

UNIVERSIDADE FEDERAL DE PERNAMBUCO
CENTRO DE TECNOLOGIA E GEOSCIÊNCIAS
PROGRAMA DE RECURSOS HUMANOS DA ANP – PRH26



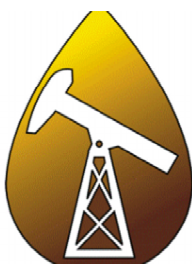
TESE DE DOUTORAMENTO

**Simulação Numérica de Escoamento Bifásico em Reservatórios de
Petróleo Heterogêneos e Anisotrópicos Utilizando um Método de
Volumes Finitos “Verdadeiramente” Multidimensional com
Aproximação de Alta Ordem**

Bolsista DSc. Márcio Rodrigo de Araújo Souza

Orientador: Prof. Paulo Roberto Maciel Lyra (Ph.D.)

Co-Orientador: Prof. Darlan Karlo Elisiário de Carvalho (DSc.)



Recife, 2015

**UNIVERSIDADE FEDERAL DE PERNAMBUCO
CENTRO DE TECNOLOGIA E GEOSCIÊNCIAS
PROGRAMA DE PÓS-GRADUAÇÃO EM ENGENHARIA CIVIL**



**Simulação Numérica de Escoamento Bifásico em Reservatórios de
Petróleo Heterogêneos e Anisotrópicos Utilizando um Método de
Volumes Finitos “Verdadeiramente” Multidimensional com
Aproximação de Alta Ordem**

Márcio Rodrigo de Araújo Souza

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:
Simulação e Gerenciamento de Reservatórios de Petróleo

Paulo Roberto Maciel Lyra
(Orientador)

Recife, Pernambuco, Brasil
Setembro de 2015

Catálogo na fonte
Bibliotecária: Rosineide Mesquita Gonçalves Luz / CRB4-1361 (BCTG)

- S729s Souza, Márcio Rodrigo de Araújo.
Simulação Numérica de Escoamento Bifásico em reservatório de Petróleo Heterogêneos e Anisotrópicos utilizando um Método de Volumes Finitos “Verdadeiramente” Multidimensional com Aproximação de Alta Ordem / Márcio Rodrigo de Araújo Souza. – Recife: O Autor, 2015.
257fol. il., figs., gráfs., tabs.
- Orientador: Prof. Paulo Roberto Maciel Lyra (Ph.D.).
Co-orientador: Prof. Dalan Karlo Elisiário de Carvalho (MSc.).
Tese (Doutorado) – Universidade Federal de Pernambuco. CTG.
Programa de Pós-Graduação em Engenharia Civil. Programa de Recursos Humanos da ANP-PRH26, 2015.
Inclui Referências.
1. Engenharia Civil. 2. Anisotropia e Heterogeneidade. 3. Escoamento Bifásico (óleo e água). 4. Reservatório de Petróleo. 5. MPFA. 6. Multidimensional Limiting Process (MLP). 7. Fluxo não Convexo. 8. Método Verdadeiramente Multidimensionais. 9. Correção de Entropia. I. Lyra, Paulo Roberto Maciel (Orientador). II. Carvalho, Darlan Karlo Elisiário de (Co-orientador). III. Título.



UNIVERSIDADE FEDERAL DE PERNAMBUCO
PROGRAMA DE PÓS-GRADUAÇÃO EM ENGENHARIA CIVIL

A comissão examinadora da Defesa de Tese de Doutorado

**SIMULAÇÃO NUMÉRICA DE ESCOAMENTO BIFÁSICO EM RESERVATÓRIOS
DE PETRÓLEO HETEROGÊNEOS E ANISOTRÓPICOS UTILIZANDO UM
MÉTODO DE VOLUMES FINITOS “VERDADEIRAMENTE”
MULTIDIMENSIONAL COM APROXIMAÇÃO DE ALTA ORDEM**

defendida por

Márcio Rodrigo de Araújo Souza

Considera o candidato APROVADO

Recife, 22 de setembro de 2015

Orientadores:

Prof. Dr. Paulo Roberto Maciel Lyra - UFPE
(orientador)

Prof. Dr. Darlan Karlo Elisiário de Carvalho - UFPE
(co-orientador)

Banca Examinadora:

Prof. Dr. Paulo Roberto Maciel Lyra - UFPE
(orientador)

Prof. Dr. Clóvis Raimundo Maliska - UFSC
(examinador externo)

Dr. José Roberto Pereira Rodrigues – Petrobras
(examinador externo)

Prof. Dr. Igor Fernandes Gomes – UFPE
(examinador externo)

Prof. Dr. Ramiro Brito Willmersdorf – UFPE
(examinador interno)

Dedico este trabalho à memória de minha filha Leila, de quem lembro todos os dias e que durante oito meses foi o motivo maior de minhas alegrias.

À minha filha Nara e minha esposa Jennifer que são a inspiração para tudo que faço.

À memória dos professores Luciano Bet e Francisco Pontes pelo incentivo e protagonismo em importantes momentos da minha jovem carreira acadêmica.

Agradecimentos

Ao longo desse processo, e até mesmo antes, contei com inúmeras pessoas que me ajudaram imensamente, mesmo sem saber. Outras tiveram uma atuação militante e foram decisivas para o melhor desfecho dessa experiência. Então agradeço com muito carinho:

àqueles que me guiaram até aqui: o professor **Ângelo Roncalli**, que me deu a oportunidade da iniciação científica; o professor **João Alves de Lima**, que me orientou no mestrado e apontou os primeiros caminhos da vida acadêmica; o professor **Luciano Bet**, em memória, pelo incentivo quando dizia que eu seria doutor e professor, ainda nos primeiros anos de graduação;

àqueles que se dedicaram para que eu conseguisse tempo para estar aqui: os professores **José Maurício Gurgel** e **Francisco Pontes** (Chicão), em memória, e o professor **Carlos Antônio Cabral**, pela dedicação e empenho em conseguir minha liberação da UFPB;

também agradeço aos colegas que me ajudaram a ficar um pouquinho mais nesse período de afastamento: todos **os colegas do Departamento de Engenharia de Energias Renováveis** e, em especial, **o comando de greve da UFPB**, fundamental para a sobrevivência do meu trabalho nesses últimos meses.

ao meu amor, **Jennifer Borges**, para quem dedico esse trabalho. Ela sempre está comigo, nas melhores e piores horas. É o meu equilíbrio;

à minha mãe, **Francisca**, pela dedicação de toda uma vida e palavras de incentivo;

aos amigos que fiz, nas ciências humanas e desumanas durante minha estada no Recife: os amigos **Joice**, **Cyntia**, **Eugênia**, **Rogério**, **Camila** e **Sueli Leal** (orientadora de Jennifer); os companheiros inesquecíveis de Labcom e PadMec com que trabalhei mais intensamente: **Fernando Contreras**, **Gustavo Galindez**, **Marcelo Alex**, **Carla Perestrelo**, **Lorena Monteiro**, **Braian Schneider**, **Alberto “Muchacho”**, **Vitor Luciola** e **Luiz Eduardo**, que por algum tempo, foi, sem dúvida, meu terceiro orientador.

aos professores com quem convivi nesses quatro anos e que me deram grandes contribuições: **Silvana Afonso**, pelos primeiros passos no Matlab (minha ferramenta de trabalho), **Igor Gomes** e **Antônio Barbosa** pelas constantes palavras de incentivo nos corredores e salas de aula, **João Adauto** e **Haydon Mort**, pelo incentivo e presteza, sempre que precisei e **Ezio da Rocha**, por me mostrar que Engenharia é Filosofia;

aos professores que não são orientadores e se dispuseram a contribuir com esse trabalho: **Clovis Maliska**, **José Roberto**, **Ramiro Willmersdorf**, **Igor Gomes**, **Leonardo Guimarães** e **Alessandro Romário**.

Também agradeço à rede temática **SIGER**, ao **PRH-26**, a **CMG Foundation** e aos órgãos de fomento **CNPq** e **ANP** pelo apoio financeiro e de material.

Por fim, um agradecimento especial a quem devo cada página desse trabalho: **Paulo Lyra**, (meu orientador) e **Darlan Carvalho** (meu treinador), pela dedicação ao meu desenvolvimento, como acadêmico, e desenvolvimento do presente trabalho. Também agradeço aos dois pela amizade em momentos difíceis e principalmente pela paciência com minhas limitações.

Resumo

Sob certas hipóteses simplificadoras, o modelo matemático que descreve o escoamento de água e óleo em reservatórios de petróleo pode ser representado por um sistema não linear de Equações Diferenciais Parciais composto por uma equação elíptica de pressão (fluxo) e uma equação hiperbólica de saturação (transporte). Devido a complexidades na modelagem de ambientes deposicionais, nos quais são incluídos camadas inclinadas, canais, falhas e poços inclinados, há uma dificuldade de se construir um modelo que represente adequadamente certas características dos reservatórios, especialmente quando malhas estruturadas são usadas (cartesianas ou *corner point*). Além disso, a modelagem do escoamento multifásico nessas estruturas geológicas incluem descontinuidades na variável e instabilidades no escoamento, associadas à elevadas razões de mobilidade e efeitos de orientação de malha. Isso representa um grande desafio do ponto de vista numérico. No presente trabalho, uma formulação fundamentada no Método de Volumes Finitos é estudada e proposta para discretizar as equações elíptica de pressão e hiperbólica de saturação. Para resolver a equação de pressão três formulações robustas, com aproximação dos fluxos por múltiplos pontos são estudadas. Essas formulações são abeis para lidar com tensores de permeabilidade completos e malhas poligonais arbitrárias, sendo portanto uma generalização de métodos mais tradicionais com aproximação do fluxo por apenas dois pontos. A discretização da equação de saturação é feita com duas abordagens com característica multidimensional. Em uma abordagem mais convencional, os fluxos numéricos são extrapolados diretamente nas superfícies de controle por uma aproximação de alta resolução no espaço (2ª a 4ª ordem) usando uma estratégia do tipo MUSCL. Uma estratégia baseada na Técnica de Mínimos Quadrados é usada para a reconstrução polinomial. Em uma segunda abordagem, uma variação de uma esquema numérico Verdadeiramente Multidimensional é proposto. Esse esquema diminui o efeito de orientação de malha, especialmente para malhas ortogonais, mesmo embora alguma falta de robustez possa ser observada pra malhas excessivamente distorcidas. Nesse tipo de formulação, os fluxos numéricos são calculados de uma forma multidimensional. Consiste em uma combinação convexa de valores de saturação ou fluxo fracionário, seguindo a orientação do escoamento através do domínio computacional. No entanto, a maioria dos esquemas numéricos achados na literatura tem aproximação apenas de primeira ordem no espaço e requer uma solução implícita de sistemas algébricos locais. Adicionalmente, no presente texto, uma forma modificada desses esquemas “Verdadeiramente” Multidimensionais é proposta em um contexto centrado na célula. Nesse caso, os fluxos numéricos multidimensionais são calculados explicitamente usando aproximações de alta ordem no espaço. Para o esquema proposto, a robustez e o caráter multidimensional também leva em conta a distorção da malha por meio de uma ponderação adaptativa. Essa ponderação regula a característica multidimensional da formulação de acordo com a distorção da malha. Claramente, os efeitos de orientação de malha são reduzidos. A supressão de oscilações espúrias, típicas de aproximações de alta ordem, são obtidas usando, pela primeira vez no contexto de simulação de reservatórios, uma estratégia de limitação multidimensional ou *Multidimensional Limiting Process* (MLP). Essa estratégia garante soluções monótonas e podem ser usadas em qualquer malha poligonal, sendo naturalmente aplicada em aproximações de ordem arbitrária. Por fim, de modo a garantir soluções convergentes, mesmo para problemas tipicamente não convexos, associados ao modelo de Buckley-Leverett, uma estratégia robusta de correção de entropia é empregada. O desempenho dessas formulações é verificado com a solução de problemas relevantes achados na literatura.

Palavras chave: Anisotropia e heterogeneidade. Escoamento bifásico (óleo e água). Reservatórios de petróleo. MPFA. Multidimensional Limiting Process (MLP). Fluxo não convexo. Métodos verdadeiramente multidimensionais. Correção de entropia.

Abstract

Under certain simplifying assumptions, the problem that describes the fluid flow of oil and water in heterogeneous and anisotropic petroleum reservoir can be described by a system of non-linear partial differential equations that comprises an elliptic pressure equation (flow) and a hyperbolic saturation equation (transport). Due to the modeling of complex depositional environments, including inclined laminated layers, channels, fractures, faults and the geometrical modeling of deviated wells, it is difficult to properly build and handle the Reservoir Characterization Process (RCM), particularly by using structured meshes (cartesian or corner point), which is the current standard in petroleum reservoir simulators. Besides, the multi-phase flow in such geological structures includes the proper modeling of water saturation shocks and flow instabilities associated to high mobility ratios and Grid Orientation Effects (GOE), posing a great challenge from a numerical point of view. In this work, a Full Finite Volume Formulation is studied and proposed to discretize both, the elliptic pressure and the hyperbolic saturation equations. To solve the pressure equation, we study and use three robust Multipoint Flux Approximation Methods (MPFA) that are able to deal with full permeability tensors and arbitrary polygonal meshes, making it relatively easy to handle complex geological structures, inclined wells and mesh adaptivity in a natural way. To discretize the saturation equation, two different multidimensional approaches are employed. In a more conventional approach, the numerical fluxes are extrapolated directly on the control surfaces for a higher resolution approximation in space (2nd to 4th order) by a MUSCL (Monotone Upstream Centered Scheme for Conservation Laws) procedure. A least squares based strategy is employed for the polynomial reconstruction. In a second approach, a variation of a “Truly” Multidimensional Finite Volume method is proposed. This scheme diminishes GOE, especially for orthogonal grids, even though some lack of robustness can be observed for extremely distorted meshes. In this type of scheme, the numerical flux is computed in each control surface in a multidimensional way, by a convex combination of the saturation or the fractional flow values, following the approximate wave orientation throughout the computational domain. However, the majority of the schemes found in literature is only first order accurate in space and demand the implicit solution of local conservation problems. In the present text, a Modified Truly Multidimensional Finite Volume Method (MTM-FVM) is proposed in a cell centered context. The truly multidimensional numerical fluxes are explicitly computed using higher order accuracy in space. For the proposed scheme, the robustness and the multidimensional character of the aforementioned MTM-FVM explicitly takes into account the angular distortion of the computational mesh by means of an adaptive weight, that tunes the multidimensional character of the formulation according to the grid distortion, clearly diminishing GOE. The suppression of the spurious oscillations, typical from higher order schemes, is achieved by using for the first time in the context of reservoir simulation a Multidimensional Limiting Process (MLP). The MLP strategy formally guarantees monotone solutions and can be used with any polygonal mesh and arbitrary orders of approximation. Finally, in order to guarantee physically meaningful solutions, a robust “entropy fix” strategy is employed. This produces convergent solutions even for the typical non-convex flux functions that are associated to the Buckley-Leverett problem. The performance of the proposed full finite volume formulation is verified by solving some relevant benchmark problems.

Key words: Oil and water displacements. High order finite volume methods. Multipoint flux approximation methods. Multidimensional Limiting Process (MLP). Truly multidimensional methods. Entropy fix.

Sumário

1. Introdução.....	29
1.1. Apresentação	29
1.2. Revisão Bibliográfica	31
1.3. Objetivos	39
1.4. Contribuições do Trabalho	40
1.5. Escopo do Trabalho	41
2. Modelo Matemático	43
2.1. Introdução	43
2.2. Conservação da Massa e Lei de Darcy	43
2.3. Escoamento Bifásico em Rochas Reservatório	48
2.4. Modelos Simplificados	51
2.4.1. Escoamento Monofásico	51
2.4.2. Modelo de Buckley-Leverett	51
3. Formulação Numérica	53
3.1. Introdução	53
3.2. Estratégia IMPES	53
3.3. Equação de Pressão na Forma Discreta	55
3.3.1. Aproximação das Mobilidades	57
3.3.2. Método de Volumes Finitos com Aproximação do Fluxo por Dois Pontos (TPFA)	58
3.3.3. Método de Volumes Finitos com Aproximação do Fluxo por Múltiplos Pontos (MPFA)	61
Suporte Triangular para a Pressão: MPFA-O	62
Suporte Completo para a Pressão: MPFA-FPS e MPFA- <i>Enriched</i>	67
Condições de Contorno	80
3.4. Equação de Saturação na Forma Discreta	82
3.4.1. Discretização no Tempo	83
3.4.2. Tratamento de Poços	85
3.4.3. Esquemas TVD	88
3.4.4. Aproximações de Alta Ordem com uma Estratégia do Tipo MUSCL	89
Reconstrução da Saturação: Técnicas Disponíveis	91
Reconstrução Baseada no Método dos Mínimos Quadrados	92
Aspectos Gerais de Funções Limitadoras	93
Funções Limitadoras de Face	95
Funções Limitadoras de Volume de Controle	99
Procedimento Multidimensional de Limitação (Estratégia MLP)	101
3.4.5. Fluxo Numérico e Resolvedores Aproximados de Riemann	109
3.4.6. Formulações Verdadeiramente Multidimensionais	113
3.4.7. Estado da Arte para Formulações Verdadeiramente Multidimen- sionais (TM)	115
Estratégia Verdadeiramente Multidimensional com Coeficientes Explícitos (TMSEC-1)	123

Estratégia Verdadeiramente Multidimensional com Coeficientes Explícitos (TMSEC-2)	127
Comparação Entre as Estratégias TMSIC, TMSEC-1 e TMSEC-2	131
Modificação para Malhas Distorcidas	136
4. Aplicações	139
4.1. Introdução	139
4.2. Escoamento Monofásico	140
4.2.1. Escoamento Monofásico em Reservatório Heterogêneo e Isotrópico	141
4.2.2. Escoamento Monofásico em Reservatório Heterogêneo e Levemente Anisotrópico	142
4.2.3. Escoamento Monofásico em Reservatório Heterogêneo e Muito Anisotrópico com Furo Quadrado	147
4.3. Escoamento Bifásico (água e óleo)	152
4.3.1. Problema de Buckley-Leverett	152
Verificação da Influência da Gravidade no Modelo de Buckley-Leverett	158
4.3.2. Escoamento Bifásico em $\frac{1}{4}$ de Cinco Poços em Reservatório Isotrópico e Homogêneo	161
4.3.3. Escoamento Bifásico de Água e Óleo em Reservatório Isotrópico e Muito Heterogêneo	165
4.3.4. Escoamento Bifásico de Água e Óleo (Tipo Pistão) em Reservatório Homogêneo e Isotrópico	170
4.3.5. Escoamento Bifásico de Água e Óleo em Reservatório Homogêneo e Isotrópico com Três poços	178
4.3.6. Escoamento Bifásico de Água e Óleo em Reservatório Homogêneo e Anisotrópico	185
4.3.7. Escoamento Bifásico de Água e Óleo em Reservatório Análogo Heterogêneo e Anisotrópico	189
5. Conclusões e Trabalhos Futuros	192
5.1. Conclusões	192
5.2. Trabalhos Futuros	195
6. Apêndices	197
6.1. Conceitos Fundamentais sobre Equações Hiperbólicas	197
6.2. Gradiente de Pressão nos Esquemas Numéricos MPFA	203
6.3. Estratégia de Reconstrução para Aproximações de Alta Ordem	213
6.4. Dados Complementares aos Exemplos Numéricos	224
7. Referências	240

Lista de Símbolos

Alfabeto Árábico

A_r	Área da seção transversal em uma amostra de rocha circular
$\mathcal{G}_{j,\hat{L}}^{MLP}$	Função limitadora do tipo MLP para o vértice j pertencente ao volume de controle genérico $\hat{L}$
c	Valor paramétrico para o volume de controle auxiliar no esquema numérico MPFA-FPS
C	Número de Courant
C_{equiv}	Número de Courant equivalente
$\vec{d}_{\hat{L}\hat{R}}$	Vetor posição representando a distância entre dois centroides $\hat{L}$ e $\hat{R}$
f_i	Fluxo fracionário da fase i
$\tilde{f}_w$	Fluxo fracionário TM com aproximação de 1ª ordem
$\hat{f}_w$	Fluxo fracionário TM com aproximação de 2ª ordem
$\vec{F}_w$	Fluxo de água
$\vec{\mathcal{F}}_{IJ}$	Fluxo numérico na superfície IJ
$\vec{g}$	Vetor aceleração da gravidade
$\mathcal{G}$	Parâmetro adimensional associado à gravidade
$k_{i,max}$	Valor multiplicado máximo para a fase i , empregado na relação constitutiva
$\tilde{H}$	Matriz Hessiana
k_{ri}	Permeabilidade relativa da fase i
$\tilde{K}$	Permeabilidade da rocha
κ	Grau do polinômio aproximador
M	Razão de mobilidade
$\vec{n}$	Vetor unitário
n_i	Expoente do modelo de Brooks-Corey para a fase i
$\vec{N}_{IJ}$	Vetor normal a uma superfície IJ
$\mathcal{N}_{HE}$	Número de meias faces em uma região de interação
$\mathcal{N}_{UHE}$	Número de meias faces à montante em uma região de interação
$\mathcal{N}_v$	Número de volumes de controle vizinhos a um vértice
$\mathcal{N}_{VC}$	Número de volumes de controle
p_i	Pressão da fase i
q_i	Termo de fonte ou sumidouro para cada fase i
Q	Termo de fonte ou sumidouro específico
$\bar{Q}_{\hat{L}}$	Termo de fonte ou sumidouro específico integrado sobre o volume de controle genérico $\hat{L}$
r	Razão entre gradientes, usada no diagrama de Sweby
$\mathcal{r}$	Fator de relaxação empregado no poço produtor
$\mathcal{R}_{ij}^{\hat{L}}$	Componente do tensor de Piola para um volume de controle genérico

	$\hat{L}$ no esquema numérico MPFA- <i>Enriched</i>
S_e	Saturação normalizada
S_o	Saturação de óleo
S_w	Saturação de água
S_{wi}	Saturação irreduzível de água
S_{or}	Saturação residual de óleo
$\bar{S}_{w_{\hat{L}}}$	Saturação média projetado sobre um volume de controle genérico $\hat{L}$
$\tilde{S}_{w_{\hat{L}}}$	Saturação extrapolada em algum ponto do volume de controle genérico $\hat{L}$
$\tilde{S}_w$	Saturação de água TM com aproximação de 1ª ordem
$\hat{S}_w$	Saturação de água TM com aproximação de 2ª ordem
$S_{w_{\hat{L}}}^*$	Saturação de água obtida em equação preditora (passo fracionário) para um volume de controle genérico $\hat{L}$
T	Tempo
$\mathcal{T}_{ij}^{\hat{L}}$	Componente do tensor de Piola para um volume de controle genérico $\hat{L}$ no esquema numérico MPFA-FPS
$\vec{v}$	Vetor velocidade total
$\vec{v}_i$	Vetor velocidade da fase i
V_{S_i}	Volume ocupado pelo componente i
$V_{\text{Reservatório}}$	Volume do reservatório
V_{Vazios}	Volume de vazios
$\mathcal{W}$	Peso para combinação linear convexa
x	Coordenada na direção x

Alfabeto Grego

α	Velocidade característica
ξ	Coordenada no espaço de referência
ζ	Parâmetro livre da relação de van Genuchten
ρ_i	Massa específica da fase i
ε	Valor paramétrico para o volume de controle auxiliar no esquema numérico MPFA- <i>Enriched</i>
$\bar{\rho}$	Massa específica média
ϕ	Porosidade da rocha
λ	Mobilidade total
θ	Ângulo entre duas meias faces
$\psi_{\hat{L}}$	Função limitadora para um volume de controle genérico $\hat{L}$
ψ_{IJ}	Função limitadora para uma face genérica IJ
λ_i	Mobilidade da fase i
μ_i	Viscosidade da fase i
η	Coordenada no espaço de referência
τ	Ponto de quadratura no volume de controle auxiliar no esquema numérico MPFA-FPS

Γ	Contorno do domínio
Γ_D	Contorno de Dirichlet
Γ_I	Contorno de interno associado ao poço injetor
$\Gamma_{\hat{L}}$	Contorno de um volume de controle genérico $\hat{L}$
Γ_N	Contorno de Neumann
Γ_P	Contorno de interno associado ao poço produtor
$\Theta_{\hat{L}}$	Limitador MLP para aproximações com ordem maior do que dois, associado a um volume de controle genérico $\hat{L}$
Δt	Intervalo de tempo
Δt_{Aux}	Intervalo de tempo auxiliar
Ω	Domínio computacional
Λ	Razão entre vazões nas faces à montante e avaliada
$\Omega_{\hat{L}}$	Volume do volume de controle genérico $\hat{L}$
$\Psi_{\hat{L}}$	Combinação entre limitadores de volume de controle e de face para um volume de controle genérico $\hat{L}$
χ	Fator de correção para malhas distorcidas
$\vec{\nabla}$	Operador gradiente

Matrizes e Vetores

A	Matriz, sem significado físico, com uma coleção de termos conhecidos
J	Matriz Jacobiana
M_G	Matriz do sistema algébrico global nos esquemas numéricos MPFA
p_G	Vetor de termos desconhecidos do sistema algébrico global nos esquemas numéricos MPFA
u_G	Vetor de termos conhecidos do sistema algébrico global nos esquemas numéricos MPFA
v	Vetor, sem significado físico, com uma lista de vazões

Lista de Acrônimos e Siglas

CFL	Courant-Friedrichs-Levy
CPR	<i>Correction Procedure via Reconstruction</i>
CVFEM	<i>Control Volume Finite Element Method</i>
DG	<i>Discontinuous Galerkin</i>
DMP	<i>Discrete Maximum Principle</i>
EbFVM	<i>Element Based Finite Volume Method</i>
EC	Estêncil Convencional
EDP	Equações Diferenciais Parciais
EV	Estêncil com Viés
ENO	<i>Essentially Non-Oscillatory</i>
FCT	<i>Flux Corrected Transport</i>
FDM	<i>Finite Difference Method</i>
FEM	<i>Finite Element Method</i>
FIM	<i>Fully Implicit Method</i>
FPR	Função Polinomial Reconstutora
FPS	<i>Full Pressure Support</i>
FVM	<i>Finite Volume Method</i>
GOE	<i>Grid Orientation Effects</i>
HF	<i>Half Faces</i>
IMEX	<i>IMplicit-EXplicit</i>
IMPES	<i>Implicit Pressure-Explicit Saturation</i>
LLF	<i>Local Lax-Friedrichs</i>
MLP	<i>Multidimensional Limiting Process</i>
MOOD	<i>Multidimensional Optimal Order Detection</i>
MPFA	<i>Multi-Point Flux Approximation</i>
M-SMU	<i>Modified Smooth Multidimensional Upstream</i>
MUSCL	<i>Monotonic Upstream-Centered Scheme for Conservation Laws</i>
PAD	<i>Physical Admissible Detection</i>
SI	Sistema Internacional
SFV	<i>Spectral Finite Volume</i>
SFD	<i>Spectral Finite Difference</i>
SKUA	<i>Subsurface Knowledge Unified Approach</i>
SMU	<i>Smooth Multidimensional Upstream</i>
TM	<i>Truly Multidimensional</i>
TMSEC-1	<i>Truly Multidimensional Scheme with Explicit Coefficients 1</i>
TMSEC-2	<i>Truly Multidimensional Scheme with Explicit Coefficients 2</i>
TMSIC	<i>Truly Multidimensional Scheme with Implicit Coefficients</i>
TMU	<i>Tight Multidimensional Upstream</i>
TPFA	<i>Two-Point Flux Approximation</i>
TV	<i>Total Variation</i>
UHF	<i>Upstream Half Faces</i>
VPI	Volume Poroso Injetado

Lista de Figuras

Capítulo 2

Figura 1. Volume Elementar Representativo para uma rocha reservatório saturada com água e óleo com indicação das vazões mássicas.

Figura 2. Domínio computacional Ω com indicação de fronteiras de Dirichlet Γ_D e Neumann Γ_N ($\Gamma = \Gamma_D + \Gamma_N$) e poços: injetor Γ_I e produtor Γ_P .

Figura 3. Curvas de permeabilidade relativa em função da saturação de água com razão de mobilidade $M = 5$: (a) para o modelo de Brooks-Corey, utilizando vários expoentes; (b) para modelo de van Genushten; (c) para o modelo do tipo pistão com vários valores de razão de mobilidades, M .

Figura 4. Curvas de fluxo unidimensional F_w para diferentes razões de mobilidade e expoentes do modelo de Brooks-Corey: (a) sem influência da gravidade; (b) com influência da gravidade com $\mathcal{G} = 2$ (Durlflosky, 1993).

Figura 5. Reservatório simplificado para o modelo de Buckley-Leverett.

Capítulo 3

Figura 6. Algoritmo da estratégia IMPES.

Figura 7. Domínio apresentado na figura 2 na forma discreta: (a) indicação do volume de controle $\Omega_{\hat{I}}$; (b) indicação da superfície de controle $\Gamma_{\hat{I}}$ e normal à face IJ , $\vec{N}_{IJ}$.

Figura 8. Aproximação da mobilidade total na face IJ : (a) do tipo *upwind*; (b) obtida com uma média ponderada pelos volumes de controle compartilhados pela face IJ ; (c) obtida com a média das mobilidades atribuídas aos vértices, calculadas por meio de uma média ponderada pelos volumes de controle da vizinhança próxima.

Figura 9. Domínio unidimensional usado para descrição do esquema numérico do tipo TPFA.

Figura 10. Situações em que o TPFA produz soluções não convergentes: (a) tensor de permeabilidade diagonal, porém não alinhado com a orientação da malha; (b) malha cartesiana com tensor não diagonal.

Figura 11. Região de interação: (a) Fragmento da malha com região de interação associada ao vértice I ; (b) Indicação das meias-arestas onde as vazões são calculadas.

Figura 12. Regiões de suporte de pressão para o MPFA-O: (a) duas regiões de interação associadas aos vértices I e J nas quais o fluxo sobre a aresta IJ é calculado; (b) área de suporte (tons escuros) da aproximação linear da pressão para cada região de interação.

Figura 13. Áreas das sub-regiões de interação “suportadas” pela função de forma que aproxima o campo de pressão: (a) função linear no MPFA-O; (b) função bilinear no MPFA-FPS.

Figura 14. Ponto de quadratura onde a continuidade dos fluxos é imposta para a meia face $\bar{EI}$ (i.e., onde o fluxo utilizado no cálculo da vazão é calculado): (a) representação da vazão calculada no ponto de quadratura da meia aresta; (b) detalhe com outros possíveis pontos de quadratura q .

Figura 15. Volume de controle auxiliar no esquema MPFA-FPS: (a) fragmento de malha com região de interação associada ao vértice I ; (b) indicação das vazões através das superfícies de controle auxiliares.

Figura 16. Parametrização do volume de controle auxiliar para o MPFA-FPS: (a) Localização do ponto de quadratura através de τ e volume de controle auxiliar $c = 0,8$; (b) Volume de controle auxiliar com $c = 0,1$.

Figura 17. Volume de controle auxiliar no esquema MPFA-Enriched: (a) Fragmento de malha com região de Interação associada ao vértice I ; (b) Indicação dos fluxos através das superfícies do volume de controle auxiliar.

Figura 18. Condição de pressão prescrita (Dirichlet): (a) malha com a região de interação avaliada; (b) indicação das arestas com condição de contorno de Dirichlet para os esquemas MPFA-FPS; (c) indicação das arestas com condição de contorno de Dirichlet para os esquemas MPFA-Enriched.

Figura 19. Condição de fluxo prescrito (Neumann): (a) fragmento de malha com a região de interação avaliada; (b) indicação das arestas com condição de contorno de Neumann para os esquemas MPFA-FPS; (c) indicação das arestas com condição de contorno de Neumann para os esquemas MPFA Enriched.

Figura 20. Intervenção no volume de controle correspondente ao poço produtor: (a) fragmento de malha com indicação do volume de controle associado ao poço produtor; (b) níveis de tempo convencional e fracionado, apenas para o poço produtor.

Figura 21. Aproximação de uma função “suave” exata com estados definidos à esquerda e à direita para esquemas numéricos de diferentes ordens de aproximação espacial: (a) primeira ordem; (b) segunda ordem; (c) terceira ordem; (d) quarta ordem.

Figura 22. Diagrama representativo das etapas que definem os três passos necessários na estratégia do tipo MUSCL (van Leer, 1979).

Figura 23. Estratégias de reconstrução para formulações conservativas: (a) reconstrução fundamentada no Teorema da Divergência, proposta por Durlinsky *et al.* (1992); (b) reconstrução fundamentada na técnica de Mínimos Quadrados; (c) volume de controle espectral, com subdivisão do volume de controle primário; (d) método de diferenças finitas espectrais, com reconstrução obtida a partir de pontos de definição do fluxo e da solução.

Figura 24. Malha com indicação dos volumes de controle utilizados na concepção da função limitadora para cada face IJ : (a) limitador de face onde apenas os volumes de controle $\hat{L}$ e $\hat{R}$ são empregados; (b) limitador de volume de controle onde todos os volumes de controle em torno de $\hat{L}$, vizinhança $\hat{M}_i$, são utilizados.

Figura 25. Estratégia MUSCL: (a) fragmento de malha com os pontos $\hat{L}$, $\hat{R}$, L' e R' , utilizados na reconstrução da variável. Os estados $\tilde{S}_{w_{IJ}}$ e $\tilde{S}_{w_{IJ}}$, à esquerda e direita de cada face IJ são indicados; (b) indicação dos vetores posição $\vec{d}_{\hat{L}\hat{R}}$ e $\vec{d}_{L'\hat{L}}$, utilizados na definição dos limitadores.

Figura 26. Diagrama de Sweby para algumas estratégias de limitação: (a) indicação de região TVD; (b) indicação da região onde o limitador produz aproximações TVD com alta ordem.

Figura 27. Fragmento de uma malha não estruturada onde são mostrados o ponto médio, $\bar{m}$, da face IJ e o ponto $\bar{c}$ onde a variável é reconstruída sobre a face IJ .

Figura 28. Gráfico da relação entre a função limitadora $\psi_{\hat{L}}$ e o parâmetro $\gamma_{\hat{L}}$, definida na equação **Erro! Fonte de referência não encontrada.**

Figura 29. Fragmento de malha utilizada no desenvolvimento da estratégia MLP: (a) indicação da face genérica IJ e do vértice genérico j onde valores extremos são avaliados em relação à vizinhança $\hat{M}_i$; (b) vista em perspectiva onde se vê o polinômio interpolador e o máximo valor contido no volume de controle $\hat{L}$.

Figura 30. Comparação entre os gráficos obtidos em cada variante da estratégia MLP para aproximações de até segunda ordem. As duas curvas convergem para o valor unitário no eixo das ordenadas em valores “infinitos” de $\Delta_{\text{sup}}/\Delta_{\text{inf}}$.

Figura 31. Algoritmo que representa a estratégia MLP e critérios de detecção de valores extremos para aproximações com polinômios de grau um.

Figura 32. Algoritmo que representa a estratégia MLP aumentada e critérios de detecção de valores extremos para aproximações com polinômios de grau maior do que dois.

Figura 33. Curvas de fluxo em modelo 1-D com gravidade, onde $F_w = f_w v - f_w \lambda_o K(\rho_w - \rho_o)g$ e varia com S_w . Estados à esquerda e direita (pontos vermelhos) são indicados: (a) com estados à direita do ponto sônico; (b) com estados à esquerda do ponto sônico; (c) com estados em à esquerda e à direita do ponto sônico.

Figura 34. Curvas de fluxo sem gravidade e sua derivada em função de S_w , onde $F_w = f_w v$: (a) com indicação dos estados à esquerda e à direita (pontos vermelhos) e ponto de tangência onde ocorre o choque; (b) e (c) indicação dos estados à esquerda e à direita (pontos vermelhos); (d), (e) e (f) velocidades características positivas.

Figura 35. Pontos de quadratura na face genérica IJ : (a) para aproximação de segunda ordem; (b) para aproximações de terceira e quarta ordem.

Figura 36. Casos onde a orientação da malha em relação à orientação do escoamento (onda) pode influenciar no valor de saturação de água obtido para o volume de controle $\hat{R}$: (a) malha distorcida e orientação do escoamento na horizontal; (b) malha ortogonal e orientação do escoamento inclinada.

Figura 37. Definição de uma região de interação associada ao vértice J : (a) visão geral da região de interação em relação à malha; (b) indicação dos pontos auxiliares e entrada de massa nas meias faces $\bar{Z}J$ e $\bar{E}J$.

Figura 38. Vazões nas meias faces à montante ($\bar{Z}J$) e avaliada ($\bar{E}J$): (a) $\Lambda < 1$ devido à vazão na meia face adjacente ser de menor intensidade do que na meia face avaliada; (b) $\Lambda > 1$ devido à vazão na meia face à montante ser de maior intensidade do que na avaliada; (c) $\Lambda = 0$ devido à massa na face à montante sair do volume de controle $\hat{L}$; (d) $\Lambda = 0$ devido à vazão na meia face à montante ser nula.

Figura 39. Regiões de interação I e J : (a) regiões de interação em relação à orientação do escoamento; (b) influência do escoamento sobre as combinações convexas que definem $\tilde{f}_{w_{EJ}}$ e $\tilde{f}_{w_{IJ}}$. Aproximação TM na região de interação I e unidimensional na região de interação J .

Figura 40. Gráficos das funções limitadoras TMU (Tran *et al.*, 2005) e SMU (Hurtado *et al.*, 2007).

Figura 41. Esquema Verdadeiramente Multidimensional, centrada no vértice, com coeficientes explícitos: (a) fragmento de malha com volumes de controle duais e a distribuição das velocidades normais às meias faces que concorrem para os centroides $\hat{M}$ e $\hat{W}$; (b) velocidades médias associadas aos nós $\hat{M}$ e $\hat{W}$.

Figura 42. Regiões de interação associadas à face IJ : (a) visão geral do fragmento de malha com indicação do volume de controle no qual a equação discreta é resolvida; (b) região de interação J e vazões sobre as meias faces $\bar{E}J$ e $\bar{Z}J$; (c) região de interação I e vazões sobre as meias faces $\bar{E}I$ e $\bar{G}I$.

Figura 43. Indicação das extrapolações (tipo MUSCL) para as meias faces avaliada e à montante. As setas com linhas contínuas indicam a extrapolação: (a) para a região de interação J ; (b) para a região de interação I .

Figura 44. Regiões de interação J com distribuição de velocidade entre as meias faces: (a) velocidades em sentido horário e anti-horário na mesma região de interação; (b) apenas um sentido (anti-horário) é observado para a mesma região de interação.

Figura 45. Regiões de interação J : (a) com indicação da meia face avaliada i e outras à montante $i-1$ e $i-2$. O mesmo raciocínio se aplica aos volumes de controle avaliado $\hat{C}$ e à montante $\hat{C}-1$ e $\hat{C}-2$; (b) com indicação das extrapolações até os pontos de quadratura nas aproximações de segunda ordem.

Figura 46. Regiões de interação I e J para duas malhas: (a) fragmento de malha quadrangular com regiões de interação definidas; (b) detalhe da região de interação J com indicação das velocidades nas meias faces; (c) fragmento de malha triangular com regiões de interação definidas; (d) detalhe da região de interação J com indicação das velocidades nas meias faces.

Figura 47. Malhas onde a multidimensionalidade da solução é ampliada ou restringida: (a) não há influência da distorção angular, $\theta = 90^\circ$, $\chi(\theta) = 1$; (b) o volume de controle $\hat{L}$ está

mais à montante da meia face $J\bar{F}$, $\theta < 90^\circ$, $\chi(\theta) > 1$; (c) o volume de controle $\hat{L}$ está menos à montante da meia face $J\bar{F}$, $\theta > 90^\circ$, $\chi(\theta) < 1$.

Figura 48. Gráficos que relacionam o ângulo θ formado entre as meias faces avaliada e à montante com o fator multiplicador $\chi(\theta)$ para as duas estratégias apresentadas nas equações (282) e (283).

Capítulo 4

Figura 49. Escoamento monofásico unidimensional em reservatório heterogêneo e isotrópico: (a) domínio computacional e representação das duas rochas; (b) malha triangular utilizada com 4x2 subdivisões.

Figura 50. Escoamento monofásico em reservatório heterogêneo e ortotrópico: (a) domínio com dois materiais; (b) uma das malhas utilizadas (com 16x16 subdivisões) na avaliação de cada formulação.

Figura 51. Gráficos de taxa de convergência: (a) para o campo de pressão utilizando as normas do máximo valor L_∞ e L_2 ; (b) para o campo de velocidade utilizando a norma L_2 .

Figura 52. Campo de pressão obtido com malha quadrangular com 64x64 subdivisões em reservatório heterogêneo e ortotrópico: (a) usando o método TPFA; (b) usando o método MPFA-O.

Figura 53. Reservatório heterogêneo e muito anisotrópico com furo quadrado: (a) domínio com dois materiais; (b) uma das malhas quadrangulares não-estruturadas utilizadas na solução (com 16x16 subdivisões).

Figura 54. Campo de pressão com diferentes métodos para escoamento monofásico em reservatório heterogêneo e muito anisotrópico com furo quadrado. Uma malha quadrangular, não estruturada e com aproximadamente 16x16 subdivisões é utilizada: (a) TPFA; (b) MPFA-O; (c) MPFA-FPS; (d) MPFA-Enriched.

Figura 55. Campo de pressão para escoamento monofásico em reservatório heterogêneo e anisotrópico com furo quadrado. Uma malha quadrangular, não estruturada e com aproximadamente 64x64 subdivisões é utilizada: (a) TPFA; (b) MPFA-O; (c) MPFA-FPS; (d) MPFA-Enriched.

Figura 56. Elevação do campo de pressão para escoamento monofásico em reservatório heterogêneo e anisotrópico com furo quadrado: (a) obtido com o MPFA-FPS; (b) obtido com o MPFA-Enriched.

Figura 57. Domínio computacional e indicação de condições de contorno para o modelo de Buckley-Leverett.

Figura 58. Gráficos com erros obtidos para várias densidades de malha adotadas na solução do modelo de Buckley-Leverett: (a) compara aproximação de 1ª ordem e várias estratégias com aproximação de 2ª ordem; (b) compara aproximação de 1ª ordem e várias estratégias com

aproximação de 3ª ordem; (c) compara aproximação de 1ª ordem e várias estratégias com aproximação de 4ª ordem; (d) compara aproximação de 1ª ordem e os melhores resultados obtidos para alta ordem.

Figura 59. Comparação entre a solução semi-analítica e soluções numéricas do modelo de Buckley-Leverett. Aproximações com 1ª ordem e várias abordagens com 2ª ordem no erro de truncamento são apresentadas.

Figura 60. Comparação entre a solução semi-analítica e soluções numéricas do modelo de Buckley-Leverett. A aproximação de 1ª ordem é comparada com os melhores resultados obtidos para 2ª e 4ª ordem no erro de truncamento.

Figura 61. Comparação entre a solução semi-analítica e soluções numéricas do modelo de Buckley-Leverett. A aproximação de primeira ordem é comparada com a tradicional aproximação de 2ª ordem (MUSCL/vanAlbada) e duas variantes da aproximação de 4ª ordem no erro de truncamento (com estêncil convencional e à montante).

Figura 62. Estêncis para aproximação de 4ª ordem em malha estruturada quadrilateral: (a) estêncil convencional; (b) estêncil à montante, orientado para a posição do poço injetor.

Figura 63. Perfis de saturação de água para o modelo de Buckley-Leverett com gravidade. Soluções com 1ª ordem e 2ª ordem, com limitadores van Albada e MLP-vk, são comparadas com uma solução de referência obtida de Durlofsky (1993): (a) soluções obtidas com malha quadrangular com 10 subdivisões; (b) soluções obtidas com malha quadrangular com 20 subdivisões.

Figura 64. Perfis de saturação de água para o modelo de Buckley-Leverett com gravidade. Soluções com 1ª ordem e 2ª ordem, com limitadores van Albada e MLP-vk, são comparadas com uma solução de referência obtida de Durlofsky (1993): (a) soluções obtidas com malha quadrangular com 40 subdivisões; (b) soluções obtidas com malha quadrangular com 80 subdivisões.

Figura 65. Domínio computacional e malhas utilizadas para o problema de ¼ de cinco poços: (a) indicação da fronteira de Neumann e poços injetor e produtor; (b) malha triangular estruturada com 18x18 subdivisões; (c) malha não estruturada com aproximadamente 32x32 subdivisões e 1.143 volumes de controle quadrangulares.

Figura 66. Gráficos de produção de óleo para malha triangular com 18x18 subdivisões (648 volumes de controle). Resultados com as diversas estratégias para tratamento de poço são comparados com os resultados sem qualquer tratamento: (a) vista geral; (b) detalhe mostrando onde ocorrem oscilações.

Figura 67. Gráficos de produção de óleo para malha quadrangular com 32x32 subdivisões (1.143 volumes de controle): (a) resultados obtidos para estratégia “mob1” na aproximação de $\lambda(S_w)$; (b) resultados obtidos para estratégia “mob2” na aproximação de $\lambda(S_w)$.

Figura 68. Escoamento bifásico de água e óleo em reservatório isotrópico e heterogêneo: (a) domínio com condições de contorno; (b) malha quadrangular cartesiana com 64x64 subdivisões; (c) campo de permeabilidade.

Figura 69. Solução de referência obtida com malha triangular, não estruturada e uniforme com aproximadamente 120x120 subdivisões (37.996 volumes de controle).

Figura 70. Escoamento bifásico de água e óleo em meio heterogêneo para diferentes ordens de aproximação no espaço: (a) solução com aproximação de 1ª ordem; (b) solução com aproximação de 2ª ordem e limitador de face van Albada; (c) solução com aproximação de 2ª ordem e limitador de volume de controle MLP-vk.

Figura 71. Escoamento bifásico de água e óleo em meio heterogêneo para diferentes ordens de aproximação no espaço: (a) solução com aproximação de 3ª ordem e limitador de volume de controle MLP; (b) solução com aproximação de 4ª ordem e limitador de volume de controle MLP.

Figura 72. Distribuição de ordens de aproximação obtidas após atuação da estratégia MLP: (a) aproximações de 2ª ordem com MLP-vk; (b) aproximações de 3ª ordem com MLP; (c) aproximações de 4ª ordem com MLP.

Figura 73. Malhas empregadas para o problema de ¼ de cinco poços com escoamento do tipo pistão: (a) malha quadrangular estruturada com 20x20 subdivisões; (b) malha triangular estruturada com 20x20 subdivisões.

Figura 74. Saturação de água com 1ª ordem para diferentes formas de aproximação do fluxo numérico e da mobilidade total: (a) *stdr* com mobilidade total à montante; (b) *stdr* com estratégia “*mob1*”; (c) *stdr* com estratégia “*mob2*”; (d) TMSIM/TMU com mobilidade total à montante; (e) TMSIM/TMU com estratégia “*mob1*”; (f) TMSIM/TMU com estratégia “*mob2*”; (g) TMSIM/SMU com mobilidade total à montante; (h) TMSIM/SMU com estratégia “*mob1*”; (i) TMSIM/SMU com estratégia “*mob2*”.

Figura 75. Perfis de saturação de água com 1ª ordem de acurácia, obtidos em malha quadrangular estruturada (20x20 subdivisões) e aproximação “*mob1*” para a mobilidade total: (a) TMSIC/TMU; (b) TMSIC/SMU; (c) TMSEC-1/TMU; (d) TMSEC-1/SMU; (e) TMSEC-2/TMU; (f) TMSEC-2/SMU.

Figura 76. Perfis de saturação de água com 1ª ordem de acurácia, obtidos em malha triangular estruturada (20x20 subdivisões) e aproximação “*mob1*” para a mobilidade total: (a) TMSIC/TMU; (b) TMSIC/SMU; (c) TMSEC-1/TMU; (d) TMSEC-1/SMU; (e) TMSEC-2/TMU; (f) TMSEC-2/SMU.

Figura 77. Perfis de saturação de água obtidos em malha quadrangular estruturada (20x20 subdivisões) e aproximação “*mob1*” para a mobilidade total: (a) *stdr*, 1ª ordem; (b) *stdr*, 2ª ordem (MLP-vk); (c) TMSEC-2/TMU, 1ª ordem; (d) TMSEC-2/TMU, 2ª ordem (MLP-vk); (e) TMSEC-2/SMU, 1ª ordem; (f) TMSEC-2/SMU, 2ª ordem (MLP-vk).

Figura 78. Malhas quadrangulares estruturadas, diagonal e paralela ao escoamento, com indicação dos poços injetores e produtores.

Figura 79. Perfis de saturação de água obtidos em malha quadrangular estruturada diagonal (20x20 subdivisões) e paralela (28x28 subdivisões) e aproximação “*mob1*” para a mobilidade total: (a) *stdr*, 1ª ordem; (b) TMSEC-2/TMU, 1ª ordem; (c) TMSEC-2/SMU, 1ª ordem; (d) TMSEC-2/TMU, 2ª ordem; (e) TMSEC-2/SMU, 2ª ordem.

stdr, 2ª ordem (MLP-vk); (e) TMSEC-2/TMU, 2ª ordem (MLP-vk); (f) TMSEC-2/SMU, 2ª ordem (MLP-vk).

Figura 80. Domínio computacional com dois meios de diferentes valores de permeabilidade: (a) sem rotação com indicação dos poços injetor e produtores; (b) rotacionado em 30° graus e malha quadrangular estruturada com 51x51 subdivisões.

Figura 81. Perfis de saturação de água para o problema de três poços, sem rotação do domínio. Diferentes estratégias de aproximação, com primeira ordem de acurácia, são usadas: (a) *stdr*, obtida de Kozdon *et al.* (2011); (b) TMU, obtida de Kozdon *et al.* (2011); SMU, obtida de Kozdon *et al.* (2011); (d) *stdr* reproduzido com $\lambda(S_w)$ à montante; (e) TMU reproduzido com $\lambda(S_w)$ à montante; (f) SMU reproduzido com $\lambda(S_w)$ à montante.

