and Fluid Flow*. New York, Hemisphere Publishing Corporation, 1980.
- PEACEMAN, D. W., In: *Fundamentals of Numerical Reservoir Simulation*. New York, Elsevier, 1977.
- PERAIRE J., PEIRO, J., MORGAN, K *Finite Element Multigrid Solution of Euler Flows Past Installed Aero-Engines*. Journal of Computational Mechanics, v. 11, p. 433–451, 1993.
- PINTO, A. C. C. *Esquemas de Alta Resolução para Controle de Dispersão Numérica em Simulação de Reservatórios*. 206 f. Dissertação de Mestrado em Engenharia do Petróleo, Universidade Estadual de Campinas (UNICAMP), Campinas, São Paulo, 1991.
- PREVOST, M. *The Streamline Method for Unstructured Grids*. University of Stanford, Department of Petroleum Engineering, Technical Report, p. 1-49, 2001.
- REES, I. *Development of an Edge-Based Finite Volume Solver for Porous Media Applications*. 265 f. Tese de Doutorado em Engenharia Civil, University of Wales, Swansea, 2004.
- REES, I.; MASTERS, I.; MALAN, A. G.; LEWIS, R. W. *An Edge-Based Finite Volume Scheme for Saturated-Unsaturated Groundwater Flow*. Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering, v. 193, p. 4741-4759, 2004.

- ROE P. L. *Approximate Rieman Solvers, Parameters Vectors and Difference Schemes*. Journal of Computational Physics, v. 43, p. 357-372, 1981.
- SCHLUMBERGER INFORMATION SYSTEMS, *Eclipse Technical Description*, 2002.
- SILVA, G. M. L. L. *Análise da Biotransferência de Calor nos Tecidos Oculares Devido à Presença de Implantes Retinianos Através da Utilização do Método dos Volumes Finitos em Malhas Não-Estruturadas*. 59 f. Dissertação de Mestrado em Engenharia Mecânica - Universidade Federal de Pernambuco (UFPE), 2004.
- SILVA, G. M. L. L.; LIMA, R. C. F.; LYRA, P. R. M.; CARVALHO, D. K. E. Uma Formulação Axissimétrica do MVF dm Malhas Não-Estruturadas para Solução de Problemas Transientes de Transferência de Calor. Congresso Nacional de Engenharia Mecânica (CONEM 2004), Belém do Pará, 2004.
- SORENSEN, K. A. *A Multigrid Accelerated Procedure for The Solution Of Compressible Fluid Flows On Unstructured Hybrid Meshes*. 161 f. Tese de Doutorado em Engenharia Civil, University of Wales, Swansea, 2001.
- SOUZA, D. A. F.; COUTINHO, A. L. G. A.; ALVES, J. L. D. *Three Dimensional Finite Element Solutions of Immiscible Two-Phase Flow Through Porous Media*. Congresso Íbero-Latino Americano de Métodos Computacionais em Engenharia (CILAMCE 2004), (Em CD-ROM), 2004.
- SVÄRD M., NORDSTRÖM, J. *A Stable and Accurate Summation by Parts Finite Volume Formulation of the Laplacian Operator*. Uppsala Universitet, Institutionen för Informationsteknologi, Technical Report 003, 2003.
- TANNEHILL, J. C.; ANDERSON, D. A.; PLETCHER, H. R., In: *Computational Fluid Mechanics and Heat Transfer*. Philadelphia, Taylor & Francis, 1997.
- THIELE, M. R.; BATYCKY, R. P.; IDING, M.; BLUNT, M. *Extension of Streamline-Based Dual Porosity Flow Simulation to Realistic Geology*. 9<sup>th</sup> European Congress on the Mathematics of Oil Recovery, 2004.
- YEH, G. T. *Orthogonal-Upstream Finite Element Approach to Modeling Aquifer Contaminant Transport*. Water Resources Research. v. 22, p. 952-964, 1986
- WANG, H. F.; ANDERSON, M. P. In: *Introduction to Groundwater Modeling: Finite Differences and Finite Elements Methods*. New York, Academic Press, 1983.
- WHEELER, M. F.; RUSSEL, T. F. In: EWING, R. E. (editor), *The Mathematics of Reservoir Simulation*. Philadelphia, SIAM, 1983.
- WHEELER, M. F. In: *Numerical Simulation in Oil Recovery*. New York, Springer, 1988.

- WILLMERSDORF, R. B.; LYRA, P. R. M.; CARVALHO, D. K. E. *Unstructured Control Volume Formulation for Solving Biphasic Flows in Porous Media*. 13<sup>th</sup> Finite Elements in Flow Problems 2005 (FEF2005), 2005, Swansea, Reino Unido. 2005.
- WOLL, C.; CORREIA, A. C.; CARVALHO, D. K. E.; WILLMERSDORF, R. B.; LYRA, P. R. M. *An Object-Oriented Implementation of the Finite Volume Method with an Edge-Based Data Structure for a Parallel Computing Environment*. Congresso Ibero-Latino Americano em Métodos Computacionais em Engenharia (CILAMCE 2004), Recife. 2004.
- VAN LEER, B. *Towards the Ultimate Conservative Difference Scheme. II- Monotonicity and Conservation Combined in a Second Order Scheme*. Journal Computational Physics, p. 361-370, 1974.
- VARGA, R. S. *Matrix Iterative Analysis*. Prentice-Hall, Englewood Cliffs, 1962.
- VERMA, S. K.; AZIZ, K. *Three Dimensional Flexible Grids for Reservoir Simulation*. Fifth European Conference on the Mathematics of Oil Recovery, Leoben, Austria, p. 1-13, 1996.
- VERMA, S. K. *Flexible Grids for Reservoir Simulation*, Stanford University, Stanford, USA, 1996.
- ZHENG, C.; BENNETT, G. D. *Applied Contaminant Transport Modeling*. New York, Wiley & Sons, 2002.
- ZIENKIEWICZ, O. C.; MORGAN K., In: *Finite Elements and Approximations*. New York, Wiley & Sons, 1983.