Figura 82. Saturação de água em domínio sem rotação para diferentes estratégias de aproximação com 1ª ordem de acurácia: (a) *stdr* com $\lambda(S_w)$ à montante; (b) TMU com $\lambda(S_w)$ à montante; (c) SMU com $\lambda(S_w)$ à montante; (d) *stdr* e *mob1* para $\lambda(S_w)$; (e) TMU e *mob1* para $\lambda(S_w)$; (f) SMU e *mob1* para $\lambda(S_w)$; (g) *stdr* e *mob2* para $\lambda(S_w)$; (h) TMU e *mob2* para $\lambda(S_w)$; (i) SMU e *mob2* para $\lambda(S_w)$.

Figura 83. Saturação de água em domínio rotacionado em 30° para diferentes estratégias de aproximação com 1ª ordem de acurácia: (a) *stdr* com $\lambda(S_w)$ à montante; (b) TMU com $\lambda(S_w)$ à montante; (c) SMU com $\lambda(S_w)$ à montante; (d) *stdr* e *mob1* para $\lambda(S_w)$; (e) TMU e *mob1* para $\lambda(S_w)$; (f) SMU e *mob1* para $\lambda(S_w)$; (g) *stdr* e *mob2* para $\lambda(S_w)$; (h) TMU e *mob2* para $\lambda(S_w)$; (i) SMU e *mob2* para $\lambda(S_w)$.

Figura 84. Gráficos de corte de água (*water cut*) para diferentes estratégias de aproximação da mobilidade total: (a) aproximações unidimensionais ou *standard (stdr)*; (b) aproximações do tipo TMU; (c) aproximações do tipo SMU; (d) comparação entre os melhores resultados para as aproximações *stdr*, TMU e SMU.

Figura 85. Saturação de água em domínio rotacionado em 30° para diferentes estratégias de aproximação com 2ª ordem de acurácia e limitador MLP-vk: (a) *stdr* e *mob1* para $\lambda(S_w)$; (b) TMU e *mob1* para $\lambda(S_w)$; (c) SMU e *mob1* para $\lambda(S_w)$; (d) *stdr* e *mob2* para $\lambda(S_w)$; (e) TMU e *mob2* para $\lambda(S_w)$; (f) SMU e *mob2* para $\lambda(S_w)$.

Figura 86. Gráficos de corte de água (*water cut*) para diferentes estratégias de aproximação da mobilidade total: (a) abordagens *stdr*, TMU e SMU com aproximação do tipo “*mob1*” para $\lambda(S_w)$; (b) abordagens *stdr*, TMU e SMU com aproximação do tipo “*mob2*” para $\lambda(S_w)$.

Figura 87. Escoamento bifásico de água e óleo em reservatório homogêneo e anisotrópico para problema de ¼ de cinco poços: (a) solução de referência; (b) domínio computacional com indicação dos poços injetor e produtor; (c) malha quadrangular estruturada com 32x32 subdivisões adaptada de Hermeline (2007).

Figura 88. Escoamento bifásico de água e óleo em reservatório homogêneo e anisotrópico para problema de $\frac{1}{4}$ de cinco poços para a malha Chevron com mobilidade “*mob1*”: (a) abordagem *stdr* com aproximação de 1ª ordem; (b) abordagem SMU-modif. 2, 1ª ordem; (c) abordagem TMU, 1ª ordem; (d) abordagem *stdr* com aproximação de 2ª ordem (MLP-vk); (e) abordagem SMU-modif. 2, 2ª ordem (MLP-vk); (f) abordagem TMU, 2ª ordem (MLP-vk).

Figura 89. Curvas de produção obtidas em malha quadrangular distorcida com 32x32 subdivisões para escoamento bifásico de água e óleo em reservatório homogêneo e anisotrópico. Abordagens convencional (*stdr*) e TMSEC-2 (TMU, SMU e SMU-modif.2) são comparadas para 1ª e 2ª ordem.

Figura 90. Indicação de valores negativos para perfis de saturação obtidos com aproximação de 2ª ordem em malha Hermeline: (a) com função limitadora van Albada; (b) com função limitadora MLP-vk.

Figura 91. Análogo “Barreiras do Boqueirão” (Alagoas), obtido de Guimarães *et al.* (2002).

Figura 92. Domínio que representa o reservatório análogo “Serras do Boqueirão”: (a) representação do domínio com indicações das litologias; (b) malha quadrangular não estruturada com 3484 volumes de controle.

Figura 93. Escoamento bifásico de água e óleo em reservatório análogo, heterogêneo e anisotrópico para 72 dias: (a) campo de pressão, dado em *Pa*; (b) campo de saturação de água.

Apêndices

Figura A.1. Problema de transporte, hipoteticamente linear: (a) condição inicial com descontinuidade da varável transportada; (b) diagrama x,t com identificação de linhas características, onde a propriedade é constante, e uma linha (tracejada) correspondente à propagação da descontinuidade.

Figura A.2. Curvas do modelo de Buckley-Leverett: (a) Fluxo Fracional com indicação dos pontos de mudança de concavidade S_w^{Inf} e tangência S_w^{Tang} ; (b) derivada do Fluxo Fracional com indicação de dois valores de saturação onde se obtém o choque; (c) Linhas características para o problema não linear com onda de rarefação.

Figura A.3. Problema de transporte não linear do tipo Pistão: (a) condição de entropia satisfeita com $\alpha_L > \alpha_R$; (b) diagrama x,t correspondente à satisfação da entropia; (c) a condição de entropia não é satisfeita, $\alpha_L < \alpha_R$; (d) diagrama x,t correspondente à não satisfação da entropia.

Figura A.4. Problema de transporte não linear com relações constitutivas de Brooks-Corey: (a) condição de entropia satisfeita com $S_{w_L} \leq S_w^{Tang}$; (b) diagrama x,t correspondente à satisfação da entropia; (c) a condição de entropia não é satisfeita, $S_{w_L} > S_w^{Tang}$; (d) diagrama x,t correspondente à não satisfação da entropia.

Figura B.1. Fragmento de malha com regiões de interação: (a) quatro regiões de interação que envolvem o volume de controle $\hat{R}$; (b) uma das regiões de interação com indicação de pontos auxiliares e uma das meias faces onde as vazões são calculados.

Figura B.2. Região de interação e suporte triangular: (a) limites da região de interação (em amarelo) associada ao vértice I ; (b) delimitação do suporte triangular de pressão (em vermelho); (c) suporte triangular com indicação de vetores normais.

Figura B.3. Região de suporte triangular para o MPFA-O: (a) espaço físico; (b) espaço mapeado.

Figura B.4. Região de suporte completo para o MPFA-FPS e MPFA-Enriched: (a) espaço físico; (b) espaço mapeado com indicação do ponto de quadratura q em relação a coordenada natural η .

Figura B.5. Região de suporte completo para o MPFA-FPS e MPFA-Enriched: (a) espaço físico com indicação do volume de controle auxiliar para o MPFA-FPS; (b) espaço mapeado com indicação do volume de controle auxiliar para o MPFA-FPS; (c) espaço físico com indicação do volume de controle auxiliar para o MPFA-Enriched; (d) espaço mapeado com indicação do volume de controle auxiliar para o MPFA-Enriched.

Figura C.1. Fragmento de malha com indicação do volume de controle avaliado $\hat{L}$ e sua vizinhança $\hat{M}_i$. O índice i varia de 1 até o número de volumes de controles considerados para cada ordem de aproximação.

Figura C.2. Fragmento de malha adjacente ao contorno com indicação da aresta avaliada IJ : (a) para saturação prescrita nos pontos de quadratura; (b) para o uso de volumes de controle fictícios em contornos onde um fluxo nulo ou simetria é prescrito.

Figura C.3. Descrição do algoritmo para decomposição ortogonal de Gram-Schmidt. O texto em negrito, azul, é uma referência a comandos do Matlab® (<http://ocw.mit.edu>, 2010).

Figura D.1. Malhas com 16x16 subdivisões empregadas para simulação de escoamento bifásico de água e óleo em reservatório homogêneo e anisotrópico para problema de ¼ de cinco poços: (a) malha Chevron (Eigestad e Klausen, 2005) (b) malha adaptada de Hermeline (2007).

Figura D.2. Escoamento bifásico de água e óleo em reservatório homogêneo e anisotrópico para problema de ¼ de cinco poços. Curvas de produção para aproximações de 1ª ordem obtidas com a malha Chevron e combinação convexa em f_w nas abordagens TM. Para todos os casos, as duas estratégias de aproximação para a mobilidade (“mob1” e “mob2”) são verificadas: (a) produção de óleo; (b) detalhe da curva de produção de óleo; (c) óleo acumulado; (d) detalhe da curva de óleo acumulado.

Figura D.3. Escoamento bifásico de água e óleo em reservatório homogêneo e anisotrópico para problema de ¼ de cinco poços: Curvas de produção para aproximações de 2ª ordem obtidas com a malha Chevron. Extrapolação de S_w nas abordagens, convencional (*stdr*) e TM e combinação convexa em S_w . Para todos os casos, as duas estratégias de aproximação para a

mobilidade (“mob1” e “mob2”) são verificadas: (a) produção de óleo; (b) detalhe da curva de produção de óleo; (c) óleo acumulado; (d) detalhe da curva de óleo acumulado.

Figura D.4. Curvas de produção para aproximações de 2ª ordem obtidas com malha Chevron. Extrapolação de S_w nas abordagens, convencional (*stdr*) e TM e combinação convexa em f_w . Para todos os casos, as duas estratégias de aproximação para a mobilidade (“mob1” e “mob2”) são verificadas: (a) produção de óleo; (b) detalhe da curva de produção de óleo; (c) óleo acumulado; (d) detalhe da curva de óleo acumulado.

Figura D.5. Escoamento bifásico de água e óleo em reservatório homogêneo e anisotrópico para problema de ¼ de cinco poços. Curvas de produção para aproximações de 2ª ordem obtidas com a malha Chevron. Extrapolação de f_w nas abordagens, convencional (*stdr*) e TM e combinação convexa em f_w . Para todos os casos, as duas estratégias de aproximação para a mobilidade (“mob1” e “mob2”) são verificadas: (a) produção de óleo; (b) detalhe da curva de produção de óleo; (c) óleo acumulado; (d) detalhe da curva de óleo acumulado.

Figura D.6. Escoamento bifásico de água e óleo em reservatório homogêneo e anisotrópico para problema de ¼ de cinco poços. Curvas de produção para aproximações de 1ª ordem obtidas com a malha Hermeline e combinação convexa em f_w nas abordagens TM. Para todos os casos, as duas estratégias de aproximação para a mobilidade (“mob1” e “mob2”) são verificadas: (a) produção de óleo; (b) detalhe da curva de produção de óleo; (c) óleo acumulado; (d) detalhe da curva de óleo acumulado.

Figura D.7. Curvas de produção para aproximações de 2ª ordem obtidas com malha Hermeline. Extrapolação de S_w nas abordagens convencional (*stdr*) e TM e combinação convexa em S_w . Para todos os casos, as duas estratégias de aproximação para a mobilidade (“mob1” e “mob2”) são verificadas: (a) produção de óleo; (b) detalhe da curva de produção de óleo; (c) óleo acumulado; (d) detalhe da curva de óleo acumulado.

Figura D.8. Escoamento bifásico de água e óleo em reservatório homogêneo e anisotrópico para problema de ¼ de cinco poços: Curvas de produção para aproximações de 2ª ordem obtidas com a malha Hermeline. Extrapolação de S_w nas abordagens, convencional (*stdr*) e TM e combinação convexa em f_w . Para todos os casos, as duas estratégias de aproximação para a mobilidade (“mob1” e “mob2”) são verificadas: (a) produção de óleo; (b) detalhe da curva de produção de óleo; (c) óleo acumulado; (d) detalhe da curva de óleo acumulado.

Figura D.9. Escoamento bifásico de água e óleo em reservatório homogêneo e anisotrópico para problema de ¼ de cinco poços: Curvas de produção para aproximações de 2ª ordem obtidas com a malha Hermeline. Extrapolação de f_w nas abordagens, convencional (*stdr*) e TM e combinação convexa em f_w . Para todos os casos, as duas estratégias de aproximação para a mobilidade (“mob1” e “mob2”) são verificadas: (a) produção de óleo; (b) detalhe da curva de produção de óleo; (c) óleo acumulado; (d) detalhe da curva de óleo acumulado.

Figura D.10. Escoamento bifásico de água e óleo em reservatório homogêneo e anisotrópico para problema de ¼ de cinco poços: Curvas de produção para aproximações de 1ª e 2ª ordem com abordagem convencional (*stdr*) e abordagem TM (SMU-modif. 2) com estratégia de aproximação da mobilidade “mob1”: (a) produção de óleo para a malha Chevron; (b) Óleo

acumulado para a malha Chevron; (c) produção de óleo para a malha Hermeline; (d) Óleo acumulado para a malha Hermeline.

Figura D.11. Escoamento bifásico de água e óleo em reservatório homogêneo e anisotrópico para problema de $\frac{1}{4}$ de cinco poços: Curvas de produção para aproximações de 1ª e 2ª ordem com abordagem convencional (*stdr*) e abordagem TM (TMU) com estratégia de aproximação da mobilidade “*mob1*”: (a) produção de óleo para a malha Chevron; (b) Óleo acumulado para a malha Chevron; (c) produção de óleo para malha Hermeline; (d) Óleo acumulado para a malha Hermeline.

Lista de Tabelas

Capítulo 4

Tabela 1. Erros, segundo as normas do máximo (L_∞) e L_2 , para o campo de pressões e velocidades obtidos com os esquemas numéricos TPFA, MPFA-O, MPFA-FPS e MPFA-Enriched.

Tabela 2. Erros e taxas de convergência para o campo de pressão, segundo a norma do máximo valor (L_∞), para os esquemas numéricos TPFA, MPFA-O, MPFA-FPS e MPFA-Enriched.

Tabela 3. Erros e taxas de convergência para o campo de pressão, segundo a norma L_2 , para os esquemas numéricos TPFA, MPFA-O, MPFA-FPS e MPFA-Enriched.

Tabela 4. Erros e taxas de convergência para o campo de velocidade, segundo a norma L_2 , para os esquemas numéricos TPFA, MPFA-O, MPFA-FPS e MPFA-Enriched.

Tabela 5. Valores máximos e mínimos de pressão para os diferentes métodos e densidades de malha adotados.

Tabela 6. Valores máximos e mínimos para aproximações de 2ª ordem usando funções limitadoras baseadas na avaliação da face (van Albada) e do volume de controle (MLP-vk) para o escoamento bifásico de água e óleo em reservatório homogêneo e anisotrópico para problema de ¼ de cinco poços.

Apêndices

Tabela D.1. Aproximação de 1ª ordem no espaço e Euler progressivo no tempo para o modelo de Buckley-Leverett.

Tabela D.2. Aproximação de 2ª ordem no espaço e Euler progressivo no tempo para o modelo de Buckley-Leverett. Os resultados obtidos com extrapolação do tipo MUSCL em S_w e f_w são, respectivamente, apresentados à esquerda e à direita da tabela. Ambos limitados com a estratégia van Albada.

Tabela D.3. Aproximação de 2ª ordem no espaço e Euler progressivo no tempo para o modelo de Buckley-Leverett. Os resultados obtidos com extrapolação do tipo MUSCL em S_w e f_w são, respectivamente, apresentados à esquerda e à direita da tabela. Ambos limitados com a estratégia MLP.

Tabela D.4. Aproximação de 3ª ordem no espaço e Euler progressivo no tempo para o modelo de Buckley-Leverett. Os resultados obtidos com extrapolação do tipo MUSCL em S_w e f_w são, respectivamente, apresentados à esquerda e à direita da tabela. Ambos limitados com a estratégia MLP.

Tabela D.5. Aproximação de 4ª ordem no espaço e Euler progressivo no tempo para o modelo de Buckley-Leverett. Os resultados obtidos com extrapolação do tipo MUSCL em S_w e f_w

são, respectivamente, apresentados à esquerda e à direita da tabela. A estratégia MLP e um estêncil com viés à montante são utilizados.

Tabela D.6. Aproximação de 4ª ordem no espaço e Euler progressivo no tempo para o modelo de Buckley-Leverett. Os resultados obtidos com extrapolação do tipo MUSCL em S_w e f_w são, respectivamente, apresentados à esquerda e à direita da tabela. A estratégia MLP e um estêncil convencional são utilizados.

Tabela D.7. Aproximação de 2ª ordem no espaço e Euler progressivo no tempo para o modelo de Buckley-Leverett. Os resultados obtidos com extrapolação do tipo MUSCL em S_w e f_w são, respectivamente, apresentados à esquerda e à direita da tabela. Ambos limitados com a estratégia MLP-vk.

Tabela D.8. Aproximação de 3ª ordem no espaço e Euler progressivo no tempo para o modelo de Buckley-Leverett. Os resultados obtidos com extrapolação do tipo MUSCL em S_w e f_w são, respectivamente, apresentados à esquerda e à direita da tabela. Ambos limitados com a estratégia MLP-vk.

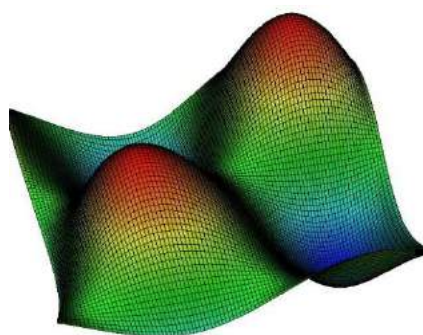
Tabela D.9. Aproximação de 4ª ordem no espaço e Euler progressivo no tempo para o modelo de Buckley-Leverett. Os resultados obtidos com extrapolação do tipo MUSCL em S_w e f_w são, respectivamente, apresentados à esquerda e à direita da tabela. A estratégia MLP-vk e um estêncil com viés à montante são utilizados.

Tabela D.10. Aproximação de 4ª ordem no espaço e Euler progressivo no tempo para o modelo de Buckley-Leverett. Os resultados obtidos com extrapolação do tipo MUSCL em S_w e f_w são, respectivamente, apresentados à esquerda e à direita da tabela. A estratégia MLP-vk e um estêncil convencional são utilizados.

Tabela D.11. Aproximação de 2ª ordem no espaço e Runge-Kutta (2ª ordem) no tempo para o modelo de Buckley-Leverett. Os resultados obtidos com extrapolação do tipo MUSCL em S_w (limitada com van Albada) e em f_w (limitada com MLP-vk) são, respectivamente, apresentados à esquerda e à direita da tabela.

Tabela D.12. Aproximações de 3ª e 4ª ordem no espaço e Runge-Kutta de 2ª ordem no tempo para o modelo de Buckley-Leverett. Os resultados são obtidos com extrapolação do tipo MUSCL em f_w e estratégia MLP.

Tabela D.13. Coordenadas dos números aleatórios utilizados para definir o campo de permeabilidade.



1

Introdução

1.1. Apresentação

A utilização de modelos computacionais representa uma ferramenta técnica poderosa na indústria petrolífera moderna. Várias estratégias de “exploração” podem ser simuladas e avaliadas antes mesmo que o primeiro poço seja perfurado em campo. Contudo, a relevância de ferramentas computacionais vai além da fase de planejamento. No gerenciamento do reservatório, durante sua vida produtiva, a simulação numérica é frequentemente associada à técnicas de ajustes históricos e de otimização (Afonso *et al.*, 2010). Isso eleva o desempenho produtivo dos reservatórios de hidrocarbonetos (Baxendale, 1995). Segundo Islan *et al.* (2010), as decisões sobre vários aspectos da engenharia de reservatórios, desde testes em poços a definição das estratégias de produção, são tomadas com base na resposta de simuladores. Os autores também destacam que a indústria petrolífera é a que mais usa modelos computacionais, mesmo quando se compara a áreas que tradicionalmente dependem, em grande escala, de ferramentas numéricas, como pesquisas espaciais e previsão do clima.

Apesar dos benefícios obtidos com a simulação numérica, em especial, o modelamento do escoamento em reservatórios de hidrocarbonetos, essa não é uma tarefa fácil. Mesmo para modelos mais simples com apenas duas fases incompressíveis e imiscíveis, muitos desafios, do ponto de vista físico e matemático, são enfrentados (Kozdon *et al.*, 2011). Variações abruptas, de propriedades como a permeabilidade e a porosidade são comuns e podem ocorrer em escalas com várias ordens de grandeza (Christie e Blunt, 2001; Kozdon *et al.*, 2011). Além disso, efeitos de contra fluxo, devido à ação de forças gravitacionais ou de capilaridade, também podem ser observados (Kozdon *et al.*, 2011). Para problemas com razões adversas de mobilidade, instabilidades físicas são frequentemente introduzidas nas soluções, produzindo “canais” ou “barreiras” não físicas, referenciados na literatura como “*numerical fingers*” (Todd *et al.*, 1972; Yanosik e McCracken, 1979; Ko e Au, 1979; Brand *et al.*, 1991).

O modelo matemático adotado nesses simuladores, consiste, em geral, em um sistema de Equações Diferenciais Parciais (EDP), fortemente acoplado e com elevada não linearidade (Kozdon *et al.*, 2011), o que também configura grandes desafios, no que se refere a sua solução. Uma forma “monolítica” dessas equações governantes é mais comumente encontrada nos simuladores comerciais (Eclipse, 1997; CMG, 2006; Eclipse, 2009). No entanto, em simuladores de linha de fluxo (*Streamlines*) e em muitas aplicações não comerciais, formas segregadas podem ser convenientemente obtidas sob a imposição de certas hipóteses simplificadoras (Todd *et al.*, 1972; Peaceman, 1977; Yanosik e McCracken, 1979; Edwards e Rogers, 1998; Edwards, 2006; Hurtado *et al.*, 2007; Chueh *et al.*, 2010; Kozdon *et al.*, 2011; Khoozan *et al.*, 2011).

Uma forma particularmente utilizada na literatura é a proposta por Peaceman (1977). Nesta formulação, uma equação de transporte ou de saturação, com natureza eminentemente hiperbólica, é definida para cada fase transportada enquanto o campo de pressão é obtido pela solução de uma equação de fluxo com natureza parabólica ou elíptica. Embora haja várias estratégias para a solução desse sistema de equações escalares (Kou e Sun, 2010), o método IMPES (*Implicit Pressure-Explicit Saturation*), simples de implementar e eficaz para uma larga faixa de problemas, é frequentemente utilizado. Isso inclui o presente trabalho, como detalhado no próximo capítulo. Segundo Kozdon *et al.* (2011), a forma segregada do modelo matemático possibilita que métodos numéricos, apropriados à solução de equações hiperbólicas e elípticas, respectivamente, possam naturalmente ser incorporados ao contexto de simulação de escoamento multifásico em reservatórios de petróleo.

Embora novos recursos tecnológicos possibilitem a modelagem de ambientes geológicos mais complexos, incluindo camadas inclinadas, canais, fraturas e falhas além da modelagem de poços direcionais, utilizando malhas computacionais não estruturadas e adaptativas, a grande maioria dos simuladores de fluxo que servem à indústria do petróleo não acompanharam esse advento tecnológico (Ronen *et al.*, 2002; Fainstein e Matos, 2004; Moog, 2013). Procedimentos numéricos bem tradicionais ainda são preservados nesses simuladores (Eclipse, 1997; CMG, 2006). A utilização de diferenças finitas de dois pontos no cálculo dos fluxos de Darcy e esquemas numéricos de primeira ordem para aproximar os termos advectivos na equação de transporte são exemplos bem conhecidos dessa abordagem mais conservadora (Edwards e Rogers, 1998; Aavatsmark *et al.*, 1998).

A aproximação de fluxos por dois pontos ou *Two-Point Flux Approximation* (TPFA) é um procedimento simples, de baixo custo computacional e com robustez comprovada em diversas áreas (Pletcher *et al.*, 1995; Peaceman, 1977; Aziz e Settari, 1979; Ertekin *et al.*, 2001). No entanto, em aplicações voltadas para a modelagem do escoamento em reservatórios de petróleo, uma discretização convergente, só é possível quando malhas denominadas *k*-ortogonais são adotadas, i.e., malhas cartesianas, ou do tipo *corner point*, alinhadas com as direções principais do tensor que representa a permeabilidade da rocha (Ponting, 1992; Schlumberger, 1997 *apud* Aavatsmark, 2007). Na prática, esse fato restringe o uso desses simuladores à utilização de malhas estruturadas e tensores de permeabilidade diagonais (CMG, 2006; Eclipse, 2009). Além disso, a representação adequada da complexidade geométrica, característica dos reservatórios, fraturas e poços horizontais e inclinados, é prejudicada em relação ao que se teria se malhas não estruturadas, poligonais (em problemas 2-D) ou poliédricas quaisquer, fossem empregadas nos domínios computacionais. Segundo Beckner (2011), a flexibilidade proporcionada por malhas não estruturadas faz com que certas estruturas geológicas complexas necessitem de muito menos células (elementos ou volumes de controle) para uma representação discreta acurada. O autor dá como exemplo, um reservatório cuja discretização envolve $1,6 \times 10^8$ células com uma malha do tipo *corner point*, enquanto apenas $1,19 \times 10^3$ células são necessárias usando uma malha não estruturada com refinamento local adequado.

Quanto ao uso de aproximações de primeira ordem para os termos advectivos, essas são rotineiramente empregadas em diversas áreas da Dinâmica dos Fluidos Computacional (Patankar, 1980; Versteeg e Malalasekera, 1995; Pletcher *et al.*, 1998; Maliska, 2004; Huynh, 2011). Sua robustez e simplicidade de implementação, por um lado, justificam sua intensa aplicabilidade. Por outro lado, a baixa resolução das soluções, proporcionada pela aproximação “pobre” de primeira ordem, pode ser um problema em áreas de atuação onde descontinuidades na solução são esperadas e malhas pouco refinadas são tradicionalmente empregadas. Erros grosseiros na avaliação de variáveis importantes na simulação do escoamento em reservatórios de petróleo como o tempo de irrupção de água no poço produtor (*breakthrough*), podem ocorrer devido à excessiva dissipação numérica que tende a suavizar descontinuidades.

Adicionalmente, a construção unidimensional desse tipo de aproximação, mesmo em problemas multidimensionais, induz à forte dependência das soluções com a orientação da malha adotada. Segundo Lamine e Edwards (2010), os efeitos dessa dependência são particularmente mais relevantes quando a razão entre mobilidades é adversa e o escoamento ocorre transversal à orientação da malha.

As restrições mencionadas acima, predominantemente observadas nos simuladores de reservatório de petróleo, são uma consequência do tipo de discretização comumente adotado em seus algoritmos. O condicionamento de soluções consistentes ao uso de malhas k-ortogonais e o viés observado nas soluções numéricas, devido, respectivamente, ao uso de esquemas TPFA e discretizações de primeira ordem, limitam a aplicabilidade desses simuladores a modelos menos realistas e com características mais simples. Alternativas acadêmicas têm sido intensamente debatidas na literatura nas últimas décadas. Em geral, tais propostas objetivam produzir simuladores mais robustos e com aplicações mais generalizadas. No entanto, mesmo com esse advento tecnológico, a simulação de escoamentos multifásicos em reservatórios de petróleo ainda representa uma área de grandes desafios e com muito a ser feito.

Esses desafios motivam o desenvolvimento do presente trabalho. Para um entendimento mais geral de algumas estratégias já empregadas a fim de conferir robustez aos simuladores voltados para a indústria do petróleo, o estado da arte relacionado à temática abordada é sucintamente descrito na próxima seção. Estratégias numéricas recentemente desenvolvidas, que, em princípio, não são relacionadas à simulação de escoamento em reservatórios, também são discutidas. A adequação dessas novas tecnologias aos algoritmos já existentes pode minimizar ou eliminar certos problemas recorrentes na referida área. Por fim, os principais objetivos e contribuições almejados com o presente trabalho e a forma com que esse é organizado são descritos nas últimas seções deste capítulo.

1.2. Revisão Bibliográfica

Nas últimas décadas, muitos esforços têm sido feitos no sentido de melhorar a acurácia das soluções numéricas obtidas, bem como a relação entre os dados vindos da geologia e sua representação nos simuladores voltados para a indústria petrolífera. Alguns seguimentos da literatura propuseram adequações entre a malha usada nas simulações e os dados vindos das análises geológicas. O uso de coordenadas generalizadas para honrar as estratigrafias (Maliska e Czesnat, 2003) e a separação entre “malha geológica” e a malha de simulação (Mallison *et al.*, 2013), característico da estratégia SKUA (*Subsurface Knowledge Unified Approach*), são exemplos disso. Novas formulações numéricas, robustas para lidar com malhas e tensores de permeabilidade arbitrários, também têm sido frequentemente propostas.

Em meados da década de 1990, Crumpton *et al.*, (1995) propuseram uma formulação numérica consistente para lidar tensores não diagonais em problemas de difusão com coeficientes descontínuos. Isso possibilitou a obtenção de soluções convergentes para problemas onde o TPFA não converge. Além disso, a formulação proposta por Crumpton *et al.* (1995) reproduz, exatamente, soluções lineares por partes, o que não necessariamente ocorre para outras formulações numéricas (Rees *et al.*, 2004 *apud* Carvalho, 2005; Lipnikov *et al.*, 2007; Queiroz *et al.*, 2013). Apesar da restrição às malhas estruturadas, a referida proposição serviu de inspiração para uma infinidade de esquemas numéricos fundamentadas na aproximação dos fluxos difusivos por múltiplos pontos. Uma alternativa à formulação proposta por Crumpton *et al.* (1995), fundamentada no Método de Diferenças Finitas (*Finite Difference Method* - FDM) e também convergente para tensores não diagonais, foi apresentada por Hyman *et al.* (1997). No entanto, a solução simultânea de pressão e velocidade representa um elevado custo

computacional em relação a outras formulações do gênero. Os métodos de Elementos Finitos (*Finite Element Method* - FEM) e o *Control Volume Finite Element Method* (CVFEM), também são frequentemente empregados para essa finalidade. Alguns autores (Maliska, 2004; Hurtado *et al.*, 2007) referenciam o CVFEM como *Element Based Finite Volume Method* (EbFVM), uma vez que, segundo esses autores, essa nomenclatura é mais adequada. Os trabalhos de Malta *et al.* (1995) e Huratdo *et al.* (2007), bem como suas referências, são relevantes aplicações de FEM e CVFEM ou EbFVM, respectivamente, na área de petróleo.

Variantes das ideias de Crumpton *et al.*, (1995), fundamentadas no Método de Volumes Finitos (*Finite Volume Method* - FVM), foram propostas, independentemente, por Aavatsmark *et al.*, (1998) e Edwards e Rogers (1998). A imposição de continuidade de fluxo nas superfícies de controle e a aproximação desses fluxos por múltiplos pontos, como na proposta de Crumpton *et al.* (1995), são características marcantes desses esquemas numéricos, denominados na literatura (Aavatsmark *et al.*, 1998) como MPFA (*Multi-Point Flux Approximation*), ou *Flux Continuous Finite Volume* (Edwards e Rogers, 1998). A concepção desses métodos implica em flexibilidade para lidar com tensores e malhas arbitrários, configurando, portanto, uma generalização dos tradicionais métodos TPFA. Apesar disso, a utilização dos métodos MPFA mais clássicos, como o MPFA-O, MPFA-U ou MPFA-Z (Aavatsmark *et al.*, 1998; Aavatsmark e Eigestad, 2006), pode produzir resultados onde o Princípio do Máximo Discreto (*Discrete Maximum Principle* - DMP) é violado (Edwards e Zheng, 2008; Chen *et al.*, 2008; Kuzmin *et al.*, 2009). Problemas resolvidos com malhas distorcidas, cujo meio é caracterizado por elevada razão de anisotropia são condições passíveis a essas violações (Le Potier, 2005; Nordbotten *et al.*, 2007). Nesses casos, ocorre uma violação da segunda lei da termodinâmica e oscilações espúrias podem ser verificadas nas soluções numéricas, resultando em comportamentos sem significado físico, como pressões absolutas com valores negativos ou calor fluindo de uma região de baixa temperatura para uma de alta temperatura, em problemas de transferência de calor (Yuan e Sheng, 2008).

Na tentativa de mitigar esses problemas, para casos desafiadores, uma nova geração de esquemas numéricos do tipo MPFA foi proposta. As oscilações espúrias nos campos de pressões geradas pelo MPFA-O são minimizadas ou eliminadas por formulações alternativas do MPFA (Edwards e Zheng, 2008; Chen *et al.*, 2008; Aavatsmark *et al.*, 2008; Gao e Wu, 2010). Nos chamados MPFA com suporte completo de pressão, não há garantia de que as soluções satisfaçam o DMP, especialmente em problemas com elevada anisotropia e malhas que não são k-ortogonal (Zheng, 2010). No entanto, em muitos casos, essas oscilações são substancialmente amenizadas. Os métodos MPFA-FPS (*Full Pressure Support*), proposto por Edwards e Zheng (2008), MPFA-*Enriched* (Chen *et al.*, 2008), MPFA-*Diamond* (Gao e Wu, 2010) e o MPFA-L, com o estêncil compacto e orientado na direção principal da anisotropia em cada volume de controle (Aavatsmark *et al.*, 2008) são outras variações encontradas na literatura.

Outras estratégias, também com características TPFA ou MPFA, fazem uso de operadores não lineares para garantir apenas a positividade das soluções (Lepotier, 2005; Lipnikov *et al.*, 2007). Nesses casos, valores extremos positivos são admissíveis, violando a condição DMP. O método não linear proposto por Lepotier (2005) e revisitado por Lipnikov *et al.* (2007), preserva a positividade das soluções pelo uso de coeficientes que também dependem da pressão (caracterizando a não linearidade), mesmo em problemas lineares. Uma métrica para determinar o ponto de colocação (interpolação) em cada volume de controle também contribui para a positividade das soluções. Há, no entanto, formulações não lineares capazes de lidar com malhas poligonais quaisquer e que respeitam o DMP, i.e., valores mínimos e máximos são honrados (Kuzmin *et al.* 2009; Sheng e Yuan, 2012; Gao e Wu, 2015).

Em geral, a construção dos métodos MPFA não lineares centrados na célula (*cell-centered*), requer a contribuição de valores de pressão associados aos vértices do volume de

controle ou de outros pontos auxiliares denominados harmônicos (Lipnikov *et al.*, 2007; Sheng e Yuan, 2011, Gao e Wu (2015). Existem, no entanto, algumas variantes de métodos não lineares livres de interpolações em pontos auxiliares (Lipnikov *et al.*, 2009). Para os que dependem de técnicas de interpolação, valores auxiliares são escritos como função das pressões associadas aos volumes de controle da vizinhança próxima. As interpolações que garantem coeficientes positivos contribuem para a positividade das soluções (Lepotier, 2005; Lipnikov *et al.*, 2007; Yuan e Sheng, 2008). No entanto, nem sempre, campos lineares por partes são reproduzidos de forma exata com essas estratégias de interpolação (Lipnikov *et al.*, 2007). Segundo Queiroz *et al.*, (2014), o uso de interpolações que preservam a linearidade das soluções, como as propostas por Gao e Wu (2010), associadas ao método não linear proposto por Lepotier (2005), por exemplo, implica na reprodução exata de campos lineares por partes. Os autores também observaram que, infelizmente, a garantia de positividade das soluções é perdida com o uso das interpolações obtidas de Gao e Wu (2010). No entanto, o desempenho dessa combinação, em termos de redução de oscilações espúrias, é superior ao obtido com os métodos MPFA-FPS, MPFA-*Enriched* e MPFA-*Diamond*, mesmo para problemas muito desafiadores. Adicionalmente, algumas formulações não lineares são restritas a aplicações com malhas triangulares (Lepotier, 2005; Lipnikov *et al.*, 2007). Além disso, a não linearidade desses métodos requer o uso de um processo iterativo que preserve a positividade das soluções convergidas obtidas. O método de ponto fixo (Picard) tem essa propriedade, mas a baixa taxa de convergência implica num custo computacional bastante elevado quando se compara com o custo computacional dos métodos MPFA lineares.

No que se refere à aproximação dos termos advectivos na equação de transporte, uma opção atrativa às formulações de primeira ordem tem sido as aproximações de alta ordem, com estratégias do tipo MUSCL (*Monotonic Upstream-Centered Scheme for Conservation Laws*), utilizadas em diversas áreas da física e engenharia (Spekreijse, 1987; Durlofsky *et al.*, 1992; Batten *et al.*, 1996; Kim e Choi, 2000; Chistov e Popov, 2008; Diaz *et al.*, 2009; Delis e Nikolos, 2012). Problemas de aerodinâmica e dinâmica dos gases são resolvidos, no contexto dos Métodos de Diferenças Finitas e Volumes Finitos, com esse tipo de estratégia, desde meados da década de 1970 (van Leer, 1974; van Leer, 1979). Em geral, as aproximações de maior ordem, proporcionadas por essa estratégia, são baseadas em reconstruções polinomiais locais, utilizando dados conhecidos associados à vizinhança próxima (Goosh, 1997; Clain *et al.*, 2011). A condição inicial ou a solução no instante de tempo presente dão esse suporte. Os trabalhos de van Leer (1979) e Colella e Woodward (1984) são pioneiros, respectivamente, na obtenção de aproximações de segunda (reconstrução linear) e terceira ordem (reconstrução quadrática).

A reconstrução de quantidades conservadas, primitivas ou características consiste em uma das principais etapas na obtenção de soluções numéricas de alta ordem (van Leer, 1979; Colella e Woodward, 1984; Barth e Frederickson, 1990). Procedimentos numéricos como o *Essentially Non-Oscillatory* (ENO), proposto por Harten *et al.* (1987) e aprimorado em (Abgrall, 1994; Friedrich, 1998; Hu e Shu, 1999) e o recentemente proposto *Multidimensional Optimal Order Detection* (MOOD), discutido nos trabalhos de Clain *et al.*, (2011), Diot *et al.* (2012), entre outros, são importantes exemplos disso. Com natureza estritamente matemática e, em geral, independente da física simulada (Ivan e Groth, 2011), a reconstrução da variável é comumente empregada em formulações conservativas, centradas no vértice (*cell-vertex*) ou na célula (*cell-centered*). Os trabalhos de (Delanaye e Essers, 1997; Goosh, 1997). Reconstruções baseadas no Teorema da Divergência de Gauss, por exemplo, são extensamente utilizadas para aproximações de segunda ordem em trabalhos conceituados na literatura (Durlofsky *et al.*, 1992; Durlofsky, 1993; Edwards, 2006; Diskin e Thomas, 2010; Delis e Nikolos, 2012). A obtenção dos gradientes se dá de forma simples e sem que seja necessário resolver sistemas algébricos locais. Na variante proposta por Durlofsky *et al.* (1992), informações as-

sociadas ao volume de controle avaliado e vizinhos predeterminados são utilizadas para definir as funções de suporte para o cálculo dos gradientes. Suportes mais robustos (vizinhança de Neumann), também baseados no Teorema da Divergência, são apresentados por Delis e Nikolos (2012). Eventualmente, aproximações de terceira ordem também são obtidas com base nesse procedimento (Betchen e Straatman, 2010). Nesse caso, um sistema algébrico local para cada volume de controle deve ser resolvido a fim de obter os coeficientes do polinômio reconstrutor, o que torna o procedimento um pouco mais complexo.

Reconstruções baseadas na técnica de mínimos quadrados também são extensamente empregadas na literatura (Goosh, 1997; Goosh e van Altena, 2002; Blazek, 2001; Mavripli, 2003; Mandal e Subramanian, 2008; Mandal e Rao, 2011). Para qualquer ordem de aproximação, em reconstruções k -exatas, por exemplo (Barth e Frederickson, 1990), sistemas algébricos locais devem ser resolvidos. O tamanho das matrizes, em cada sistema algébrico local, depende da ordem de aproximação pretendida, o que implica num elevado custo computacional aparente para ordens mais elevadas. No entanto, o pré-processamento de parâmetros exclusivamente geométricos eleva a eficiência desse procedimento. Além disso, essa alternativa é caracterizada pela robustez das aproximações, mesmo para malhas com elevado grau de distorção, o que não ocorre com reconstruções baseadas no teorema da divergência, como observa Diskin e Thomas (2010).

Alternativamente, há na literatura estratégias cujo suporte de reconstrução é restrito apenas ao próprio elemento discreto ou volume de controle avaliado, mesmo para ordens mais elevadas de acurácia. Em princípio, essas estratégias parecem ser vantajosas em relação ao procedimento baseado num suporte menos local. A formulação mais popular, com esse tipo de reconstrução, voltada para solução de problemas de transporte é o Método de Galerkin Descontínuo ou *Discontinuous Galerkin* (DG), proposto e avaliado em uma série de publicações (Cockburn e Shu, 1989; Cockburn *et al.*, 1989; Cockburn e Shu, 1998). Tendo fundamentação em preceitos variacionais (FEM), DG utiliza funções de forma, definidas no interior de cada elemento discreto, sendo, portanto, desnecessário o uso de elementos da vizinhança para promover a reconstrução da variável. Possíveis discontinuidades nessa variável são admitidas apenas nas fronteiras entre os elementos discretos. Nesse caso, Resolvedores Aproximados de Riemann (Leveque, 1992; Lyra, 1992; Blazek, 2001) são utilizados para o cálculo dos fluxos numéricos, o que torna a referida formulação conservativa (Wang, 2002), tal como aquelas fundamentadas no FVM. Segundo Wang (2002), uma grande desvantagem no uso de DG são as integrais de superfície e de volume, inerentes ao método e computacionalmente caras. Aplicações de DG para a modelagem do escoamento bifásico em reservatórios de petróleo são encontradas nos trabalhos de Riviere (2000), Riviere e Wheeler (2002), Bastian (2002), Ern *et al.* (2010), Bastian (2013), entre outros. Nessas aplicações, o fluxo de Darcy é obtido com Elementos Finitos Mistos (Fučík e Mikyška, 2011) ou mesmo DG aplicado à solução simultânea das equações de pressão e velocidade (Riviere, 2008). Essas formulações são caracterizadas por produzir campos de pressão e velocidade com ordens arbitrárias (Riviere, 2008), dependendo do grau da função de forma utilizada.

Os Métodos de Volumes Finitos Espectrais ou *Spectral Finite Volume* (SFV), proposto por Wang (2002) e extensamente estudado em outras publicações (Wang e Liu, 2002; Wang *et al.*, 2004; Sun *et al.*, 2006; Wang e Liu, 2006; Liu *et al.*, 2006; Abeelee e Lacor, 2007; Breviglieri e Souza, 2010), apresenta características semelhantes ao DG. Contudo, é completamente fundamentado no FVM. A variável de interesse é reconstruída a partir de informações contidas apenas no volume de controle avaliado. Isso é possível devido a uma subdivisão do chamado volume de controle espectral (volume de controle da malha primária) em pequenos subvolumes de controle menores. A equação hiperbólica discreta é, portanto, resolvida para cada subvolume de controle. O número de subdivisões e sua disposição são definidos de acordo com a ordem de aproximação desejada e estão diretamente relacionadas com a

estabilidade da solução (Abeele e Lacor, 2007; Abeele *et al.*, 2007). Adicionalmente, Resolvedores Aproximados de Riemann são utilizados, em geral, apenas nas superfícies do volume de controle espectral (Breviglieri *et al.*, 2010). Nas interfaces internas, utiliza-se o fluxo analítico, o que representa vantagem em termos de custo computacional (Wang, 2002). Algumas exceções são verificadas em circunstâncias particulares, tal como discutido nos trabalhos de Wang (2002) e Breviglieri *et al.* (2012). Embora essa estratégia de reconstrução tenha sido excessivamente utilizada em malhas triangulares e tetraédricas, algumas aplicações também foram propostas para malhas quadrangulares (Choi *et al.*, 2004; Cheruvu *et al.*, 2007).

Uma aplicação do SFV no contexto do escoamento bifásico em meios porosos foi feita por Ramirez (2014) para domínios unidimensionais nos quais um campo de velocidade constante foi imposto. Nesse caso, se tem a velocidade exata em qualquer ponto do domínio avaliado. Não há ainda estudos sobre o acoplamento do SFV com métodos do tipo MPFA, por exemplo, de modo que se tenha um campo de velocidades calculado a partir da distribuição de pressão em problemas multidimensionais.

O Método de Diferenças Finitas Espectrais ou *Spectral Finite Difference* (SFD), proposto por Liu *et al.* (2006), surgiu como uma evolução do SFV e também é inteiramente fundamentado no FVM (May e Jameson, 2006; Balan *et al.*, 2012). A localidade dos dados necessários à reconstrução se mantém, tal qual nos métodos DG e SFV. Além disso, no SFD, a subdivisão do volume de controle da malha primária não é necessária, tal como no SFV. Dessa forma, alguns problemas de estabilidade nas soluções numéricas, relacionados a esse “particionamento” são superados. Os cálculos de integrais de volume e de superfícies também não são requeridos, o que torna o SFD atrativo em relação ao DG (Balan *et al.*, 2012). O recentemente proposto Procedimento de Correção via Reconstrução (Gao e Wang, 2013) ou *Correction Procedure via Reconstruction* (CPR) diminui, em relação ao SFD, o número de pontos de quadratura necessários à obtenção de ordens maiores do que dois.

Comparações entre DG, SFD e CPR na solução de problemas hiperbólicos lineares evidenciam o elevado custo computacional das integrais em DG, bem como o baixo custo computacional devido à necessidade de menos pontos de solução e de fluxo no CPR (Liang e Plesniak, 2013; Yu *et al.*, 2013). Yu *et al.*, (2013) também destacam que, para vários experimentos numéricos, os valores absolutos dos erros obtidos com SFD são, em geral, menores do que os obtidos com DG e CPR.

Para todas as estratégias de reconstrução mencionadas, funções limitadoras não lineares são frequentemente utilizadas na tentativa de garantir soluções com monotonicidade (Leveque, 1992). A ação da função limitadora, em regiões de descontinuidade, faz com que a aproximação inicialmente de alta ordem, seja reduzida para primeira ordem, que é caracterizada pela monotonicidade. Regiões suaves do escoamento permanecem com aproximações de alta ordem. Dessa forma, descontinuidades na solução podem ser representadas sem que oscilações espúrias ocorram. Nesse caso, o campo de solução no domínio computacional é aproximado com alta resolução (Leveque, 1992).

Há na literatura várias opções de funções limitadoras (van Leer, 1979; Zalezak, 1979; Roe, 1983; van Albada *et al.*, 1982; Sweby, 1984; Barth e Jespersen, 1989; Venkatakrishnan, 1995; Woodfield *et al.*, 2004; Berger *et al.*, 2005; Cada e Torrilhon, 2009; Clain *et al.*, 2011; Park e Kim, 2011; Park e Kim, 2012; Diot *et al.*, 2012). Dentre essas, destacam-se as funções limitadoras de face e de volume de controle (Berger *et al.*, 2005). As limitadoras de face têm um caráter unidimensional e são baseadas na avaliação de extremos locais, levando em conta apenas informações dos volumes de controle que compartilham cada superfície de controle (van Leer, 1979). Em alguns casos, a ação dessas funções limitadoras não é completamente eficaz para produzir soluções monotônicas (Woodfield *et al.*, 2004; Berger *et al.*, 2005). A falta de “multidimensionalidade” na avaliação de possíveis extremos locais é uma causa frequente disso (Clain *et al.*, 2011). Contreras *et al.* (2015) avaliaram problemas onde isso ocorre

para o contexto do escoamento bifásico de água e óleo em reservatório de petróleo. Os autores verificaram que, para alguns problemas envolvendo malhas distorcidas ou tensores de permeabilidade muito anisotrópicos, as soluções de alta ordem só são livres de oscilações espúrias quando um limitador baseado na avaliação de toda a vizinhança do volume de controle (Woodfield *et al.*, 2004) é invocado junto com o limitador de face do tipo van Albada (Löhner, 2001). No entanto, essa composição entre limitadores de face e de volume de controle pode adicionar excessiva difusão numérica, chegando a descaracterizar a aproximação de alta ordem (Contreras *et al.*, 2015).

Funções limitadoras de volume de controle foram propostas por Zalezak (1979) para aplicação em estratégias do tipo *Flux Corrected Transport* (FCT), previamente proposta por Boris e Book (1972). Nesses casos, em geral, mais difusão numérica é introduzida às soluções obtidas (Woodfield *et al.*, 2004). Por outro lado, para um dado volume de controle, valores extremos são detectados, mesmo que sejam provenientes de vértices não pertencentes à face avaliada. Park *et al.* (2010) propuseram um procedimento de limitação que avalia a existência de valores extremos em todo o volume de controle, tal como na proposta de Zalezak (1979). O procedimento de limitação tem um caráter “multidimensional”, sendo, portanto, chamado na literatura de *Multidimensional Limiting Process* (MLP). Variações do MLP para limitação de ordens arbitrárias também podem ser encontradas nos trabalhos de Park e Kim (2011) e Park e Kim (2014). Com base em experimentos numéricos, os autores afirmam que soluções acuradas são observadas para problemas hiperbólicos em geral (Park *et al.*, 2010; Park e Kim, 2012). Aplicações da estratégia MLP voltadas para a área petrolífera podem ser encontradas nos trabalhos de Souza *et al.* (2015a) e Souza *et al.* (2015b). Comparações entre o MLP e funções limitadoras mais tradicionais exaltam o desempenho dessa nova estratégia de limitação. Além disso, a abordagem multidimensional do MLP evita que oscilações espúrias sejam produzidas, mesmo quando escoamentos transversais à malhas distorcidas são simulados. O mesmo não se verifica para o limitador de face utilizado (Souza *et al.*, 2015a). A extensão natural do MLP para aproximações com ordem maior do que dois é outro atrativo da estratégia, embora Clain *et al.* (2011) afirmem que a limitação de ordens arbitrárias ainda é um tema mal resolvido na literatura.

Algumas estratégias encontradas na literatura têm como proposta mais do que a simples ação de limitar extremos. A estratégia MOOD, por exemplo, funciona como um “gerenciador” de aproximações de alta ordem (Clain *et al.*, 2011; Diot *et al.*, 2012; Diot *et al.*, 2013; Berthon, 2014; Loubère *et al.*, 2014; Dumbser *et al.*, 2014). Assim como na estratégia ENO (Harten *et al.*, 1987), etapas como reconstrução, limitação (não necessariamente para o ENO), cálculo de fluxos numéricos e avanço no tempo estão contidos em uma estrutura maior. O diferencial do MOOD é a proposta de limitação *a posteriori* (Clain *et al.*, 2011), o que não é comum na literatura (Clain *et al.*, 2011). No MOOD, após o novo campo ser calculado provisoriamente em um instante de tempo futuro, sem limitação *a priori* e com aproximação de alta ordem, uma busca por volumes de controle “problemáticos” é feita. A violação do DMP é o parâmetro que indica se o volume de controle é ou não problemático. Para aqueles volumes de controle que violam o DMP, a ordem de aproximação é diminuída e a equação discreta é resolvida novamente, apenas nos volumes de controle problemáticos, utilizando dados do instante de tempo conhecido. Uma vez que não há mais volumes de controle problemáticos, o campo de solução no instante de tempo futuro é definitivamente obtido. A avaliação de extremos *a posteriori* tem alguns problemas. Diot *et al.* (2012) observaram que a ausência de limitação *a priori* produz comportamentos físicos inadmissíveis como massa específica e pressões absolutas negativas numa clara violação da segunda lei da termodinâmica. Para resolver esse problema, critérios para detecção de física admissível ou *Physical Admissible Detection* (PAD) foram introduzidos à medida que o MOOD foi sendo aplicado às distintas áreas onde leis de conservação são relevantes. A tentativa de aplicação da estratégia MOOD na so-

lução do modelo de Buckley-Leverett, estudada por Souza *et al.* (2012), evidenciam um problema a ser ainda solucionado. Extrapolações de alta ordem, sem limitação *a priori*, de saturação de água, por exemplo, podem levar a valores negativos da variável que é usada como argumento na função fluxo fracionário (i.e., a saturação). Isso pode levar a uma completa desconexão com a física simulada já que saturações negativas produzem fluxos fracionais positivos, sem significado físico. Nesse caso, critérios PAD, específicos, devem ser estudados e definidos para esse problema.

Após as etapas de reconstrução da variável e posterior limitação, quando necessário, os fluxos discretizados nas superfícies de controle de cada volume discreto são calculados. Seguindo a nomenclatura adotada em Leveque (1992), esses fluxos serão referenciados como fluxos numéricos ao longo deste texto. Para garantir conservação no cálculo desses fluxos numéricos, mesmo quando há descontinuidade na propriedade transportada, um Resolvedor Aproximado de Riemann deve ser usado (Wang, 2002). O Resolvedor Aproximado de Riemann proposto por Roe (1981) é largamente usado, inclusive em aplicações voltados para escoamento bifásico em reservatórios de petróleo (Carvalho, 2005; Edwards, 2006; Nikitin e Vassilevsky, 2012). No entanto, em muitos casos, se verifica violação da entropia, especialmente em problemas cujo fluxo é definido por uma função não convexa (Leveque, 1992; Lamine, 2009). Algumas técnicas de correção são empregadas no cálculo do fluxo numérico de modo a satisfazer a entropia e consequentemente garantir a convergência da aproximação numérica. A correção de entropia proposta por Shu e Osher (1989) e largamente usada em diversas áreas (Wang, 2002 e Serna, 2009), foi adequada ao modelo de Buckley-Leverett por Lamine (2009). O autor destaca a necessidade dessa correção para problemas onde efeitos gravitacionais são relevantes e a curva de fluxo apresenta mudança de sinal na derivada (ponto sônico). Nesse caso, uma variante do fluxo de Lax-Friedrichs, denominado *Local Lax-Friedrichs* (LLF) é usado no lugar do fluxo de Roe (1981), garantindo a satisfação da entropia (Leveque, 1992; Carvalho, 2005). Serna (2009) propôs, no contexto da magneto-dinâmica, uma forma modificada da correção de entropia tradicional (Shu e Osher, 1989). A autora invoca o fluxo do tipo LLF seguindo outros critérios além da existência do ponto sônico. Resultados com coerência física são observados para a nova abordagem.

Por fim, a susceptibilidade das soluções numéricas à orientação da malha adotada é um problema em diversas áreas onde a simulação é relevante (Todd *et al.*, 1972; Levy *et al.*, 1989; Powell *et al.*, 1993). Devido a certas características inerentes ao problema físico na simulação de escoamentos em reservatórios de petróleo, esse efeito pode ser ainda mais importante. Instabilidades são observadas na solução de modelos que governam escoamentos multifásicos em meios porosos quando razões de mobilidade adversas são consideradas (Todd *et al.*, 1972). Esse fenômeno foi relatado inicialmente no trabalho de Todd *et al.* (1972) e posteriormente avaliado por Yanosik e McCracken (1979), Ko e Au (1979) e Bajor e Cormack (1989). Brand *et al.* (1991) apontam, com base em análise de estabilidade linear das equações, “gatilhos” que deflagram as instabilidades. Os autores fazem uma análise abrangente da influência de características físicas e numéricas que tornam as instabilidades mais ou menos pronunciadas. Efeitos de capilaridade, razão entre mobilidades, ordem de aproximação e refinamento da malha são alguns dos parâmetros avaliados.

Na década de 1970, Yanosik e McCracken (1979) e Ko e Au (1979) utilizaram, no contexto do FDM, estêncis de nove pontos em domínios bidimensionais para aproximar a equação de pressão em problemas de escoamento bifásico em meios porosos. O caráter multidimensional dos estêncis aumentados, em relação ao estêncil tradicional de cinco pontos (Pieceman, 1977), minimizou certos Efeitos de Orientação de Malha para problemas com razão de mobilidades adversa. Apesar dos resultados promissores, as estratégias são restritas às malhas cartesianas e, assim como os esquemas TPFA, de modo geral, não admitem a representação da permeabilidade por tensores não diagonais. Nos últimos anos, novos seguimentos têm sur-

gido na literatura a fim de resolver ou amenizar esse problema. Os chamados esquemas numéricos Verdadeiramente Multidimensionais (*Truly Multidimensional*) ou Orientados pelo Escoamento (*Flow Oriented*) são uma tentativa de minimizar os efeitos das instabilidades descritas por Todd *et al.* (1972).

As ideias de Colella (1990) e Schneider e Raw (1986), originalmente propostas no contexto de dinâmica dos fluidos, foram, respectivamente, adaptadas por Edwards (2003) e Hurtado *et al.* (2007), pela primeira vez, para aplicações em escoamento multifásico em reservatórios de petróleo. Formulações centradas no vértice (*node-centered*), com aproximação de primeira ordem, foram utilizadas nos dois casos. Um ponto em comum entre as ideias de Colella (1990) e Schneider e Raw (1986) é o caráter multidimensional dos fluxos numéricos calculados nas superfícies de controle. Essa multidimensionalidade se dá por meio de uma combinação convexa dos valores de saturação da água ou fluxo fracionário, cuja proporção é definida de acordo com a orientação do escoamento. Nos dois casos, o caráter unidimensional, tradicionalmente empregado no cálculo de fluxos numéricos, como nos trabalhos de Edwards (2006) e Chueh *et al.* (2010), é recuperado nos casos em que a orientação do escoamento é normal à superfície de controle (Hurtado *et al.*, 2007; Lamine e Edwards, 2010; Kozdon *et al.*, 2011). Por outro lado, uma diferença marcante entre as duas propostas é a necessidade da solução de sistemas algébricos locais no esquema numérico adaptado por Hurtado *et al.* (2007). Na proposta adaptada por Edwards (2003), a variável multidimensional é obtida de forma explícita, sem a solução de sistemas algébricos locais. A definição da orientação do escoamento, necessária à composição convexa, se dá, nesse caso, por uma direção preferencial média da velocidade, calculada sobre a face avaliada. Segundo Lamine (2009), resultados com oscilações espúrias podem ser observadas quando malhas muito distorcidas, associadas a variações significativas de velocidade são levadas em conta no cálculo dessa direção preferencial média.

Extensões da proposta de Edwards (2003) para malhas quaisquer e aproximações de alta ordem podem ser encontradas nos trabalhos de Lamine e Edwards (2010) e Lamine e Edwards (2013), respectivamente. Nos dois casos, formulações *node-centered* são utilizadas. A aproximação proposta por Hurtado *et al.* (2007) foi adaptada por Kozdon *et al.* (2011) e Keilegavlen *et al.* (2012) para formulações *cell-centered* com aplicação em malhas estruturada e não estruturada, respectivamente. Nos dois casos, aproximações de primeira ordem foram consideradas. No entanto, no trabalho de Tran *et al.* (2005), uma variante com aproximação de segunda ordem, *node-centered*, desse esquema numérico é proposta para problemas de transferência de calor.

Recentemente, Eymard *et al.* (2011) propuseram uma forma diferente das propostas Verdadeiramente Multidimensionais encontradas na literatura. Para obter a multidimensionalidade do fluxo numérico em cada superfície de controle, os autores fazem uma combinação linear entre valores de vazão total, calculados em todas as faces da vizinhança próxima à face avaliada. Diferente das propostas de Edwards (2003) e Hurtado *et al.*, (2007), que definem um peso para a combinação convexa em cada região de interação, o peso usado por Eymard *et al.* (2011) é definido uma vez e válido para todos os problemas avaliados. Nessa proposta o peso é obtido por meio da avaliação da “isotropia” do erro de truncamento na malha adotada, i.e., o parâmetro que pondera os diversos valores de vazão total é obtido de modo que o erro de truncamento em uma malha alinhada seja o mesmo obtido em uma malha transversal em um problema de um quarto de cinco poços, por exemplo (Eymard *et al.*, 2011). Embora os resultados apresentados pelos autores sejam muito promissores, há ainda uma forte dependência na construção do método, e do peso para a combinação linear, em malhas estruturadas e cartesianas, além da aproximação ser essencialmente de primeira ordem.

Algumas dentre as técnicas numéricas descritas nessa seção constituem a base do presente trabalho. Os objetivos almejados, bem como a contribuição deste trabalho para o estado da arte aqui descrito são apresentados nas seções seguintes.

1.3. Objetivos

O presente trabalho tem como objetivo geral produzir “novos” algoritmos que promovam uma solução robusta e com alta resolução para o modelo matemático que governa o escoamento bifásico (água e óleo), incompressível e imiscível em reservatórios de petróleo indeformáveis, heterogêneos e anisotrópicos. A ideia de robustez, mencionado acima, consiste na diminuição da dependência dos resultados produzidos na forma como certas propriedades físicas são representadas ou no tipo de malha adotada para obter esses resultados. Tensores de permeabilidades cheios e razões de mobilidade adversas, por exemplo, além de malhas não estruturadas ou estruturadas com elevado grau de distorção, podem influenciar consideravelmente os resultados obtidos para os algoritmos frequentemente utilizados em simuladores comerciais voltados para a indústria do petróleo. A alta resolução pretendida, também mencionada acima, se caracteriza pela obtenção de resultados acurados, em malhas pouco refinadas, preservando, no entanto, a monotonicidade das soluções, independente das características físicas ou numéricas consideradas.

Para alcançar essa meta, alguns objetivos específicos são estabelecidos: no que se refere à equação de pressão, pretende-se estudar alguns exemplos de uma nova geração de formulações, consistentes para lidar com tensores de permeabilidade e malhas quaisquer; comparar essas formulações entre si e com a tradicionalmente empregada nesse contexto; verificar qual, dentre essas formulações, produz resultados mais robustos, inclusive para meios com elevada anisotropia e alta heterogeneidade. Para a aproximação do termo de mobilidade total, que é o parâmetro de acoplamento entre as equações escalares a serem resolvidas, pretende-se investigar diferentes estratégias de aproximação para esse termo; comparar essas alternativas, inclusive com àquela tradicionalmente empregada, de modo a verificar a influência de cada proposta sobre os resultados obtidos.

Na aproximação da equação de saturação, onde, de fato, está a contribuição do presente trabalho, como melhor descrito na próxima seção, diferentes formas de intervenção são almejadas. No que se refere à aproximação de alta ordem no espaço, pretende-se investigar estratégias, fundamentadas no Método de Volumes Finitos, para reconstruir a variável com aproximação de alta ordem (2ª a 4ª ordem no erro de truncamento); avaliar diferentes formas de calcular os fluxos numéricos (reconstrução na variável primária ou no fluxo) com a estratégia de reconstrução adotada; investigar a influência do estêncil, usado na etapa de reconstrução, sobre os resultados obtidos; estudar novas estratégias de limitação com características multidimensionais, recentemente propostas na literatura; comparar essas estratégias com as comumente empregadas em aproximações de alta ordem no contexto de escoamento multifásico em reservatórios de petróleo. Outra intervenção pretendida para a equação de saturação é o emprego de técnicas Verdadeiramente Multidimensionais ou Orientadas pelo Escoamento, nas quais o fluxo numérico é aproximado levando-se em conta dados distribuídos ao longo da orientação do escoamento. Nessa abordagem, pretende-se investigar as principais estratégias existentes na literatura; propor uma “nova” estratégia ou uma característica diferente para uma estratégia já existente; comparar os resultados obtidos, por meio da estratégia proposita, com os obtidos com outras formulações estudadas. Por fim, pretende-se investigar algumas técnicas encontradas na literatura para tratar termos de fonte pontuais, com certa “rigidez” para uma aproximação adequada. Adicionalmente, uma nova estratégia para obter soluções

que satisfaçam a entropia também é investigada. Os resultados obtidos com essa abordagem são comparados com os obtidos sem qualquer estratégia para garantir a satisfação da entropia.

1.4. Contribuições do Trabalho

A contribuição do presente trabalho se dá na avaliação de diferentes estratégias para aproximar a mobilidade total, na equação de pressão, e em uma série de intervenções na equação de transporte (saturação). No que se refere à aproximação da mobilidade total, se observa que a forma com que esse parâmetro é aproximado, influencia os resultados numéricos obtidos. Tal como discutido no Capítulo 3 e verificado nas soluções numéricas apresentadas no Capítulo 4, a adoção dessas “novas” estratégias de aproximação reduzem efeitos de orientação de malha, para certos problemas *benchmark*, em relação à estratégias tradicionalmente usadas.

Dentre as intervenções propostas para a equação de saturação, destacam-se: o emprego de aproximações com ordem maior do que 2 no erro de truncamento; a adoção de um novo limitador com natureza multidimensional na detecção de extremos locais, originalmente proposta para uso no contexto de aerodinâmica; a utilização de uma variante Verdadeiramente Multidimensional com aproximação de alta ordem e um tratamento de poço para evitar ocorrência de oscilações espúrias nas curvas de produção.

A reconstrução polinomial do tipo *k*-exata, fundamentada na técnica de mínimos quadrados (Barth e Frederickson, 1990), é usada para aproximações de segunda a quarta ordem no erro de truncamento. Esse tipo de abordagem, no contexto do Método de Volumes Finitos, não é comumente encontrada na literatura de simulação em reservatórios de petróleo. Por outro lado, aproximações com *Descontinuous Galerkin*, para ordens arbitrárias são fartamente encontradas nesse segmento da literatura (Riviere, 2000; Riviere e Wheeler, 2002; Bastian 2002; Riviere, 2008; Ern *et al.*, 2010; Bastian, 2013). No entanto, o elevado custo computacional associado à essa estratégia de reconstrução muitas vezes é visto como uma desvantagem (Wang, 2002; Liang e Plesniak, 2013; Yu *et al.*, 2013). Além disso, mesmo para aproximações de segunda ordem, tão frequentemente encontradas na literatura de engenharia de reservatórios, reconstruções fundamentadas na técnica de mínimos quadrados são mais robustas do que as baseadas no Teorema da Divergência de Gauss (Diskin e Thomas, 2010), utilizado nos trabalhos de Durlofsky (1993), Edwards (2006), Lamine e Edwards (2013), dentre outros.

O *Multidimensional Limiting Process* (MLP), proposto por Park *et al.* (2010) para aplicações em aerodinâmica é, no presente trabalho, incorporado à literatura voltada para simulação de escoamentos em reservatórios de petróleo. Essa estratégia de limitação é caracterizada pela robustez e acurácia das soluções, mesmo para problemas cujo meio é anisotrópico e malhas com acentuadas distorções e desalinhadas com a direção do fluxo são adotadas. Além disso, o MLP é naturalmente extensível à aproximações com ordens arbitrárias (Park e Kim, 2011; Park e Kim, 2014), sendo portanto uma excelente alternativa para limitar as aproximações de alta ordem estudadas nesse trabalho.

A formulação Verdadeiramente Multidimensional proposta por Hurtado *et al.* (2007), é reproduzida no presente trabalho com algumas variações. Além de centrada na célula, como na abordagem de Kozdon *et al.* (2011), essa “nova” variante também tem características do esquema numérico apresentado nos trabalhos de Edwards (2003) e Lamine e Edwards (2013). Uma delas é a aproximação das variáveis nas superfícies de controle, calculadas sem que seja necessário resolver um sistema algébrico local por região de interação. Essa abordagem representa uma diferença marcante das estratégias propostas por Hurtado *et al.* (2007) e Kozdon *et al.* (2011). Aproximações de alta ordem também foram utilizadas nos fluxos numéricos para essa classe de métodos. Adicionalmente, uma modificação, própria do presente trabalho, com relevância apenas em malhas distorcidas, consiste em uma forma adaptativa com que a função

de controle garante a combinação convexa nas aproximações Verdadeiramente Multidimensionais. Esse procedimento leva em conta distorções locais na malha de modo que um fator de correção eleva ou diminui a multidimensionalidade das aproximações. Essa modificação é adaptada à função de controle proposta por Hurtado *et al.* (2007), dada sua suavidade (*Smooth Multidimensional Upstream* - SMU), cuja relevância é exaltada na literatura (Lamine, 2009; Kozdon *et al.*, 2011; Keilegavlen *et al.*, 2012). Naturalmente, em malhas ortogonais, esse fator adaptativo é unitário e a função de controle SMU é recuperada.

Por fim, Tendo em vista alguns problemas de oscilação observados nas curvas de produção para aproximações de alta ordem, uma sequência de procedimentos é proposta no presente trabalho visando promover uma espécie de tratamento nos poços produtores. Dessa forma, um fator de relaxação, tal como descrito em Date (2005), é associado com um procedimento preditor-corretor, conhecido como passo fracionário, implementado tal como descrito em Leveque (1992), para problemas hiperbólicos em geral, e Carvalho (2005), para aplicações em escoamento bifásico em reservatórios. Um fracionamento no passo de tempo também é proposto de modo que a “rigidez” do termo fonte (Leveque, 1992) seja amenizada. Assim, todo o domínio avança no passo de tempo submetido à condição de CFL e os volumes de controle associados aos poços produtores marcham em um ritmo mais lento, submetidos a um passo de tempo mais conservador, cuja definição recebe a influência do termo fonte. Essa junção de procedimentos é sempre utilizada apenas nos volumes de controle associados aos poços produtores e eliminam ou minimizam substancialmente as oscilações espúrias observadas em algumas problemas *benchmark*.

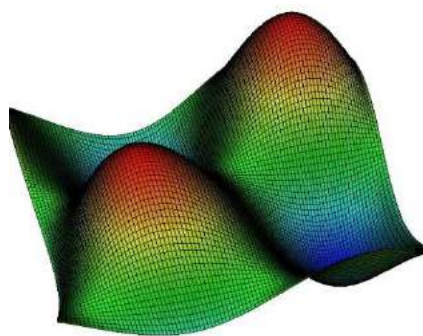
Todas as formulações numéricas empregadas no presente trabalho são fundamentadas no Método de Volumes Finitos. O volume de controle discreto, para o qual a equação aproximada é formulada, é coincidente com o elemento da malha gerada. Isso caracteriza uma formulação centrada na célula ou *cell-centered*. Os algoritmos são todos implementados em linguagem Matlab® (Otto e Denier, 2005). Por ser uma linguagem de prototipagem rápida, os algoritmos abordados podem ser implementados de forma mais direta, i.e., utilizando uma série de funções disponibilizadas na biblioteca dessa plataforma. Em linguagens de codificação mais tradicionais, toda operação, especialmente com matrizes, deve ser implementada pelo usuário. A geração das malhas adotadas e a visualização dos resultados obtidos são, respectivamente, feitas com os softwares de uso livre GMSH® (Geuzaine e Remacle, 2009) e VisIt® (LLNS, 2005).

1.5. Escopo do Trabalho

Além do presente capítulo, que tem caráter introdutório, o trabalho é dividido em mais quatro capítulos e quatro apêndices. No Capítulo 2, o modelo matemático adotado e suas hipóteses simplificadoras são apresentados. As técnicas numéricas empregadas na solução das equações governantes introduzidas no Capítulo 2, são descritas em detalhes no Capítulo 3. Apesar de extenso, esse capítulo é descrito seguindo a sequência na qual o algoritmo resolve o acoplamento entre as equações governantes. Inicialmente, a estratégia “macro” de solução é apresentada (estratégia IMPES). Em seguida, as técnicas numéricas usadas para resolver os problemas elíptico e hiperbólico também são descritas. No Capítulo 4 experimentos numéricos envolvendo problemas de referência (*benchmarks*) encontrados na literatura são resolvidos para escoamento monofásico e bifásico (água e óleo). Em uma primeira etapa, problemas representando escoamento monofásico são resolvidos com as formulações numéricas adotadas. Essas são, portanto, comparadas no que se refere a certas características como taxas de convergência, monotonicidade da solução, reprodução de campos lineares, dentre outros aspectos. Na sequência, os problemas envolvendo escoamento bifásico são resolvidos. Os resul-

tados obtidos com os procedimentos numéricos aqui propostos também são comparados com os resultados obtidos com formulações conhecidas na literatura. Positividade e resolução dos resultados, bem como minimização de efeitos de orientação de malha são aspectos relevantes nesses casos. Por fim, conclusões e sugestões para trabalhos futuros são apresentadas no Capítulo 5.

A lista de Apêndices tem a função de trazer esclarecimentos adicionais ao texto corrente. Dessa forma, o entendimento do texto não é prejudicado sem sua consulta. No Apêndice A, se tem uma visão geral sobre linhas características para problemas lineares e não lineares, como é o caso do modelo de Buckley-Leverett. Condições importantes para a representação física correta desse modelo simplificado também são discutidas. No Apêndice B, diferentes formas de calcular os gradientes de pressão para os esquemas do tipo MPFA são deduzidos em detalhes. A técnica de reconstrução, necessária para aproximações de alta ordem, é descrita em detalhes no Apêndice C. Por fim, dados complementares à alguns exemplos numéricos apresentados no Capítulo 4 são disponibilizados no Apêndice D. Esses dados não são, necessariamente, essenciais para a avaliação do desempenho das formulações investigadas no referido capítulo. Tabelas e gráficos são apresentados nos quais certos parâmetros são comparados de modo a se definir a melhor configuração considerada para cada exemplo.



2

Modelo Matemático

2.1. Introdução

Reservatórios de petróleo são, em geral, caracterizados por apresentarem geometrias complexas e conter hidrocarbonetos constituídos de diferentes componentes nas fases líquida, gasosa ou ambos, além de água conata (Islan *et al.*, 2010). Modelos matemáticos são comumente empregados na indústria petrolífera para predição do comportamento desses hidrocarbonetos dentro das rochas reservatório (Helmig, 1997). Apesar da complexidade dos fenômenos envolvidos nessa área, modelos matemáticos mais simples também podem ser considerados para uma variedade de aplicações práticas (Chen *et al.*, 2006; Islan *et al.*, 2010). No presente capítulo, as equações básicas que governam o escoamento bifásico (água e óleo) em rochas reservatório são descritas. Conceitos fundamentais, necessários ao entendimento do fenômeno simulado também são sucintamente apresentados.

2.2. Conservação da Massa e Lei de Darcy

O modelo matemático adotado no presente texto é concebido a partir de hipóteses simplificadoras, impostas sem que se perca generalidade. Inicialmente, assume-se que a rocha reservatório tem uma distribuição uniforme de espaços vazios. A relação entre o volume total desses espaços vazios V_{Vazios} e o volume do reservatório avaliado $V_{\text{Reservatório}}$, define a porosidade ϕ da seguinte forma (Aziz e Settari, 1979):

$$\phi = \frac{V_{\text{Vazios}}}{V_{\text{Reservatório}}} \quad (1)$$

Assume-se também que apenas dois componentes (água e óleo), cada um em sua respectiva fase, ocupam o volume de vazios arbitrado para a rocha. A fração de um desses componentes, no volume de vazios, define a saturação desse componente no meio poroso, levando à seguinte relação (Aziz e Settari, 1979):

$$S_i = \frac{V_{S_i}}{V_{\text{Vazios}}} \quad (2)$$

onde V_{S_i} representa o volume ocupado pelo componente i , com $i = "w"$ ou $"o"$, representando as fases água e óleo, respectivamente. Assim, as saturações e outras variáveis são referenciadas pelos referidos subscritos (S_w e S_o , por exemplo). Todos os espaços vazios da rocha são, portanto, preenchidos por água e óleo. Uma consequência dessa hipótese é a equação de restrição que segue (Aziz e Settari, 1979; Fanchi, 2001; Chen *et al.*, 2006):

$$S_w + S_o = 1 \quad (3)$$

A rocha é considerada indeformável, de modo que a porosidade ϕ se mantém constante para qualquer intervalo de tempo $[0, t]$, simplificando substancialmente a solução do modelo matemático. Os fluidos também são considerados incompressíveis e imiscíveis.

Devido à imiscibilidade dos fluidos, os componentes água e óleo permanecem nas fases de mesmo nome. Não há, portanto, transferência de massa entre as fases. Adicionalmente, o termo de difusão, característico de equações (parabólicas) governantes de processos miscíveis é, nesse caso, desnecessário. Efeitos térmicos, de adsorção, dispersão e capilaridade são desconsiderados. Por fim, a quantidade de movimento no meio poroso é regida por uma forma generalizada da lei de Darcy, válida para escoamentos em regime laminar, incompressível e com uma relação linear entre as forças viscosas e a velocidade do fluido (Bear, 1988). A condição de não deslizamento é aplicada entre a fase fluida e a rocha, que por sua vez deve ser considerada rígida (Helmig, 1997).

Com a adoção dessas hipóteses, um balanço de massa é feito para cada componente i , em sua respectiva fase. As vazões mássicas que entram e saem do volume elementar representativo ilustrado na figura 1 são definidas para um dado intervalo de tempo. Maiores detalhes desse procedimento podem ser encontrados em Fanchi (2001) e Chen *et al.* (2006).

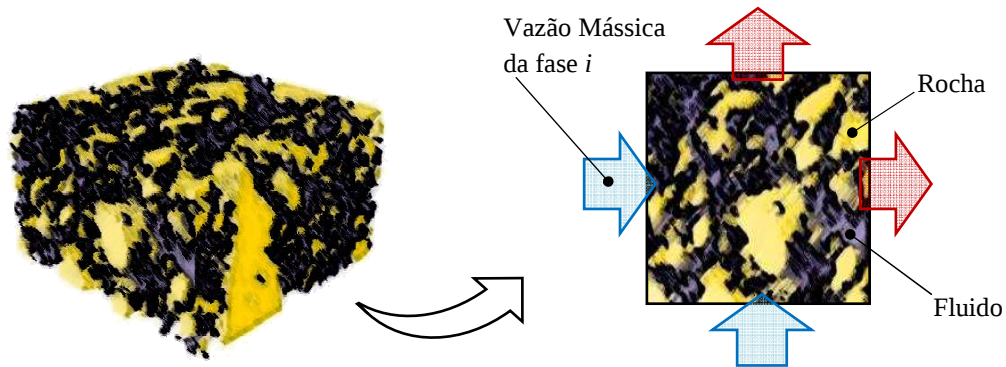


Figura 1. Volume Elementar Representativo para uma rocha reservatório saturada com água e óleo com indicação das vazões mássicas.

Tomando, o domínio computacional $\Omega \subset \mathfrak{R}^2$, ilustrado na figura 2, onde o modelo matemático é válido, tem-se, após algumas manipulações algébricas, a equação de conservação da massa, para cada componente ou fase i , escrita da seguinte forma:

$$\frac{\partial(\phi \rho_i S_i)}{\partial t} = -\nabla \cdot (\rho_i \vec{v}_i) + q_i, \quad i = w, o \quad (4)$$

onde ρ_i e q_i são, respectivamente, a massa específica e o termo de fonte (poço injetor) ou sumidouro (poço produtor) de cada fase i . A velocidade $\vec{v}_i$, também definida para cada fase, é regida pela lei de Darcy em uma forma generalizada (Helmig, 1997; Pinde e Gray, 2008), dada como:

$$\vec{v}_i = -\lambda_i \tilde{K} (\vec{\nabla} p_i - \rho_i \vec{g}), \quad i = w, o \quad (5)$$

Na equação (5), $\vec{g}$ é a aceleração da gravidade. A permeabilidade absoluta da rocha é representada pelo tensor $\tilde{K}(\vec{x})$, que, utilizando coordenadas cartesianas, pode ser escrito, para o modelo bidimensional ($\Omega \subset \mathfrak{R}^2$), como segue:

$$\tilde{K}(\vec{x}) = \begin{bmatrix} K_{xx} & K_{xy} \\ K_{yx} & K_{yy} \end{bmatrix} \quad (6)$$

O tensor $\tilde{K}(\vec{x})$ apresentado na equação (6) deve ser simétrico ($K_{xy} = K_{yx}$) e satisfazer a condição de elipticidade (Crumpton *et al.*, 1995; Edwards e Rogers, 1998; Aavatsmark *et al.*, 1998). Para isso, suas entradas ou componentes devem ser tais que $K_{xx}K_{yy} \geq K_{xy}^2$.

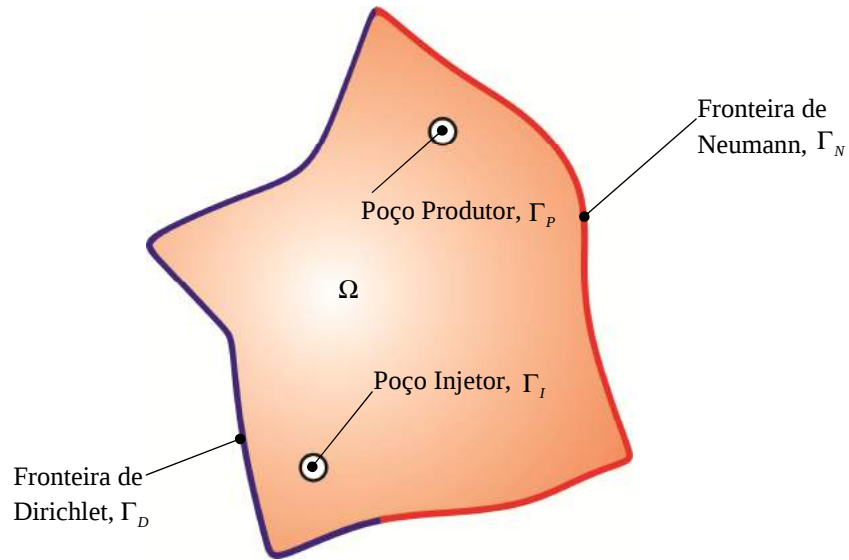


Figura 2. Domínio computacional Ω com indicação de fronteiras de Dirichlet Γ_D e Neumann Γ_N ($\Gamma = \Gamma_D + \Gamma_N$) e poços: injetor Γ_I e produtor Γ_P .

Ainda com respeito à equação (5), $\vec{\nabla} p_i$ e λ_i são, respectivamente, o gradiente de pressão e a mobilidade de cada fase considerada. Esse último parâmetro representa uma medida de quão móvel cada fase é em relação à outra (Fanchi, 2001), sendo definido como:

$$\lambda_i = \frac{k_{ri}}{\mu_i} \quad (7)$$

onde k_{ri} e μ_i são, respectivamente, a permeabilidade relativa a viscosidade absoluta da fase i . A permeabilidade relativa é um parâmetro empírico, obtido a partir de amostras submetidas a escoamentos unidimensionais (Dake, 2001). Em geral, esse parâmetro é expresso como uma função da saturação da fase molhante (água no presente texto) e dá, de forma normalizada, a medida de permeabilidade dessa fase em relação a fase não molhante (óleo). Essa dependência com respeito à saturação, $k_{ri}(S_i)$, pode ser definida com relações constitutivas apresentadas na literatura (Helmig, 1997; Pinder e Gray, 2008). As chamadas relações paramétricas de Brooks-Corey (Corey, 1954 *apud* Kozdon *et al.*, 2011) são frequentemente encontradas em aplicações na literatura e são definidas da seguinte forma:

$$k_{rw} = k_{w,\max} (S_e)^{n_w}; \quad k_{ro} = k_{o,\max} (1 - S_e)^{n_o} \quad (8)$$

onde os expoentes n_w e n_o são parâmetros que podem assumir diferentes valores a depender das propriedades dos fluidos considerados no problema simulado (Lamine e Edwards, 2010; Kozdon *et al.* 2011). Os parâmetros $k_{w,\max}$ e $k_{o,\max}$ são valores, entre 0 e 1, que estabelecem limites máximos para as funções k_{rw} e k_{ro} , respectivamente. Embora se assumam valores unitários para esses parâmetros na maioria dos problemas acadêmicos, aplicações com valores diferentes de 1 podem ser encontradas no trabalho de Khoozan *et al.* (2011). A saturação efetiva, S_e é uma normalização da saturação da fase molhante S_w em relação aos valores de saturação irreduzível de água S_{wi} e residual de óleo S_{or} , sendo, portanto, definido como:

$$S_e = \frac{(S_w - S_{wi})}{(1 - S_{wi} - S_{or})} \quad (9)$$

O modelo de van Genuchten (1980 *apud* Pinder e Gray, 2008) também é frequentemente empregado na literatura. As equações para as fases molhante e não-molhante são definidas da seguinte forma:

$$k_{rw} = k_{w,\max} (S_e)^{\frac{2+3\zeta}{\zeta}}; \quad k_{ro} = k_{o,\max} (1 - S_e)^2 \left(1 - S_e^{\frac{2+\zeta}{\zeta}} \right) \quad (10)$$

Nesse modelo, o parâmetro ζ pode assumir valores entre 2 e 3 (Bastian, 2002). Aplicações desse modelo podem ser encontradas nos trabalhos de Bastian e Helmig, (1999), Bastian (2002) e Fucik *et al.* (2004).

Um terceiro tipo de relação constitutiva encontrado na literatura produz soluções do tipo pistão (*piston-like*). Esse tipo de relação leva à pronunciados efeitos de orientação de malha (Yanosik e McCracken, 1979; Chong *et al.*, 2004; Hurtado *et al.*, 2007a). A dependência das permeabilidades relativas em relação à saturação da fase molhante é dada como:

$$k_{rw} = \frac{S_w^2}{M(1 - S_w^2) + S_w^2}; \quad k_{ro} = 1 - k_{rw} \quad (11)$$

Na equação (11), M é a razão de mobilidades, dada, como o nome sugere, pela razão entre as mobilidades da fase molhante e não molhante (Chen *et al.*, 2006; Slan *et al.*, 2010).

Uma expressão envolvendo apenas as viscosidades de cada fase também é comumente utilizada na definição desse parâmetro (Fanchi, 2001; Lamine e Edwards, 2010):

$$M = \frac{\lambda_w}{\lambda_o} \cong \frac{\mu_o}{\mu_w} \quad (12)$$

Na figura 3, se vê o comportamento de modelos de permeabilidades relativas da água e do óleo em função de valores de saturação da fase molhante, S_w .

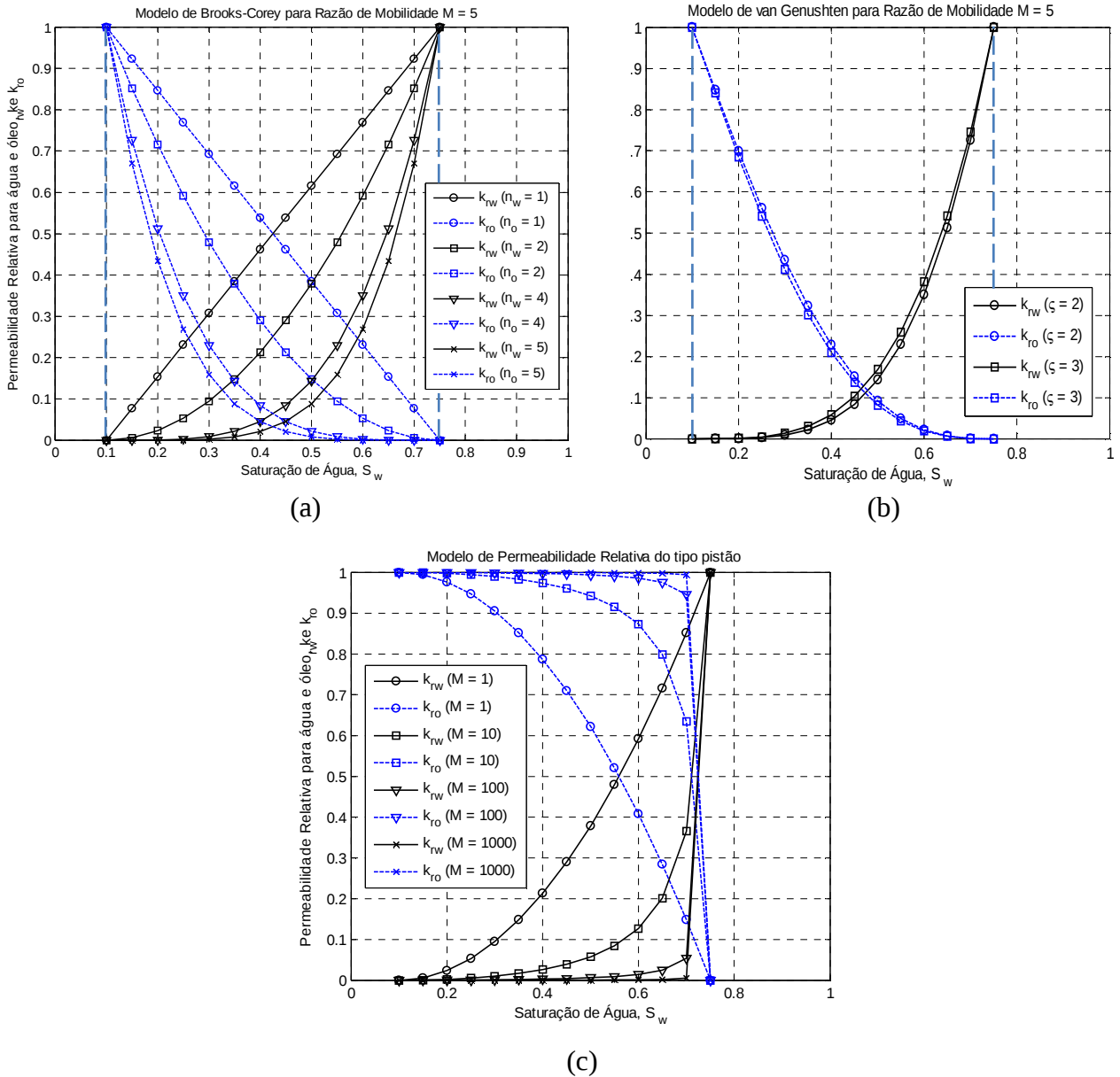


Figura 3. Curvas de permeabilidade relativa em função da saturação de água com razão de mobilidade $M = 5$: (a) para o modelo de Brooks-Corey, utilizando vários expoentes; (b) para modelo de van Genushten; (c) para o modelo do tipo pistão com vários valores de razão de mobilidades, M .

Nas figuras 3a e 3b, os modelos de Brooks-Corey e van Genushten, respectivamente, são mostrados para diferentes valores paramétricos. A razão de mobilidade não altera o comportamento das curvas, embora seja relevante no comportamento das mobilidades.

No modelo do tipo pistão (*piston-like*), apresentado na equação (11), com curvas mostradas na figura 3c, a razão de mobilidades influencia o comportamento das curvas. Nos três modelos, as saturações irreduzível de água S_{wi} e residual de óleo S_{or} são, respectivamente, 0,1 e 0,25 (Pinde e Gray, 2008).

2.3. Escoamento Bifásico em Rochas Reservatório

O modelo matemático que compreende a equação (4), combinada com a equação (5), é resolvido de maneira acoplada em alguns casos (Crichlow, 1977; Bastian e Helmig, 1999; Ertekin *et al.*, 2001; Fanchi, 2001). Nesse tipo de abordagem, um balanço é feito para cada componente considerado (água, óleo ou gás, se o for o caso) resultando em um sistema de equações parabólicas. No presente texto, uma formulação segregada é usada, tal como proposto por Pieceman, (1977) e tem sido frequentemente usado na literatura (Edwards e Rogers, 1998; Edwards, 2006; Hurtado *et al.*, 2007; Lamine e Edwards, 2010; Kozdon *et al.*, 2011; Kou e Sun, 2010; Khoozan *et al.*, 2011). Nesse caso, as equações (3) a (5) são combinadas e após manipulações algébricas se tem, de modo conveniente, uma equação elíptica, cuja solução produz o campo de pressões e uma equação de transporte, que fornece a distribuição de saturação no domínio Ω . A equação de pressão é então escrita da seguinte forma:

$$\vec{\nabla} \cdot \vec{v} = Q \quad \text{com} \quad \vec{v} = -\lambda \vec{\nabla} p + K(\lambda_w \rho_w + \lambda_o \rho_o) \vec{g} \quad (13)$$

onde $\vec{\nabla} p$ representa o gradiente de pressão, $\lambda = \lambda_o + \lambda_w$ é a mobilidade total e $\vec{v} = \vec{v}_w + \vec{v}_o$ é a velocidade total. A vazão total específica de injeção ou produção é representada por $Q = Q_w + Q_o$, onde $Q_i = q_i / \rho_i$.

Para obter a equação de saturação, as equações (3) a (5) são novamente combinadas e manipuladas algebricamente de modo que se tem:

$$\phi \frac{\partial S_w}{\partial t} = -\vec{\nabla} \cdot \vec{F}_w(S_w) + Q_w \quad (14)$$

onde o fluxo $\vec{F}_w(S_w)$, considerando o termo de gravidade, é dado por:

$$\vec{F}_w(S_w) = f_w \vec{v} + f_w \lambda_o K(\rho_w - \rho_o) \vec{g} \quad (15)$$

Na equação (15), f_w é o fluxo fracionário de água, que é uma função da saturação de água e representa a fração de massa da fase molhante transportada no meio poroso. Para entender a definição desse parâmetro, deve-se considerar uma amostra cilíndrica de rocha de seção transversal A_r e permeabilidade absoluta K , inicialmente saturada com óleo. Em um processo de embebedimento, ou seja, injeção de água na rocha para retirada do óleo residente (Pinder e Gray, 2008), o fluxo fracionário de água em cada ponto da amostra rochosa, é dado pela razão entre as vazões de água e total (vazão de água + vazão de óleo). Em uma aplicação mais generalizada onde pressão capilar p_c e o termo de gravidade são considerados, f_w é escrito da seguinte forma (Crichlow, 1977; Fanchi, 2001; Slan *et al.*, 2010):

$$f_w = \frac{\vec{v}_w \cdot \vec{n} A_r}{\vec{v} \cdot \vec{n} A_r} = \frac{1 + \frac{\lambda_o K}{\vec{v} \cdot \vec{n} A_r} [\vec{\nabla} p_c - (\rho_w - \rho_o) \vec{g}] \cdot \vec{n} A_r}{1 + \frac{\lambda_o}{\lambda_w}} \quad (16)$$

Na equação (16), $\vec{n}$ é um vetor unitário e juntamente com A_r define o vetor normal à área da seção transversal da amostra rochosa tomada como exemplo ilustrativo. Nos casos em que os termos de gravidade e capilaridade são desconsiderados, o fluxo fracionário é escrito de uma forma mais simples (Fanchi, 2001; Chen *et al.*, 2006), como segue:

$$f_w = \frac{1}{1 + \frac{\lambda_o}{\lambda_w}} = \frac{\lambda_w}{\lambda} \quad (17)$$

Segundo Fanchi (2001), mesmo quando se considera gravidade, capilaridade ou ambos, na definição do modelo matemático, os termos $\vec{\nabla} p_c - (\rho_w - \rho_o) \vec{g}$ que representam essa física na equação (16), podem ser considerados pouco relevantes e, consequentemente, desprezados, apenas na definição do fluxo fracionário f_w . Isso ocorre porque os referidos termos são multiplicados pelo inverso da vazão total ($1/\vec{v} \cdot \vec{n} A_r$). Em alguns casos, se admite que a vazão total seja suficientemente elevada, tornado o numerador da equação (16) aproximadamente unitário chegando à equação (17). De fato, isso ocorre em muitas publicações encontradas na literatura (Durlofsky, 1993; Bastian e Helmig, 1999; Fucik *et al.*, 2004; Hurtado, 2005; Hoteit e Firoozabadi, 2008; Lamine, 2009; Kou e Sun, 2010; Goumiri *et al.*, 2011; Friis e Evje, 2011). No entanto, não há nenhuma referência, nessas publicações, a respeito de uma possível simplificação.

Alguns autores incorporam o termo de gravidade em um número adimensional $\mathcal{G}$ (Durlofsky, 1992; Rosland, 2013). Tomando um domínio unidimensional, como o ilustrado na figura 5, onde o modelo apresentado na equação (14) é válido e a gravidade atua no sentido contrário à orientação de x , tem-se que $\vec{v} = v$ e $K = K$. Nesse caso, se o termo $f_w v$ é colocado em evidência na equação (15), o fluxo unidimensional na direção x pode ser escrito da seguinte forma:

$$F_w(S_w) = f_w v (1 + k_{ro} \mathcal{G}) \quad (18)$$

onde o parâmetro adimensional $\mathcal{G}$ é dado como:

$$\mathcal{G} = \frac{K(\rho_w - \rho_o)g}{\mu_o v} \quad (19)$$

Na figura 4, o fluxo $F_w(S_w)$ unidimensional é mostrado para os mesmos valores de saturação irreduzível e residual usados na figura 3a. Diferentes expoentes na relação de Brooks-Corey são utilizados de acordo com os valores adotados nos trabalhos de Lamine e Edwards (2010), Durlofsky (1992), Kozdon *et al.* (2011). A influência da gravidade, atuando contra a diferença de pressão pode ser vista nas curvas da figura 4b. Essas curvas podem ser comparadas com as da figura 4a, onde não há essa influência. É importante salientar que a ação da

gravidade contra o gradiente de pressão produz o chamado ponto de estagnação ou ponto sônico (Leveque, 1992) associado à mudança de sinal na derivada da função de fluxo.

A dependência de f_w , $\bar{v}$ e λ_o com a saturação de água S_w faz com que a equação (14) apresente forte não linearidade, representando um desafio para sua solução. Adicionalmente, devido à natureza hiperbólica da referida equação, perfis descontínuos de saturação podem ser obtidos mesmo que a condição inicial seja suave (Aziz e Settari, 1979; Ewing, 1983; Chen *et al.*, 2006).

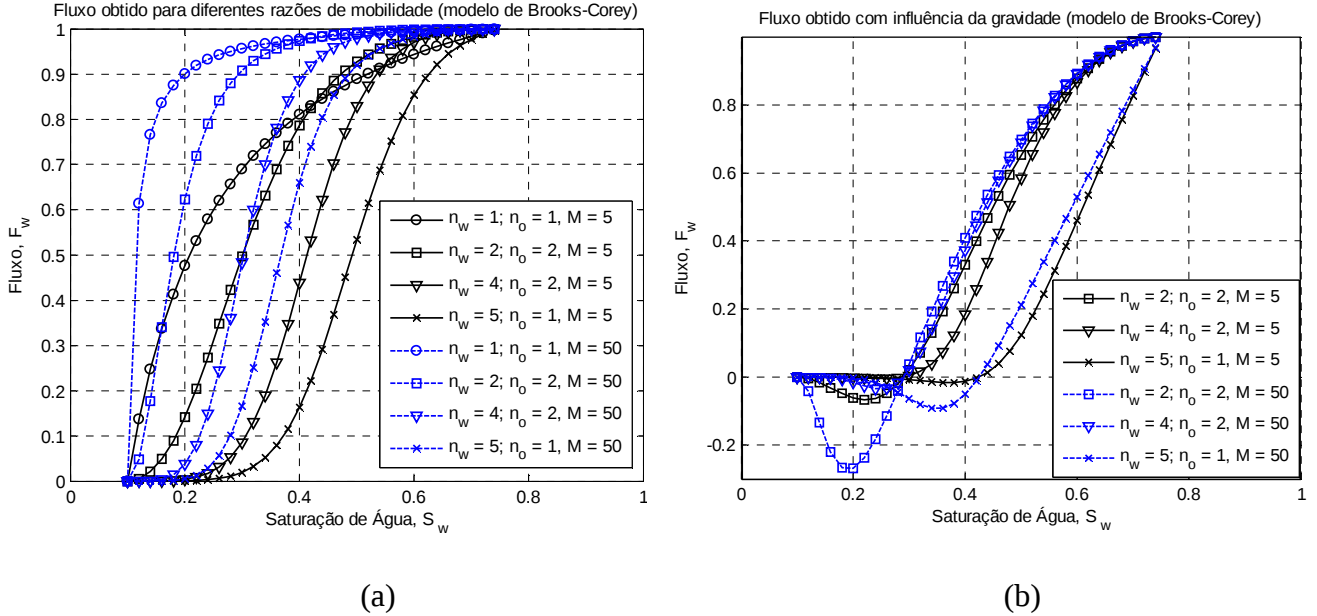


Figura 4. Curvas de fluxo unidimensional F_w para diferentes razões de mobilidade e expoentes do modelo de Brooks-Corey: (a) sem influência da gravidade; (b) com influência da gravidade com $\mathcal{G} = 2$ (Durlflosky, 1993).

O modelo matemático descrito pelas equações (13) e (14) está completamente determinado quando condições iniciais e de contorno apropriadas são utilizadas. Tomando a figura 2 como referência, as condições de contorno para a equação de pressão podem ser definidas da seguinte forma: para o contorno externo, constituído pelos contornos de Dirichlet Γ_D e de Neumann Γ_N , de modo que $\Gamma = \Gamma_D \cup \Gamma_N$ e $\Gamma_D \cap \Gamma_N = \emptyset$, admite-se, respectivamente, pressão prescrita e vazão prescrita, tal como:

$$p(\vec{x}, t) = g_D \quad \text{em} \quad \Gamma_D \times [0, t]; \quad \bar{v}_w \cdot \bar{n} + \bar{v}_o \cdot \bar{n} = g_N \quad \text{em} \quad \Gamma_N \times [0, t] \quad (20)$$

Nos contornos internos, que definem os poços injetores e produtores, a pressão também pode ser prescrita da seguinte forma:

$$p(\vec{x}, t) = g_I \quad \text{em} \quad \Gamma_I \times [0, t]; \quad p(\vec{x}, t) = g_P \quad \text{em} \quad \Gamma_P \times [0, t] \quad (21)$$

As funções escalares g_D , g_N , g_I e g_P , nas equações (20) e (21), são valores conhecidos, definidos nas fronteiras de Dirichlet, Neumann e poços injetor e produtor, respectivamente. Para a equação de saturação, a condição inicial é dada como:

$$S_w(\vec{x}, 0) = \bar{S}_w^0 \quad \text{em} \quad \Omega \quad (22)$$

onde $\bar{S}_w^0$ é a distribuição inicial de saturação de água em Ω para $t = t_0$. Nas fronteiras onde há injeção de água, tem-se um valor conhecido para a saturação de água $\bar{S}_w$, tal como segue:

$$S_w(\vec{x}, t) = \bar{S}_w \text{ em } \Gamma_D \text{ ou } \Gamma_I \quad (23)$$

É importante observar que a saturação de água é prescrita na fronteira de Dirichlet para a equação de saturação. No entanto, a mesma parcela da fronteira no domínio pode estar submetida à uma condição de Neumann, simbolizando vazão conhecida, em relação à equação de pressão.

2.4. Modelos Simplificados

Na presente seção duas particularizações do modelo matemático segregado, descrito nas equações (13) e (14), são apresentadas.

2.4.1. Escoamento Monofásico

Para aplicações em escoamentos monofásicos, assume-se que, na equação (13) a mobilidade total é unitária. Adicionalmente, desconsiderando efeitos gravitacionais, se obtém:

$$-\vec{\nabla} \cdot (\lambda \vec{K} \vec{\nabla} p) = Q \quad (24)$$

Naturalmente a equação (14) não é resolvida, uma vez que apenas uma fase satura o meio poroso.

2.4.2. Modelo de Buckley-Leverett

Uma forma mais simplificada da equação (14) pode ser obtida assumindo-se que o escoamento da fase molhante é essencialmente unidimensional e em uma rocha disposta horizontalmente e com permeabilidade homogênea, como ilustrado na figura 5.

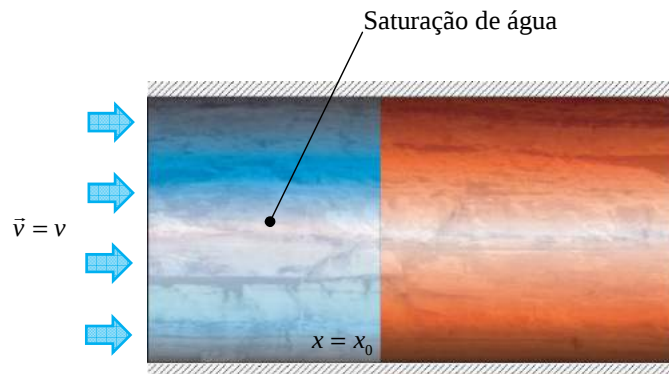


Figura 5. Reservatório simplificado para o modelo de Buckley-Leverett.

Efeitos de gravidade e capilaridade também são desconsiderados e o gradiente de pressões (e consequentemente a velocidade) é constante ao longo do domínio. Essas hipóteses

simplificadoras levam ao modelo de Buckley-Leverett (Leveque, 1992; Helmig, 1997; Dake, 2001; Fanchi, 2001), definido como:

$$\frac{\partial S_w}{\partial t} + \frac{1}{\phi} \frac{\partial}{\partial x} (f_w v) = 0 \quad (25)$$

Deve-se notar que na forma simplificada da equação (25) não há necessidade se resolver a equação de pressão, uma vez que o campo de velocidades é conhecido em todos os pontos do domínio. Embora a forma divergente ou conservativa, na qual está apresentada a equação (25), seja ideal para discretização com técnicas numéricas, é na forma não conservativa que se determina a velocidade característica da equação hiperbólica (Leveque, 1992). Dessa forma, a equação (25), dada em termos da velocidade característica α tem a seguinte forma (ver Helmig, 1997 para maiores detalhes):

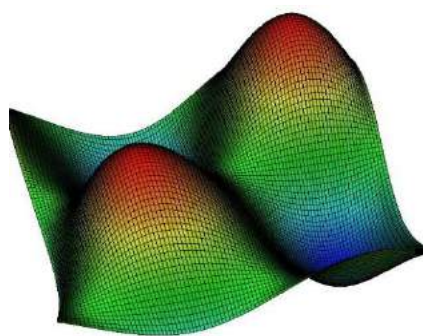
$$\frac{\partial S_w}{\partial t} + \alpha(S_w) \frac{\partial S_w}{\partial x} = 0, \quad \text{com} \quad \alpha(S_w) = \frac{v}{\phi} \frac{\partial f_w(S_w)}{\partial S_w} \quad (26)$$

A equação (26) se caracteriza pela propagação (transporte) de uma concentração ou saturação de massa de água ao longo de direções características, nas quais a referida variável é constante (Leveque, 1992; Helmig, 1997). No processo transiente, uma massa de água invade o domínio computacional, ilustrado na figura 4, por meio da superfície esquerda, representando um poço injetor com $S_w(x_0, t) = \bar{S}_w$. A massa de água varre o óleo residente na rocha para a superfície à direita, que representa um poço produtor. A descontinuidade na saturação de água, definida já na condição inicial, caracteriza um problema de Riemann (Helmig, 1997), dado por:

$$S_w(x, 0) = \begin{cases} 1 - S_{or} & \text{se } x \leq x_0 \\ S_{wi} & \text{se } x > x_0 \end{cases} \quad (27)$$

onde S_{wi} e S_{or} são, respectivamente, as saturações irreduzível de água e residual de óleo, como já mencionado. A variável independente x representa a posição em um domínio essencialmente unidimensional (ver figura 5), com x_0 representando a posição inicial da descontinuidade na distribuição de saturação de água.

Alguns conceitos fundamentais sobre equações hiperbólicas são introduzidos no Apêndice A. No capítulo seguinte, todas as técnicas numéricas utilizadas no presente trabalho, para a solução de problemas como o discutido acima, são apresentadas.



3

Formulação Numérica

3.1. Introdução

O modelo matemático apresentado no capítulo anterior admite soluções analíticas, ou semi-analíticas, apenas sob condições muito restritivas (Chen *et al.*, 2006; Pinder e Gray, 2008). Na maioria das aplicações, estratégias numéricas devem ser empregadas (Helmig, 1997). Características próprias do fenômeno investigado, tais como alta heterogeneidade e anisotropia da rocha e não convexidade do fluxo advectivo, que não ocorrem em outras físicas, como aerodinâmica, por exemplo, demandam o uso de ferramentas numéricas adequadas para tratar particularidades específicas de cada equação governante que constitui o sistema de equações escalares aqui abordado. A forte não linearidade presente na equação de transporte e no seu acoplamento com a equação de pressão também constitui um desafio do ponto de vista numérico.

Ao longo deste capítulo, as estratégias numéricas utilizadas para a solução do modelo matemático descrito no capítulo anterior são apresentadas. Uma abordagem fundamentada no Método de Volumes Finitos (Patankar, 1980; Versteeg e Malalasekera, 1995; Maliska, 2004), *cell-centered*, é adotada para todas as aproximações. Os esquemas numéricos utilizados para resolver as equações de transporte e de pressão são apresentados a seguir. Antes, porém, a estratégia para tratar o acoplamento entre essas equações é discutida, já na seção que segue.

3.2. Estratégia IMPES

Há na literatura uma variedade de estratégias utilizadas na solução do modelo matemático segregado introduzido no capítulo anterior. No presente texto, a estratégia IMPES (*Implicit Pressure-Explicit Saturation*), proposta por Sheldon *et al.*, (1959) e Stone e Garder (1961), é utilizada, dada sua simplicidade de implementação e robustez para escoamentos incompressíveis ou levemente compressíveis (Chen *et al.*, 2006).

Para problemas de baixa e média complexidade, a estratégia IMPES é muito popular na indústria do petróleo e funciona de acordo com o algoritmo representado na figura 6 (Edwards e Rogers, 1998; Edwards, 2006; Hurtado *et al.*, 2007; Monteagudo e Firoozabadi, 2007; Kou e Sun, 2010; Chueh *et al.*, 2010; Kozdon *et al.*, 2011; Khoozan *et al.*, 2011).

A partir de uma distribuição inicial de saturações (condição inicial), a mobilidade total $\lambda(S_w)$ é calculada nas superfícies de controle. Há na literatura uma variedade de formas para esse tipo de aproximação (Aziz e Settari, 1979; Brand *et al.*, 1991; Hurtado, 2005; Friis e Evje, 2011; Nikitin e Vassilevsky, 2012). Para uma certa classe de formulações numéricas, os

campos de pressão e velocidade são resolvidos simultaneamente (Durlinsky, 1993; Hyman *et al.*, 1997; Riviere, 2008). Em outros casos, a equação de pressão é resolvida implicitamente e em seguida, o campo de velocidade é calculado explicitamente com a lei de Darcy (Crumpton *et al.*, 1995; Edwards e Rogers, 1998; Aavatsmark *et al.*, 1998). Há ainda, técnicas fundamentadas no Método de Elementos Finitos onde a velocidade é obtida implicitamente após a determinação do campo de pressão (Malta *et al.*, 1995). Conhecido o campo de velocidade, a saturação é calculada explicitamente. No caso do tempo estimado para a simulação não ser atingido, a mobilidade total é atualizada com o novo campo de saturação, recomeçando o processo descrito.

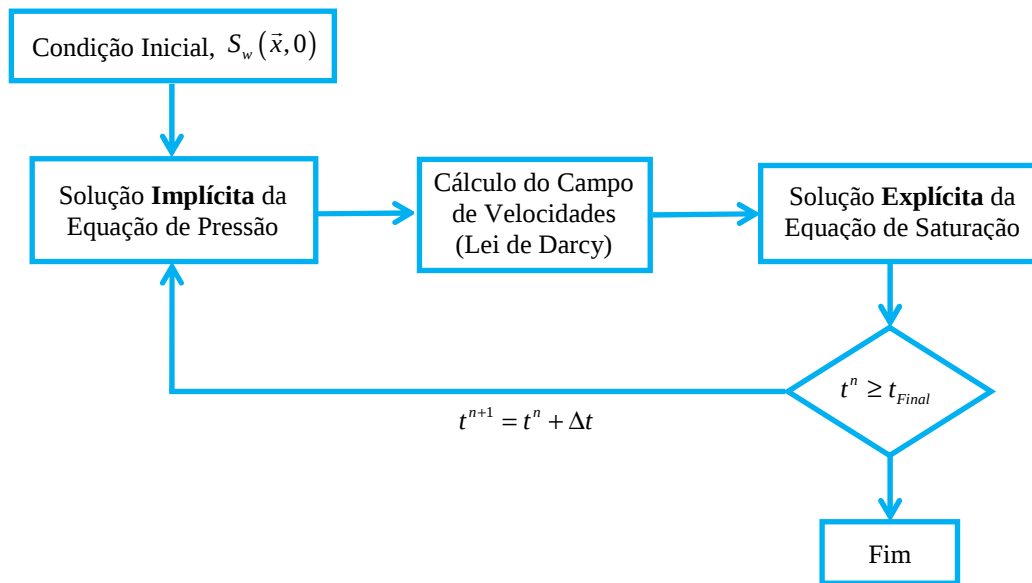


Figura 6. Algoritmo da estratégia IMPES.

A abordagem explícita da equação de saturação restringe o tamanho do passo de tempo (ver seção 3.4). Efeitos de capilaridade e gravidade, incorporados à física do problema também levam a passos de tempo severamente restritos (Chen *et al.*, 2006; Kou e Sun, 2010). Na também popular estratégia completamente implícita ou *Fully Implicit Method* (FIM) o acoplamento pressão-saturação é resolvido simultaneamente. Nesse caso, não há, do ponto de vista de estabilidade linear, limite para a definição do passo de tempo (Aziz e Settari, 1979; Collins *et al.*, 1992; Dawson *et al.*, 1997), embora processos iterativos sejam necessários para solução das não linearidades decorrentes do acoplamento, elevando mais ainda o custo computacional por passo de tempo (Bastian, 2013). Por um lado, a estratégia IMPES se caracteriza por um baixo custo computacional por passo de tempo, principalmente em problemas com grandes dimensões e aproximações de alta ordem (Monteagudo e Firoozabadi, 2007; Kou e Sun, 2010). Por outro lado, os largos passos de tempo admitidos pelo FIM podem reduzir o “esforço” computacional, tornando essa estratégia competitiva, em relação ao IMPES. A melhor estratégia, naturalmente, depende da relação entre o tempo de simulação requerido e o tamanho do domínio ou física envolvida no problema. Há ainda as estratégias do tipo IMEX (*IMplicit-EXplicit*) que tratam os termos lineares implicitamente e avaliam os termos não lineares explicitamente (Ascher *et al.*, 1995; Boscarino, 2007 *apud* Kou e Sun, 2010).

Versões modificadas da estratégia IMPES podem ser encontradas em Forsyth (1991, *apud* Helmig, 1997), Hurtado (2005) e Chen *et al.* (2006). Nas duas últimas citações, as diferentes escalas de tempo nas quais os fenômenos representados pelas equações de pressão e saturação ocorrem são levadas em conta para reduzir o custo computacional da estratégia original. Sabe-se que, em geral, o campo de pressões muda mais lentamente do que o campo de

saturações no interior dos reservatórios (Chen *et al.*, 2006). Nos métodos IMPES modificados mais modernos Hurtado (2005) e Chen *et al.* (2006), a equação de pressão é, portanto, atualizada menos vezes que a equação de saturação e por meio do cálculo de um passo de tempo adaptativo a partir de algum critério que leva em consideração a física do problema, de modo a reduzir o custo computacional sem perda apreciável de acurácia.

Na seção 3.3.1, diferentes formas de aproximar a mobilidade em cada superfície de controle são discutidas.

3.3. Equação de Pressão na Forma Discreta

A solução aproximada da equação de pressão, segundo o Método de Volumes Finitos, é obtida a partir da forma integral da equação (13), ao longo de todo o domínio Ω ilustrado na figura 2. Isso produz:

$$\int_{\Omega} \vec{\nabla} \cdot \vec{v} d\Omega = \int_{\Omega} Q d\Omega \quad (28)$$

Para obter a forma discreta da equação (28), o domínio ilustrado na figura 2 é discretizado em $\mathcal{N}_{vc}$ volumes de controle poligonais, tal como se vê na figura 7a.

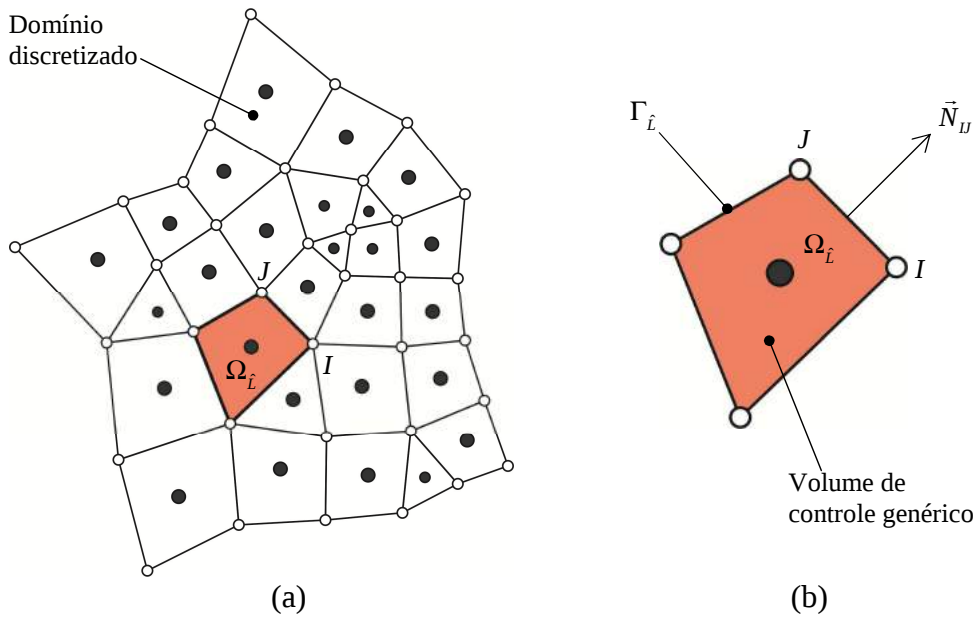


Figura 7. Domínio apresentado na figura 2 na forma discreta: (a) indicação do volume de controle Ω_L ; (b) indicação da superfície de controle Γ_L e normal à face IJ , $\vec{N}_L$.

A integral no lado esquerdo da equação (28) pode ser representada como um somatório de integrais em cada volume de controle Ω_L , logo, a equação (28) pode ser escrita como:

$$\sum_{i=1}^{\mathcal{N}_{vc}} \int_{\Omega_i} \vec{\nabla} \cdot \vec{v} d\Omega_i = \sum_{i=1}^{\mathcal{N}_{vc}} \int_{\Omega_i} Q d\Omega_i \quad (29)$$

Considerando apenas um único volume de controle genérico, representado no presente texto como $\hat{L}$, e usando o teorema da divergência de Gauss no lado esquerdo da equação (29), obtém-se:

$$\int_{\Omega_{\hat{L}}} \vec{\nabla} \cdot \vec{v} d\Omega_{\hat{L}} = \int_{\Gamma_{\hat{L}}} \vec{v} \cdot \vec{n} d\Gamma_{\hat{L}} = \int_{\Omega_{\hat{L}}} Q d\Omega_{\hat{L}} \quad (30)$$

onde $\Gamma_{\hat{L}}$ representa as superfícies do volume de controle discreto $\Omega_{\hat{L}}$.

As duas últimas integrais da equação (30) podem ser aproximadas utilizando o Teorema do Valor Médio, como:

$$\int_{\Gamma_{\hat{L}}} \vec{v} \cdot \vec{n} d\Gamma \cong \sum_{IJ \in \Gamma_{\hat{L}}} \vec{v}_{IJ} \cdot \vec{N}_{IJ} \quad (31)$$

$$\int_{\Omega_{\hat{L}}} Q d\Omega_{\hat{L}} \cong \bar{Q}_{\hat{L}} \Omega_{\hat{L}} \quad (32)$$

onde, $\vec{v}_{IJ}$ é a velocidade total aproximada na superfície de controle formada pelos vértices I e J (ver figura 7b), e $\vec{N}_{IJ}$ representa o vetor área normal à face IJ , com o somatório realizado sobre todas as faces que compõe a superfície de controle e $\bar{Q}_{\hat{L}}$ é o valor médio aproximado do termo de injeção ou produção específica no volume de controle genérico $\hat{L}$.

Considerando uma superfície de controle arbitrária, e as aproximações dadas nas equações (31) e (32), a equação de pressão na forma discreta pode ser escrita como segue:

$$\sum_{IJ \in \Gamma_{\hat{L}}} \vec{v}_{IJ} \cdot \vec{N}_{IJ} = \bar{Q}_{\hat{L}} \Omega_{\hat{L}} \quad (33)$$

ou, alternativamente, escrita explicitamente em função do gradiente de pressão. A lei de Darcy, estabelecida na equação (5), é substituída na equação (33), e após alguma manipulação algébrica (Chen *et al.*, 2006), se obtém:

$$\sum_{IJ \in \Gamma_{\hat{L}}} -\lambda \tilde{K} (\vec{\nabla} p - \bar{\rho} \vec{g}) \cdot \vec{N}_{IJ} = \bar{Q}_{\hat{L}} \Omega_{\hat{L}} \quad (34)$$

onde $\bar{\rho}$ é a uma massa específica média, definida em função das mobilidades envolvidas, como segue (Chen *et al.*, 2006):

$$\bar{\rho} = \frac{\lambda_w \rho_w + \lambda_o \rho_o}{\lambda} \quad (35)$$

A velocidade total de Darcy $\vec{v}_{IJ}$ é definida em cada superfície de controle IJ e representada, em uma forma generalizada, na equação (5), na seção 2.2. Na seção 3.3.2, a forma convencional de aproximação dos fluxos discretos estabelecidos na equação (33) é sucintamente apresentada. Nessa abordagem, o fluxo em cada superfície de controle IJ é representado por uma diferença entre dois pontos, sendo comumente referenciada na literatura (Aavatsmark *et al.*, 1998; Edwards e Rogers, 1998; Lipnikov *et al.*, 2007; Gao e Wu, 2010) por *Two-Point Flux Approximation* (TPFA). Dado que alguns inconvenientes são observados com o

TPFA quando malhas com algum grau de distorção ou tensores de permeabilidade cheios (não diagonais) são adotados, outras formulações numéricas, disponíveis na literatura, ditas convergentes para tensores e malhas arbitrários também são apresentadas posteriormente.

3.3.1. Aproximação das Mobilidades

Um passo importante da estratégia descrita na seção anterior é a forma como as mobilidades são aproximadas na equação de pressão. Em algumas aplicações observadas na literatura, a mobilidade é simplesmente obtida a partir da saturação calculada sobre a face IJ no instante de tempo anterior (Aziz e Settari, 1979; Brand *et al.*, 1991; Kozdon *et al.*, 2011; Nikiti e Vassilevsky, 2012). Nesses casos, a mobilidade total é obtida como:

$$\lambda_{IJ} = \lambda_{IJ}(\bar{S}_{w_i}) \quad (36)$$

onde $\bar{S}_{w_i}$ é a saturação atribuída a face IJ a partir do volume de controle $\hat{L}$, dada a orientação do escoamento, como ilustrado na figura 8a.

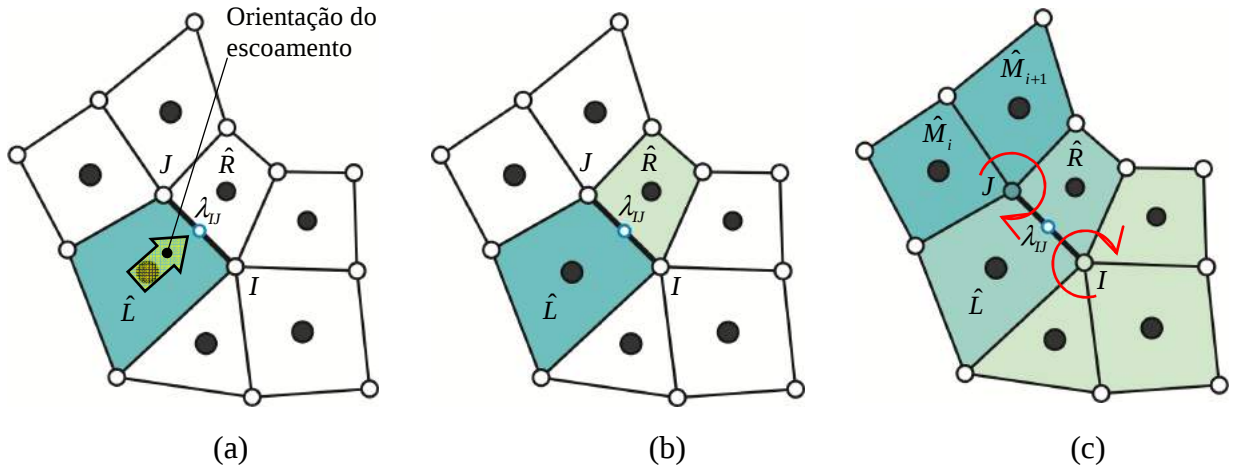


Figura 8. Aproximação da mobilidade total na face IJ : (a) do tipo *upwind*; (b) obtida com uma média ponderada pelos volumes de controle compartilhados pela face IJ ; (c) obtida com a média das mobilidades atribuídas aos vértices, calculadas por meio de uma média ponderada pelos volumes de controle da vizinhança próxima.

Aproximações de primeira ou de alta ordem podem ser usadas como argumento da equação (36). É consenso que esse tipo de aproximação facilita a ocorrência de efeitos de orientação de malha (Brand *et al.* 1991). Hurtado (2005) compara esse tipo de aproximação com uma aproximação linear da mobilidade, onde o valor em cada superfície IJ do volume de controle dual (formulação *node-centered*) é interpolado por valores conhecidos, obtidos de uma vizinhança próxima, sem um viés à montante. Segundo o autor, a aproximação linear proporciona resultados mais satisfatórios.

Além da forma tradicional de aproximar a mobilidade total, dada pela equação (36), duas formas alternativas de aproximação dessa variável são propostas no presente trabalho. Essas proposições são descritas ao longo dessa seção e comparadas com a aproximação dada pela equação (36) no capítulo de aplicações para alguns problemas *benchmark*.

Na primeira proposta, a mobilidade total na face IJ é aproximada por uma média ponderada pelos volumes de controle que compartilham a referida face, tal como ilustrado na figura 8b. Dessa forma, volumes de controle maiores, exercem mais influência sobre a mobili-

dade total calculada em cada face avaliada. A mobilidade total na face IJ , é portanto, obtida da seguinte forma:

$$\lambda_{IJ} = \frac{\lambda_{\hat{L}}(\bar{S}_{w_{\hat{L}}})\Omega_{\hat{L}} + \lambda_{\hat{R}}(\bar{S}_{w_{\hat{R}}})\Omega_{\hat{R}}}{\Omega_{\hat{L}} + \Omega_{\hat{R}}} \quad (37)$$

onde $\Omega_{\hat{L}}$ e $\Omega_{\hat{R}}$ são os volumes, ou áreas em domínios 2-D, dos volumes de controle $\hat{L}$ e $\hat{R}$, respectivamente. As mobilidades totais $\lambda_{\hat{L}}$ e $\lambda_{\hat{R}}$ são obtidas, respectivamente, com as saturações médias $\bar{S}_{w_{\hat{L}}}$ e $\bar{S}_{w_{\hat{R}}}$, atribuídas aos volumes de controle $\hat{L}$ e $\hat{R}$, representadas no presente texto pelas barras superiores.

Numa segunda proposta, aproxima-se a mobilidade total pela média dessas variáveis previamente atribuídas aos vértices I e J , tal como segue:

$$\lambda_{IJ} = \frac{\lambda_I + \lambda_J}{2} \quad (38)$$

A mobilidade total em cada vértice é calculada, como no trabalho de Friis e Evje (2011). Uma média ponderada pelo volume, ou área em 2-D, de cada volume de controle $\hat{M}_i$ (com $i = 1, \dots, \mathcal{N}_v$, e $\mathcal{N}_v$ é o número de vizinhos em torno do vértice considerado) que compartilha o vértice avaliado é utilizada como segue, para o vértice I , por exemplo (ver figura 8c):

$$\lambda_I = \frac{\sum_{i=1}^{\mathcal{N}_v} \lambda_{\hat{M}_i}(\bar{S}_{w_{\hat{M}_i}})\Omega_{\hat{M}_i}}{\sum_{i=1}^{\mathcal{N}_v} \Omega_{\hat{M}_i}} \quad (39)$$

Assim como na equação (37), $\Omega_{\hat{M}_i}$ representa o volume de cada volume de controle $\hat{M}_i$ em torno do vértice avaliado.

3.3.2. Método de Volumes Finitos com Aproximação do Fluxo por Dois Pontos (TPFA)

O esquema numérico TPFA, tradicionalmente empregado em simuladores comerciais voltados para a indústria do petróleo, é brevemente descrito nessa seção. Apesar desse tipo de aproximação ser bastante conhecido e amplamente descrito na literatura (Peaceman, 1977; Aziz e Settari, 1979), a motivação dessa introdução é apenas didática. Os esquemas numéricos do tipo MPFA, descritos na seção seguinte, são uma generalização do TPFA e, por isso, preservam algumas características aqui abordadas.

Para entender o princípio do TPFA e como essa aproximação recai naturalmente em médias harmônicas nas superfícies de controle, o fragmento de malha de um domínio unidimensional, ilustrado na figura 9 é usado como referência. O fluxo na face $\bar{e}$ é definido a partir de uma permeabilidade equivalente, calculada sobre a referida face, e pressões associadas aos volumes de controle adjacentes, $\hat{L}$ e $\hat{R}$. Para simplificar o entendimento na

dedução do fluxo na interface $\bar{e}$, e sem perda de generalidade, a contribuição da gravidade é desconsiderada.

Considerando um meio poroso homogêneo, ilustrado na figura 9, uma aproximação linear do fluxo usando os valores de pressão nos pontos de colocação $\hat{L}$ e $\hat{R}$, seria suficiente para definir a vazão $\vec{v}_{\bar{e}} \cdot \vec{N}_{\bar{e}}$ na interface entre os volumes de controle (Edwards e Rogers, 1998). No entanto, havendo uma descontinuidade na permeabilidade, o que é comum em reservatórios de petróleo, é importante definir-se o gradiente de pressões adequadamente de modo que haja ainda continuidade do fluxo na interface entre os volumes adjacentes. Nesse contexto, o cálculo do fluxo, apresentado na equação (44), se dá em três etapas bem definidas.

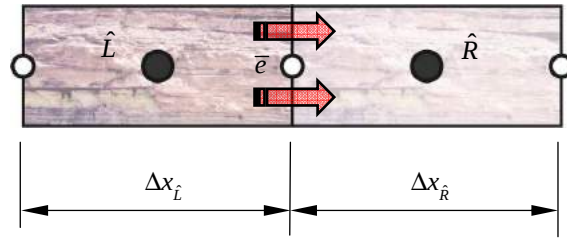


Figura 9. Domínio unidimensional usado para descrição do esquema numérico do tipo TPFA.

Na primeira etapa, o fluxo na interface $\bar{e}$ é calculado segundo a contribuição dos volumes de controle $\hat{L}$ e $\hat{R}$, onde as vazões de cada lado da superfície de controle podem ser escritos como:

$$\left(\vec{v}_{\bar{e}} \cdot \vec{N}_{\bar{e}}\right)_{\hat{L}} = -2K_{\hat{L}} \left(\frac{p_{\bar{e}} - p_{\hat{L}}}{\Delta x_{\hat{L}}} \right) \quad (40)$$

$$\left(\vec{v}_{\bar{e}} \cdot \vec{N}_{\bar{e}}\right)_{\hat{R}} = 2K_{\hat{R}} \left(\frac{p_{\hat{R}} - p_{\bar{e}}}{\Delta x_{\hat{R}}} \right) \quad (41)$$

As vazões representadas nas equações (40) e (41) são, cada um, função de duas incógnitas. Uma dessas é o valor da pressão no ponto auxiliar $\bar{e}$ (“provisório”) e a outra o ponto de colocação em cada volume de controle que compartilha a referida face. A segunda etapa é concretizada com a imposição da equação da continuidade na interface avaliada, onde $\left(\vec{v}_{\bar{e}} \cdot \vec{N}_{\bar{e}}\right)_{\hat{L}} = -\left(\vec{v}_{\bar{e}} \cdot \vec{N}_{\bar{e}}\right)_{\hat{R}}$. Assim, se obtém a seguinte relação:

$$-2K_{\hat{L}} \left(\frac{p_{\bar{e}} - p_{\hat{L}}}{\Delta x_{\hat{L}}} \right) = -2K_{\hat{R}} \left(\frac{p_{\hat{R}} - p_{\bar{e}}}{\Delta x_{\hat{R}}} \right) \quad (42)$$

A pressão no ponto auxiliar $p_{\bar{e}}$ pode, portanto, ser escrita como função da pressão nos dois pontos de colocação adjacentes, tal como na equação (43). Isso permanece válido para aplicações de esquemas numéricos do tipo TPFA em domínios bidimensionais.

$$p_e = \frac{\frac{p_{\hat{L}} K_{\hat{L}}}{\Delta x_{\hat{L}}} + \frac{p_{\hat{R}} K_{\hat{R}}}{\Delta x_{\hat{R}}}}{\frac{K_{\hat{L}}}{\Delta x_{\hat{L}}} + \frac{K_{\hat{R}}}{\Delta x_{\hat{R}}}} \quad (43)$$

Por fim, a pressão no ponto auxiliar é substituída em um dos balanços já formulados na primeira etapa, cuja pressão auxiliar era uma de suas incógnitas. A equação (44) é o resultado de todo o procedimento.

$$\vec{v}_e \cdot \vec{N}_e = -\frac{2K_{\hat{R}}K_{\hat{L}}}{K_{\hat{R}}\Delta x_{\hat{L}} + K_{\hat{L}}\Delta x_{\hat{R}}}(p_{\hat{R}} - p_{\hat{L}}) \quad (44)$$

Esse procedimento é equivalente a uma aproximação usando o Método de Diferenças Finitas (Peaceman, 1977) com a permeabilidade na interface representada por uma média harmônica entre as permeabilidades dos volumes de controle que compartilham a face. Isso significa que o uso de formulações fundamentadas na continuidade dos fluxos, imposta em cada interface entre os elementos discretos faz surgir, naturalmente, uma média harmônica para a permeabilidade na superfície de controle. Segundo Edwards e Rogers (1998), esse procedimento pode ser visto como um tipo de mudança de escala (*upscaling*) na definição da permeabilidade.

Embora aproximações como a apresentada na equação (44) sejam simples e robustas e, até a última década, amplamente utilizadas em simuladores comerciais (Aavatsmark, 2002), algumas restrições são observadas quanto à aplicabilidade de esquemas numéricos do tipo TPFA. Na figura 10, duas dessas situações são ilustradas. Nos dois casos, esquemas numéricos do tipo TPFA produzem soluções não convergentes, devido à incapacidade desse tipo de aproximação em representar termos de difusão cruzada.

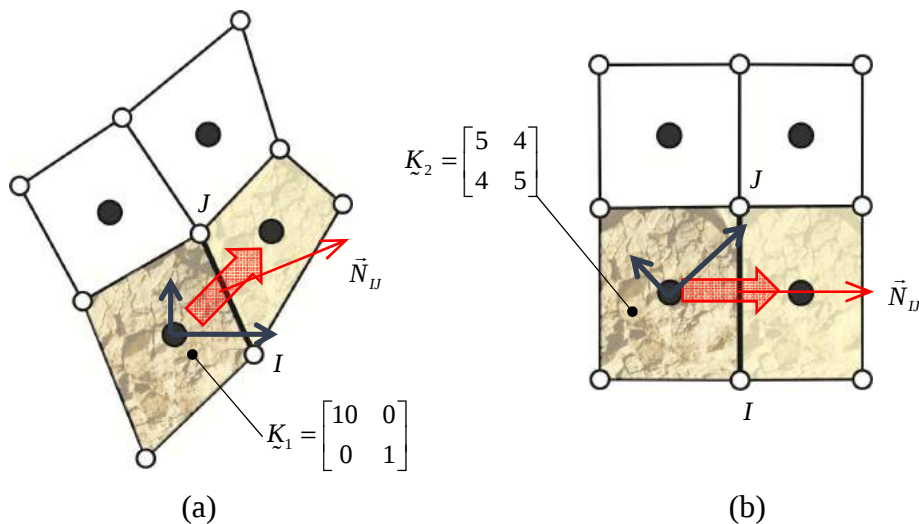


Figura 10. Situações em que o TPFA produz soluções não convergentes: (a) tensor de permeabilidade diagonal, porém não alinhado com a orientação da malha; (b) malha cartesiana com tensor não diagonal.

Na figura 10a, o tensor de permeabilidade é diagonal, porém as direções principais desse tensor estão desalinhadas com a orientação do fragmento de malha ilustrado. Na figura 10b, apesar da malha ser cartesiana, o tensor de permeabilidade adotado não é diagonal (ten-

sor completo). O fluxo calculado na face IJ , inevitavelmente, também produz termos de difusão cruzada.

Em muitos casos, a representação da permeabilidade da rocha é restrita a tensores diagonais e as malhas empregadas na discretização dos reservatórios são, em geral, cartesianas (CMG, 2006; Eclipse, 2009). De acordo com Pointing (1992), malhas não ortogonais são permitidas em simuladores fundamentados em aproximações do tipo TPFA. No entanto, para uma discretização correta, essas aproximações devem ser em uma malha do tipo “corner point” com as direções principais do tensor de permeabilidade alinhadas localmente com a orientação da malha adotada.

3.3.3. Método de Volumes Finitos com Aproximação do Fluxo por Múltiplos Pontos (MPFA)

Alternativas eficientes ao tradicional esquema numérico TPFA, descrito na seção anterior, são as formulações com aproximação do fluxo por múltiplos pontos, referenciadas na literatura como *Multi-Point Flux Approximation* (MPFA). Aproximações com Diferenças Finitas envolvendo um estêncil de nove pontos, em domínios bidimensionais, são usuais há muitas décadas (Hirsch, 1992; Pletcher *et al.*, 1998), inclusive na área de petróleo (Yanosich e McCracken, 1979; Ko e Au, 1979). No entanto, aproximações do tipo MPFA podem ser naturalmente empregadas em malhas poligonais quaisquer, mesmo as não conformes (Aavatsmark, 2002; Chen *et al.*, 2008). Os métodos MPFA também têm um caráter conservativo na construção dos fluxos nas superfícies de controle, assim como o CVFEM, também chamado de EbFVM (Hurtado *et al.*, 2007). Por outro lado, os esquemas numéricos MPFA são fundamentados na imposição de continuidade de fluxo ao longo da descontinuidade da propriedade de material (permeabilidade da rocha), atribuída aos elementos da malha primal. Sob certas condições, essa característica torna os MPFA análogos aos Métodos de Elementos Finitos Mistos ou *Mixed Finite Element* (Klausen e Eigestad, 2004; Klausen e Winther, 2006). Nesse ponto, os métodos MPFA diferem do EbFVM, onde essa restrição não é necessária (Hurtado *et al.*, 2007).

A estratégia de aproximação do fluxo por múltiplos pontos nas superfícies de controle, tal como as descritas a seguir, foi inicialmente proposta por Crumpton *et al.* (1995), com restrição à malhas cartesianas. Edwards e Rogers (1998) e Aavatsmark *et al.* (1998) propuseram, independentemente, uma generalização das ideias de Crumpton *et al.* (1995) para malhas quaisquer. Deve-se notar que os passos necessários à discretização da equação de pressão com esquemas numéricos do tipo MPFA seguem o mesmo procedimento já descrito na seção anterior para o TPFA. A comparação entre os dois procedimentos numéricos ressalta a semelhança entre as duas formulações e evidencia que o MPFA, de certa forma, é uma generalização de esquemas tradicionais como Diferenças Finitas ou Volumes Finitos com aproximação do fluxo por dois pontos (TPFA).

O estêncil com mais pontos (nove em malhas estruturadas quadrilaterais em domínios bidimensionais), necessário às aproximações do tipo MPFA, diminui os efeitos de orientação de malha e melhoram a acurácia da solução, mesmo quando os chamados tensores não diagonais ou completos são necessários para representar a permeabilidade da rocha. Tal melhoria é decorrente da aproximação do fluxo, em cada superfície de controle, fazendo uso de mais do que dois pontos de modo que termos de difusão cruzada sejam representados adequadamente, o que não ocorre nos esquemas numéricos do tipo TPFA (Crumpton *et al.* 1995; Edwards e Rogers, 1998; Aavatsmark *et al.*, 1998). Apesar das primeiras estratégias MPFA (MPFA-O e MPFA-L) garantirem convergência em problemas onde o TPFA não converge, i.e., para tensores completos ou malhas com distorção angular, soluções sem significado físico são produzidas com o MPFA-O, por exemplo, quando o tensor de permeabilidade adotado tem elevada

razão de anisotropia e é desalinhado com a orientação da malha utilizada (Edwards e Zheng, 2008; Chen *et al.*, 2008). Diante dessas limitações, novas famílias de esquemas numéricos do tipo MPFA (Lipnikov *et al.*, 2007; Sheng e Yuan, 2008; Edwards e Zheng, 2008, Chen *et al.*, 2008; Gao e Wu, 2010), mais robustos, têm sido propostas para resolver esses problemas desafiadores, inerentes à simulação de escoamento em rochas reservatório.

Na presente seção, três variantes de formulações do tipo MPFA são apresentadas. A forma mais tradicional, denominada MPFA-O, onde se utiliza uma aproximação linear para a pressão (suporte triangular) e duas outras variantes com aproximação bilinear para a pressão (suporte completo): MPFA *Full Pressure Support* (MPFA-FPS) e MPFA-*Enriched*, propostos, respectivamente, por Edwards e Zheng (2008) e Chen *et al.* (2008). De modo a inserir as referidas formulações no contexto de escoamento bifásico de água e óleo em reservatórios de petróleo, o termo de mobilidade total λ é considerado na equação elíptica a ser discretizada. Mais uma vez, sem perda de generalidade, o termo de gravidade é omitido para simplificar a dedução das equações.

Suporte Triangular para a Pressão: MPFA-O

Assim como em todo método de volumes finitos, o que caracteriza o MPFA-O é a forma como são aproximados os termos de fluxo na equação (34). Tomando o fragmento de malha ilustrado na figura 11, as vazões (fluxos integrados nas faces) nas superfícies de controle, para as três variantes de MPFA aqui abordadas, são definidas em cada meia face pertencente à chamada região de interação (Aavatsmark *et al.*, 1998). Essa região é estabelecida segundo um polígono dual que compreende os pontos de colocação e os pontos auxiliares, localizados, respectivamente, nos volumes de controle e faces em torno de um dado vértice, como ilustrado na figura 11 (Aavatsmark *et al.*, 1998).

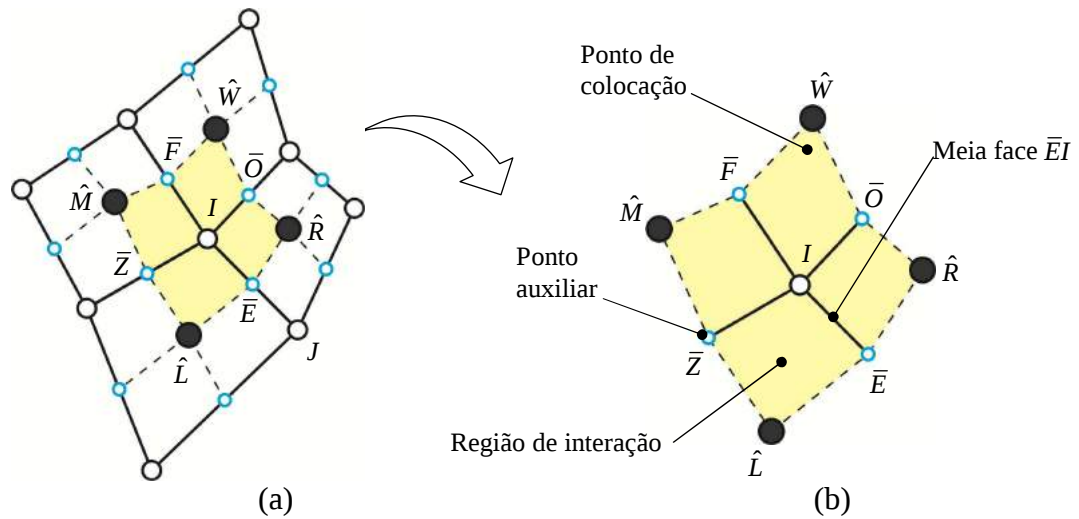


Figura 11. Região de interação: (a) Fragmento da malha com região de interação associada ao vértice I; (b) Indicação das meias-arestas onde as vazões são calculadas.

Dessa forma, para a região de interação genérica, associada ao vértice I (ver figura 11b), as vazões são contabilizadas para cada meia face ($\bar{FI}$, $\bar{ZI}$, $\bar{EI}$ e $\bar{OI}$) que concorrem para o vértice I. A vazão na meia face $\bar{EI}$, por exemplo, é estabelecida como segue:

$$\vec{v}_{\bar{EI}} \cdot \vec{N}_{\bar{EI}} = -\lambda_{\bar{EI}} K_L \vec{\nabla} p_{\bar{L}\bar{E}\bar{Z}} \cdot \vec{N}_{\bar{EI}} \quad (45)$$

onde $\vec{v}_{\bar{E}I}$, $\lambda_{\bar{E}I}$ e $\vec{N}_{\bar{E}I}$ são, respectivamente, a velocidade total, a mobilidade total e o vetor normal associados à meia face $\bar{E}I$. Os parâmetros $K_{\hat{L}}$ e $\vec{\nabla}p_{\hat{L}\bar{E}\bar{Z}}$ são, respectivamente, a permeabilidade absoluta atribuída ao volume de controle $\hat{L}$ e o gradiente de pressão definido na região de interação associada ao vértice I , a partir de informações contidas no volume de controle $\hat{L}$ e das meias faces $\bar{Z}I$ e $\bar{E}I$.

Na equação (45), uma etapa importante do método consiste na definição dos gradientes aproximados nos volumes de controle que discretizam o domínio computacional. Em geral, nos esquemas numéricos do tipo MPFA, o campo de pressões, e, conseqüentemente, seu gradiente, são dependentes da pressão no centro da célula $\hat{L}$ e de pressões em pontos auxiliares, tal como ilustrado nas figuras 12b e 13. No caso do MPFA-O, o campo de pressões é aproximado por um conjunto de funções lineares definidas nos triângulos constituídos pelos pontos de colocação e por dois pontos auxiliares sobre as superfícies de controle, conforme ilustrado na figura 12b (triângulos em tom escuro).

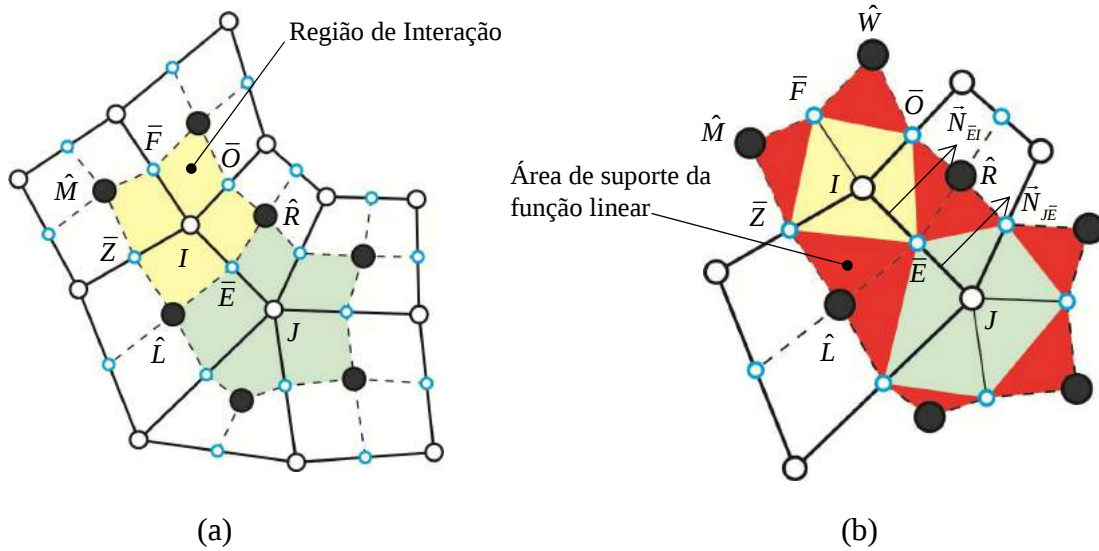


Figura 12. Regiões de suporte de pressão para o MPFA-O: (a) duas regiões de interação associadas aos vértices I e J nas quais o fluxo sobre a aresta IJ é calculado; (b) área de suporte (tons escuros) da aproximação linear da pressão para cada região de interação.

Nesta figura, os pontos de colocação e os pontos auxiliares são representados, respectivamente, por letras maiúsculas com “chapéu” ($\hat{L}, \hat{R}, \hat{W}, \hat{M}$), e com “barra” ($\bar{Z}, \bar{E}, \bar{O}, \bar{F}$). Os vértices são referenciados pelas letras I e J . No cálculo do gradiente $\vec{\nabla}p_{\hat{L}\bar{E}\bar{Z}}$, por exemplo, os pontos $\bar{E}$ e $\bar{Z}$ são os pontos auxiliares.

Considerando o triângulo $\triangle \hat{L}\bar{E}\bar{Z}$ (figura 12b em tons escuros), o gradiente de pressões é obtido, como:

$$\vec{\nabla}p_{\hat{L}\bar{E}\bar{Z}} = -\frac{1}{2\Omega_{\hat{L}\bar{E}\bar{Z}}} \left(p_{\hat{L}} \vec{N}_{\bar{E}\bar{Z}} + p_{\bar{Z}} \vec{N}_{\hat{L}\bar{E}} + p_{\bar{E}} \vec{N}_{\bar{Z}\hat{L}} \right) \quad (46)$$

onde o parâmetro $\Omega_{\hat{L}\bar{E}\bar{Z}}$ representa a área (volume, em 3-D) do triângulo $\triangle \hat{L}\bar{E}\bar{Z}$, os vetores $\vec{N}_{\bar{E}\bar{Z}}$, $\vec{N}_{\hat{L}\bar{E}}$ e $\vec{N}_{\bar{Z}\hat{L}}$ são normais com dimensão das faces do triângulo $\triangle \hat{L}\bar{E}\bar{Z}$ e $p_{\hat{L}}$, $p_{\bar{Z}}$ e $p_{\bar{E}}$ são as pressões nos pontos de colocação e auxiliares, respectivamente, para o referido suporte

triangular. A dedução do gradiente apresentado na equação (46), usando o Teorema da Divergência, e de uma forma alternativa, onde os triângulos de suporte são mapeados em um espaço de referência, são detalhados no Apêndice B.

Visto que a vazão em cada meia face é definida pela equação (45) e o gradiente de pressões é escrito, para o triângulo $\triangle \hat{L}\bar{E}\bar{Z}$, pela equação (46), a contribuição do elemento $\hat{L}$ para a meia face $\bar{E}\bar{I}$ (ver figura 12), pode ser escrita como:

$$\vec{v}_{\bar{E}\bar{I}} \cdot \vec{N}_{\bar{E}\bar{I}} = -\lambda_{\bar{E}\bar{I}} K_{\hat{L}} \vec{\nabla} p_{\hat{L}\bar{E}\bar{Z}} \cdot \vec{N}_{\bar{E}\bar{I}} = \frac{\lambda_{\bar{E}\bar{I}} K_{\hat{L}}}{2\Omega_{\hat{L}\bar{E}\bar{Z}}} (p_{\hat{L}} \vec{N}_{\bar{E}\bar{Z}} + p_{\bar{E}} \vec{N}_{\bar{Z}\bar{L}} + p_{\bar{Z}} \vec{N}_{\bar{L}\bar{E}}) \cdot \vec{N}_{\bar{E}\bar{I}} \quad (47)$$

A vazão definida na equação (47) é calculada para as outras meias faces pertencentes à região de interação associada ao vértice I . Dessa forma, considerando as contribuições dos volumes de controle à esquerda de cada meia face, as quatro vazões são descritas na forma matricial como:

$$\begin{Bmatrix} \vec{v}_{\bar{E}\bar{I}} \cdot \vec{N}_{\bar{E}\bar{I}} \\ \vec{v}_{\bar{O}\bar{I}} \cdot \vec{N}_{\bar{O}\bar{I}} \\ \vec{v}_{\bar{F}\bar{I}} \cdot \vec{N}_{\bar{F}\bar{I}} \\ \vec{v}_{\bar{Z}\bar{I}} \cdot \vec{N}_{\bar{Z}\bar{I}} \end{Bmatrix} = \begin{bmatrix} A_{1,1} & 0 & 0 & 0 \\ 0 & A_{2,2} & 0 & 0 \\ 0 & 0 & A_{3,3} & 0 \\ 0 & 0 & 0 & A_{4,4} \end{bmatrix} \begin{Bmatrix} p_{\hat{L}} \\ p_{\hat{R}} \\ p_{\hat{W}} \\ p_{\hat{M}} \end{Bmatrix} + \begin{bmatrix} B_{1,1} & 0 & 0 & B_{1,4} \\ B_{2,1} & B_{2,2} & 0 & 0 \\ 0 & B_{3,2} & B_{3,3} & 0 \\ 0 & 0 & B_{4,3} & B_{4,4} \end{bmatrix} \begin{Bmatrix} p_{\bar{E}} \\ p_{\bar{O}} \\ p_{\bar{F}} \\ p_{\bar{Z}} \end{Bmatrix} \quad (48)$$

onde os termos $A_{i,j}$ e $B_{i,j}$ são coeficientes que dependem dos parâmetros físicos de interesse.

No caso do escoamento bifásico de óleo e água, obtém-se:

$$\begin{aligned} A_{1,1} &= \frac{\lambda_{\bar{E}\bar{I}} (K_{\hat{L}} \vec{N}_{\bar{E}\bar{Z}}) \cdot \vec{N}_{\bar{E}\bar{I}}}{2\Omega_{\hat{L}\bar{E}\bar{Z}}}; & A_{2,2} &= \frac{\lambda_{\bar{O}\bar{I}} (K_{\hat{R}} \vec{N}_{\bar{O}\bar{E}}) \cdot \vec{N}_{\bar{O}\bar{I}}}{2\Omega_{\hat{R}\bar{O}\bar{E}}}; & A_{3,3} &= \frac{\lambda_{\bar{F}\bar{I}} (K_{\hat{W}} \vec{N}_{\bar{F}\bar{O}}) \cdot \vec{N}_{\bar{F}\bar{I}}}{2\Omega_{\hat{W}\bar{F}\bar{O}}}; \\ A_{4,4} &= \frac{\lambda_{\bar{Z}\bar{I}} (K_{\hat{M}} \vec{N}_{\bar{Z}\bar{F}}) \cdot \vec{N}_{\bar{Z}\bar{I}}}{2\Omega_{\hat{M}\bar{Z}\bar{F}}}; & B_{1,1} &= \frac{\lambda_{\bar{E}\bar{I}} (K_{\hat{L}} \vec{N}_{\bar{Z}\bar{L}}) \cdot \vec{N}_{\bar{E}\bar{I}}}{2\Omega_{\hat{L}\bar{E}\bar{Z}}}; & B_{1,4} &= \frac{\lambda_{\bar{E}\bar{I}} (K_{\hat{L}} \vec{N}_{\bar{L}\bar{E}}) \cdot \vec{N}_{\bar{E}\bar{I}}}{2\Omega_{\hat{L}\bar{E}\bar{Z}}}; \\ B_{2,1} &= \frac{\lambda_{\bar{O}\bar{I}} (K_{\hat{R}} \vec{N}_{\bar{R}\bar{O}}) \cdot \vec{N}_{\bar{O}\bar{I}}}{2\Omega_{\hat{R}\bar{O}\bar{E}}}; & B_{2,2} &= \frac{\lambda_{\bar{O}\bar{I}} (K_{\hat{R}} \vec{N}_{\bar{E}\bar{R}}) \cdot \vec{N}_{\bar{O}\bar{I}}}{2\Omega_{\hat{R}\bar{O}\bar{E}}}; & B_{3,2} &= \frac{\lambda_{\bar{F}\bar{I}} (K_{\hat{W}} \vec{N}_{\bar{W}\bar{F}}) \cdot \vec{N}_{\bar{F}\bar{I}}}{2\Omega_{\hat{W}\bar{F}\bar{O}}}; \\ B_{3,3} &= \frac{\lambda_{\bar{F}\bar{I}} (K_{\hat{W}} \vec{N}_{\bar{O}\bar{W}}) \cdot \vec{N}_{\bar{F}\bar{I}}}{2\Omega_{\hat{W}\bar{F}\bar{O}}}; & B_{4,3} &= \frac{\lambda_{\bar{Z}\bar{I}} (K_{\hat{M}} \vec{N}_{\bar{M}\bar{Z}}) \cdot \vec{N}_{\bar{Z}\bar{I}}}{2\Omega_{\hat{M}\bar{Z}\bar{F}}}; & B_{4,4} &= \frac{\lambda_{\bar{Z}\bar{I}} (K_{\hat{M}} \vec{N}_{\bar{F}\bar{M}}) \cdot \vec{N}_{\bar{Z}\bar{I}}}{2\Omega_{\hat{M}\bar{Z}\bar{F}}} \end{aligned} \quad (49)$$

Escrevendo a equação (48) de forma compacta, obtém-se:

$$\mathbf{v}_{\text{Esq}} = \mathbf{A}\hat{\mathbf{p}} + \mathbf{B}\bar{\mathbf{p}} \quad (50)$$

onde $\mathbf{v}_{\text{Esq}}$ é um vetor com as vazões, calculadas nas meias faces $\bar{F}\bar{I}$, $\bar{Z}\bar{I}$, $\bar{E}\bar{I}$ e $\bar{O}\bar{I}$, e que considera a contribuição dos volumes de controle à esquerda da mesma. A matriz $\mathbf{A}$ é constituída de parâmetros físicos e geométricos, sendo o número de linhas igual ao número de meias faces e o número de coluna igual ao número de volumes de controle envolvidos na região de interação avaliada. A matriz $\mathbf{B}$ também tem como entrada parâmetros físicos e geométricos. No entanto, o número de colunas também é igual ao número de meias faces consideradas

em cada região de interação. Para o MPFA-O, a matriz $\mathbf{B}$ é sempre quadrada. Os vetores $\hat{\mathbf{p}}$ e $\bar{\mathbf{p}}$ são, respectivamente, as pressões nos pontos de colocação ($p_{\hat{L}}, p_{\hat{R}}, p_{\hat{W}}$ e $p_{\hat{M}}$) e nos pontos auxiliares ($p_{\bar{Z}}, p_{\bar{E}}, p_{\bar{O}}$ e $p_{\bar{F}}$).

Seguindo um raciocínio análogo ao desenvolvido para a equação (47), a vazão calculada na meia face $\vec{IE}$, segundo a contribuição do volume de controle à direita $\hat{R}$, é dada, por:

$$\vec{v}_{IE} \cdot \vec{N}_{IE} = -\lambda_{IE} K_{\hat{R}} \vec{\nabla} p_{\hat{R}OE} \cdot \vec{N}_{IE} = \frac{\lambda_{IE} K_{\hat{R}}}{2\Omega_{\hat{R}OE}} (p_{\hat{R}} \vec{N}_{OE} + p_{\bar{E}} \vec{N}_{\hat{R}O} + p_{\bar{O}} \vec{N}_{\bar{E}\hat{R}}) \cdot \vec{N}_{IE} \quad (51)$$

Para os volumes de controle à direita das meias faces que concorrem para I , as vazões são escritas matricialmente como:

$$\begin{Bmatrix} \vec{v}_{IE} \cdot \vec{N}_{IE} \\ \vec{v}_{IO} \cdot \vec{N}_{IO} \\ \vec{v}_{IF} \cdot \vec{N}_{IF} \\ \vec{v}_{IZ} \cdot \vec{N}_{IZ} \end{Bmatrix} = \begin{bmatrix} 0 & C_{1,2} & 0 & 0 \\ 0 & 0 & C_{2,3} & 0 \\ 0 & 0 & 0 & C_{3,4} \\ C_{4,1} & 0 & 0 & 0 \end{bmatrix} \begin{Bmatrix} p_{\hat{L}} \\ p_{\hat{R}} \\ p_{\hat{W}} \\ p_{\hat{M}} \end{Bmatrix} + \begin{bmatrix} D_{1,1} & D_{1,2} & 0 & 0 \\ 0 & D_{2,2} & D_{2,3} & 0 \\ 0 & 0 & D_{3,3} & D_{3,4} \\ D_{4,1} & 0 & 0 & D_{4,4} \end{bmatrix} \begin{Bmatrix} p_{\bar{E}} \\ p_{\bar{O}} \\ p_{\bar{F}} \\ p_{\bar{Z}} \end{Bmatrix} \quad (52)$$

onde os termos $C_{i,j}$ e $D_{i,j}$ têm definições semelhantes aos termos $A_{i,j}$ e $B_{i,j}$, sendo dados, por:

$$\begin{aligned} C_{1,2} &= \frac{\lambda_{IE} (K_{\hat{R}} \vec{N}_{OE}) \cdot \vec{N}_{IE}}{2\Omega_{\hat{R}OE}}; & C_{2,3} &= \frac{\lambda_{IO} (K_{\hat{W}} \vec{N}_{FO}) \cdot \vec{N}_{IO}}{2\Omega_{\hat{W}FO}}; & C_{3,4} &= \frac{\lambda_{IF} (K_{\hat{M}} \vec{N}_{ZF}) \cdot \vec{N}_{IF}}{2\Omega_{\hat{M}ZF}}; \\ C_{4,1} &= \frac{\lambda_{IZ} (K_{\hat{L}} \vec{N}_{EZ}) \cdot \vec{N}_{IZ}}{2\Omega_{\hat{L}EZ}}; & D_{1,1} &= \frac{\lambda_{IE} (K_{\hat{R}} \vec{N}_{RO}) \cdot \vec{N}_{IE}}{2\Omega_{\hat{R}OE}}; & D_{1,2} &= \frac{\lambda_{IE} (K_{\hat{R}} \vec{N}_{ER}) \cdot \vec{N}_{IE}}{2\Omega_{\hat{R}OE}}; \\ D_{2,2} &= \frac{\lambda_{IO} (K_{\hat{W}} \vec{N}_{WO}) \cdot \vec{N}_{IO}}{2\Omega_{\hat{W}FO}}; & D_{2,3} &= \frac{\lambda_{IO} (K_{\hat{W}} \vec{N}_{OW}) \cdot \vec{N}_{IO}}{2\Omega_{\hat{W}FO}}; & D_{3,3} &= \frac{\lambda_{IF} (K_{\hat{M}} \vec{N}_{MZ}) \cdot \vec{N}_{IF}}{2\Omega_{\hat{M}ZF}}; \\ D_{3,4} &= \frac{\lambda_{IF} (K_{\hat{M}} \vec{N}_{FM}) \cdot \vec{N}_{IF}}{2\Omega_{\hat{M}ZF}}; & D_{4,1} &= \frac{\lambda_{IZ} (K_{\hat{L}} \vec{N}_{ZL}) \cdot \vec{N}_{IZ}}{2\Omega_{\hat{L}EZ}}; & D_{4,4} &= \frac{\lambda_{IZ} (K_{\hat{L}} \vec{N}_{LE}) \cdot \vec{N}_{IZ}}{2\Omega_{\hat{L}EZ}} \end{aligned} \quad (53)$$

A equação (52) também é escrita em uma forma compacta, como feito na equação (50) para a contribuição dos volumes de controle a esquerda das meias faces avaliadas.

$$\mathbf{v}_{Dir} = \mathbf{C}\hat{\mathbf{p}} + \mathbf{D}\bar{\mathbf{p}} \quad (54)$$

Nas equações (50) e (54), nota-se que as vazões são dependentes do valor das pressões nos pontos de colocação e nos pontos auxiliares (ver figura 12). As matrizes $\mathbf{C}$ e $\mathbf{D}$ são análogas às matrizes $\mathbf{A}$ e $\mathbf{B}$, respectivamente, tendo, contudo parâmetros físicos e geométricos, respectivamente, dos volumes de controle à direita e à esquerda de cada meia face avaliada como entrada. Impondo continuidade dos fluxos em todas as meias faces da região de interação I , como se vê na equação (55), um sistema local de equações algébricas é obtido.

$$\mathbf{v}_{Esq} = -\mathbf{v}_{Dir} \quad (55)$$

A solução desse sistema algébrico possibilita escrever as pressões nos pontos auxiliares como função das pressões nos pontos de colocação, que são, de fato, as incógnitas de uma formulação centrada na célula. Para isso, manipulações algébricas são necessárias para separar os termos associados aos pontos de colocação daqueles associados aos pontos auxiliares, produzindo:

$$\mathbf{G}\bar{\mathbf{p}} = \mathbf{H}\hat{\mathbf{p}} \quad (56)$$

As matrizes $\mathbf{H}$ e $\mathbf{G}$ podem ser obtidas facilmente substituindo as equações (50) e (54) na equação (55) e separando os termos associados aos pontos de colocação ($\mathbf{H} = \mathbf{A} + \mathbf{C}$) daqueles associados aos pontos auxiliares ($\mathbf{G} = -\mathbf{B} - \mathbf{D}$). Invertendo a matriz $\mathbf{G}$, as pressões nos pontos auxiliares $\bar{\mathbf{p}}$ podem ser escritas como função das pressões nos pontos de colocação $\hat{\mathbf{p}}$, como:

$$\bar{\mathbf{p}} = \mathbf{G}^{-1}\mathbf{H}\hat{\mathbf{p}} \quad (57)$$

Substituindo a equação (57) nas equações (50) e (54), as equações que definem as vazões nas meias faces $\bar{F}I$, $\bar{Z}I$, $\bar{E}I$ e $\bar{O}I$, são obtidas como função apenas das pressões nos pontos de colocação.

$$\mathbf{v}_{\text{Esq}} = \mathbf{A}\hat{\mathbf{p}} + \mathbf{B}\mathbf{G}^{-1}\mathbf{H}\hat{\mathbf{p}} \quad (58)$$

$$\mathbf{v}_{\text{Dir}} = \mathbf{C}\hat{\mathbf{p}} + \mathbf{D}\mathbf{G}^{-1}\mathbf{H}\hat{\mathbf{p}} \quad (59)$$

Agrupando todos os parâmetros de natureza física e geométrica associados às pressões desconhecidas, as equações (58) e (59) podem ser escritas como:

$$\mathbf{v}_{\text{Esq}} = \mathbf{T}_{\text{Esq}}\hat{\mathbf{p}} \quad (60)$$

$$\mathbf{v}_{\text{Dir}} = \mathbf{T}_{\text{Dir}}\hat{\mathbf{p}} \quad (61)$$

onde $\mathbf{T}_{\text{Esq}} = \mathbf{A} + \mathbf{B}\mathbf{G}^{-1}\mathbf{H}$ e $\mathbf{T}_{\text{Dir}} = \mathbf{C} + \mathbf{D}\mathbf{G}^{-1}\mathbf{H}$, podem ser interpretadas como matrizes de transmissibilidade. As equações (60) e (61) representam as contribuições aos volumes de controle $\hat{L}$, $\hat{R}$, $\hat{W}$ e $\hat{M}$ das vazões calculadas em suas meias faces da região de interação avaliada.

Considerando as contribuições de cada meia face pertencente a cada região de interação, definida em cada vértice que constitui o domínio discreto, o sistema algébrico global pode ser escrito, como:

$$\mathbf{M}_G\hat{\mathbf{p}}_G = \mathbf{u}_G \quad (62)$$

onde a matriz de transmissibilidade global $\mathbf{M}_G$ tem dimensões $i, j = \mathcal{N}_{\text{vc}}$ (número de volumes de controle). Cada linha i dessa matriz representa as contribuições sobre o i -ésimo volume de controle avaliado, cujos coeficientes são estabelecidos nas expressões que definem as vazões nas superfícies de controle, que, por sua vez, são dependentes dos volumes de controle associados às j -ésimas colunas não nulas da i -ésima linha avaliada. O vetor $\mathbf{u}_G$ representa o

“carregamento” global do sistema, cujas entradas são termos de fonte/sumidouro, i.e., poços de injeção e produção, e condições de contorno, e $\hat{\mathbf{p}}_G$ representa o campo de pressões nos pontos de colocação dos volumes, aqui assumidos nos centróides dos volumes de controle.

Tomando como exemplo a vazão calculada sobre a meia face $\bar{EI}$ (ver figura 12b). Existe contribuição para o volume de controle $\hat{L}$ (à esquerda da meia face), por meio da vazão $\vec{v}_{\bar{IE}} \cdot \vec{N}_{\bar{IE}}$, assim como também há contribuição para o volume de controle $\hat{R}$ (à direita da meia aresta) por meio da vazão $\vec{v}_{\bar{EI}} \cdot \vec{N}_{\bar{EI}}$. Dessa forma, as linhas das matrizes $\mathbf{T}_{\text{Esq}}$ e $\mathbf{T}_{\text{Dir}}$, correspondentes às vazões $\vec{v}_{\bar{IE}} \cdot \vec{N}_{\bar{IE}}$ e $\vec{v}_{\bar{EI}} \cdot \vec{N}_{\bar{EI}}$ nas equações (60) e (61), são adicionadas, respectivamente, às linhas da matriz global $\mathbf{M}_G$ correspondentes às posições dos volumes de controle $\hat{L}$ e $\hat{R}$. Em ambos os casos, as colunas de $\mathbf{M}_G$ que recebem as entradas vindas de $\mathbf{T}_{\text{Esq}}$ e $\mathbf{T}_{\text{Dir}}$ são aquelas associadas aos volumes de controle $\hat{L}$, $\hat{R}$, $\hat{W}$ e $\hat{M}$ (ver figura 12).

Na seção a seguir, duas variantes de esquemas do tipo MPFA com suporte completo de pressão são apresentadas. Devido à semelhança com o procedimento descrito para o MPFA-O, alguns detalhes dessa classe de esquemas numéricos são apenas mencionados, sempre com a devida referência ao procedimento já detalhado na presente seção.

Suporte Completo para a Pressão: MPFA-FPS e MPFA-Enriched

Apesar das semelhanças com os esquemas MPFA-O, as formulações com Suporte Completo para a Pressão (MPFA-FPS) ou “Enriquecidas” (MPFA-Enriched) aproximam o campo de pressão, em cada sub-região de interação, de modo que não haja zonas de extrapolação na função que define esse campo, conforme mostrado na figura 13b.

Segundo Chen *et al.* (2008), essas zonas de extrapolação contribuem fortemente para soluções do campo de pressões com oscilações espúrias, que são frequentes em problemas cujo tensor de permeabilidade apresenta elevada razão de anisotropia ou no caso de malhas computacionais com elevada distorção angular. Contudo, é importante observar que, o uso de uma função de interpolação bilinear (que usa quatro pontos) requer um grau de liberdade a mais do que à aproximação da pressão adotada no método MPFA-O com suporte triangular, tal como ilustrado na figura 13a.

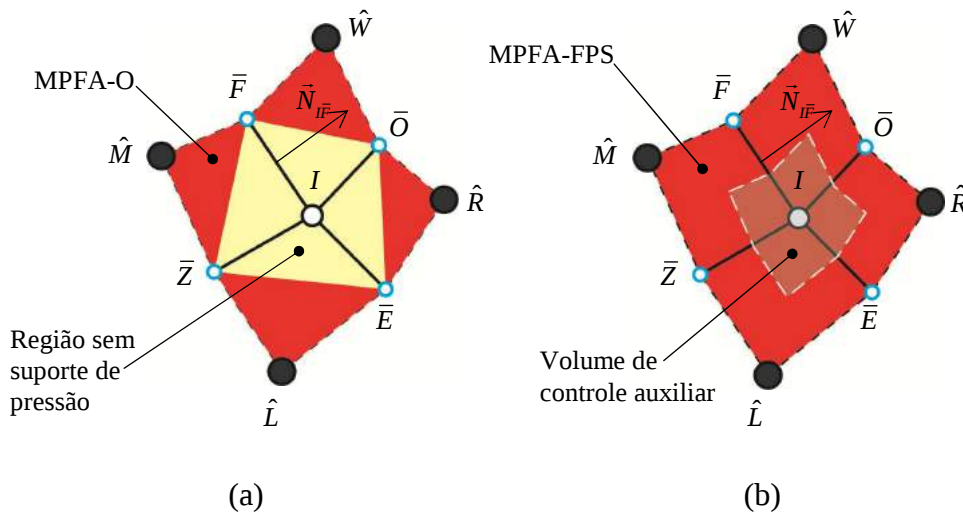


Figura 13. Áreas das sub-regiões de interação “suportadas” pela função de forma que aproxima o campo de pressão: (a) função linear no MPFA-O; (b) função bilinear no MPFA-FPS.

Nesse caso, o vértice I , comum aos volumes de controle interceptados pela região de interação avaliada, passa a conter uma incógnita extra nas formulações MPFA-FPS e MPFA-*Enriched*. Um balanço em um volume de controle auxiliar (mostrado na figura 12b) define a equação que complementa o sistema algébrico local para esses métodos. A forma com que esse volume de controle auxiliar é definido é a principal diferença entre os dois esquemas numéricos com suporte completo de pressão, aqui abordados. Detalhes adicionais são apresentados ao longo da presente seção.

Seguindo o procedimento adotado na descrição do MPFA-O, as vazões $\vec{v} \cdot \vec{N}$ são definidas nas meias faces dentro de cada região de interação associada a um vértice genérico I . Tomando a região de interação ilustrada na figura 12b, as vazões nas meias faces $\bar{EI}$ e $\bar{ZI}$, escritas com contribuições do volume de controle $\hat{L}$ e pontos auxiliares $\bar{E}$, $\bar{Z}$ e I , são, respectivamente, definidas como:

$$\vec{v}_{EI} \cdot \vec{N}_{EI} = -\lambda_{EI} K_{\hat{L}} \vec{\nabla} p_{\hat{L}\bar{E}\bar{I}\bar{Z}} \cdot \vec{N}_{EI} \quad (63)$$

$$\vec{v}_{IZ} \cdot \vec{N}_{IZ} = -\lambda_{IZ} K_{\hat{L}} \vec{\nabla} p_{\hat{L}\bar{E}\bar{I}\bar{Z}} \cdot \vec{N}_{IZ} \quad (64)$$

Comparado ao MPFA-O, a principal diferença observada nas formulações com suporte completo para a pressão consiste na forma como se define o gradiente de pressão, $\vec{\nabla} p_{\hat{L}\bar{E}\bar{I}\bar{Z}}$ por exemplo, no interior das sub-regiões de interação. Enquanto a distribuição de pressão no MPFA-O se dá por uma função linear, cujo gradiente é constante (ver Apêndice B), nas formulações com suporte completo, a pressão é representada por uma função bilinear em cada sub-região de interação. Consequentemente, o gradiente de pressão, estabelecido nas equações (63) e (64) depende da posição (ponto de quadratura) onde ele é avaliado. Na figura 14b são ilustradas possibilidades para o ponto de quadratura q , normalizado $(0,1]$, ao longo da meia face $\bar{EI}$.

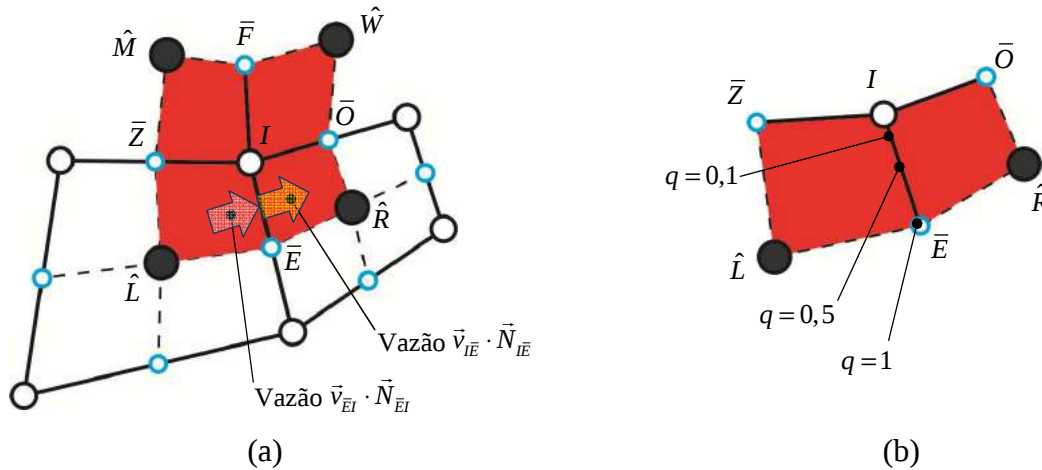


Figura 14. Ponto de quadratura onde a continuidade dos fluxos é imposta para a meia face $\bar{EI}$ (i.e., onde o fluxo utilizado no cálculo da vazão é calculado): (a) representação da vazão calculada no ponto de quadratura da meia aresta; (b) detalhe com outros possíveis pontos de quadratura q .

Qualquer ponto na meia face $\bar{EI}$, excluindo o vértice I , pode ser usado como ponto de quadratura na equação (63), como se vê na figura 14b. Ainda tendo como referência a figura 14b, qualquer ponto na meia face $\bar{ZI}$, excluindo o vértice I , também pode ser usado para o

cálculo do gradiente na equação (64). Segundo Edwards e Zheng (2008), os pontos de quadratura definidos em $\bar{E}$ e $\bar{Z}$, para as equações (63) e (64), respectivamente, garantem uma aproximação de segunda ordem. No entanto, variações na posição do ponto de quadratura propiciam uma diminuição nas oscilações espúrias, características de problemas com elevada razão de anisotropia e malhas que não são k-ortogonais Edwards e Zheng (2008), mesmo para esquemas numéricos com suporte completo de pressão.

Seguindo o procedimento adotado independentemente por Edwards e Zheng (2008) e Chen *et al.* (2008), o campo de pressões e, conseqüentemente, seu gradiente são definidos no interior de cada sub-região de interação, em um espaço de referência (mapeado) com coordenadas ξ e η . As equações (63) e (64) são, portanto, escritas como:

$$\vec{v}_{\bar{EI}} \cdot \vec{N}_{\bar{EI}} = -\lambda_{\bar{EI}} \left(\mathcal{T}_{11}^{\hat{L}} \frac{\partial p}{\partial \xi} \Big|_{\hat{L}} + \mathcal{T}_{12}^{\hat{L}} \frac{\partial p}{\partial \eta} \Big|_{\hat{L}} \right) \quad (65)$$

$$\vec{v}_{\bar{IZ}} \cdot \vec{N}_{\bar{IZ}} = -\lambda_{\bar{IZ}} \left(\mathcal{T}_{12}^{\hat{L}} \frac{\partial p}{\partial \xi} \Big|_{\hat{L}} + \mathcal{T}_{22}^{\hat{L}} \frac{\partial p}{\partial \eta} \Big|_{\hat{L}} \right) \quad (66)$$

As derivadas $\partial p / \partial \xi$ e $\partial p / \partial \eta$, avaliadas na sub-região de interação associada ao volume de controle $\hat{L}$, são definidas como:

$$\frac{\partial p}{\partial \xi} \Big|_{\hat{L}} = (p_{\bar{E}} - p_{\hat{L}})(1 - \eta) + (p_I - p_{\bar{Z}})\eta \quad (67)$$

$$\frac{\partial p}{\partial \eta} \Big|_{\hat{L}} = (p_{\bar{Z}} - p_{\hat{L}})(1 - \xi) + (p_I - p_{\bar{E}})\xi \quad (68)$$

onde os valores de ξ e η são definidos de acordo com o ponto no qual cada gradiente é avaliado (ver figura B.4 no Apêndice B). Uma abordagem mais detalhada pode ser vista em Edwards e Zheng (2008) e no Apêndice B. Os termos $\mathcal{T}_{11}^{\hat{L}}$, $\mathcal{T}_{12}^{\hat{L}}$ e $\mathcal{T}_{22}^{\hat{L}}$ são os componentes do tensor de Piola (Edwards e Zheng, 2008), estabelecido para as vazões calculadas nas meias faces $\bar{EI}$ e $\bar{ZI}$, a partir do volume de controle $\hat{L}$. Esses termos são definidos nas equações (69) a (72) como uma relação entre o tensor de permeabilidade absoluta, associado ao volume de controle tomado como referência, $\mathbf{K}_{\hat{L}}$, a inversa da matriz Jacobiana $\mathbf{J}_{\hat{L}\bar{EI}\bar{Z}}$, que converte as coordenadas estabelecidas no espaço mapeado ξ, η para o espaço dimensional x, y e os vetores normais às meias faces avaliadas $\vec{N}_{\bar{EI}}$ e $\vec{N}_{\bar{IZ}}$ (ver Apêndice B).

$$\mathbf{K}_{\hat{L}} \mathbf{J}_{\hat{L}\bar{EI}\bar{Z}}^{-1} \cdot \vec{N}_{\bar{EI}} = \begin{Bmatrix} \mathcal{T}_{11}^{\hat{L}} \\ \mathcal{T}_{12}^{\hat{L}} \end{Bmatrix}; \quad \mathbf{K}_{\hat{L}} \mathbf{J}_{\hat{L}\bar{EI}\bar{Z}}^{-1} \cdot \vec{N}_{\bar{IZ}} = \begin{Bmatrix} \mathcal{T}_{12}^{\hat{L}} \\ \mathcal{T}_{22}^{\hat{L}} \end{Bmatrix} \quad (69)$$

$$\mathcal{T}_{11}^{\hat{L}} = \frac{1}{\det(\mathbf{J}_{\hat{L}\bar{EI}\bar{Z}})} \left[k_{xx}^{\hat{L}} \left(\frac{\partial y}{\partial \eta} \right)^2 + k_{yy}^{\hat{L}} \left(\frac{\partial x}{\partial \eta} \right)^2 - 2k_{xy}^{\hat{L}} \frac{\partial x}{\partial \eta} \frac{\partial y}{\partial \eta} \right] \quad (70)$$

$$\mathcal{T}_{22}^{\hat{L}} = \frac{1}{\det(\mathbf{J}_{\hat{L}\bar{E}\bar{I}\bar{Z}})} \left[k_{xx}^{\hat{L}} \left(\frac{\partial y}{\partial \xi} \right)^2 + k_{yy}^{\hat{L}} \left(\frac{\partial x}{\partial \xi} \right)^2 - 2k_{xy}^{\hat{L}} \frac{\partial x}{\partial \xi} \frac{\partial y}{\partial \xi} \right] \quad (71)$$

$$\mathcal{T}_{12}^{\hat{L}} = \frac{1}{\det(\mathbf{J}_{\hat{L}\bar{E}\bar{I}\bar{Z}})} \left[k_{xy}^{\hat{L}} \left(\frac{\partial x}{\partial \xi} \frac{\partial y}{\partial \eta} + \frac{\partial x}{\partial \eta} \frac{\partial y}{\partial \xi} \right) - \left(k_{xx}^{\hat{L}} \frac{\partial y}{\partial \xi} \frac{\partial y}{\partial \eta} + k_{yy}^{\hat{L}} \frac{\partial x}{\partial \xi} \frac{\partial x}{\partial \eta} \right) \right] \quad (72)$$

As deduções das equações (70) a (72) também são detalhadas no Apêndice B.

Por meio de um raciocínio análogo ao utilizada na definição das equações (65) e (66), as vazões nas outras meias faces, associadas às sub-regiões de interação pertencentes aos volumes de controle $\hat{R}$, $\hat{W}$ e $\hat{M}$, podem ser escritas, como:

$$\vec{v}_{\bar{I}\bar{E}} \cdot \vec{N}_{\bar{I}\bar{E}} = -\lambda_{\bar{I}\bar{E}} \left(\mathcal{T}_{11}^{\hat{R}} \frac{\partial p}{\partial \xi} \Big|_{\hat{R}} + \mathcal{T}_{12}^{\hat{R}} \frac{\partial p}{\partial \eta} \Big|_{\hat{R}} \right) \quad (73)$$

$$\vec{v}_{\bar{O}\bar{I}} \cdot \vec{N}_{\bar{O}\bar{I}} = -\lambda_{\bar{O}\bar{I}} \left(\mathcal{T}_{12}^{\hat{R}} \frac{\partial p}{\partial \xi} \Big|_{\hat{R}} + \mathcal{T}_{22}^{\hat{R}} \frac{\partial p}{\partial \eta} \Big|_{\hat{R}} \right) \quad (74)$$

$$\vec{v}_{\bar{F}\bar{I}} \cdot \vec{N}_{\bar{F}\bar{I}} = -\lambda_{\bar{F}\bar{I}} \left(\mathcal{T}_{11}^{\hat{W}} \frac{\partial p}{\partial \xi} \Big|_{\hat{W}} + \mathcal{T}_{12}^{\hat{W}} \frac{\partial p}{\partial \eta} \Big|_{\hat{W}} \right) \quad (75)$$

$$\vec{v}_{\bar{I}\bar{O}} \cdot \vec{N}_{\bar{I}\bar{O}} = -\lambda_{\bar{I}\bar{O}} \left(\mathcal{T}_{12}^{\hat{W}} \frac{\partial p}{\partial \xi} \Big|_{\hat{W}} + \mathcal{T}_{22}^{\hat{W}} \frac{\partial p}{\partial \eta} \Big|_{\hat{W}} \right) \quad (76)$$

$$\vec{v}_{\bar{Z}\bar{I}} \cdot \vec{N}_{\bar{Z}\bar{I}} = -\lambda_{\bar{Z}\bar{I}} \left(\mathcal{T}_{11}^{\hat{M}} \frac{\partial p}{\partial \xi} \Big|_{\hat{M}} + \mathcal{T}_{12}^{\hat{M}} \frac{\partial p}{\partial \eta} \Big|_{\hat{M}} \right) \quad (77)$$

$$\vec{v}_{\bar{I}\bar{F}} \cdot \vec{N}_{\bar{I}\bar{F}} = -\lambda_{\bar{I}\bar{F}} \left(\mathcal{T}_{12}^{\hat{M}} \frac{\partial p}{\partial \xi} \Big|_{\hat{M}} + \mathcal{T}_{22}^{\hat{M}} \frac{\partial p}{\partial \eta} \Big|_{\hat{M}} \right) \quad (78)$$

A construção do gradiente de pressões no espaço mapeado e a definição dos componentes do tensor de Piola para os volumes de controle $\hat{R}$, $\hat{W}$ e $\hat{M}$ seguem o mesmo raciocínio empregado na obtenção das equações (67) a (72).

As vazões nas meias faces avaliadas, obtidas com a contribuição dos volumes de controle a sua esquerda, são definidas associando as equações (65), (73), (75) e (77) com as equações (67) e (68), e adotando $\xi = 1$ e $\eta = 1 - q$ em cada sub-região de interação avaliada (ver figura B.4 no Apêndice B). Dessa forma, as equações (65), (73), (75) e (77) são reescritas, como:

$$\vec{v}_{\bar{E}\bar{I}} \cdot \vec{N}_{\bar{E}\bar{I}} = -\lambda_{\bar{E}\bar{I}} \left[\mathcal{T}_{11}^{\hat{L}} \left(q(p_{\bar{E}} - p_{\hat{L}}) + (1-q)(p_{\bar{I}} - p_{\bar{Z}}) \right) + \mathcal{T}_{12}^{\hat{L}} (p_{\bar{I}} - p_{\bar{E}}) \right] \quad (79)$$

$$\vec{v}_{\bar{O}I} \cdot \vec{N}_{\bar{O}I} = -\lambda_{\bar{O}I} \left[\mathcal{T}_{12}^{\hat{R}} \left(q(p_{\bar{O}} - p_{\hat{R}}) + (1-q)(p_I - p_{\bar{E}}) \right) + \mathcal{T}_{22}^{\hat{R}} (p_I - p_{\bar{O}}) \right] \quad (80)$$

$$\vec{v}_{\bar{F}I} \cdot \vec{N}_{\bar{F}I} = -\lambda_{\bar{F}I} \left[\mathcal{T}_{11}^{\hat{W}} \left(q(p_{\bar{F}} - p_{\hat{W}}) + (1-q)(p_I - p_{\bar{O}}) \right) + \mathcal{T}_{12}^{\hat{W}} (p_I - p_{\bar{F}}) \right] \quad (81)$$

$$\vec{v}_{\bar{Z}I} \cdot \vec{N}_{\bar{Z}I} = -\lambda_{\bar{Z}I} \left[\mathcal{T}_{12}^{\hat{M}} \left(q(p_{\bar{Z}} - p_{\hat{M}}) + (1-q)(p_I - p_{\bar{F}}) \right) + \mathcal{T}_{22}^{\hat{M}} (p_I - p_{\bar{Z}}) \right] \quad (82)$$

Os pontos de quadratura nas equações acima são coincidentes com os pontos auxiliares em cada meia face avaliada (ver $q=1$ na figura 14b).

Organizando as equações (79) a (82) na forma matricial, assim como foi feito para o MPFA-O na equação (48), obtém-se:

$$\begin{Bmatrix} \vec{v}_{\bar{E}I} \cdot \vec{N}_{\bar{E}I} \\ \vec{v}_{\bar{O}I} \cdot \vec{N}_{\bar{O}I} \\ \vec{v}_{\bar{F}I} \cdot \vec{N}_{\bar{F}I} \\ \vec{v}_{\bar{Z}I} \cdot \vec{N}_{\bar{Z}I} \end{Bmatrix} = \begin{bmatrix} A_{1,1} & 0 & 0 & 0 \\ 0 & A_{2,2} & 0 & 0 \\ 0 & 0 & A_{3,3} & 0 \\ 0 & 0 & 0 & A_{4,4} \end{bmatrix} \begin{Bmatrix} p_{\hat{L}} \\ p_{\hat{R}} \\ p_{\hat{W}} \\ p_{\hat{M}} \end{Bmatrix} + \begin{bmatrix} B_{1,1} & 0 & 0 & B_{1,4} & B_{1,5} \\ B_{2,1} & B_{2,2} & 0 & 0 & B_{2,5} \\ 0 & B_{3,2} & B_{3,3} & 0 & B_{3,5} \\ 0 & 0 & B_{4,3} & B_{4,4} & B_{4,5} \end{bmatrix} \begin{Bmatrix} p_{\bar{E}} \\ p_{\bar{O}} \\ p_{\bar{F}} \\ p_{\bar{Z}} \\ p_I \end{Bmatrix} \quad (83)$$

onde os termos $A_{i,j}$ e $B_{i,j}$ são dados, por:

$$\begin{aligned} A_{1,1} &= \lambda_{\bar{E}I} q \mathcal{T}_{11}^{\hat{L}}; & A_{2,2} &= \lambda_{\bar{O}I} q \mathcal{T}_{12}^{\hat{R}}; & A_{3,3} &= \lambda_{\bar{F}I} q \mathcal{T}_{11}^{\hat{W}}; & A_{4,4} &= \lambda_{\bar{Z}I} q \mathcal{T}_{12}^{\hat{M}}; \\ B_{1,1} &= -\lambda_{\bar{E}I} (\mathcal{T}_{11}^{\hat{L}} q - \mathcal{T}_{12}^{\hat{L}}); & B_{1,4} &= \lambda_{\bar{E}I} (1-q) \mathcal{T}_{11}^{\hat{L}}; & B_{2,1} &= \lambda_{\bar{O}I} (1-q) \mathcal{T}_{12}^{\hat{R}}; & B_{2,5} &= -\lambda_{\bar{O}I} [(1-q) \mathcal{T}_{12}^{\hat{R}} + \mathcal{T}_{22}^{\hat{R}}]; \\ B_{1,5} &= -\lambda_{\bar{E}I} [(1-q) \mathcal{T}_{11}^{\hat{L}} + \mathcal{T}_{12}^{\hat{L}}]; & B_{2,2} &= -\lambda_{\bar{O}I} (\mathcal{T}_{12}^{\hat{R}} q - \mathcal{T}_{22}^{\hat{R}}); & B_{3,2} &= \lambda_{\bar{F}I} (1-q) \mathcal{T}_{11}^{\hat{W}}; & B_{3,3} &= -\lambda_{\bar{F}I} (\mathcal{T}_{11}^{\hat{W}} q - \mathcal{T}_{12}^{\hat{W}}); \\ B_{2,5} &= -\lambda_{\bar{O}I} [(1-q) \mathcal{T}_{12}^{\hat{R}} + \mathcal{T}_{22}^{\hat{R}}]; & B_{3,5} &= -\lambda_{\bar{F}I} [(1-q) \mathcal{T}_{11}^{\hat{W}} + \mathcal{T}_{12}^{\hat{W}}]; & B_{4,3} &= \lambda_{\bar{Z}I} (1-q) \mathcal{T}_{12}^{\hat{M}}; & B_{4,5} &= -\lambda_{\bar{Z}I} [(1-q) \mathcal{T}_{12}^{\hat{M}} + \mathcal{T}_{22}^{\hat{M}}]; \\ B_{3,2} &= \lambda_{\bar{F}I} (1-q) \mathcal{T}_{11}^{\hat{W}}; & B_{4,4} &= -\lambda_{\bar{Z}I} (\mathcal{T}_{12}^{\hat{M}} q - \mathcal{T}_{22}^{\hat{M}}); & & & & \end{aligned} \quad (84)$$

Escrevendo a equação (83) de maneira compacta, obtém-se:

$$\mathbf{v}_{\text{Esq}} = \mathbf{A}_{FPS} \hat{\mathbf{p}} + \mathbf{B}_{FPS} \mathbf{p}_{Aux} \quad (85)$$

onde $\mathbf{v}_{\text{Esq}}$ e a matriz $\mathbf{A}_{FPS}$ seguem o mesmo padrão estabelecido para o sistema algébrico local obtido com o MPFA-O, sendo esses, respectivamente, um vetor com as vazões, calculadas nas meias faces $\bar{E}I$, $\bar{O}I$, $\bar{F}I$ e $\bar{Z}I$ (contribuição dos volumes de controle à esquerda) e uma matriz constituída de parâmetros físicos e geométricos. Na matriz $\mathbf{A}_{FPS}$, o número de linhas é igual ao número de meias faces e o número de colunas é igual ao número de volumes de controle envolvidos na região de interação avaliada, tal como no MPFA-O. Na matriz $\mathbf{B}_{FPS}$ o número de colunas é igual ao número de meias faces consideradas em cada região de

interação mais um. Essa diferença ocorre devido ao grau de liberdade adicional, resultante da utilização da função com suporte completo, característico dos esquemas numéricos MPFA-FPS e MPFA-*Enriched*, este último comentado mais adiante. Deve-se notar que a matriz $\mathbf{B}_{FPS}$ não é quadrada como ocorre no MPFA-O. Isso implica em uma restrição adicional, descrita a seguir. Os vetores $\hat{\mathbf{p}}$ e $\mathbf{p}_{Aux}$ são as pressões desconhecidas nos pontos de colocação $(p_{\hat{L}}, p_{\hat{R}}, p_{\hat{W}} \text{ e } p_{\hat{M}})$ e nos pontos auxiliares $(p_{\bar{Z}}, p_{\bar{E}}, p_{\bar{O}}, p_{\bar{F}} \text{ e } p_I)$, respectivamente.

Novamente, fazendo um raciocínio análogo para obterem-se as vazões nas meias faces $\bar{EI}$, $\bar{OI}$, $\bar{FI}$ e $\bar{ZI}$ com a contribuição dos volumes de controle localizados à sua direita, se obtém as equações (86) a (89).

$$\vec{v}_{\bar{IE}} \cdot \vec{N}_{\bar{IE}} = -\lambda_{\bar{IE}} \left[\mathcal{T}_{11}^{\hat{R}} (q(p_{\bar{E}} - p_{\hat{R}}) + (1-q)(p_I - p_{\bar{O}})) + \mathcal{T}_{12}^{\hat{R}} (p_I - p_{\bar{E}}) \right] \quad (86)$$

$$\vec{v}_{\bar{IO}} \cdot \vec{N}_{\bar{IO}} = -\lambda_{\bar{IO}} \left[\mathcal{T}_{12}^{\hat{W}} (q(p_{\bar{O}} - p_{\hat{W}}) + (1-q)(p_I - p_{\bar{F}})) + \mathcal{T}_{22}^{\hat{W}} (p_I - p_{\bar{O}}) \right] \quad (87)$$

$$\vec{v}_{\bar{IF}} \cdot \vec{N}_{\bar{IF}} = -\lambda_{\bar{IF}} \left[\mathcal{T}_{11}^{\hat{M}} (q(p_{\bar{F}} - p_{\hat{M}}) + (1-q)(p_I - p_{\bar{Z}})) + \mathcal{T}_{12}^{\hat{M}} (p_I - p_{\bar{F}}) \right] \quad (88)$$

$$\vec{v}_{\bar{IZ}} \cdot \vec{N}_{\bar{IZ}} = -\lambda_{\bar{IZ}} \left[\mathcal{T}_{12}^{\hat{L}} (q(p_{\bar{Z}} - p_{\hat{L}}) + (1-q)(p_I - p_{\bar{E}})) + \mathcal{T}_{22}^{\hat{L}} (p_I - p_{\bar{Z}}) \right] \quad (89)$$

Assim como foi feito na equação (83), a forma matricial para as referidas equações é dada como segue:

$$\begin{Bmatrix} \vec{v}_{\bar{IE}} \cdot \vec{N}_{\bar{IE}} \\ \vec{v}_{\bar{IO}} \cdot \vec{N}_{\bar{IO}} \\ \vec{v}_{\bar{IF}} \cdot \vec{N}_{\bar{IF}} \\ \vec{v}_{\bar{IZ}} \cdot \vec{N}_{\bar{IZ}} \end{Bmatrix} = \begin{bmatrix} 0 & C_{1,2} & 0 & 0 \\ 0 & 0 & C_{2,3} & 0 \\ 0 & 0 & 0 & C_{3,4} \\ C_{4,1} & 0 & 0 & 0 \end{bmatrix} \begin{Bmatrix} p_{\hat{L}} \\ p_{\hat{R}} \\ p_{\hat{W}} \\ p_{\hat{M}} \end{Bmatrix} + \begin{bmatrix} D_{1,1} & D_{1,2} & 0 & 0 & D_{1,5} \\ 0 & D_{2,2} & D_{2,3} & 0 & D_{2,5} \\ 0 & 0 & D_{3,3} & D_{3,4} & D_{3,5} \\ D_{4,1} & 0 & 0 & D_{4,4} & D_{4,5} \end{bmatrix} \begin{Bmatrix} p_{\bar{E}} \\ p_{\bar{O}} \\ p_{\bar{F}} \\ p_{\bar{Z}} \\ p_I \end{Bmatrix} \quad (90)$$

onde os coeficientes $C_{i,j}$ e $D_{i,j}$ são dados, por:

$$\begin{aligned} C_{1,2} &= \lambda_{\bar{IE}} q \mathcal{T}_{11}^{\hat{R}}; & C_{2,3} &= \lambda_{\bar{IO}} q \mathcal{T}_{12}^{\hat{W}}; & C_{3,4} &= \lambda_{\bar{IF}} q \mathcal{T}_{11}^{\hat{M}}; & C_{4,1} &= \lambda_{\bar{IZ}} q \mathcal{T}_{12}^{\hat{L}}; \\ D_{1,1} &= -\lambda_{\bar{IE}} (\mathcal{T}_{11}^{\hat{R}} q - \mathcal{T}_{12}^{\hat{R}}); & D_{1,2} &= \lambda_{\bar{IE}} (1-q) \mathcal{T}_{11}^{\hat{R}}; \\ D_{1,5} &= -\lambda_{\bar{IE}} [(1-q) \mathcal{T}_{11}^{\hat{R}} + \mathcal{T}_{12}^{\hat{R}}]; & D_{2,2} &= -\lambda_{\bar{IO}} (\mathcal{T}_{12}^{\hat{W}} q - \mathcal{T}_{22}^{\hat{W}}); \\ D_{2,3} &= \lambda_{\bar{IO}} (1-q) \mathcal{T}_{12}^{\hat{W}}; & D_{2,5} &= -\lambda_{\bar{IO}} [(1-q) \mathcal{T}_{12}^{\hat{W}} + \mathcal{T}_{22}^{\hat{W}}]; \\ D_{3,3} &= \lambda_{\bar{IF}} (1-q) \mathcal{T}_{11}^{\hat{M}}; & D_{3,4} &= -\lambda_{\bar{IF}} (\mathcal{T}_{11}^{\hat{M}} q - \mathcal{T}_{12}^{\hat{M}}); \\ D_{3,5} &= -\lambda_{\bar{IF}} [(1-q) \mathcal{T}_{11}^{\hat{M}} + \mathcal{T}_{12}^{\hat{M}}]; & D_{4,1} &= -\lambda_{\bar{IZ}} (\mathcal{T}_{12}^{\hat{L}} q - \mathcal{T}_{22}^{\hat{L}}); \\ D_{4,4} &= \lambda_{\bar{IZ}} (1-q) \mathcal{T}_{12}^{\hat{L}}; & D_{4,5} &= -\lambda_{\bar{IZ}} [(1-q) \mathcal{T}_{12}^{\hat{L}} + \mathcal{T}_{22}^{\hat{L}}] \end{aligned} \quad (91)$$

Adicionalmente, a equação (90) na forma compacta é definida, por:

$$\mathbf{v}_{Dir} = \mathbf{C}_{FPS} \hat{\mathbf{p}} + \mathbf{D}_{FPS} \mathbf{p}_{Aux} \quad (92)$$

A imposição da continuidade de fluxo sobre as meias faces da região de interação avaliada é o procedimento natural a ser feito, assim como foi feito na equação (55), para o MPFA-O, ou mesmo, na equação (42), para o TPFA no domínio unidimensional. Assim, separando os termos associados às pressões nos pontos de colocação ($p_{\hat{L}}$, $p_{\hat{R}}$, $p_{\hat{W}}$ e $p_{\hat{M}}$) dos termos associados às pressões nos pontos auxiliares ($p_{\bar{E}}$, $p_{\bar{O}}$, $p_{\bar{F}}$, $p_{\bar{Z}}$ e p_I), tem-se:

$$\mathbf{G}_{FPS} \mathbf{p}_{Aux} = \mathbf{H}_{FPS} \hat{\mathbf{p}} \quad (93)$$

No entanto, diferentemente da matriz $\mathbf{G}$, obtida na equação (56) para o MPFA-O, a matriz $\mathbf{G}_{FPS}$ apresentada no sistema algébrico local da equação (93) não é quadrada. Conforme mencionado anteriormente, o grau de liberdade no vértice I (p_I), característico dos esquemas MPFA-FPS e MPFA-Enriched, requer uma equação a mais para permitir a solução do referido sistema algébrico. A linha adicional nas matrizes $\mathbf{G}_{FPS}$ e $\mathbf{H}_{FPS}$ na equação (93) é obtida a partir do balanço de massa no volume de controle auxiliar Ω_{aux} , ilustrado nas figuras 15 e 17, respectivamente, para as formulações MPFA-FPS e MPFA-Enriched.

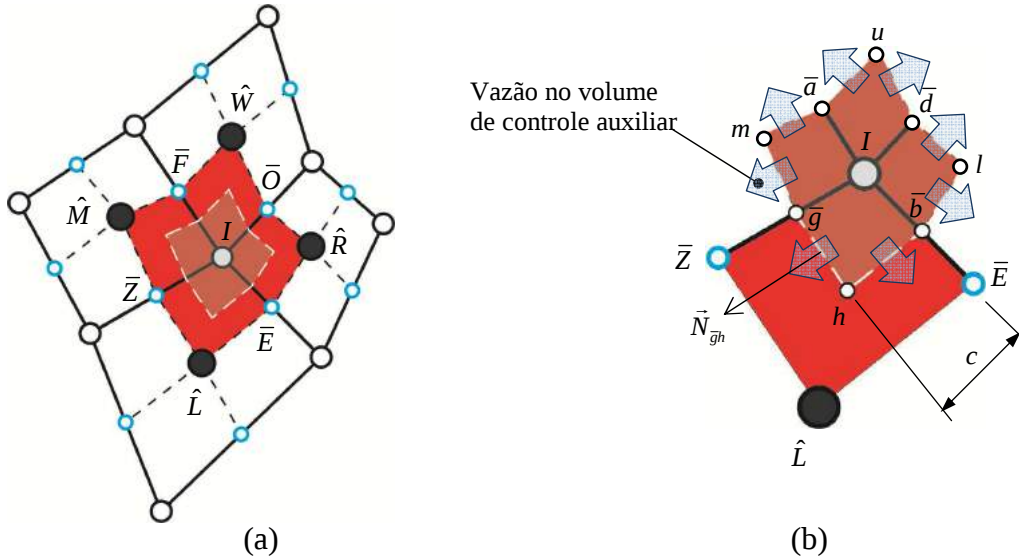


Figura 15. Volume de controle auxiliar no esquema MPFA-FPS: (a) fragmento de malha com região de interação associada ao vértice I ; (b) indicação das vazões através das superfícies de controle auxiliares.

Nos dois esquemas numéricos, a integral da equação (13), sem o termo de gravidade, apenas para simplificar a apresentação, no volume de controle auxiliar Ω_{aux} é dada, por:

$$\int_{\Omega_{Aux}} \vec{\nabla} \cdot \vec{v} d\Omega_{Aux} = 0 \quad (94)$$

Novamente, assim como foi feito para obter a equação (33), os Teoremas da Divergência e do Valor Médio são empregados na equação (94). Dessa forma, a equação que governa o balanço de massa no volume de controle auxiliar pode ser escrita como:

$$\sum_{ij \in \Gamma_{Aux}} \vec{v}_{ij} \cdot \vec{N}_{ij} = 0 \quad (95)$$

onde $\vec{v}_{ij} \cdot \vec{N}_{ij}$ representa a vazão calculada em uma face genérica do volume de controle auxiliar (ver face $\bar{g}h$, por exemplo, na figura 15b).

As vazões nas faces auxiliares são calculadas substituindo devidamente as coordenadas naturais ξ e η de acordo com o ponto de quadratura desejado. Considerando a sub-região de interação associada ao volume de controle $\hat{L}$, ilustrada na figura 15b, a vazão calculada na face $\bar{g}h$ é definida fazendo ξ e η assumirem as seguintes relações:

$$\xi = 1 - c; \quad \eta = 1 - c(1 - \tau) \quad (96)$$

onde os parâmetros c e τ representam, respectivamente, o tamanho do volume de controle auxiliar, $(0,1]$ e um ponto de quadratura definido ao longo da aresta onde a “vazão auxiliar” é calculada. Ambos indicados na figura 16a.

O valor de τ varia entre $(0,1]$ e o referido parâmetro é equivalente ao ponto de quadratura q nas meias faces, porém atuando no volume de controle auxiliar. É fácil verificar que $\tau = 1$ implica em $\eta = 1$ e a “vazão auxiliar” é calculado no ponto $\bar{g}$ (ver figura 15b).

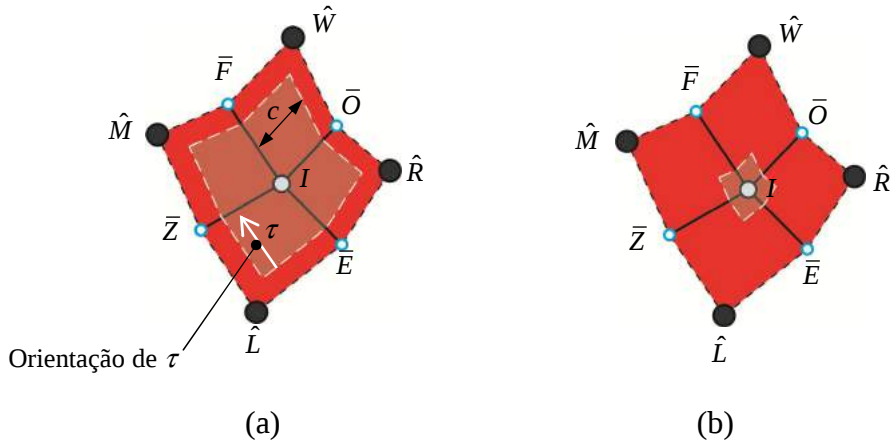


Figura 16. Parametrização do volume de controle auxiliar para o MPFA-FPS: (a) Localização do ponto de quadratura através de τ e volume de controle auxiliar $c = 0,8$; (b) Volume de controle auxiliar com $c = 0,1$.

Para $\tau = 0$ se tem $\eta = 1 - c$ o que equivale a um ponto de quadratura coincidente com o ponto h . Assim, utilizando um raciocínio análogo ao usado na construção das equações (79) a (82) e (86) a (89), porém com a equação (96) definindo o ponto de integração, a vazão na aresta auxiliar $\bar{g}h$ pode ser escrita como:

$$\vec{v}_{\bar{g}h} \cdot \vec{N}_{\bar{g}h} = -\lambda_{\bar{g}h} c \left[\mathcal{T}_{11}^{\hat{L}} \left(c(1 - \tau)(p_{\bar{E}} - p_{\hat{L}}) + (1 - c(1 - \tau))(p_I - p_{\bar{Z}}) \right) + \mathcal{T}_{12}^{\hat{L}} \left(c(p_{\bar{Z}} - p_{\hat{L}}) + (1 - c)(p_I - p_{\bar{E}}) \right) \right] \quad (97)$$

Analogamente, para as outras faces do volume de controle auxiliar ilustrado na figura 15b, as vazões são definidas como:

$$\vec{v}_{h\bar{b}} \cdot \vec{N}_{h\bar{b}} = -\lambda_{h\bar{b}} c \left[\mathcal{T}_{12}^{\hat{L}} \left(c(p_{\bar{E}} - p_{\hat{L}}) + (1-c)(p_I - p_{\bar{Z}}) \right) + \mathcal{T}_{22}^{\hat{L}} \left(c(1-\tau)(p_{\bar{Z}} - p_{\hat{L}}) + (1-c(1-\tau))(p_I - p_{\bar{E}}) \right) \right] \quad (98)$$

$$\vec{v}_{l\bar{d}} \cdot \vec{N}_{l\bar{d}} = -\lambda_{l\bar{d}} c \left[\mathcal{T}_{11}^{\hat{R}} \left(c(1-\tau)(p_{\bar{E}} - p_{\hat{R}}) + (1-c(1-\tau))(p_I - p_{\bar{O}}) \right) + \mathcal{T}_{12}^{\hat{R}} \left(c(p_{\bar{O}} - p_{\hat{R}}) + (1-c)(p_I - p_{\bar{E}}) \right) \right] \quad (99)$$

$$\vec{v}_{b\bar{l}} \cdot \vec{N}_{b\bar{l}} = -\lambda_{b\bar{l}} c \left[\mathcal{T}_{12}^{\hat{R}} \left(c(p_{\bar{E}} - p_{\hat{R}}) + (1-c)(p_I - p_{\bar{O}}) \right) + \mathcal{T}_{22}^{\hat{R}} \left(c(1-\tau)(p_{\bar{O}} - p_{\hat{R}}) + (1-c(1-\tau))(p_I - p_{\bar{E}}) \right) \right] \quad (100)$$

$$\vec{v}_{d\bar{u}} \cdot \vec{N}_{d\bar{u}} = -\lambda_{d\bar{u}} c \left[\mathcal{T}_{11}^{\hat{W}} \left(c(1-\tau)(p_{\bar{F}} - p_{\hat{W}}) + (1-c(1-\tau))(p_I - p_{\bar{O}}) \right) + \mathcal{T}_{12}^{\hat{W}} \left(c(p_{\bar{O}} - p_{\hat{W}}) + (1-c)(p_I - p_{\bar{F}}) \right) \right] \quad (101)$$

$$\vec{v}_{u\bar{a}} \cdot \vec{N}_{u\bar{a}} = -\lambda_{u\bar{a}} c \left[\mathcal{T}_{12}^{\hat{W}} \left(c(p_{\bar{F}} - p_{\hat{W}}) + (1-c)(p_I - p_{\bar{O}}) \right) + \mathcal{T}_{22}^{\hat{W}} \left(c(1-\tau)(p_{\bar{O}} - p_{\hat{W}}) + (1-c(1-\tau))(p_I - p_{\bar{F}}) \right) \right] \quad (102)$$

$$\vec{v}_{m\bar{g}} \cdot \vec{N}_{m\bar{g}} = -\lambda_{m\bar{g}} c \left[\mathcal{T}_{11}^{\hat{M}} \left(c(1-\tau)(p_{\bar{F}} - p_{\hat{M}}) + (1-c(1-\tau))(p_I - p_{\bar{Z}}) \right) + \mathcal{T}_{12}^{\hat{M}} \left(c(p_{\bar{Z}} - p_{\hat{M}}) + (1-c)(p_I - p_{\bar{F}}) \right) \right] \quad (103)$$

$$\vec{v}_{a\bar{m}} \cdot \vec{N}_{a\bar{m}} = -\lambda_{a\bar{m}} c \left[\mathcal{T}_{12}^{\hat{M}} \left(c(p_{\bar{F}} - p_{\hat{M}}) + (1-c)(p_I - p_{\bar{Z}}) \right) + \mathcal{T}_{22}^{\hat{M}} \left(c(1-\tau)(p_{\bar{Z}} - p_{\hat{M}}) + (1-c(1-\tau))(p_I - p_{\bar{F}}) \right) \right] \quad (104)$$

Substituindo as vazões definidas nas equações (97) a (104) na equação (95) produz:

$$\sum_{ij \in \Gamma_{Aux}} \vec{v}_{ij} \cdot \vec{N}_{ij} = (\vec{v}_{g\bar{h}} \cdot \vec{N}_{g\bar{h}}) + (\vec{v}_{h\bar{b}} \cdot \vec{N}_{h\bar{b}}) + (\vec{v}_{b\bar{l}} \cdot \vec{N}_{b\bar{l}}) + (\vec{v}_{l\bar{d}} \cdot \vec{N}_{l\bar{d}}) + (\vec{v}_{d\bar{u}} \cdot \vec{N}_{d\bar{u}}) + (\vec{v}_{u\bar{a}} \cdot \vec{N}_{u\bar{a}}) + (\vec{v}_{a\bar{m}} \cdot \vec{N}_{a\bar{m}}) + (\vec{v}_{m\bar{g}} \cdot \vec{N}_{m\bar{g}}) = 0 \quad (105)$$

Dessa forma, os coeficientes da última linha do sistema algébrico local, definido na equação (93), podem ser obtidos como:

$$H_{5,1} = \lambda_{g\bar{h}} c \left[\mathcal{T}_{11}^{\hat{L}} c(1-\tau) + \mathcal{T}_{12}^{\hat{L}} c \right] + \lambda_{h\bar{b}} c \left[\mathcal{T}_{12}^{\hat{L}} c + \mathcal{T}_{22}^{\hat{L}} c(1-\tau) \right] \quad (106)$$

$$H_{5,2} = \lambda_{l\bar{d}} c \left[\mathcal{T}_{11}^{\hat{R}} c(1-\tau) + \mathcal{T}_{12}^{\hat{R}} c \right] + \lambda_{b\bar{l}} c \left[\mathcal{T}_{12}^{\hat{R}} c + \mathcal{T}_{22}^{\hat{R}} c(1-\tau) \right] \quad (107)$$

$$H_{5,3} = \lambda_{\bar{d}u} c \left[\mathcal{T}_{11}^{\hat{W}} c(1-\tau) + \mathcal{T}_{12}^{\hat{W}} c \right] + \lambda_{\bar{d}u} c \left[\mathcal{T}_{12}^{\hat{W}} c + \mathcal{T}_{22}^{\hat{W}} c(1-\tau) \right] \quad (108)$$

$$H_{5,4} = \lambda_{m\bar{g}} c \left[\mathcal{T}_{11}^{\hat{M}} c(1-\tau) + \mathcal{T}_{12}^{\hat{M}} c \right] + \lambda_{\bar{a}m} c \left[\mathcal{T}_{12}^{\hat{M}} c + \mathcal{T}_{22}^{\hat{M}} c(1-\tau) \right] \quad (109)$$

$$G_{5,1} = \lambda_{\bar{g}h} c \left[\mathcal{T}_{11}^{\hat{L}} c(1-\tau) - \mathcal{T}_{12}^{\hat{L}} (1-c) \right] + \lambda_{\bar{l}d} c \left[\mathcal{T}_{11}^{\hat{R}} c(1-\tau) - \mathcal{T}_{12}^{\hat{R}} (1-c) \right] \\ \lambda_{\bar{h}b} c \left[\mathcal{T}_{12}^{\hat{L}} c - \mathcal{T}_{22}^{\hat{L}} (1-c(1-\tau)) \right] + \lambda_{\bar{b}l} c \left[\mathcal{T}_{12}^{\hat{R}} c - \mathcal{T}_{22}^{\hat{R}} (1-c(1-\tau)) \right] \quad (110)$$

$$G_{5,2} = -\lambda_{\bar{l}d} c \left[\mathcal{T}_{11}^{\hat{R}} (1-c(1-\tau)) - \mathcal{T}_{12}^{\hat{R}} c \right] - \lambda_{\bar{b}l} c \left[\mathcal{T}_{12}^{\hat{R}} (1-c) - \mathcal{T}_{22}^{\hat{R}} c(1-\tau) \right] \\ - \lambda_{\bar{d}u} c \left[\mathcal{T}_{11}^{\hat{W}} (1-c(1-\tau)) - \mathcal{T}_{12}^{\hat{W}} c \right] - \lambda_{\bar{u}a} c \left[\mathcal{T}_{12}^{\hat{W}} (1-c) - \mathcal{T}_{22}^{\hat{W}} c(1-\tau) \right] \quad (111)$$

$$G_{5,3} = \lambda_{\bar{d}u} c \left[\mathcal{T}_{11}^{\hat{W}} c(1-\tau) + \mathcal{T}_{12}^{\hat{W}} c \right] + \lambda_{\bar{u}a} c \left[\mathcal{T}_{12}^{\hat{W}} c - \mathcal{T}_{22}^{\hat{W}} (1-c(1-\tau)) \right] \\ \lambda_{m\bar{g}} c \left[\mathcal{T}_{11}^{\hat{M}} c(1-\tau) - \mathcal{T}_{12}^{\hat{M}} (1-c) \right] + \lambda_{\bar{a}m} c \left[\mathcal{T}_{12}^{\hat{M}} c - \mathcal{T}_{22}^{\hat{M}} (1-c(1-\tau)) \right] \quad (112)$$

$$G_{5,4} = -\lambda_{\bar{g}h} c \left[\mathcal{T}_{11}^{\hat{L}} (1-c(1-\tau)) - \mathcal{T}_{12}^{\hat{L}} c \right] - \lambda_{\bar{h}b} c \left[\mathcal{T}_{12}^{\hat{L}} (1-c) - \mathcal{T}_{22}^{\hat{L}} c(1-\tau) \right] \\ - \lambda_{m\bar{g}} c \left[\mathcal{T}_{11}^{\hat{M}} (1-c(1-\tau)) - \mathcal{T}_{12}^{\hat{M}} c \right] - \lambda_{\bar{a}m} c \left[\mathcal{T}_{12}^{\hat{M}} (1-c) - \mathcal{T}_{22}^{\hat{M}} c(1-\tau) \right] \quad (113)$$

$$G_{5,5} = \lambda_{\bar{g}h} c \left[\mathcal{T}_{11}^{\hat{L}} (1-c(1-\tau)) - \mathcal{T}_{12}^{\hat{L}} (1-c) \right] + \lambda_{\bar{h}b} c \left[\mathcal{T}_{12}^{\hat{L}} (1-c) + \mathcal{T}_{22}^{\hat{L}} (1-c(1-\tau)) \right] \\ \lambda_{\bar{l}d} c \left[\mathcal{T}_{11}^{\hat{R}} (1-c(1-\tau)) - \mathcal{T}_{12}^{\hat{R}} (1-c) \right] + \lambda_{\bar{b}l} c \left[\mathcal{T}_{12}^{\hat{R}} (1-c) + \mathcal{T}_{22}^{\hat{R}} (1-c(1-\tau)) \right] \\ \lambda_{\bar{d}u} c \left[\mathcal{T}_{11}^{\hat{W}} (1-c(1-\tau)) - \mathcal{T}_{12}^{\hat{W}} (1-c) \right] + \lambda_{\bar{u}a} c \left[\mathcal{T}_{12}^{\hat{W}} (1-c) + \mathcal{T}_{22}^{\hat{W}} (1-c(1-\tau)) \right] \\ \lambda_{m\bar{g}} c \left[\mathcal{T}_{11}^{\hat{M}} (1-c(1-\tau)) - \mathcal{T}_{12}^{\hat{M}} (1-c) \right] + \lambda_{\bar{a}m} c \left[\mathcal{T}_{12}^{\hat{M}} (1-c) + \mathcal{T}_{22}^{\hat{M}} (1-c(1-\tau)) \right] \quad (114)$$

Uma vez que a matriz $\mathbf{G}_{FPS}$ é invertível com os coeficientes adicionais, definidos nas equações (110) a (114), as pressões nos pontos auxiliares podem, portanto, ser escritas como função das pressões nos pontos de colocação, como:

$$\mathbf{p}_{Aux} = \mathbf{G}_{FPS}^{-1} \mathbf{H}_{FPS} \hat{\mathbf{p}} \quad (115)$$

Por fim, substituindo a equação (115) nas equações (85) e (92), as vazões nas meias faces da região de interação avaliada são escritas como:

$$\mathbf{v}_{Esq} = \mathbf{A}_{FPS} \hat{\mathbf{p}} + \mathbf{B}_{FPS} \mathbf{G}_{FPS}^{-1} \mathbf{H}_{FPS} \hat{\mathbf{p}} \quad (116)$$

$$\mathbf{v}_{Dir} = \mathbf{C}_{FPS} \hat{\mathbf{p}} + \mathbf{D}_{FPS} \mathbf{G}_{FPS}^{-1} \mathbf{H}_{FPS} \hat{\mathbf{p}} \quad (117)$$

Assim como no MPFA-O, a contribuição de cada meia face pode ser inserida na matriz global $\mathbf{M}_{G_{FPS}}$, definida para todo o domínio computacional.

Uma variante do MPFA-FPS foi proposta por Chen *et al.* (2008) que chamou este método de MPFA-*Enriched*. A diferença fundamental entre o MPFA-*Enriched* e o MPFA-FPS proposto por Edwards e Zheng (2008), está na forma adotada para o volume de controle auxiliar, conforme ilustrado na figura 17.

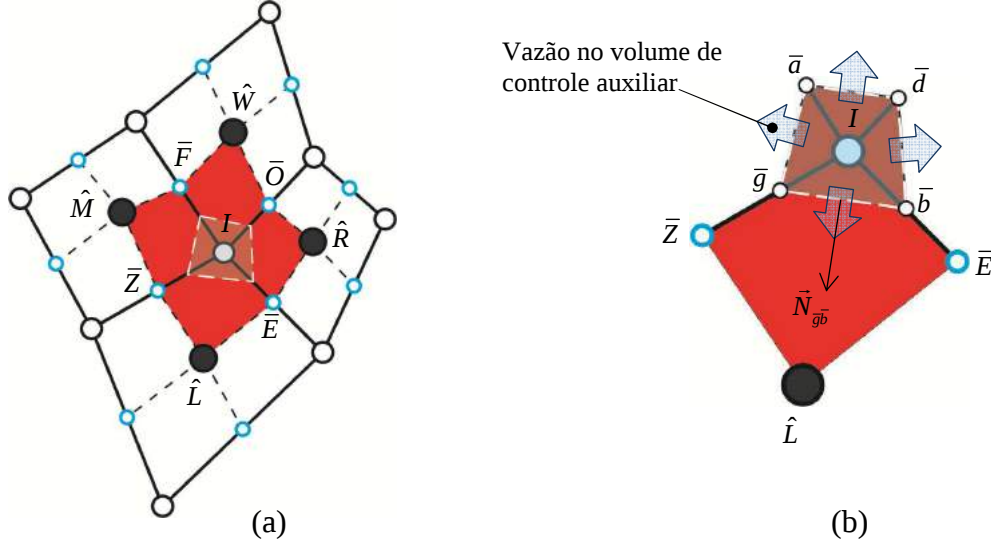


Figura 17. Volume de controle auxiliar no esquema MPFA-*Enriched*: (a) Fragmento de malha com região de Interação associada ao vértice I ; (b) Indicação dos fluxos através das superfícies do volume de controle auxiliar.

Nessa formulação, apenas uma razão $\mathcal{E}$, associada ao tamanho do volume de controle auxiliar (análogo à variável c no MPFA-FPS), é a variável paramétrica. Esse parâmetro é definido de acordo com a seguinte razão (Chen *et al.*, 2008):

$$\mathcal{E} = \frac{|\vec{N}_{\bar{g}\bar{b}}|}{|\vec{N}_{\bar{z}\bar{e}}|} \quad (118)$$

Assim, para cada sub-região de interação avaliada, uma vazão auxiliar $\vec{v}_{\bar{g}\bar{b}} \cdot \vec{N}_{\bar{g}\bar{b}}$, por exemplo, é definida, fazendo ξ e η assumirem as seguintes relações:

$$\xi = 1 - \frac{\mathcal{E}}{2}; \quad \eta = 1 - \frac{\mathcal{E}}{2} \quad (119)$$

As expressões apresentadas na equação (119) são as coordenadas, no espaço mapeado, do ponto médio de cada superfície de controle auxiliar (ver Apêndice B para maiores detalhes). Naturalmente, essas coordenadas são dependentes do parâmetro $\mathcal{E}$ (tamanho do volume de controle auxiliar).

Tomando a figura 17b como referência, no MPFA-*Enriched*, o equivalente à equação (105) é dado por:

$$\sum_{ij \in \Gamma_{Aux}} \vec{v}_{ij} \cdot \vec{N}_{ij} = (\vec{v}_{\bar{g}\bar{b}} \cdot \vec{N}_{\bar{g}\bar{b}}) + (\vec{v}_{\bar{b}\bar{d}} \cdot \vec{N}_{\bar{b}\bar{d}}) + (\vec{v}_{\bar{d}\bar{a}} \cdot \vec{N}_{\bar{d}\bar{a}}) + (\vec{v}_{\bar{a}\bar{g}} \cdot \vec{N}_{\bar{a}\bar{g}}) = 0 \quad (120)$$

Uma vez que a geometria do volume de controle auxiliar no MPFA-*Enriched* é diferente da adotada no MPFA-FPS, os componentes do tensor de Piola também mudam. Essa variação se dá apenas na avaliação das vazões das superfícies de controle auxiliares. Dessa forma, os componentes para o volume de controle $\hat{L}$ são definidas como (ver dedução no Apêndice B):

$$\mathcal{R}_{11}^{\hat{L}} = -\frac{1}{\det(\mathbf{J}_{\hat{L}\bar{E}\bar{I}\bar{Z}})} \left[k_{xx}^{\hat{L}} \left(\frac{\partial y}{\partial \eta} \right)^2 + k_{yy}^{\hat{L}} \left(\frac{\partial x}{\partial \eta} \right)^2 + k_{xx}^{\hat{L}} \frac{\partial y}{\partial \xi} \frac{\partial y}{\partial \eta} + k_{yy}^{\hat{L}} \frac{\partial x}{\partial \xi} \frac{\partial x}{\partial \eta} + k_{xy}^{\hat{L}} \left(2 \frac{\partial x}{\partial \eta} \frac{\partial y}{\partial \eta} - \frac{\partial x}{\partial \xi} \frac{\partial y}{\partial \eta} - \frac{\partial x}{\partial \eta} \frac{\partial y}{\partial \xi} \right) \right] \quad (121)$$

$$\mathcal{R}_{22}^{\hat{L}} = -\frac{1}{\det(\mathbf{J}_{\hat{L}\bar{E}\bar{I}\bar{Z}})} \left[k_{xx}^{\hat{L}} \left(\frac{\partial y}{\partial \xi} \right)^2 + k_{yy}^{\hat{L}} \left(\frac{\partial x}{\partial \xi} \right)^2 + k_{xx}^{\hat{L}} \frac{\partial y}{\partial \xi} \frac{\partial y}{\partial \eta} + k_{yy}^{\hat{L}} \frac{\partial x}{\partial \xi} \frac{\partial x}{\partial \eta} + k_{xy}^{\hat{L}} \left(2 \frac{\partial x}{\partial \xi} \frac{\partial y}{\partial \xi} - \frac{\partial x}{\partial \xi} \frac{\partial y}{\partial \eta} - \frac{\partial x}{\partial \eta} \frac{\partial y}{\partial \xi} \right) \right] \quad (122)$$

$$\mathcal{R}_{12}^{\hat{L}} = \frac{1}{\det(\mathbf{J}_{\hat{L}\bar{E}\bar{I}\bar{Z}})} \left[\left(k_{xx}^{\hat{L}} \frac{\partial y}{\partial \xi} \frac{\partial y}{\partial \eta} + k_{yy}^{\hat{L}} \frac{\partial x}{\partial \xi} \frac{\partial x}{\partial \eta} \right) - k_{xy}^{\hat{L}} \left(\frac{\partial x}{\partial \xi} \frac{\partial y}{\partial \eta} + \frac{\partial x}{\partial \eta} \frac{\partial y}{\partial \xi} \right) \right] \quad (123)$$

Cada vazão na superfície de controle auxiliar considerada no somatório da equação (120) é obtida substituindo as coordenadas da equação (119) nas equações (67) e (68), que definem os gradientes de pressão no ponto de quadratura adequado. Isso produz:

$$\vec{v}_{\bar{g}\bar{b}} \cdot \vec{N}_{\bar{g}\bar{b}} = -\lambda_{\bar{g}\bar{b}} \varepsilon \left[\left(\mathcal{R}_{11}^{\hat{L}} + \mathcal{R}_{12}^{\hat{L}} \right) \left[\frac{\varepsilon}{2} (p_{\bar{E}} - p_{\hat{L}}) + \left(1 - \frac{\varepsilon}{2} \right) (p_I - p_{\bar{Z}}) \right] + \left(\mathcal{R}_{12}^{\hat{L}} + \mathcal{R}_{22}^{\hat{L}} \right) \left[\frac{\varepsilon}{2} (p_{\bar{Z}} - p_{\hat{L}}) + \left(1 - \frac{\varepsilon}{2} \right) (p_I - p_{\bar{E}}) \right] \right] \quad (124)$$

$$\vec{v}_{\bar{b}\bar{d}} \cdot \vec{N}_{\bar{b}\bar{d}} = -\lambda_{\bar{b}\bar{d}} \varepsilon \left[\left(\mathcal{R}_{11}^{\hat{R}} + \mathcal{R}_{12}^{\hat{R}} \right) \left[\frac{c}{2} (p_{\bar{E}} - p_{\hat{R}}) + \left(1 - \frac{c}{2} \right) (p_I - p_{\bar{O}}) \right] + \left(\mathcal{R}_{12}^{\hat{R}} + \mathcal{R}_{22}^{\hat{R}} \right) \left[\frac{c}{2} (p_{\bar{O}} - p_{\hat{R}}) + \left(1 - \frac{c}{2} \right) (p_I - p_{\bar{E}}) \right] \right] \quad (125)$$

$$\vec{v}_{\bar{d}\bar{a}} \cdot \vec{N}_{\bar{d}\bar{a}} = -\lambda_{\bar{d}\bar{a}} \varepsilon \left[\left(\mathcal{R}_{11}^{\hat{W}} + \mathcal{R}_{12}^{\hat{W}} \right) \left[\frac{\varepsilon}{2} (p_{\bar{F}} - p_{\hat{W}}) + \left(1 - \frac{\varepsilon}{2} \right) (p_I - p_{\bar{O}}) \right] + \left(\mathcal{R}_{12}^{\hat{W}} + \mathcal{R}_{22}^{\hat{W}} \right) \left[\frac{\varepsilon}{2} (p_{\bar{O}} - p_{\hat{W}}) + \left(1 - \frac{\varepsilon}{2} \right) (p_I - p_{\bar{F}}) \right] \right] \quad (126)$$

$$\begin{aligned} \vec{v}_{\bar{a}g} \cdot \vec{N}_{\bar{a}g} = & -\lambda_{\bar{a}g} \mathcal{E} \left[\left(\mathcal{R}_{11}^{\hat{M}} + \mathcal{R}_{12}^{\hat{M}} \right) \left[\frac{\mathcal{E}}{2} (p_{\bar{F}} - p_{\hat{M}}) + \left(1 - \frac{\mathcal{E}}{2} \right) (p_I - p_{\bar{Z}}) \right] + \right. \\ & \left. \left(\mathcal{R}_{12}^{\hat{M}} + \mathcal{R}_{22}^{\hat{M}} \right) \left[\frac{\mathcal{E}}{2} (p_{\bar{Z}} - p_{\hat{M}}) + \left(1 - \frac{\mathcal{E}}{2} \right) (p_I - p_{\bar{F}}) \right] \right] \end{aligned} \quad (127)$$

Consequentemente, os termos adicionais no sistema algébrico local equivalente ao produzido na equação (93) para o MPFA-FPS são apresentados nas equações (128) a (136), para o MPFA-*Enriched*. O sobrescrito “\$” diferencia os termos obtidos com MPFA-FPS (sem sobrescrito) dos obtidos para o MPFA-*Enriched*.

$$H_{5,1}^{\$} = \lambda_{\bar{g}\bar{b}} \mathcal{E} \left[\left(\mathcal{R}_{11}^{\hat{L}} + 2\mathcal{R}_{12}^{\hat{L}} + \mathcal{R}_{22}^{\hat{L}} \right) \frac{\mathcal{E}}{2} \right] \quad (128)$$

$$H_{5,2}^{\$} = \lambda_{\bar{b}\bar{d}} \mathcal{E} \left[\left(\mathcal{R}_{11}^{\hat{R}} + 2\mathcal{R}_{12}^{\hat{R}} + \mathcal{R}_{22}^{\hat{R}} \right) \frac{\mathcal{E}}{2} \right] \quad (129)$$

$$H_{5,3}^{\$} = \lambda_{\bar{d}\bar{a}} \mathcal{E} \left[\left(\mathcal{R}_{11}^{\hat{W}} + 2\mathcal{R}_{12}^{\hat{W}} + \mathcal{R}_{22}^{\hat{W}} \right) \frac{\mathcal{E}}{2} \right] \quad (130)$$

$$H_{5,4}^{\$} = \lambda_{\bar{a}g} \mathcal{E} \left[\left(\mathcal{R}_{11}^{\hat{M}} + 2\mathcal{R}_{12}^{\hat{M}} + \mathcal{R}_{22}^{\hat{M}} \right) \frac{\mathcal{E}}{2} \right] \quad (131)$$

$$\begin{aligned} G_{5,1}^{\$} = & \lambda_{\bar{g}\bar{b}} \mathcal{E} \left[\left(\mathcal{R}_{11}^{\hat{L}} + \mathcal{R}_{12}^{\hat{L}} \right) \frac{\mathcal{E}}{2} - \left(\mathcal{R}_{12}^{\hat{L}} + \mathcal{R}_{22}^{\hat{L}} \right) \left(1 - \frac{\mathcal{E}}{2} \right) \right] + \\ & \lambda_{\bar{b}\bar{d}} \mathcal{E} \left[\left(\mathcal{R}_{11}^{\hat{R}} + \mathcal{R}_{12}^{\hat{R}} \right) \frac{\mathcal{E}}{2} - \left(\mathcal{R}_{12}^{\hat{R}} + \mathcal{R}_{22}^{\hat{R}} \right) \left(1 - \frac{\mathcal{E}}{2} \right) \right] \end{aligned} \quad (132)$$

$$\begin{aligned} G_{5,2}^{\$} = & -\lambda_{\bar{b}\bar{d}} \mathcal{E} \left[\left(\mathcal{R}_{11}^{\hat{R}} + \mathcal{R}_{12}^{\hat{R}} \right) \left(1 - \frac{\mathcal{E}}{2} \right) - \left(\mathcal{R}_{12}^{\hat{R}} + \mathcal{R}_{22}^{\hat{R}} \right) \frac{\mathcal{E}}{2} \right] - \\ & \lambda_{\bar{d}\bar{a}} \mathcal{E} \left[\left(\mathcal{R}_{11}^{\hat{W}} + \mathcal{R}_{12}^{\hat{W}} \right) \left(1 - \frac{\mathcal{E}}{2} \right) - \left(\mathcal{R}_{12}^{\hat{W}} + \mathcal{R}_{22}^{\hat{W}} \right) \frac{\mathcal{E}}{2} \right] \end{aligned} \quad (133)$$

$$\begin{aligned} G_{5,3}^{\$} = & \lambda_{\bar{d}\bar{a}} \mathcal{E} \left[\left(\mathcal{R}_{11}^{\hat{W}} + \mathcal{R}_{12}^{\hat{W}} \right) \frac{\mathcal{E}}{2} + \left(\mathcal{R}_{12}^{\hat{W}} + \mathcal{R}_{22}^{\hat{W}} \right) \left(1 - \frac{\mathcal{E}}{2} \right) \right] + \\ & \lambda_{\bar{a}g} \mathcal{E} \left[\left(\mathcal{R}_{11}^{\hat{M}} + \mathcal{R}_{12}^{\hat{M}} \right) \frac{\mathcal{E}}{2} - \left(\mathcal{R}_{12}^{\hat{M}} + \mathcal{R}_{22}^{\hat{M}} \right) \left(1 - \frac{\mathcal{E}}{2} \right) \right] \end{aligned} \quad (134)$$

$$\begin{aligned} G_{5,4}^{\$} = & \lambda_{\bar{g}\bar{b}} \mathcal{E} \left[\left(\mathcal{R}_{11}^{\hat{L}} + \mathcal{R}_{12}^{\hat{L}} \right) \left(1 - \frac{\mathcal{E}}{2} \right) + \left(\mathcal{R}_{12}^{\hat{L}} + \mathcal{R}_{22}^{\hat{L}} \right) \frac{\mathcal{E}}{2} \right] + \\ & \lambda_{\bar{a}g} \mathcal{E} \left[\left(\mathcal{R}_{11}^{\hat{M}} + \mathcal{R}_{12}^{\hat{M}} \right) \left(1 - \frac{\mathcal{E}}{2} \right) - \left(\mathcal{R}_{12}^{\hat{M}} + \mathcal{R}_{22}^{\hat{M}} \right) \frac{\mathcal{E}}{2} \right] \end{aligned} \quad (135)$$

$$G_{5,5}^s = \lambda_{\bar{g}b} \varepsilon \left[\left(1 - \frac{\varepsilon}{2} \right) (\mathcal{R}_{11}^{\hat{L}} + 2\mathcal{R}_{12}^{\hat{L}} + \mathcal{R}_{22}^{\hat{L}}) \right] + \lambda_{\bar{b}d} \varepsilon \left[\left(1 - \frac{\varepsilon}{2} \right) (\mathcal{R}_{11}^{\hat{R}} + 2\mathcal{R}_{12}^{\hat{R}} + \mathcal{R}_{22}^{\hat{R}}) \right] + \lambda_{\bar{d}a} \varepsilon \left[\left(1 - \frac{\varepsilon}{2} \right) (\mathcal{R}_{11}^{\hat{W}} + 2\mathcal{R}_{12}^{\hat{W}} + \mathcal{R}_{22}^{\hat{W}}) \right] + \lambda_{\bar{a}g} \varepsilon \left[\left(1 - \frac{\varepsilon}{2} \right) (\mathcal{R}_{11}^{\hat{M}} + 2\mathcal{R}_{12}^{\hat{M}} + \mathcal{R}_{22}^{\hat{M}}) \right] \quad (136)$$

O procedimento para escrever as vazões apenas como função das pressões nos pontos de colocação e montagem da matriz global segue, portanto, análogo ao já desenvolvido para o MPFA-O e MPFA-FPS.

Condições de Contorno

Para que o problema fique bem definido, é necessária a imposição das condições de contorno adequadas. Na presente seção, estratégias numéricas usadas para a implementação de condições de contorno de Dirichlet (Pressões prescritas) ou Neumann (Fluxos prescritos) são apresentadas. O procedimento descrito tem foco nos esquemas MPFA-FPS e MPFA-Enriched. No entanto, a abordagem é a mesma para o MPFA-O descrito no início desta seção. Naturalmente, para regiões de interação adjacentes ao contorno tal como ilustrado nas figuras 18 e 19, a construção do sistema algébrico local, como o apresentado nas equações (83) e (90) recebe influência da condição de contorno aplicada.

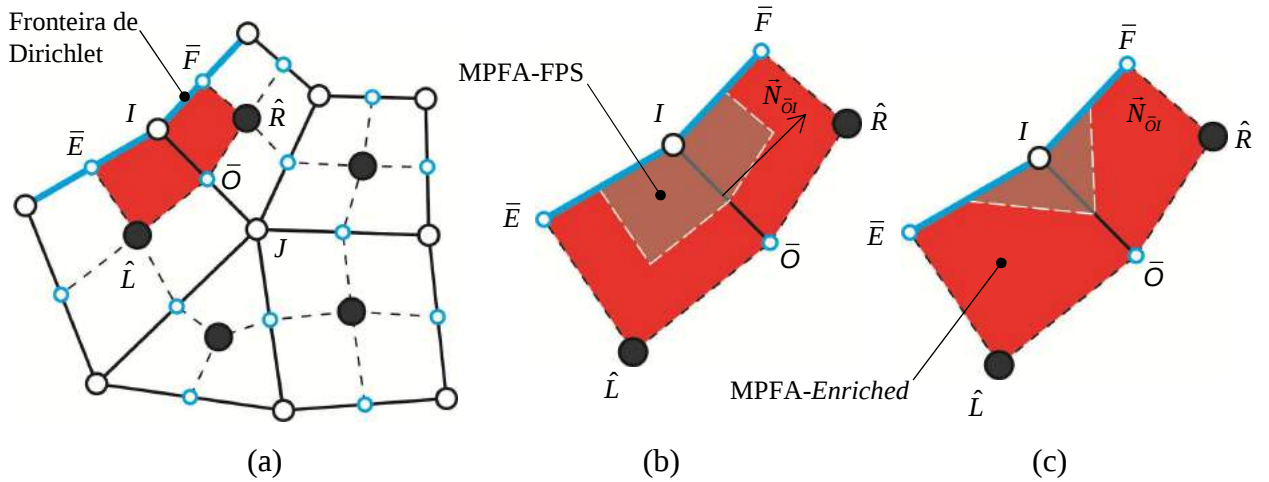


Figura 18. Condição de pressão prescrita (Dirichlet): (a) malha com a região de interação avaliada; (b) indicação das arestas com condição de contorno de Dirichlet para os esquemas MPFA-FPS; (c) indicação das arestas com condição de contorno de Dirichlet para os esquemas MPFA-Enriched.

Na figura 18 vê-se que duas das três meias faces que concorrem para o vértice I estão submetidas à condição de contorno do tipo Dirichlet. Nesse caso, as pressões nos pontos médios $\bar{E}$ e $\bar{F}$, além do próprio vértice I , tem valor conhecido, sendo, portanto, desnecessário escrevê-las como função dos pontos de colocação como feito na equação (115), por exemplo.

O valor da pressão no ponto auxiliar $\bar{O}$ não está sobre o contorno e deve ser relacionado com os valores das pressões nos pontos de colocação $\hat{L}$ e $\hat{R}$. Portanto, para o volume de controle à esquerda da meia face $\bar{O}I$, a vazão é escrita como:

$$\vec{v}_{OI} \cdot \vec{N}_{OI} = -\lambda_{OI} \left[\mathcal{T}_{11}^{\hat{L}} (q(p_{\bar{O}} - p_{\hat{L}}) + (1-q)(p_I - p_{\bar{E}})) + \mathcal{T}_{12}^{\hat{L}} (p_I - p_{\bar{O}}) \right] \quad (137)$$

Novamente, os termos $\mathcal{T}_{11}^{\hat{L}}$ e $\mathcal{T}_{12}^{\hat{L}}$ são definidos de acordo com as relações apresentadas nas equações (70) e (72). É importante destacar que a relação apresentada na equação (137) também é válida para o MPFA-*Enriched*, uma vez que a vazão não é calculada na superfície de controle auxiliar. Analogamente, para o volume de controle à direita da meia face $\bar{O}I$, a vazão é definida como:

$$\vec{v}_{I\bar{O}} \cdot \vec{N}_{I\bar{O}} = -\lambda_{I\bar{O}} \left[\mathcal{T}_{11}^{\hat{R}} \left(q(p_{\bar{O}} - p_{\hat{R}}) + (1-q)(p_I - p_{\bar{F}}) \right) + \mathcal{T}_{12}^{\hat{R}} (p_I - p_{\bar{O}}) \right] \quad (138)$$

Aplicando a equação da continuidade sobre a meia face $\bar{O}I$ ($\vec{v}_{\bar{O}I} \cdot \vec{N}_{\bar{O}I} + \vec{v}_{I\bar{O}} \cdot \vec{N}_{I\bar{O}} = 0$) é possível escrever a pressão auxiliar $p_{\bar{O}}$ como função das pressões nos pontos de colocação $p_{\hat{L}}$ e $p_{\hat{R}}$, bem como das pressões nos pontos auxiliares, $p_{\bar{E}}$, $p_{\bar{F}}$ e p_I , cujos valores são conhecidos.

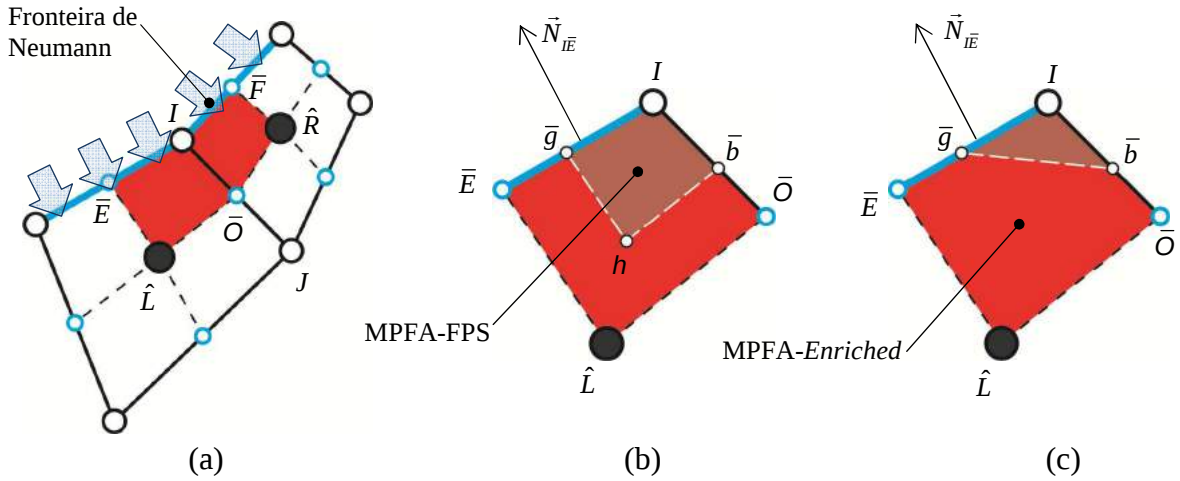


Figura 19. Condição de fluxo prescrito (Neumann): (a) fragmento de malha com a região de interação avaliada; (b) indicação das arestas com condição de contorno de Neumann para os esquemas MPFA-FPS; (c) indicação das arestas com condição de contorno de Neumann para os esquemas MPFA *Enriched*.

Substituindo $p_{\bar{O}}$, em todas as vazões calculadas sobre as meias faces na região de interação avaliada, essas passam a ser função apenas das incógnitas nos pontos de colocação e outros termos conhecidos. Esses últimos devem constituir o vetor de termos independentes no sistema de equações algébrico global.

A imposição da condição de contorno de Neumann nos seguimentos $\bar{I}\bar{E}$ e $\bar{I}\bar{F}$ (ver figura 19) torna desnecessário escrever a continuidade do fluxo como função das pressões nos pontos de colocação e nos pontos auxiliares localizados nos dois lados dessas meias faces. Dessa forma, a vazão nas meias faces $\bar{I}\bar{E}$ e $\bar{I}\bar{F}$, tomadas como exemplo, são dadas por:

$$\vec{v}_{\bar{I}\bar{E}} \cdot \vec{N}_{\bar{I}\bar{E}} = \sigma_{\bar{I}\bar{E}}(\vec{x}); \quad \vec{v}_{\bar{F}I} \cdot \vec{N}_{\bar{F}I} = \sigma_{\bar{F}I}(\vec{x}) \quad (139)$$

onde $\sigma_{\bar{I}\bar{E}}(\vec{x})$ e $\sigma_{\bar{F}I}(\vec{x})$ são funções conhecidas.

Finalmente, o mesmo procedimento pode ser feito com o volume de controle auxiliar (figura 19b e 19c), onde a continuidade do fluxo é imposta ($\vec{v}_{I\bar{g}} \cdot \vec{N}_{I\bar{g}} = \sigma_{\bar{g}I}(\vec{x})$) e um sistema algébrico local é definido para a região de interação I .

3.4. Equação de Saturação na Forma Discreta

Na presente seção, é discutida a solução numérica da equação que governa o transporte de água em um meio poroso inicialmente saturado por óleo e água. A forma discreta da equação (14), introduzida no capítulo 2, é obtida por meio do Método de Volumes Finitos, conforme mencionado anteriormente. Estratégias para aumentar a resolução dos resultados em regiões suaves e importantes critérios físicos como a satisfação do princípio do aumento de entropia, e uma abordagem “multidimensional” das aproximações nas superfícies de controle de cada volume de controle discreto, também constituem etapas dessa metodologia.

Dessa forma, integrando a Equação de Saturação no domínio Ω , ilustrado na figura 2, obtém-se:

$$\int_{t_0}^t \int_{\Omega} \phi \frac{\partial S_w}{\partial t} \partial\Omega \partial t = - \int_{t_0}^t \int_{\Omega} \vec{\nabla} \cdot \left[f_w (\vec{v} + \lambda_o K (\rho_w - \rho_o) \vec{g}) \right] \partial\Omega \partial t + \int_{t_0}^t \int_{\Omega} Q_w \partial\Omega \partial t \quad (140)$$

A integral no domínio Ω pode ser representada por um somatório de integrais em cada volume de controle $\hat{L}$ da malha ilustrada na figura 7a, com volume $\Omega_{\hat{L}}$ e porosidade $\phi_{\hat{L}}$, como feito para a equação de pressão. Desta forma, a equação (140) pode ser então reescrita, como:

$$\begin{aligned} \int_{t_0}^t \sum_{i=1}^{\mathcal{N}_{VC}} \int_{\Omega_{\hat{L}}} \phi_{\hat{L}} \frac{\partial S_w}{\partial t} \partial\Omega_{\hat{L}} \partial t = \\ - \int_{t_0}^t \sum_{i=1}^{\mathcal{N}_{VC}} \int_{\Omega_{\hat{L}}} \vec{\nabla} \cdot \left[f_w (\vec{v} + \lambda_o K (\rho_w - \rho_o) \vec{g}) \right] \partial\Omega_{\hat{L}} \partial t + \int_{t_0}^t \sum_{i=1}^{\mathcal{N}_{VC}} \int_{\Omega_{\hat{L}}} Q_w \partial\Omega_{\hat{L}} \partial t \end{aligned} \quad (141)$$

Considerando novamente um volume de controle genérico $\hat{L}$ (figura 7b) e utilizando o Teorema da Divergência no primeiro termo do lado direito da equação (141), obtém-se:

$$\begin{aligned} \int_{t_0}^t \int_{\Omega_{\hat{L}}} \frac{\partial S_w}{\partial t} \partial\Omega_{\hat{L}} \partial t = \\ - \frac{1}{\phi_{\hat{L}}} \int_{t_0}^t \int_{\Gamma_{\hat{L}}} \left[f_w (\vec{v} + \lambda_o K (\rho_w - \rho_o) \vec{g}) \right] \cdot \vec{n} \partial\Gamma_{\hat{L}} \partial t + \frac{1}{\phi_{\hat{L}}} \int_{t_0}^t \int_{\Omega_{\hat{L}}} Q_w \partial\Omega_{\hat{L}} \partial t \end{aligned} \quad (142)$$

Utilizando o Teorema do Valor Médio, obtém-se as seguintes relações:

$$\begin{aligned} \frac{1}{\phi_{\hat{L}}} \int_{t_0}^t \int_{\Gamma_{\hat{L}}} f_w (\vec{v} + \lambda_o K (\rho_w - \rho_o) \vec{g}) \cdot \vec{n} \partial\Gamma_{\hat{L}} \partial t = \\ \frac{1}{\phi_{\hat{L}}} \int_{t_0}^t \sum_{IJ \in \Gamma_{\hat{L}}} f_w (\vec{v} + \lambda_o K (\rho_w - \rho_o) \vec{g}) \cdot \vec{N}_{IJ} \partial t \end{aligned} \quad (143)$$

$$\frac{1}{\phi_{\hat{L}}} \int_{t_0}^t \int_{\Omega_{\hat{L}}} Q_w \partial\Omega_{\hat{L}} \partial t = \int_{t_0}^t \frac{\bar{Q}_w}{\phi_{\hat{L}}} \partial t \quad (144)$$

onde $\bar{Q}_w$ representa o valor médio do termo de fonte ou sumidouro (poços de injeção ou produção) associado ao volume de controle avaliado.

Assim, substituindo as equações (143) e (144) na equação (142), a Equação de Saturação para um volume de controle pode ser escrita na forma semi-discreta, como:

$$\int_{t_0}^t \frac{\partial S_w}{\partial t} \partial t = -\frac{1}{\phi_L \Omega_L} \int_{t_0}^t \sum_{IJ \in \Gamma_L} f_w (\vec{v} + \lambda_o K(\rho_w - \rho_o) \vec{g}) \cdot \vec{N}_{IJ} \partial t + \frac{1}{\phi_L \Omega_L} \int_{t_0}^t \bar{Q}_w \partial t \quad (145)$$

A discretização no tempo da equação (145) pode ser obtida com as aproximações descritas na seção que segue.

3.4.1. Discretização no Tempo

Integrando a equação (145) no intervalo de tempo entre t e t_0 , utilizando uma aproximação do tipo Euler Progressivo, obtém-se:

$$\int_{t_0}^t \frac{\partial S_w}{\partial t} \partial t = S_{w_L}^{n+1} - S_{w_L}^n \quad (146)$$

onde $S_{w_L}^{n+1}$ e $S_{w_L}^n$ são, respectivamente, os valores de saturação de água no volume de controle $\hat{L}$ nos instantes de tempo $n+1$ e n .

Substituindo a equação (146) na equação (145) e fazendo algumas manipulações algébricas, obtém-se a equação na forma discreta, com aproximação de primeira ordem no tempo, da seguinte forma:

$$S_{w_L}^{n+1} = S_{w_L}^n - \frac{\Delta t}{\phi \Omega_L} \sum_{IJ \in \Gamma_L} f_w (\vec{v} + \lambda_o K(\rho_w - \rho_o) \vec{g}) \cdot \vec{N}_{IJ} + \frac{\Delta t \bar{Q}_w}{\phi \Omega_L} \quad (147)$$

Por conveniência de notação, o sobrescrito que indica saturação no instante n (tempo onde a variável é conhecida) será suprimido nas próximas equações do presente texto. A ausência dessa indicação será, na verdade, um indicativo de saturação com valor conhecido, i.e. $S_{w_L}^n = S_{w_L}$. A saturação em um instante de tempo futuro continua com o sobrescrito $n+1$. Em alguns casos, a equação (147) pode ser escrita em termos do chamado fluxo numérico (Leveque, 1992), na forma que segue:

$$S_{w_L}^{n+1} = S_{w_L} - \frac{\Delta t}{\phi \Omega_L} \sum_{IJ \in \Gamma_L} [\vec{\mathcal{F}}_{IJ} \cdot \vec{N}_{IJ}] + \frac{\Delta t \bar{Q}_w}{\phi \Omega_L} \quad (148)$$

onde os termos $\vec{\mathcal{F}}_{IJ} = f_w (\vec{v} + \lambda_o K(\rho_w - \rho_o) \vec{g})$ são calculados em cada face IJ pertencente a fronteira Γ_L do volume de controle avaliado. Em geral, o que diferencia um método de volumes finitos de outro é o modo pelo qual esses fluxos são calculados. O fluxo fracional da água f_w é escrito, em cada aresta IJ , como uma função não linear da saturação da água $S_{w_{IJ}}$ no instante de tempo em que a variável é conhecida. Adicionalmente, é importante notar que a aproximação para a equação (145) se dá na forma explícita, i.e., o valor da saturação de água no instante de tempo futuro $S_{w_L}^{n+1}$ é calculado a partir de informações conhecidas no instante

de tempo vigente ou da condição inicial ou de contorno imposta, $S_{w_{\hat{L}}}$ e $\vec{\mathcal{F}}_{IJ}(S_{w_{IJ}})$. Portanto, o passo de tempo Δt deve atender a uma condição de estabilidade adequada. Para tal, a condição de estabilidade linear de Courant-Friedrichs-Lewy (CFL) é utilizada como referência (Hirsch, 1992; Leveque, 1992). Esse critério é estabelecido de acordo com as expressões descritas por Colella (1990) e Hurtado (2005). A influência de aproximações de alta ordem na definição do passo de tempo também é considerada, seguindo a adaptação proposta por Park e Kim (2012). Dessa forma, o critério de estabilidade adotado deve satisfazer a seguinte relação:

$$\max_{IJ \in \Gamma_{\hat{L}}} \left[\left| \left(\Delta f_w(S_w) / \Delta S_w \right)_{IJ} \vec{v}_{IJ} \cdot \vec{N}_{IJ} \right| \right] \frac{\Delta t}{\Omega_{\hat{L}}} \leq \frac{\mathcal{C}}{(2\kappa+1)} \quad (149)$$

O intervalo de tempo máximo permitido para o avanço no tempo no método explícito, é, portanto, obtido como:

$$\Delta t \leq \mathcal{C} \frac{\Omega_{\hat{L}}}{\max_{IJ \in \Gamma_{\hat{L}}} \left(\left| \left(\Delta f_w(S_w) / \Delta S_w \right)_{IJ} \vec{v}_{IJ} \cdot \vec{N}_{IJ} \right| \right) (2\kappa+1)} \quad (150)$$

onde $\mathcal{C}$ é o número de Courant, a razão $\Delta f_w(S_w) / \Delta S_w$ é a representação discreta de $\partial f_w(S_w) / \partial S_w$, e surge naturalmente ao se definir a velocidade característica (Leveque, 1992) em cada face IJ do volume de controle $\hat{L}$ (ver figura 7b). De modo a garantir o menor passo de tempo, dentre os possíveis para o volume de controle avaliado, o máximo valor da velocidade característica integrada em cada face IJ , $\max_{IJ \in \Gamma_{\hat{L}}} \left(\left| \left(\Delta f_w(S_w) / \Delta S_w \right)_{IJ} \vec{v}_{IJ} \cdot \vec{N}_{IJ} \right| \right)$, é considerado. A relação entre o volume $\Omega_{\hat{L}}$ e o vetor normal a cada face IJ , $\vec{N}_{IJ}$, é equivalente a norma do vetor posição $|\vec{\Delta x}|$ utilizado em aplicações unidimensionais (Hirsch, 1992), especialmente nos casos em que a malha utilizada é estruturada, ortogonal e uniforme. Esse vetor é definido entre os centroides de dois volumes de controles adjacentes e que compartilham a aresta IJ .

De acordo com Gregor *et al.* (2008 *apud* Park e Kim, 2012) e Dumbser (2010 *apud* Park e Kim, 2012), formulações explícitas com aproximações de alta ordem requerem passos de tempo com uma restrição severa. Uma forma de adaptar o passo de tempo de acordo com a ordem de aproximação empregada é sugerida por Park e Kim (2012), como já mencionado. O termo $(2\kappa+1)$ nas equações (149) e (150) leva em conta o grau do polinômio reconstrutor κ , utilizado para obtenção de aproximações de alta ordem. Em esquemas de primeira ordem, κ é nulo (polinômio de grau zero), e o critério de estabilidade volta a ser equivalente ao usado por Hurtado (2005).

Uma alternativa à aproximação do tipo Euler Progressivo, que é de primeira ordem no tempo, é a estratégia de múltiplos estágios ou aproximação do tipo Runge-Kutta (Hirsch, 1992; Gottlieb e Shu, 1998; Bastian, 2002; Lamine, 2009). Essa estratégia é comumente utilizada para representar a integração no tempo em formulações explícitas, como a apresentada na equação (148). O limite de estabilidade linear, definido na equação (150) para estimar o passo de tempo, pode ser relaxado ou a resolução do termo que varia no tempo pode ser melhorada de acordo com a ordem (consequentemente número de estágios) adotada (Hirsch, 1992; Gottlieb *et al.*, 2001). Apesar de ordens arbitrárias poderem ser obtidas, com diferentes pesos em cada estágio (Gottlieb *et al.*, 2001), no presente texto, aproximações de segunda e

terceira ordem são consideradas, além da aproximação do tipo Euler Progressivo. A equação (148) pode, portanto, ser escrita para a aproximação de segunda ordem, como (Gottlieb e Shu, 1998):

$$\begin{aligned}
S_{w_{\hat{L}}}^{(1)} &= S_{w_{\hat{L}}} - \frac{\Delta t}{\phi \Omega_{\hat{L}}} \sum_{IJ \in \Gamma_{\hat{L}}} \left[\vec{\mathcal{F}}_{IJ}(S_{w_{IJ}}) \cdot \vec{N}_{IJ} \right] + \frac{\Delta t \bar{Q}_w(S_{w_{\hat{L}}})}{\phi \Omega_{\hat{L}}}; \\
S_{w_{\hat{L}}}^{n+1} &= \frac{1}{2} S_{w_{\hat{L}}} + \frac{1}{2} S_{w_{\hat{L}}}^{(1)} - \frac{1}{2} \frac{\Delta t}{\phi \Omega_{\hat{L}}} \sum_{IJ \in \Gamma_{\hat{L}}} \left[\vec{\mathcal{F}}_{IJ}(S_{w_{IJ}}^{(1)}) \cdot \vec{N}_{IJ} \right] + \frac{1}{2} \frac{\Delta t \bar{Q}_w(S_{w_{\hat{L}}}^{(1)})}{\phi \Omega_{\hat{L}}}
\end{aligned} \tag{151}$$

Da mesma forma, a aproximação de terceira ordem no tempo é obtida com três estágios, definidos por (Gottlieb e Shu, 1998; Lamine, 2009):

$$\begin{aligned}
S_{w_{\hat{L}}}^{(1)} &= S_{w_{\hat{L}}} - \frac{\Delta t}{\phi \Omega_{\hat{L}}} \sum_{IJ \in \Gamma_{\hat{L}}} \left[\vec{\mathcal{F}}_{IJ}(S_{w_{IJ}}) \cdot \vec{N}_{IJ} \right] + \frac{\Delta t \bar{Q}_w(S_{w_{\hat{L}}})}{\phi \Omega_{\hat{L}}}; \\
S_{w_{\hat{L}}}^{(2)} &= \frac{3}{4} S_{w_{\hat{L}}} + \frac{1}{4} S_{w_{\hat{L}}}^{(1)} - \frac{1}{4} \frac{\Delta t}{\phi \Omega_{\hat{L}}} \sum_{IJ \in \Gamma_{\hat{L}}} \left[\vec{\mathcal{F}}_{IJ}(S_{w_{IJ}}^{(1)}) \cdot \vec{N}_{IJ} \right] + \frac{1}{4} \frac{\Delta t \bar{Q}_w(S_{w_{\hat{L}}}^{(1)})}{\phi \Omega_{\hat{L}}}; \\
S_{w_{\hat{L}}}^{n+1} &= \frac{1}{3} S_{w_{\hat{L}}} + \frac{2}{3} S_{w_{\hat{L}}}^{(2)} - \frac{2}{3} \frac{\Delta t}{\phi \Omega_{\hat{L}}} \sum_{IJ \in \Gamma_{\hat{L}}} \left[\vec{\mathcal{F}}_{IJ}(S_{w_{IJ}}^{(2)}) \cdot \vec{N}_{IJ} \right] + \frac{2}{3} \frac{\Delta t \bar{Q}_w(S_{w_{\hat{L}}}^{(2)})}{\phi \Omega_{\hat{L}}}
\end{aligned} \tag{152}$$

Embora se comente na literatura (Ivan e Groth, 2011; Clain *et al.*, 2011; Diot *et al.*, 2012) sobre a relevância de aproximações de alta ordem no tempo para problemas lineares, Durlofsky (1993) ressalta que, na prática, para problemas de escoamento bifásico em meios porosos, aproximações de alta ordem no tempo não são tão essenciais quanto no espaço. Lamine (2009) afirma que aproximações no tempo com Euler Progressivo possibilitam, para os casos avaliados por ele, resultados mais eficientes do que os obtidos com Runge-Kutta de terceira ordem. Nas aplicações abordadas no Capítulo 4, para alguns exemplos, as referidas estratégias são comparadas, onde se percebe que, em geral, o uso de aproximações com Runge-Kutta tem por consequência uma suavização de regiões descontínuas. Essa suavização se intensifica com o aumento da ordem de aproximação adotada.

3.4.2. Tratamento de Poços

Nos volumes de controle associados aos poços produtores, o último termo da equação (148) é diferente de zero. Nos termos de fonte e sumidouros, frequentemente ocorrem escalas de tempo menores do que a dominante no resto do domínio devido à variações bruscas na variável primária (Leveque, 1992). Isso leva à chamada “rigidez” do termo fonte (*stiff source term*). Chichlow (1977) afirma que formulações explícitas podem ocasionar severas oscilações em volumes de controle associados aos poços, mesmo atendendo à condição de CFL estabelecida globalmente na equação (149). Volumes de controle muito pequenos ou taxas elevadas de injeção ou produção são causas frequentes para essas inconsistências. O autor destaca ainda, com base em Coats (1968 *apud* Crichlow, 1977), que as oscilações espúrias nas curvas de produção podem ser eliminadas pelo uso de uma aproximação implícita no volume de controle “problemático”. Em geral, uma abordagem implícita é a solução mais adequada para esse tipo de problema, dada sua estabilidade incondicional (Leveque e Yee, 1988). No entanto, segundo Kou e Sun (2010), formulações implícitas podem demandar maior custo

computacional, especialmente para problemas de grandes dimensões ou aproximações com alta resolução (Bastian, 2013), devido aos processos iterativos, inerentes, em se tratando de problemas não lineares, a esse tipo de abordagem (Dawson *et al.*, 1997; Monteagudo e Firoozabadi, 2007 *apud* Kou e Sun, 2010).

No presente trabalho, os volumes de controle associados aos poços produtores são avaliados com uma formulação explícita, tal como proposto para o resto do domínio e frequentemente empregado em importantes publicações encontradas na literatura (Edwards e Rogers, 1998; Edwards, 2006; Hurtado *et al.*, 2007b; Lamine e Edwards, 2010; Eymard *et al.*, 2012; Lamine e Edwards, 2013; Kozdon *et al.*, 2011; Khoozan *et al.*, 2011; Nikitin e Vassilevsky, 2012). Nesses trabalhos, não há qualquer menção à tratamento especial nos volumes de controle associados aos poços. No entanto, para evitar ou minimizar oscilações espúrias nas curvas de produção oriundas dessa particularidade, duas estratégias são aqui associadas. A primeira intervenção é o uso de um passo fracional nos volumes de controle onde há termo fonte. Essa estratégia é descrita em Leveque (1992), para aplicações em equações hiperbólicas em geral e foi adaptada por Carvalho (2005) para o contexto de simulação de escoamento em reservatórios de petróleo. Esse procedimento consiste em uma equação “preditora”, onde o termo fonte é desconsiderado, dada, por:

$$S_{w_L}^* = S_{w_L} - \frac{r\Delta t}{\phi\Omega_L} \sum_{IJ \in \Gamma_L} \left[\vec{\mathcal{F}}_{IJ}(S_{w_L}) \cdot \vec{N}_{IJ} \right] \quad (153)$$

onde r é um parâmetro de relaxação (Date, 2005) que, no presente texto, assume os valores 0,5 ou 1 e pode ser conveniente como se vê, no Capítulo 4, nas discussões sobre a estratégia aqui descrita. Quando esse parâmetro é igual a 0,5, diminui-se o passo de tempo Δt obtido para o resto do domínio de acordo com a equação (150). Segundo Leveque (1992), quando há dependência do termo fonte na derivada da variável primária, esse procedimento se torna inviável. O autor também afirma que esse fracionamento da equação discreta nem sempre é eficaz para a suavização da “rigidez” do termo fonte. Uma vez que o termo fonte na equação de saturação depende apenas da vazão total $\bar{Q}$, obtida com as velocidades totais de Darcy, da variável primária, por meio da relação $\bar{Q}_w = \bar{Q}f_w(S_w)$ e, em alguns casos, da posição $\vec{x}$, a equação “corretora” que envolve o termo fonte pode ser usada e é escrita como:

$$S_{w_L}^{n+1} = S_{w_L}^* + \frac{r\Delta t \bar{Q}_w(S_{w_L})}{\phi\Omega_L} \quad (154)$$

Deve-se notar na equação (154) que, novamente, o parâmetro de relaxação r é incorporado e que o termo fonte $\bar{Q}_w$ é função de S_{w_L} ao invés de $S_{w_L}^*$. No Capítulo 4, os resultados obtidos dão suporte a essa definição.

A segunda intervenção na equação (148) consiste em um “fatiamento” do passo de tempo calculado convencionalmente com a equação (150). Uma vez que a mudança da variável primária nos poços produtores ocorre em uma escala de tempo incompatível com a definida para o resto do domínio, como já mencionado, se propõe, aqui, a determinação de um passo de tempo auxiliar Δt_{Aux} quando a saturação de água no poço produtor for significativa. Na figura 20a, um fragmento de malha é ilustrado com indicação de um volume de controle associado ao poço produtor. Ao lado (figura 20b), uma vista em perspectiva do mesmo fragmento onde se vê uma representação do nível de tempo futuro ($n+1$), e, para o volume de controle

associado ao poço, níveis intermediários ($k+1$), representando esse passo de tempo auxiliar com o qual a solução marcha até coincidir com o estágio de tempo global.

O critério para o fatiamento do passo de tempo calculado convencionalmente (Δt), em passos de tempo menores (Δt_{Aux}), também tem como inspiração o critério de estabilidade CFL (ver seção 3.4.1). No entanto, para a intervenção na equação associada aos poços produtores, a contribuição do termo fonte é inserida na relação entre o passo de tempo e o número de Courant. Tradicionalmente, isso não ocorre (Hirsch, 1992; Leveque, 1992). Dessa forma, assumindo que não há contribuição da gravidade, apenas para simplificar o entendimento e sem perder generalidade, a equação de saturação é escrita em função da velocidade característica (ver Apêndice A), ao invés de ser escrita na forma divergente, comumente empregada (Leveque, 1992; Pletcher *et al.*, 1997). Isso leva a:

$$\frac{\partial S_w}{\partial t} + \frac{\partial f_w}{\partial S_w} \frac{\vec{v}}{\phi} \cdot \vec{\nabla} S_w = Q_w \quad (155)$$

Utilizando o Método de Volumes Finitos, seguindo os mesmos passos descritos na seção 3.4.1, a forma discreta da equação (155) é obtida como:

$$S_{w_{\hat{L}}}^{n+1} = S_{w_{\hat{L}}} - \frac{\Delta t}{\phi_{\hat{L}} \Omega_{\hat{L}}} \sum_{IJ \in \Gamma_{\hat{L}}} \left(\frac{\partial f_w}{\partial S_w} \right)_{IJ} \vec{v}_{IJ} S_{w_{IJ}} \cdot \vec{N}_{IJ} + \frac{\Delta t \bar{Q}_w}{\phi_{\hat{L}} \Omega_{\hat{L}}} \quad (156)$$

onde o número de Courant em cada face IJ do volume de controle $\hat{L}$, ilustrado na figura 20a, pode ser obtido pela seguinte relação:

$$C = \frac{\Delta t}{\phi_{\hat{L}} \Omega_{\hat{L}}} \left(\frac{\partial f_w}{\partial S_w} \right)_{IJ} \vec{v}_{IJ} \cdot \vec{N}_{IJ} \quad (157)$$

A equação (157) é utilizada para calcular o passo de tempo, onde, obviamente deve-se considerar o menor dentre os passos de tempo obtidos em todas as faces IJ do domínio computacional. Isso leva a equação (150) na seção 3.4.1.

Na proposta do presente trabalho, para promover um tratamento de poço, um número equivalente ao número de Courant (C_{equiv}) para as faces IJ dos volumes de controle associados aos poços produtores é escrito como:

$$C_{equiv} = \frac{\Delta t}{\phi_{\hat{L}} \Omega_{\hat{L}}} \left(\frac{\partial f_w}{\partial S_w} \right)_{IJ} \vec{v}_{IJ} \cdot \vec{N}_{IJ} + \frac{\Delta t \bar{Q}_w}{\phi_{\hat{L}} \Omega_{\hat{L}}} \quad (158)$$

É importante observar que o valor atribuído ao número de Courant equivalente é o mesmo atribuído ao convencional. A inserção do termo fonte é a única mudança estabelecida. Portanto, dada a referida intervenção, o passo de tempo, agora auxiliar (Δt_{Aux}), para cada face IJ , pode ser escrito a partir da equação (158). Considerando todas as faces dos volumes de controle associados aos poços produtores (no caso ilustrado, apenas $\hat{L}$), obtém-se:

$$\Delta t_{Aux} = \frac{\phi_{\hat{L}} \Omega_{\hat{L}} C_{equiv}}{\max \left[\left(\frac{\partial f_w}{\partial S_w} \right)_{IJ} \vec{v}_{IJ} \cdot \vec{N}_{IJ} \right] + \bar{Q}_w} \quad (159)$$

Deve-se notar que para valores muito pequenos de saturação, $\bar{Q}_w$ tem valores próximos de zero e a equação (159) recai na equação (150), que define o passo de tempo convencional Δt . No entanto, na equação (150), todas as faces do domínio computacional são levadas em conta, enquanto que na equação (159), apenas as faces dos volumes de controle associados aos poços produtores são consideradas. Para evitar um passo de tempo auxiliar que não satisfaça a condição de CFL calculada convencionalmente, a seguinte relação é utilizada nas equações (153) e (154):

$$\Delta t = \min(\Delta t_{Aux}, \Delta t) \quad (160)$$

Assim, enquanto a saturação de água não for relevante nos poços produtores, o passo de tempo recebe o valor convencional, Δt . Para $\Delta t_{Aux} < \Delta t$, os poços produtores avançam com Δt_{Aux} e o resto do domínio avança com Δt , tal como ilustrado na figura 20b.

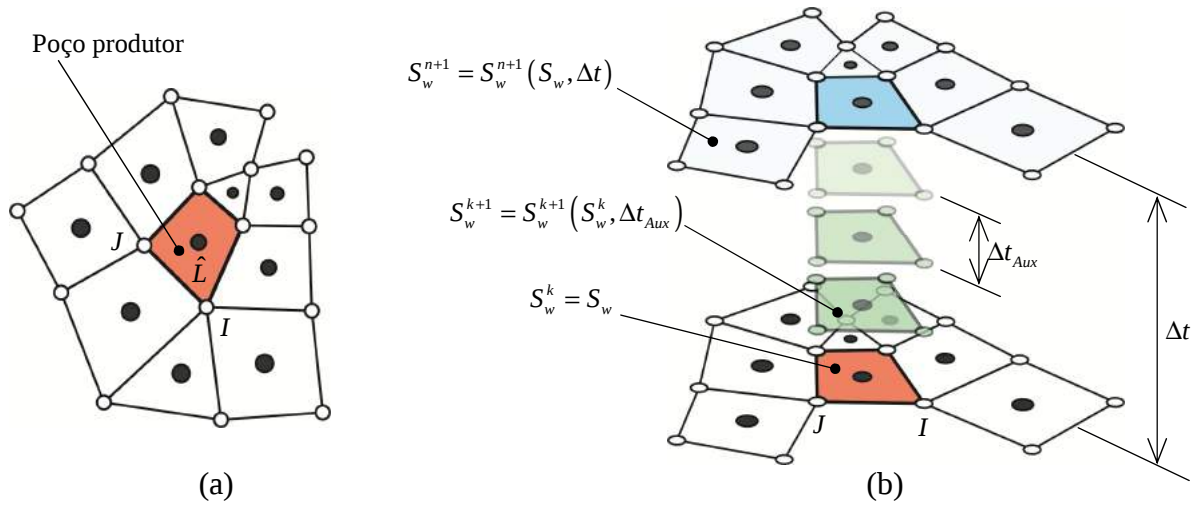


Figura 20. Intervenção no volume de controle correspondente ao poço produtor: (a) fragmento de malha com indicação do volume de controle associado ao poço produtor; (b) níveis de tempo convencional e fracionado, apenas para o poço produtor.

Uma vez que os volumes de controle associados aos poços produtores e o resto do domínio tem passos de tempo diferentes, a marcha no tempo auxiliar (níveis k) ocorre até o ultimo nível alcançar o nível de tempo $n+1$ (ver figura 20b). Por fim, como observação relevante, o passo de tempo auxiliar Δt_{Aux} não precisa necessariamente ser múltiplo do passo de tempo convencional Δt .

3.4.3. Esquemas TVD

A ideia de uma solução onde nenhum novo extremo local deve ser criado durante a marcha no tempo, i.e., o máximo valor não deve aumentar e o mínimo valor não deve diminuir, foi inicialmente proposta por Harten (1983). Desta forma, nos chamados esquemas TVD (*Total Variation Diminishing*), a variação total ou *Total Variation* (TV) da solução S_w , dada pelas equações (161) para um domínio unidimensional, considerando um problema de valor inicial submetido à condições iniciais e de contorno adequadas, não deve aumentar ao longo do tempo.

$$TV = \int_{-\infty}^{\infty} \left| \frac{\partial S_w}{\partial x} \right| dx \quad (161)$$

Na forma discreta, a equação (161) pode ser escrita como segue:

$$TV = \sum_i |S_{i+1} - S_i| \quad (162)$$

Portanto, um método numérico é dito TVD se $TV(S^{n+1}) \leq TV(S^n)$. Por consequência, a monotonicidade da solução é preservada e essa é livre de oscilações espúrias. Harten (1983) provou que todo esquema monótono é TVD e que todo esquema TVD preserva a monotonicidade. No entanto essa constatação só pode ser provada para domínios unidimensionais (Lyra, 1992; Leveque, 1992).

De acordo com o teorema de Godunov, esquemas numéricos lineares e monótonos usados para resolver EDPs podem ser no máximo de primeira ordem de acurácia (Leveque, 1992). Desta forma, aproximações de ordem maior que um causam o aparecimento de oscilações espúrias nas soluções obtidas em regiões onde se verificam elevados gradientes da variável calculada. A ideia 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 de primeira ordem. Em tais esquemas a solução é, em geral, de segunda ordem em regiões suaves da solução e de primeira ordem próximo a “descontinuidades”. A transição para métodos de ordem mais alta é feita a partir da utilização de funções limitadoras de inclinação para as variáveis dependentes S_w ou a partir da limitação do fluxo $\tilde{\mathcal{F}}_{IJ}(S_w)$ (ver seção 3.4.4) de maneira adaptativa (Leveque, 1992 *apud* Carvalho, 2005).

3.4.4. Aproximações de Alta Ordem com uma Estratégia do tipo MUSCL

A estratégia MUSCL, proposta por van Leer (1979) para obtenção de uma aproximação de segunda ordem, foi inicialmente pensada para malhas estruturadas. Essa estratégia consiste na reconstrução da variável em cada volume de controle avaliado. Para isso, uma distribuição linear (que proporciona aproximações de segunda ordem) é definida a partir da média dos valores associados aos volumes de controle da vizinhança próxima. Existe, no entanto, várias outras técnicas de reconstrução disponíveis na literatura (Goosh, 1997; Cokburn *et al.*, 1989; Sonar, 1998; Wang 2002; Liu *et al.*, 2006; Diskin e Thomas, 2010; Betchen e Straatman, 2010; Delis e Nikolos, 2012; Gao e Wang, 2013), inclusive para aproximações com ordens arbitrárias e suporte restrito ao volume de controle avaliado, tal como discutido na subseção *Reconstrução da Saturação: Técnicas disponíveis*.

Na figura 21, uma função suave é ilustrada ao longo de uma malha unidimensional representando a solução exata de um dado fenômeno físico. Aproximações numéricas de primeira ordem, com distribuição constante da variável no volume de controle, até quarta ordem, obtida com um polinômio cúbico, também são ilustradas. Para evitar conflitos de nomenclatura, saturações com barra sobrescrita, $\bar{S}_w$, e til sobrescrito, $\tilde{S}_w$, são utilizadas, respectivamente, para diferenciar os valores médios (projetados) atribuídos aos volumes de controle dos valores reconstruídos em cada face IJ avaliada. Essa nomenclatura será adotada ao longo do presente texto.

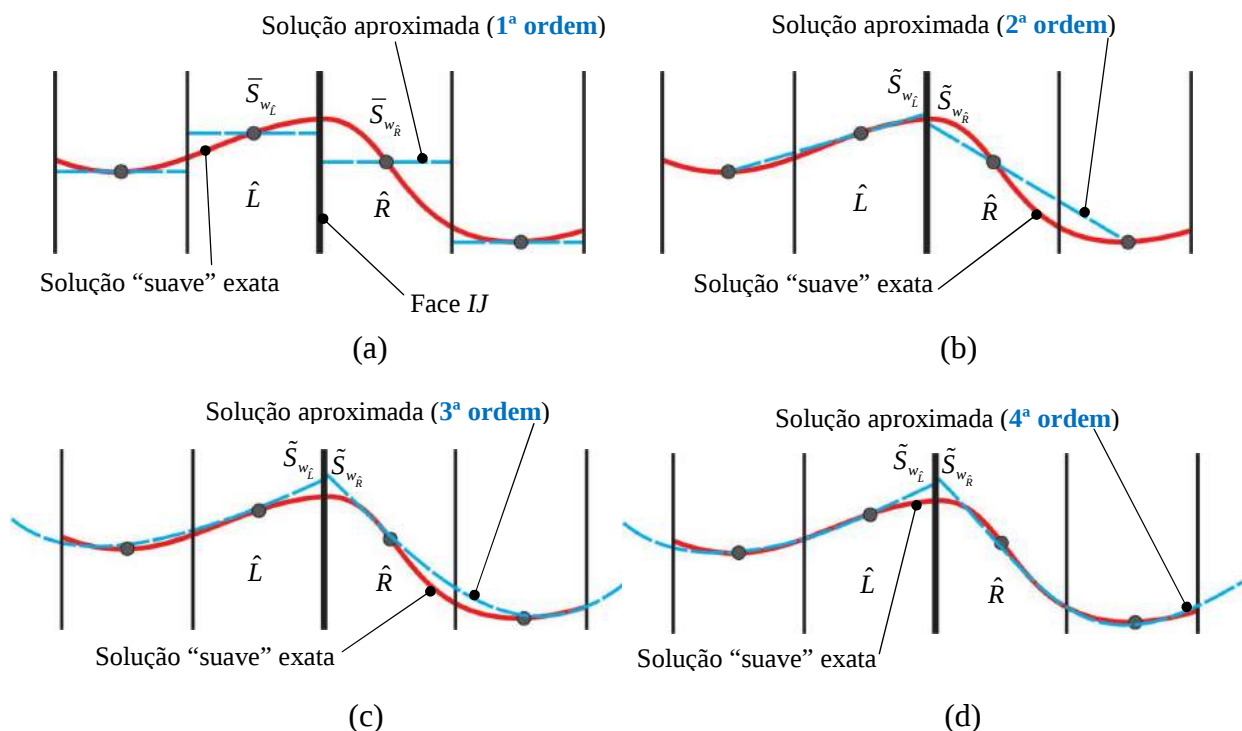


Figura 21. Aproximação de uma função “suave” exata com estados definidos à esquerda e à direita para esquemas numéricos de diferentes ordens de aproximação espacial: (a) primeira ordem; (b) segunda ordem; (c) terceira ordem; (d) quarta ordem.

De acordo com a proposta de van Leer (1979), as aproximações de alta ordem são obtidas de acordo com as etapas apresentadas na figura 22. Inicialmente, a variável é reconstruída, à esquerda e à direita da face avaliada, com a ordem de aproximação desejada como se vê nas figuras 21b a 21d. A reconstrução da variável é feita a partir de dados associados aos volumes de controle $\hat{L}$ e $\hat{R}$, e seus respectivos vizinhos próximos. Fica claro que aproximações de maior ordem representam melhor a função que descreve o fenômeno simulado (Colella e Woodward, 1984; Barth e Frederickson, 1990). No entanto, também é fácil verificar que os valores extrapolados até a face IJ (aproximações de alta ordem), por meio dos polinômios reconstituidores, são propensos a produzir valores maiores do que os máximos valores médios (ou menores do que os mínimos valores médios, em outros contextos), atribuídos aos volumes de controle da vizinhança próxima. Uma consequência disso é o surgimento de extremos locais, produzidos no cálculo das saturações nos volumes de controle avaliados em instantes de tempo futuros (Leveque, 1992). Nas aproximações de primeira ordem, esses extremos não ocorrem, dada a distribuição constante da variável em todo o volume de controle. Assim, o campo de saturações calculados no instante de tempo futuro preserva a monotonicidade da solução produzida.

Para assegurar que a aproximação de alta ordem satisfaça um princípio do máximo discreto (van Leer, 1979), funções limitadoras não lineares, i.e., que dependem da variável a ser determinada, são utilizadas após a etapa de reconstrução. Esses limitadores minimizam ou eliminam os termos de ordem mais alta, tornando a aproximação de primeira ordem nas regiões de choque de saturação (ver subseções seguintes para maiores detalhes).

Num passo seguinte, o Resolvedor Aproximado de Riemann (Godunov, 1959 *apud* Hirsch, 1992) é utilizado como discutido na seção (3.4.5). Na figura 22, as etapas definidas por van Leer (1979), na estratégia MUSCL, são apresentadas.

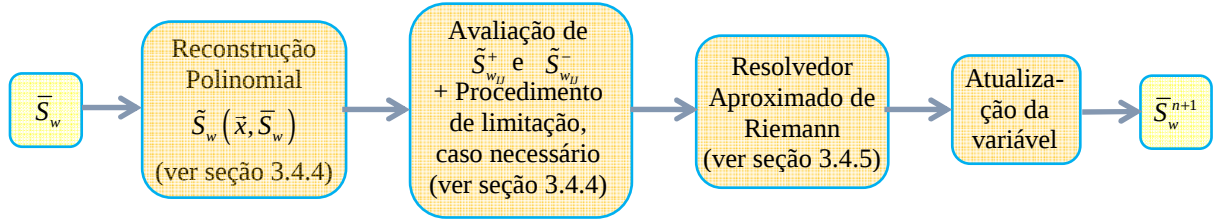


Figura 22. Diagrama representativo das etapas que definem os três passos necessários na estratégia do tipo MUSCL (van Leer, 1979).

Nas aproximações de primeira ordem, valores médios, projetados sobre os volumes de controle à esquerda ($\bar{S}_{w_L}$) e à direita ($\bar{S}_{w_R}$) da aresta IJ são os argumentos do termo $\tilde{\mathcal{F}}_{IJ}(\bar{S}_{w_L}, \bar{S}_{w_R})$ na equação (148). Nesse caso, não há necessidade de reconstrução da variável.

Reconstrução da Saturação: técnicas disponíveis

Dentre as muitas estratégias de reconstrução disponíveis na literatura, muitas tem o suporte de reconstrução definido no volume de controle avaliado e naqueles que compõe sua vizinhança “próxima”. A reconstrução com estêncil adaptativo, proposta por Durlofsky *et al.* (1992), cujo estêncil é ilustrado na figuras 23a, e a reconstrução k-exata (Barth e Frederickson, 1990) com estêncil de segunda ordem ilustrado na figura 23b, são exemplos desse tipo de abordagem. Vantagens e desvantagens dessa estratégia de reconstrução, em relação a outras estratégias mais locais, como DG, SFV (figura 23c), SFD (figura 23d) e CPR, são discutidas no capítulo 1.

No presente trabalho, a chamada reconstrução “k-exata”, introduzida por Barth e Frederickson (1990) e aprimorada por Goosh (1997), é utilizada para promover a reconstrução da variável e, consequentemente, produzir aproximações de alta ordem para o fluxo numérico na equação (148). O procedimento de reconstrução nesse esquema numérico é fundamentado na expansão da variável em uma série de Taylor, feita para cada volume de controle que constitui a vizinhança considerada. A equação resultante para cada volume de controle representa um polinômio reconstrutor cujos coeficientes são as componentes do gradiente, hessiana, derivada terceira, etc. Isso resulta em $\mathcal{N}_{vis}$ equações, sendo $\mathcal{N}_{vis}$ o número de volumes de controle em torno do volume de controle avaliado. O número de coeficientes a se determinar, em cada uma dessas equações, depende da ordem de aproximação desejada. Dessa forma, para qualquer ordem de aproximação, um sistema algébrico local deve ser resolvido para cada volume de controle avaliado, de modo que os coeficientes do polinômio reconstrutor sejam determinados.

Dadas as frequentes situações em que o número de equações é maior do que o número de incógnitas (sistema sobredeterminado), técnicas convencionais empregadas na solução de sistemas algébricos (Eliminação de Gauss, Método de Gauss-Seidel, etc) não se aplicam. Nesse caso, a Técnica de Mínimos Quadrados (Golub e van Loan, 1983), detalhada no Apêndice C, é comumente empregada. Por um lado, isso implica em uma elevação do custo computacional quando se compara com estratégias baseada no Teorema da Divergência. No entanto, segundo Diskin e Thomas (2010), a reconstrução baseada na Técnica de Mínimos Quadrados produz soluções mais robustas, especialmente quando malhas com elevado grau de distorção são utilizadas.

A partir de uma visão geral das principais técnicas de reconstrução disponíveis na literatura, sucintamente apresentadas na seção 1.1, a estratégia de reconstrução k-exata, baseada na Técnica de Mínimos Quadrados (Barth e Frederickson, 1990) é adotada no presente texto.

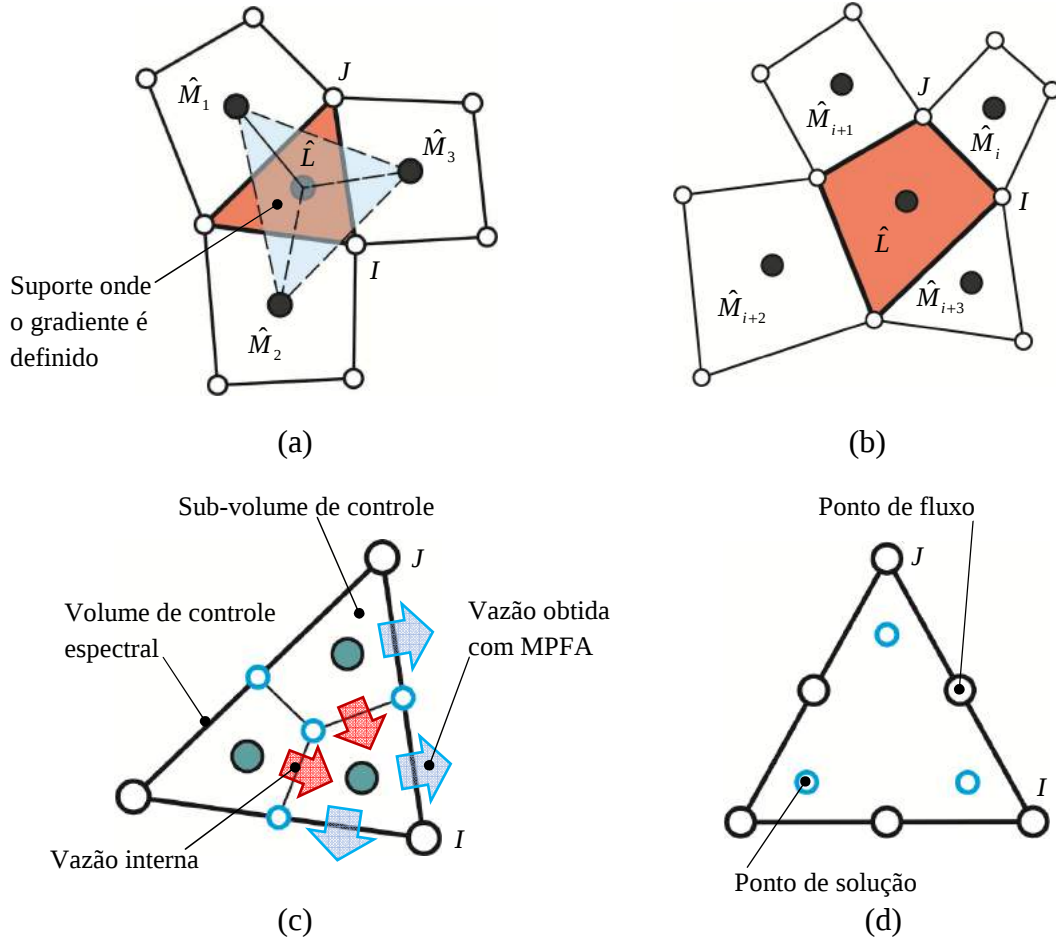


Figura 23. Estratégias de reconstrução para formulações conservativas: (a) reconstrução fundamentada no Teorema da Divergência, proposta por Durlinsky *et al.* (1992); (b) reconstrução fundamentada na técnica de Mínimos Quadrados; (c) volume de controle espectral, com subdivisão do volume de controle primário; (d) método de diferenças finitas espectrais, com reconstrução obtida a partir de pontos de definição do fluxo e da solução.

Para aplicações onde se deseja formulações exclusivamente baseadas no Método de Volumes Finitos, flexibilidade para lidar com malhas distorcidas e compatibilidade com formulações do tipo MPFA, essa estratégia de reconstrução parece ser a mais atrativa, mesmo com a aparente desvantagem proporcionada pelo estêncil característico de ordens mais elevadas (ver Apêndice C).

Reconstrução Baseada na Técnica de Mínimos Quadrados

Para entender melhor a estratégia de reconstrução proposta por Barth e Frederickson (1990) e adotada no presente texto, a figura 23b é tomada como referência. Como já mencionado na subseção anterior, expansões em Série de Taylor são a base dessa estratégia. O valor médio de saturação de água (ou outra variável, como o fluxo fracional) associado a todo volume de controle $\hat{M}_i$ que define a vizinhança é escrito como a variável associada ao volume de controle $\hat{L}$ mais a variação dessa variável até o termo compatível com a ordem pretendida. Uma forma generalizada de escrever a equação resultante para cada volume de controle $\hat{M}_i$ é dada como segue:

$$w_{\hat{L}, \hat{M}_i} \left(\bar{S}_{w_{\hat{M}_i}} - \bar{S}_{w_{\hat{L}}} \right) = w_{\hat{L}, \hat{M}_i} \sum_{\alpha=1}^{\kappa} \sum_{\beta=1}^{\kappa} \frac{\partial^{\alpha+\beta} S_w}{\partial x^{\alpha} \partial y^{\beta}} \bigg|_{\hat{L}} \left(\hat{x}_{\hat{L}, \hat{M}_i}^{\alpha} \hat{y}_{\hat{L}, \hat{M}_i}^{\beta} - \bar{x}_{\hat{L}}^{\alpha} \bar{y}_{\hat{L}}^{\beta} \right) \quad (163)$$

onde $\bar{S}_{w_{\hat{L}}}$ e $\bar{S}_{w_{\hat{M}_i}}$ são, respectivamente, os valores integrais médios (projetados), atribuídos ao volume de controle avaliado $\hat{L}$ e da vizinhança $\hat{M}_i$ (ver figura 23b e Apêndice C). O parâmetro $w_{\hat{L}, \hat{M}_i}$ representa uma ponderação com o inverso da distância, utilizada para tornar a reconstrução mais local, diminuindo a influência dos valores de saturação de água correspondentes a volumes de controle mais distantes (Clain *et al.*, 2011). Os termos diferenciais são os coeficientes a se determinar da função polinomial e os parâmetros $\hat{x}_{\hat{L}, \hat{M}_i}^{\alpha} \hat{y}_{\hat{L}, \hat{M}_i}^{\beta}$ e $\bar{x}_{\hat{L}}^{\alpha} \bar{y}_{\hat{L}}^{\beta}$ são de natureza geométrica, sendo pré-processados. Os “contadores” α e β nos somatórios da equação (163) assumem valores entre 1 e o grau κ do polinômio a ser reconstruído. Isso define cada termo diferencial aproximado e o geométrico para a ordem de aproximação desejada. As várias equações de restrição, escritas para modelar o polinômio reconstrutor em $\hat{L}$ constituem um sistema algébrico local, do tipo $\mathbf{Ud} = \mathbf{b}$ (ver Apêndice C), no qual os termos diferenciais formam um vetor de incógnitas ($\mathbf{d}$), como já mencionado, e os termos geométricos e valores médios de saturação de água (ou fluxo fracionário) são entradas, respectivamente, da matriz $\mathbf{U}$ e do vetor de termos conhecidos $\mathbf{b}$.

No Apêndice C todo o procedimento de reconstrução aqui adotado é descrito em detalhes. Isso inclui a definição dos valores integrais médios nos volumes de controle, a dedução da equação (163) a partir da expansão em Série de Taylor (ver equação C.23 no Apêndice C), além da montagem e algoritmo de solução do sistema algébrico local obtido. O apêndice é finalizado com a verificação dos coeficientes do polinômio reconstrutor para cada ordem considerada.

Uma vez definido o polinômio reconstrutor, a variável avaliada é, portanto, extrapolada até o ponto de quadratura (ou pontos, em ordens de aproximação maiores do que dois) nas superfícies de controle, com a acurácia desejada. Em geral, para regiões suaves, soluções de alta ordem são muito mais acuradas do que as obtidas com esquemas numéricos de primeira ordem. No entanto, em regiões não suaves, especialmente na presença de descontinuidades na solução numérica, há uma degradação na acurácia das aproximações, seja pelas oscilações espúrias, geradas nas aproximações de alta ordem, ou pelo uso de funções limitadoras que diminuem a ordem de aproximação de modo a satisfazer critérios de monotonicidade (Leveque, 1992; Goosh, 1997; Delis e Nikolos, 2012). Dessa forma, uma solução de alta resolução é o ideal. Nesse caso, existe uma combinação com regiões onde se pode ter alta ordem e regiões onde a necessidade de monotonicidade impõe o uso de aproximações de primeira ordem (Leveque, 1992). Na próxima seção algumas das muitas funções limitadoras disponíveis na literatura são brevemente discutidas.

Aspectos Gerais de Funções Limitadoras

As várias estratégias de limitação encontradas na literatura, tentam produzir soluções de alta ordem e que satisfazem o teorema de Godunov (1959 *apud* Hirsch, 1992; van Leer, 1979; Zalezak, 1979; Roe, 1983; van Albada *et al.*, 1982; Sweby, 1984; Barth e Jespersen, 1989; Venkatakrishnan, 1995; Woodfield *et al.*, 2004; Berger *et al.*, 2005; Cada e Torrilhon, 2009; Clain *et al.*, 2011; Park e Kim, 2011; Park e Kim, 2012; Diot *et al.*, 2012). Estratégias não lineares são utilizadas para esse fim (Hirsch, 1992; Leveque, 1992; Lyra e Morgan, 1994). Para a maioria das estratégias presentes na literatura, voltadas apenas para aproximações de segunda ordem, a intensidade do gradiente utilizado na reconstrução da variável, é reduzida quando necessário. Essa redução (limitação) é suficiente para que não ocorram ex-

tremos locais e, conseqüentemente, oscilações nas soluções obtidas. Dependendo da estratégia de limitação adotada, mais ou menos difusão numérica artificial pode ser inserida na aproximação de alta ordem de maneira adaptativa, sem, necessariamente, torná-la estritamente de primeira ordem ao longo de todo o domínio. Em malhas estruturadas e ortogonais, essas estratégias estão bem definidas e são bastante robustas. Por outro lado, quando consideramos malhas não estruturadas e não ortogonais, a redução na acurácia da solução e dificuldade de convergência são efeitos colaterais frequentes (Berger *et al.*, 2005). Para aproximações com ordem maior do que dois, as técnicas de limitação disponíveis na literatura são ainda um tema pouco discutido (Clain *et al.*, 2011). Os trabalhos de Cada e Torrilhon (2009), Clain *et al.* (2011) e Park e Kim (2012) são propostas relevantes para esse tipo de aplicação.

Tipicamente, existem duas estratégias de limitação: limitadores de face e de volume de controle como ilustrado na figura 24.

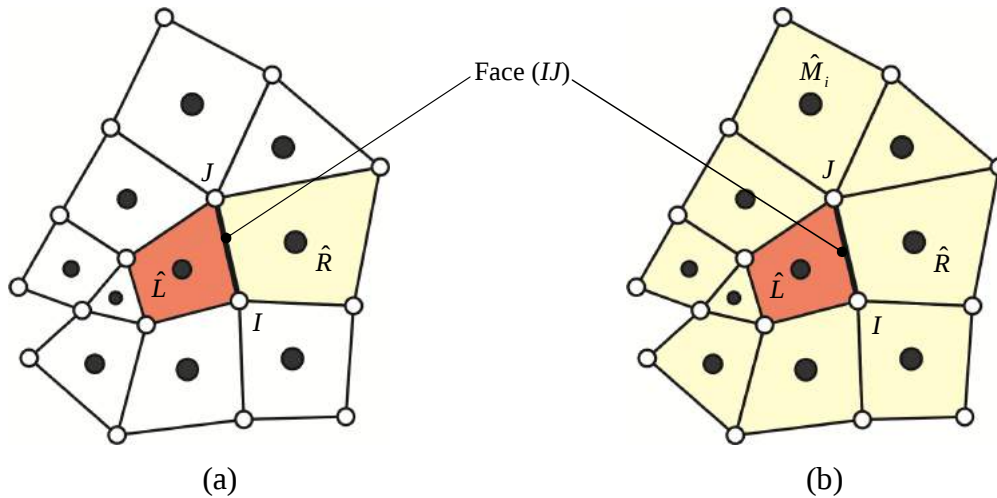


Figura 24. Malha com indicação dos volumes de controle utilizados na concepção da função limitadora para cada face IJ : (a) limitador de face onde apenas os volumes de controle $\hat{L}$ e $\hat{R}$ são empregados; (b) limitador de volume de controle onde todos os volumes de controle em torno de $\hat{L}$, vizinhança $\hat{M}_i$, são utilizados.

Nos chamados limitadores de face (*face-based limiter*), representados por ψ_{IJ} , apenas informações associadas aos volumes de controle que compartilham uma face genérica IJ são considerados (volumes de controle $\hat{L}$ e $\hat{R}$ na figura 24a). Nos limitadores de volume de controle (*control volume-based limiter*), com notação $\psi_{\hat{L}}$, toda a vizinhança (de face e de vértice) de um volume de controle genérico $\hat{L}$ (ver figura 24b) é considerada na avaliação de cada face IJ (Zalezak, 1979; Woodfield *et al.* 2004). Em geral, esse tipo de estratégia propicia uma aproximação excessivamente difusiva em relação aos limitadores de face (Woodfield *et al.* 2004). Recentemente, algumas exceções, quanto à difusão excessiva, são verificadas para esse tipo de limitador (Park e Kim, 2012), tal como discutido mais adiante. Nas duas abordagens, algum critério de monotonicidade é invocado na concepção dos limitadores. Em alguns casos, a solução aproximada só é livre de oscilações espúrias mediante a combinação dos dois tipos de limitadores (Woodfield *et al.*, 2004). No capítulo de aplicações essa necessidade fica evidente.

Há ainda esquemas numéricos de alta ordem que evitam o uso de funções limitadoras (Berger *et al.*, 2005). Nos esquemas do tipo ENO (Harten *et al.*, 1987) e WENO (Liu *et al.*, 1994) um estêncil adaptativo é usado na etapa de reconstrução. Dessa forma, um estêncil que envolva regiões de descontinuidade é desconsiderado dentro do possível (Wang, 2002).

Funções Limitadoras de Face

Na aproximação proposta por van Leer (1979), os estados reconstruídos à esquerda $\tilde{S}_{w_{\hat{L}}}$ e a direita $\tilde{S}_{w_{\hat{R}}}$ da face IJ (ver figura 25a) são obtidos a partir da variável associada aos respectivos volumes de controle que compartilham a referida face ($\bar{S}_{w_{\hat{L}}}$ e $\bar{S}_{w_{\hat{R}}}$), e uma combinação do que o autor chamou de gradiente centrado $\vec{\nabla} S_{w_{\hat{L}}}^{Cent}$ e gradiente *upwind* $\vec{\nabla} S_{w_{\hat{L}}}^{Upwd}$ (à montante da face) projetados, respectivamente, nos vetores posição $\vec{d}_{\hat{L}\hat{R}}$ e $\vec{d}_{\hat{L}\hat{L}}$ (figura 25b).

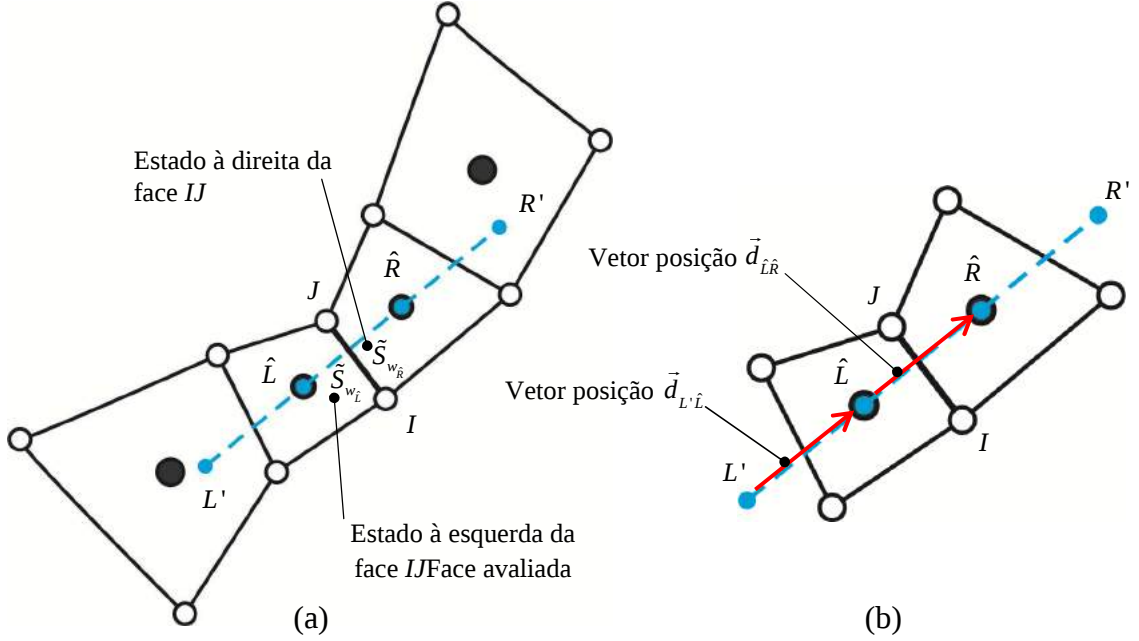


Figura 25. Estratégia MUSCL: (a) fragmento de malha com os pontos $\hat{L}$, $\hat{R}$, L' e R' , utilizados na reconstrução da variável. Os estados $\tilde{S}_{w_{\hat{L}}}$ e $\tilde{S}_{w_{\hat{R}}}$, à esquerda e direita de cada face IJ são indicados; (b) indicação dos vetores posição $\vec{d}_{\hat{L}\hat{R}}$ e $\vec{d}_{\hat{L}\hat{L}}$, utilizados na definição dos limitadores.

É importante notar que os gradientes mencionados, não necessariamente são os gradientes definidos na etapa de reconstrução, utilizando a Técnica de Mínimos Quadrados, por exemplo. No entanto, esse último é indispensável para o cálculo do gradiente *upwind*, como detalhado mais adiante.

A concepção do gradiente centrado tem uma forte característica unidimensional, uma vez que, em problemas com apenas uma dimensão, discretizada com malhas de espaçamento uniformemente, foram considerados na proposta de van Leer (1979). Assim, fazendo uma expansão em Série de Taylor até o termo da primeira derivada (para erro de truncamento de segunda ordem), é possível escrever a saturação de água no volume de controle $\hat{R}$, $\bar{S}_{w_{\hat{R}}}$, obtida a partir do valor da saturação de água e seu gradiente ($\bar{S}_{w_{\hat{L}}}$ e $\vec{\nabla} S_{w_{\hat{L}}}^{Cent}$), no volume de controle $\hat{L}$, como:

$$\bar{S}_{w_{\hat{R}}} = \bar{S}_{w_{\hat{L}}} + \vec{\nabla} S_{w_{\hat{L}}}^{Cent} \cdot \vec{d}_{\hat{L}\hat{R}} \quad (164)$$

O gradiente centrado projetado no vetor posição $\vec{d}_{\hat{L}\hat{R}}$ pode, portanto, ser aproximado pela diferença entre os valores médios de saturação de água, por:

$$\vec{\nabla}S_{w_{\hat{L}}}^{Cent} \cdot \vec{d}_{\hat{L}\hat{R}} = \bar{S}_{w_{\hat{R}}} - \bar{S}_{w_{\hat{L}}} \quad (165)$$

Utilizando um raciocínio análogo, o gradiente *upwind* projetado no vetor posição $\vec{d}_{L'\hat{L}}$ pode ser definido como:

$$\vec{\nabla}S_{w_{\hat{L}}}^{Upwd} \cdot \vec{d}_{L'\hat{L}} = \bar{S}_{w_{\hat{L}}} - \bar{S}_{w_{L'}} \quad (166)$$

Para malhas não estruturadas, o valor da saturação de água no ponto L' não é naturalmente conhecido. Em formulações centradas na célula a variável é, em geral, associada ao centroide de cada volume de controle (ver figura 25). Dessa forma, dado que o ponto L' é obtido por extrapolação a partir das informações nos pontos $\hat{L}$ e $\hat{R}$, é possível definir a diferença $\bar{S}_{w_{\hat{L}}} - \bar{S}_{w_{L'}}$ a partir de um ponto de vista geométrico (Delis e Nikolos, 2012), i.e., o gradiente centrado, projetado no vetor posição $\vec{d}_{\hat{L}\hat{R}}$, somado ao gradiente *upwind*, projetado no vetor posição $\vec{d}_{L'\hat{L}}$ é equivalente ao dobro do gradiente, obtido no procedimento de reconstrução com a Técnica de Mínimos Quadrados, $\vec{\nabla}S_{w_{\hat{L}}}$, projetado no vetor posição $\vec{d}_{\hat{L}\hat{R}}$. A figura 25b pode ajudar o entendimento dessa relação, que pode ser escrita como:

$$\left(\bar{S}_{w_{\hat{R}}} - \bar{S}_{w_{\hat{L}}}\right) + \left(\bar{S}_{w_{\hat{L}}} - \bar{S}_{w_{L'}}\right) = 2\vec{\nabla}S_{w_{\hat{L}}} \cdot \vec{d}_{\hat{L}\hat{R}} \quad (167)$$

O gradiente *upwind* é, portanto, dado por:

$$\bar{S}_{w_{\hat{L}}} - \bar{S}_{w_{L'}} = 2\vec{\nabla}S_{w_{\hat{L}}} \cdot \vec{d}_{\hat{L}\hat{R}} - \left(\bar{S}_{w_{\hat{R}}} - \bar{S}_{w_{\hat{L}}}\right) \quad (168)$$

A razão entre variações consecutivas de saturação de água, i.e., os gradientes *upwind* e centrado, projetado em seus respectivos vetores posição, define o chamado fator de suavidade para uma dada aresta IJ (Sweby, 1984; Blazek, 2001), estabelecido como:

$$r = \frac{\vec{\nabla}S_{w_{\hat{L}}}^{Upwd} \cdot \vec{d}_{L'\hat{L}}}{\vec{\nabla}S_{w_{\hat{L}}}^{Cent} \cdot \vec{d}_{\hat{L}\hat{R}}} = \frac{\bar{S}_{w_{\hat{L}}} - \bar{S}_{w_{L'}}}{\bar{S}_{w_{\hat{R}}} - \bar{S}_{w_{\hat{L}}}} \quad (169)$$

Esse parâmetro é um indicador de quão elevado é o gradiente no campo de saturação de água. Muitas funções limitadoras encontradas na literatura são definidas tendo o fator de suavidade como argumento de entrada $\phi = \phi(r)$, e devem atender aos critérios estabelecidos a seguir (Berger *et al.*, 2005):

$$\phi(r \leq 0) = 0; \quad \phi(1) = 1; \quad \frac{\phi(r)}{r} = \phi\left(\frac{1}{r}\right); \quad 0 \leq \left[\frac{\phi(r)}{r}, \phi(r)\right] \leq 2 \quad (170)$$

As relações entre algumas das funções limitadoras clássicas encontradas na literatura e o fator de suavidade são apresentadas no diagrama de Sweby (Sweby, 1983). As regiões TVD (figura 26a) e TVD para esquemas de alta ordem (figura 26b) também são indicadas.

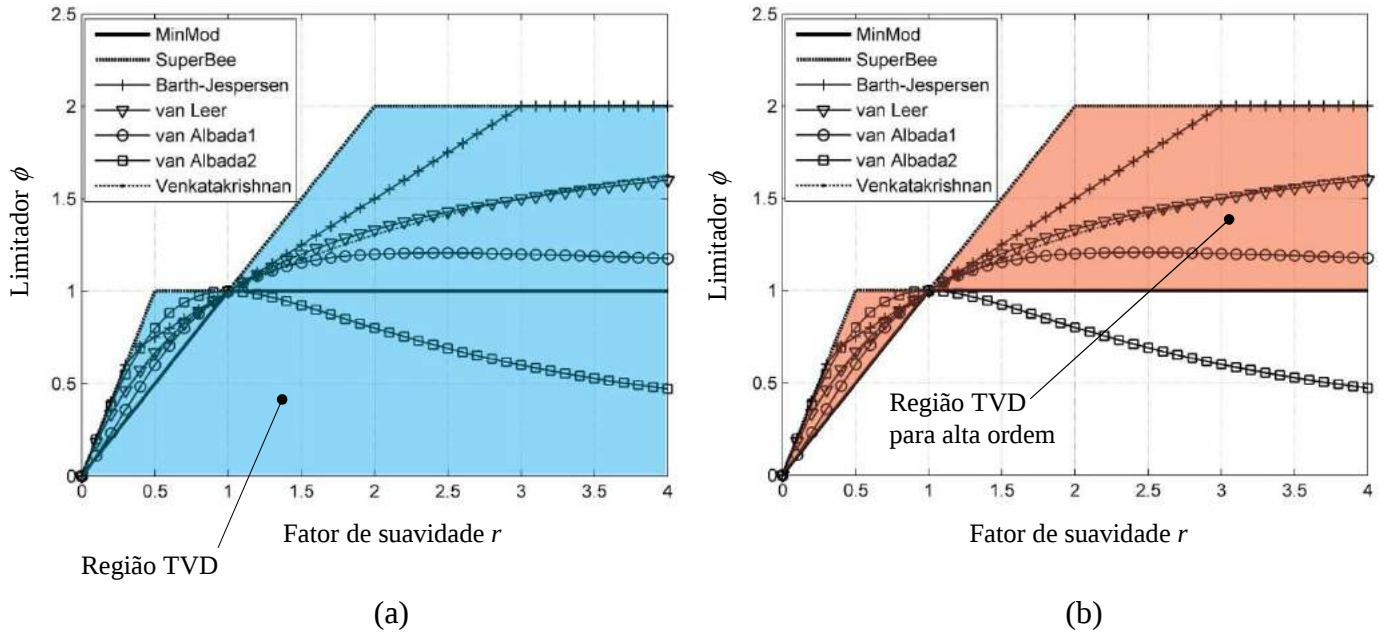


Figura 26. Diagrama de Sweby para algumas estratégias de limitação: (a) indicação de região TVD; (b) indicação da região onde o limitador produz aproximações TVD com alta ordem.

Nas equações (171) à (177), as relações cujos gráficos são ilustrados na figura 26 são apresentadas (Venkatakrishnan, 1995; Löhner, 2001; Berger *et al.*, 2005).

$$\phi_{\text{minmod}} = \min(1, r) \quad (171)$$

$$\phi_{\text{SuperBee}} = \min\left[\max(1, r), 2, 2r\right] \quad (172)$$

$$\phi_{\text{Barth-Jespersen}} = \frac{1}{2}(r+1) \min\left[\min\left(1, \frac{4r}{r+1}\right), \min\left(1, \frac{4}{r+1}\right)\right] \quad (173)$$

$$\phi_{\text{vanLeer}} = \frac{2r}{r+1} \quad (174)$$

$$\phi_{\text{vanAlbada1}} = \frac{r^2 + r}{r^2 + 1} \quad (175)$$

$$\phi_{\text{vanAlbada2}} = \frac{2r}{r^2 + 1} \quad (176)$$

$$\phi_{\text{Venkatakrishnan}} = \frac{1}{2}(r+1) \min\left[\phi\left(\frac{4r}{r+1}\right), \phi\left(\frac{4}{r+1}\right)\right], \quad \text{com} \quad \phi(\varpi) = \frac{\varpi^2 + 2\varpi}{\varpi^2 + \varpi + 2} \quad (177)$$

Dependendo da relação utilizada, o esquema numérico se torna mais ou menos difusivo, uma vez que o limitador diminui a magnitude do gradiente. Há, no entanto, limitadores chamados de compressivos (e pouco difusivos) que chegam a maximizar o valor do gradiente e que tentam, ao mesmo tempo, produzir aproximações que honrem o critério TVD para a aproximação de alta ordem (Berger *et al.*, 2005). Os limitadores *Superbee* (Roe, 1983) e *Barth-Jespersen* (Barth e Jespersen, 1989) são exemplos clássicos encontrados na literatura. Outras funções limitadoras, com base logarítmica, são encontradas no trabalho de Cada e Torrilhon (2009).

Definidos os gradiente centrado e *upwind*, além dos critérios necessários à concepção de funções limitadoras, pode-se escrever o valor da saturação de água à esquerda da aresta *IJ*, segundo a estratégia MUSCL. Como já mencionado, uma combinação entre os referidos gradientes, devidamente limitados, define a aproximação de alta ordem como:

$$\tilde{S}_{w_L} = \bar{S}_{w_L} + \frac{1}{4} \left[(1+\varepsilon)\phi\left(\frac{1}{r}\right) + (1-\varepsilon)\phi(r) \right] (\bar{S}_{w_L} - \bar{S}_{w_{L'}}) \quad (178)$$

onde ε é um parâmetro livre que define formalmente a ordem da aproximação do método. Segundo Blazek (2001), $\varepsilon = -1$ proporciona um método de ponderação à montante de segunda ordem, $\varepsilon = 1$ produz uma aproximação de diferenças centrais e $\varepsilon = 1/3$ é equivalente a uma aproximação à montante de segunda ordem com três pontos. Essa última produz resultados mais acurados do que os obtidos com os valores previamente mencionados (Carvalho, 2005). Maiores detalhes sobre a obtenção da equação (178) podem ser encontrado em Hirsch (1992) e Blazek (2001).

A equação (178) pode ser simplificada, definida como:

$$\tilde{S}_{w_L} = \bar{S}_{w_L} + \frac{\psi_{IJ}}{2} (\bar{S}_{w_L} - \bar{S}_{w_{L'}}) \quad (179)$$

Analogamente, a reconstrução da saturação de água à direita da aresta *IJ* pode ser obtida, por:

$$\tilde{S}_{w_R} = \bar{S}_{w_R} + \frac{\psi_{IJ}}{2} (\bar{S}_{w_R} - \bar{S}_{w_{R'}}) \quad (180)$$

onde o gradiente *upwind* para o volume de controle $\hat{R}$ é obtido com raciocínio análogo ao desenvolvido para obter a equação (168), sendo dado, como:

$$\bar{S}_{w_{\hat{R}}} - \bar{S}_{w_{R'}} = 2\vec{\nabla} S_{w_{\hat{R}}} \cdot \vec{d}_{\hat{R}L} - (\bar{S}_{w_L} - \bar{S}_{w_{\hat{R}}}) \quad (181)$$

O limitador de face ψ_{IJ} , comum às equações (179) e (180), tem a seguinte forma:

$$\psi_{IJ} = \frac{1}{2} \left[\frac{1}{r}(1+\varepsilon) + (1-\varepsilon) \right] \phi(r) \quad (182)$$

O critério de simetria apresentado na equação (170), $\phi(r)/r = \phi(1/r)$ (Sweby, 1984; Berger *et al.*, 2005), é utilizado de modo a colocar a função $\phi(r)$ em evidência.

Apesar da estratégia proposta por van Leer (1979) produzir excelentes resultados em malhas estruturadas e ortogonais, sua aplicação em malhas não estruturadas ou com algum grau de distorção angular pode causar diminuição na ordem das soluções aproximadas (Delis e Nikolos, 2012). Isso ocorre devido à forma como os gradientes *upwind* e centrado são construídos.

É importante notar que a diferença apresentada na equação (165), que define o gradiente centrado, e consequentemente o gradiente *upwind*, não necessariamente produz uma reconstrução da variável no ponto médio da aresta com aproximação de segunda ordem. Na figura 27, um fragmento de malha é mostrado onde o ponto $\bar{m}$ representa o ponto médio da face IJ onde a variável deveria ser reconstruída para uma aproximação formal de segunda ordem.

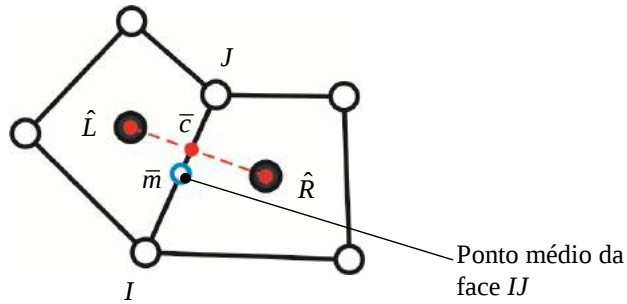


Figura 27. Fragmento de uma malha não estruturada onde são mostrados o ponto médio, $\bar{m}$, da face IJ e o ponto $\bar{c}$ onde a variável é reconstruída sobre a face IJ .

O ponto $\bar{c}$ indica onde, de fato, a reconstrução é feita, considerando a malha não ortogonal apresentada na figura 27 utilizando a estratégia MUSCL convencional. Uma alternativa proposta por Delis e Nikolos (2012), para obter o valor reconstruído da variável no ponto médio $\bar{m}$, mesmo em malhas distorcidas, é a reconstrução da variável no ponto médio por extrapolação a partir do ponto $\bar{c}$, onde a variável é conhecida devido à reconstrução convencional. Esse procedimento foi utilizado por Queiroz (2014) em aplicações voltadas para escoamento bifásico em meios porosos e melhorando moderadamente a resolução dos resultados obtidos, especialmente em malhas muito distorcidas.

Funções Limitadoras de Volume de Controle

Os limitadores de volume de controle, como o nome sugere, são fundamentados na avaliação de extremos em todo o volume de controle. Os dados relacionados à sua vizinhança de face e vértice, são verificados para garantir que não haja oscilações espúrias na proximidade de descontinuidades no campo de saturação de água. De certa forma, estratégias de limitação com essas características tem um apelo multidimensional, enquanto os limitadores de face são essencialmente unidimensionais. Uma abordagem clássica de limitadores de fluxo de volume de controle foi proposta por Zalezak (1979), com aplicação no esquema numérico FCT (*Flux Corrected Transport*), previamente proposto por Boris e Book (1973). Woodfield *et al.* (2004) propuseram uma estratégia de limitação que associa um limitador de gradiente do volume de controle ($\hat{L}$, por exemplo) com um limitador que atue apenas na face IJ , afim de assegurar a monotonicidade das soluções. Dessa forma, as equações (179) e (180) são reescritas com os limitadores de face, ψ_{IJ} , substituídos por $\Psi_{\hat{L}}$ e $\Psi_{\hat{R}}$, respectivamente, onde se tem:

$$\Psi_{\hat{L}} = \psi_{IJ} \psi_{\hat{L}}; \quad \Psi_{\hat{R}} = \psi_{IJ} \psi_{\hat{R}} \quad (183)$$

O limitador de volume de controle $\psi_{\hat{L}}$, tomado como exemplo, é uma função que deve variar suavemente entre 1, onde se tem aproximação de alta ordem, até 0, onde uma aproximação de primeira ordem é obtida. O parâmetro $\psi_{\hat{L}}$ é definido na equação (184), variando de modo a produzir, junto com ψ_{II} , soluções livres de oscilações espúrias.

$$\psi_{\hat{L}} = \begin{cases} 1 & \text{se } (\bar{S}_w^{\max} - \bar{S}_w^{\min}) \leq \varsigma \\ 0 & \text{se } \gamma_{\hat{L}} \geq 1 \text{ or } \gamma_{\hat{L}} \leq 0 \\ 1 & \text{se } \delta \leq \gamma_{\hat{L}} \leq (1-\delta) \\ \gamma_{\hat{L}}/\delta & \text{se } 0 < \gamma_{\hat{L}} < \delta \\ (1-\gamma_{\hat{L}})/\delta & \text{se } (1-\delta) < \gamma_{\hat{L}} < 1 \end{cases} \quad (184)$$

onde ς é um número muito pequeno, que evita divisões por zero. Seguindo a recomendação de Woodfield *et al.* (2004), $\varsigma = 10^{-20}$ no presente texto. O parâmetro $\gamma_{\hat{L}}$ que rege a atuação do limitador é definido, por:

$$\gamma_{\hat{L}} = \frac{\bar{S}_{w_{\hat{L}}} - \bar{S}_w^{\min}}{\bar{S}_w^{\max} - \bar{S}_w^{\min}} \quad (185)$$

Nas equações (184) e (185), $\bar{S}_w^{\max}$ e $\bar{S}_w^{\min}$ são o máximo e mínimo valores médios (projetados) de saturação de água, considerando todos os volumes de controle com vizinhança imediata (faces e vértices) do volume de controle $\hat{L}$ (ver figura 24b), exceto o próprio $\hat{L}$. Consequentemente, o denominador na equação (185) representa a máxima diferença entre os valores de saturação de água dentre os volumes de controle em torno do volume de controle $\hat{L}$ para cada passo de tempo. Em problemas multidimensionais, a saturação de água é limitada para todo volume de controle do domínio computacional, se a seguinte relação é satisfeita:

$$0 \leq \gamma_{\hat{L}} \leq 1 \quad (186)$$

O comportamento da função limitadora $\psi_{\hat{L}}$ com respeito aos valores de $\gamma_{\hat{L}}$ pode ser verificado no gráfico ilustrado na figura 28.

Vale ressaltar que o uso de um esquema numérico de segunda ordem em todo o domínio computacional, exceto onde a equação (186) é aplicada, não é uma estratégia muito segura do ponto de vista numérico, uma vez que a transição entre primeira e alta ordens é abrupta. Uma forma de assegurar que essa transição ocorra suavemente consiste na utilização de um fator δ definido pelo usuário, e cuja variação se dá, por:

$$\delta \leq \gamma_{\hat{L}} \leq 1-\delta, \quad \text{com } 0 \leq \delta \leq 0,5 \quad (187)$$

De acordo com Woodfield *et al.* (2004), um valor razoável para o parâmetro δ onde robustez e acurácia sejam obtidos de forma equilibrada é $\delta = 0,2$. Valores de δ próximos de zero tornam o esquema numérico menos difusivo, enquanto que valores próximos de 0,5 adicionam mais difusão numérica e garantem que as soluções obtidas sejam livres de oscilações

espúrias. No entanto, a resolução dessas soluções fica comprometida tal como ocorre em esquemas numéricos de primeira ordem.

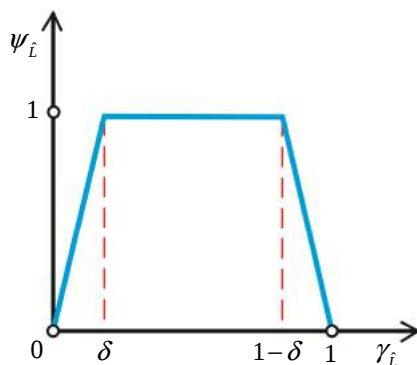


Figura 28. Gráfico da relação entre a função limitadora ψ_i e o parâmetro γ_i , definida na equação (184).

Recentemente, a estratégia de limitação proposta por Woodfield *et al.* (2004) foi utilizada por Contreras *et al.* (2015), para aplicações em problemas envolvendo o escoamento bifásico de água e óleo em reservatórios de petróleo. Uma variante (Löhner, 2001) do limitador de face proposto por van Albada *et al.* (1982) foi utilizada nas combinações apresentadas na equação (183). Para problemas com elevada razão de anisotropia no campo de permeabilidades ou com malhas com elevado grau de distorção, a abordagem multidimensional discutida acima eliminou oscilações espúrias não contidas pela forma convencional da estratégia MUSCL. Os autores ressaltam ainda que essa garantia de monotonicidade não tornam as soluções obtidas tão difusivas quanto às obtidas com o esquema numérico de primeira ordem.

Procedimento Multidimensional de Limitação (Estratégia MLP)

O Processo Multidimensional de Limitação ou *Multidimensional Limiting Process* (MLP), proposto por Park *et al.* (2010), consiste em uma estratégia de limitação não linear, baseada na avaliação de extremos locais em toda a vizinhança de cada volume de controle que constitui o domínio computacional. Assim, soluções com alta resolução podem ser obtidas sem oscilações espúrias, mesmo que o campo de soluções apresente gradientes elevados. Essa característica, nos limitadores MLP, deve ser assegurada independente da orientação do escoamento em relação à malha adotada, originada da natureza multidimensional de alguns problemas. Assim como no método proposto por Woodfield *et al.* (2004), essa “multidimensionalidade” do MLP, na prevenção de extremos locais, representa uma generalização na atuação das funções limitadoras tradicionais (Van Albada *et al.*, 1982; Venkatakrishnan, 1995), que, em geral, têm caráter unidimensional e são baseadas na detecção de valores extremos locais, avaliando apenas a face do volume de controle onde o fluxo numérico é calculado (Park e Kim, 2012b).

Na comparação com essas estratégias convencionais de limitação, em aproximações de segunda ordem do tipo MUSCL, a estratégia MLP, em geral, produz resultados mais acurados. Enquanto particularidades muito locais do escoamento são capturadas com os limitadores do tipo MLP, funções limitadoras convencionais usualmente “suavizam” esses detalhes do escoamento (Park *et al.*, 2010). Isso é mais evidente quando o escoamento tem uma natureza multidimensional ou a malha apresenta elevada distorção nos volumes de controle (Park e Kim, 2012b) ou elementos finitos (Park e Kim, 2014). No contexto de simulação de escoamento Bifásico em Reservatórios de Petróleo, o MLP foi empregado, pela primeira vez, por Souza *et al.*, 2015a, onde se obteve resultados mais acurados do que os obtidos com uma es-

estratégia convencional de limitação (Van Albada *et al.*, 1982; Löhner, 2001), especialmente para malhas com elevada distorção e meios heterogêneos e anisotrópicos. Aplicações do MLP para DG também são verificadas na literatura (Park e Kim, 2011; Park e Kim, 2012a; Park e Kim, 2014), porém no contexto de aerodinâmica. Para entender o fundamento básico da estratégia MLP, o fragmento de malha ilustrado na figura 29a é tomado como referência.

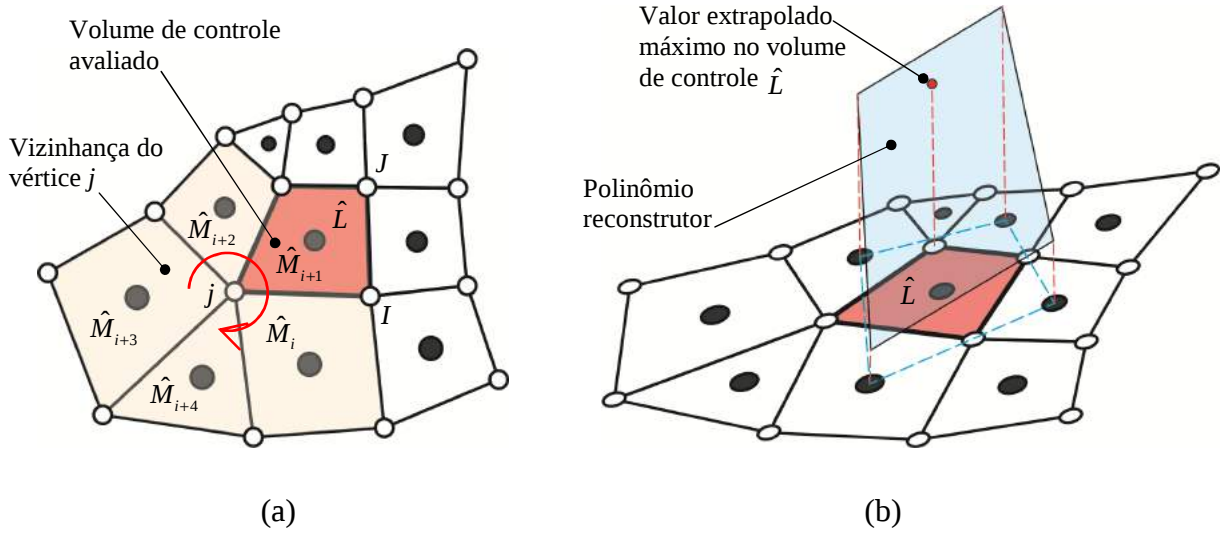


Figura 29. Fragmento de malha utilizada no desenvolvimento da estratégia MLP: (a) indicação da face genérica IJ e do vértice genérico j onde valores extremos são avaliados em relação à vizinhança $\hat{M}_i$; (b) vista em perspectiva onde se vê o polinômio interpolador e o máximo valor contido no volume de controle $\hat{L}$.

Assim, o volume de controle genérico $\hat{L}$, de vértices j (onde $j=1, \dots, 4$), tem cada vértice compartilhado por $\hat{M}_i$ volumes de controle, sendo $i=1, 2, \dots, \mathcal{N}_v$ (número de volumes de controle em torno do vértice j). Nesse caso, o fluxo numérico de alta ordem na face IJ tem como argumento de entrada, a saturação de água extrapolada, até o ponto de quadratura da referida face, como se vê na figura 35a. Apesar desse fluxo numérico ser calculado na face IJ , a avaliação de possíveis valores extremos, na estratégia MLP, é feita em todos os vértices do volume de controle $\hat{L}$. Segundo Park e Kim (2012b), em aproximações lineares (de segunda ordem), valores extremos ocorrem nos vértices dos volumes de controle, tal como representado na figura 29b. Dessa forma, para cada vértice j que constitui o volume de controle avaliado, a relação a seguir deve ser satisfeita:

$$\bar{S}_{w,\min} \leq \tilde{S}_{w_j} \leq \bar{S}_{w,\max} \quad (188)$$

onde $\bar{S}_{w,\min}$ representa o valor mínimo de saturação de água, dentre todos os valores médios associados aos volumes de controle $\hat{M}_i$ em torno do vértice j ($\forall \hat{M}_i \in j$). Isso também inclui o volume de controle $\hat{L}$, como se vê na figura 29a. O raciocínio é análogo para $\bar{S}_{w,\max}$, porém com o máximo valor. A saturação de água $\tilde{S}_{w_j}$ extrapolada, com aproximação de segunda ordem, até o vértice j é definida, usando a projeção do tipo MUSCL, como:

$$\tilde{S}_{w_j} = \bar{S}_{w_{\hat{L}}} + \vec{\nabla} S_{w_{\hat{L}}} \cdot \vec{d}_{\hat{L},j} \quad (189)$$

onde $\vec{\nabla} S_{w_{\hat{L}}}$ é o gradiente de saturação, obtido com a Técnica de Mínimos Quadrados para o volume de controle $\hat{L}$, a partir de dados associados ao próprio volume de controle e à vizinhança próxima (ver Apêndice C). O módulo do vetor posição $\vec{d}_{\hat{L},j}$ representa a distância entre o centroide do volume de controle $\hat{L}$ e o vértice avaliado j .

Com base na premissa estabelecida na equação (188), a avaliação de possíveis valores extremos locais em cada vértice j se dá, para a estratégia MLP, como:

$$\mathcal{G}_{j,\hat{L}}^{MLP} = \begin{cases} \min \left(1, \frac{\bar{S}_{w,\max} - \bar{S}_{w_{\hat{L}}}}{\tilde{S}_{w_j} - \bar{S}_{w_{\hat{L}}}} \right), & \text{se } \tilde{S}_{w_j} - \bar{S}_{w_{\hat{L}}} > 0 \\ \min \left(1, \frac{\bar{S}_{w,\min} - \bar{S}_{w_{\hat{L}}}}{\tilde{S}_{w_j} - \bar{S}_{w_{\hat{L}}}} \right), & \text{se } \tilde{S}_{w_j} - \bar{S}_{w_{\hat{L}}} < 0 \\ 1, & \text{se } \tilde{S}_{w_j} - \bar{S}_{w_{\hat{L}}} = 0 \end{cases} \quad (190)$$

O parâmetro $\mathcal{G}_{j,\hat{L}}^{MLP}$ representa uma função limitadora do tipo MLP para o vértice j pertencente ao volume de controle $\hat{L}$. É importante notar que a função limitadora definida em cada vértice j varia entre 0 e 1. Para $\mathcal{G}_{j,\hat{L}}^{MLP} = 0$ se tem uma aproximação de primeira ordem, usualmente obtida na representação de um choque de saturações a fim de garantir alta resolução sem oscilações espúrias. Para $\mathcal{G}_{j,\hat{L}}^{MLP} = 1$, obtido independente das razões na equação (190) serem maiores do que 1, a aproximação é de fato de alta ordem. Em geral, isso ocorre em regiões suaves do campo de solução. Adicionalmente, o limitador, válido de fato para o volume de controle $\hat{L}$, é obtido pela avaliação do menor valor de $\mathcal{G}_{j,\hat{L}}^{MLP}$ em torno de $\hat{L}$ ($\forall j \in \hat{L}$), de modo que:

$$\psi_{\hat{L}}^{MLP} = \min_{\forall j \in \hat{L}} \left(\mathcal{G}_{j,\hat{L}}^{MLP} \right) \quad (191)$$

Em todas as faces IJ do volume de controle $\hat{L}$, o valor atribuído à $\psi_{\hat{L}}^{MLP}$ é usado na extrapolação do tipo MUSCL de S_w , de modo, que:

$$\tilde{S}_{w_{IJ}} = \bar{S}_{w_{\hat{L}}} + \psi_{\hat{L}}^{MLP} \vec{\nabla} S_{w_{\hat{L}}} \cdot \vec{d}_{\hat{L},IJ} \quad (192)$$

onde $\vec{d}_{\hat{L},IJ}$ é o vetor cujo módulo representa a distância entre o centroide do volume de controle $\hat{L}$ e o ponto de quadratura na face IJ (ponto médio para aproximação de segunda ordem). A aproximação da equação (192) é, portanto, livre de oscilações, mesmo para gradientes acentuados em uma abordagem “multidimensional”, o que não necessariamente ocorre

com funções limitadoras convencionais (baseadas na avaliação apenas da face), como se vê no capítulo de aplicações.

Uma variante do limitador MLP, ainda voltado exclusivamente para limitação de aproximações de segunda ordem, foi proposta por Park e Kim (2012a). Nessa variante, a função proposta por Venkatakrisnan (1995), já apresentada na equação (177), é utilizada para produzir uma função limitadora também do tipo MLP, porém mais difusiva do que a definida na equação (190). Assim, em cada vértice j do volume de controle $\hat{L}$, a razão $\Delta_{\text{sup}}/\Delta_{\text{inf}}$ é usada, como (Venkatakrisnan, 1995):

$$\mathcal{G}_{j,\hat{L}}^{\text{MLP-vk}}\left(\varpi = \frac{\Delta_{\text{sup}}}{\Delta_{\text{inf}}}\right) = \frac{\varpi^2 + 2\varpi + \varepsilon}{\varpi^2 + \varpi + 2 + \varepsilon} \quad (193)$$

onde Δ_{inf} representa a diferença $\tilde{S}_{w_j} - \bar{S}_{w_{\hat{L}}}$ em cada vértice j . Da mesma forma, Δ_{sup} também representa uma diferença. No entanto, essa se dá entre a saturação média no volume de controle $\hat{L}$ e o máximo (ou mínimo) valor médio de saturação entre os atribuídos aos volumes de controle em torno do vértice j . Na equação (194) essa relação é melhor representada, por:

$$\Delta_{\text{sup}} = \begin{cases} \bar{S}_{w,\text{max}} - \bar{S}_{w_{\hat{L}}}, & \text{se } \tilde{S}_{w_j} - \bar{S}_{w_{\hat{L}}} > 0 \\ \bar{S}_{w,\text{min}} - \bar{S}_{w_{\hat{L}}}, & \text{se } \tilde{S}_{w_j} - \bar{S}_{w_{\hat{L}}} < 0 \end{cases} \quad (194)$$

O parâmetro ε representa um número pequeno, utilizado para evitar divisões por zero na equação (193). Venkatakrisnan (1995) e, recentemente, Park e Kim (2012a), usam a relação $\varepsilon^2 = \mathcal{K}(\Delta x)^3$ para definir essa constante, onde $\mathcal{K}$ é um parâmetro livre que pode variar de acordo com o problema. No presente texto assume-se $\mathcal{K} = 5$ em concordância com Park e Kim (2012a). O valor médio dentre as áreas (comprimento da aresta em 2-D) das faces do volume de controle avaliado é representado pelo parâmetro Δx (Park e Kim, 2012a). Os dois parâmetros são definidos de modo que em regiões suaves, $\Delta_{\text{sup}}, \Delta_{\text{inf}} \sim \Delta x$ e $\mathcal{G}_{j,\hat{L}}^{\text{MLP-vk}} = 1$ (Venkatakrisnan, 1995).

Após alguma manipulação algébrica, chega-se numa forma de representar a equação (193) frequentemente encontrada na literatura (Blazek, 2001; Mandal e Subramanian, 2008; Delis e Nikolos, 2012; Park e Kim, 2012a; Park e Kim, 2012b).

$$\mathcal{G}_{j,\hat{L}}^{\text{MLP-vk}} = \frac{1}{\Delta_{\text{inf}}} \left[\frac{(\Delta_{\text{sup}}^2 + \varepsilon^2)\Delta_{\text{inf}} + 2\Delta_{\text{inf}}^2\Delta_{\text{sup}}}{\Delta_{\text{sup}}^2 + 2\Delta_{\text{inf}}^2 + \Delta_{\text{sup}}\Delta_{\text{inf}} + \varepsilon^2} \right] \quad (195)$$

Novamente, a função limitadora válida para o volume de controle $\hat{L}$ é obtida com o mínimo valor dentre os calculado em cada vértice j , onde se obtém:

$$\psi_{\hat{L}}^{\text{MLP-vk}} = \min_{\forall j \in \hat{L}} \left(\mathcal{G}_{j,\hat{L}}^{\text{MLP-vk}} \right) \quad (196)$$

A equação (192) é, portanto, usada com a devida substituição. Na figura 30, os gráficos que relacionam a razão $\Delta_{\text{sup}}/\Delta_{\text{inf}}$ com o limitador obtido em cada vértice j , para o MLP “tradicional” e sua variante “vk” (Venkatakrishnan), são comparados.

Fica claro que para uma dada faixa de valores de $\Delta_{\text{sup}}/\Delta_{\text{inf}}$ (aproximadamente entre 0,5 e 2), se tem menores valores da função limitadora $\mathcal{G}_{j,\hat{L}}^{\text{MLP-vk}}$ do que da função tradicional $\mathcal{G}_{j,\hat{L}}^{\text{MLP}}$. Para $\Delta_{\text{sup}}/\Delta_{\text{inf}} > 2$ o inverso ocorre, tornando inclusive a variante “vk” mais compressiva, já que o valor de $\mathcal{G}_{j,\hat{L}}^{\text{MLP-vk}}$ chega a maximizar o valor do gradiente ($\mathcal{G}_{j,\hat{L}}^{\text{MLP-vk}} > 1$). Na região com razão $\Delta_{\text{sup}}/\Delta_{\text{inf}} < 0,5$, as duas estratégias de limitação tem praticamente o mesmo comportamento. Isso também ocorre para valores muito elevados de $\Delta_{\text{sup}}/\Delta_{\text{inf}}$, onde as duas curvas tendem a um ponto em comum. Naturalmente, isso se reflete no limitador válido para o volume de controle, $\psi_{\hat{L}}^{\text{MLP}}$ ou $\psi_{\hat{L}}^{\text{MLP-vk}}$, obtidos, respectivamente com as equações (191) e (196).

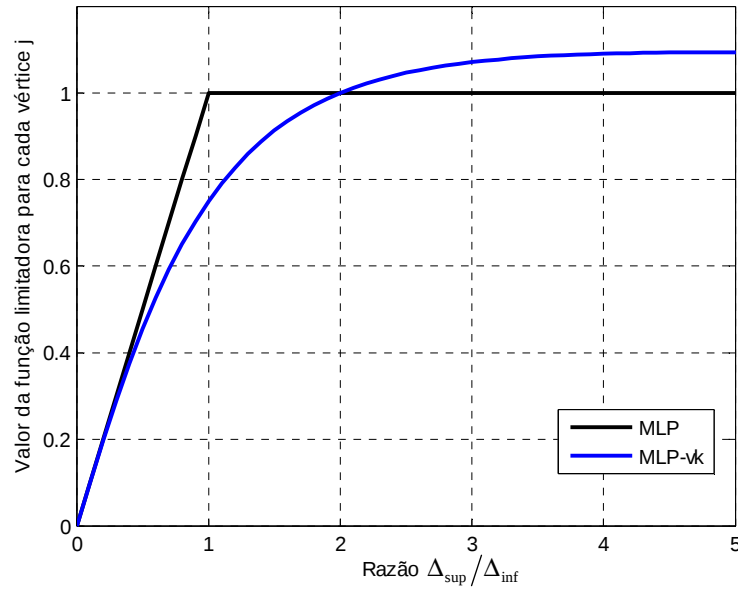


Figura 30. Comparação entre os gráficos obtidos em cada variante da estratégia MLP para aproximações de até segunda ordem. As duas curvas convergem para o valor unitário no eixo das ordenadas em valores “infinitos” de $\Delta_{\text{sup}}/\Delta_{\text{inf}}$.

Na figura 31, o algoritmo da estratégia de limitação MLP ou MLP-vk é apresentado. Cada volume de controle (VC) é avaliado, por meio de seus vértices j , onde se objetiva detectar algum valor extremo local. Caso o volume de controle seja identificado como “problemático” (Park e Kim, 2012a), a variável é reconstruída em cada face IJ (figura 29a) com a ação da função limitadora (MLP “convencional” ou MLP-vk). Em caso contrário (geralmente em regiões de suavidade no campo de solução), a variável é extrapolada sem a ação da função limitadora, ou com esta unitária, em todas as faces do volume de controle avaliado.

Para aproximações com ordem maior do que dois, condições adicionais são impostas para detecção de volumes de controle ditos “problemáticos”. O critério utilizado na equação (188), em muitos casos, omite a violação do Princípio do Máximo Discreto em aproximações com funções quadráticas, cúbicas, etc. (Park e Kim, 2014). Em aproximações com funções lineares (segunda ordem), a avaliação do valor projetado sobre o vértice j , a partir do volume

de controle $\hat{L}$, em relação aos valores médios atribuídos a sua vizinhança M_i (ver figura 29a) é suficiente. Nesse caso, a satisfação do Princípio do Máximo Discreto e consequentemente a condição MLP, definida na equação (188), é verificada apenas para o volume de controle avaliado (Park e Kim, 2012a; Park e Kim, 2014).

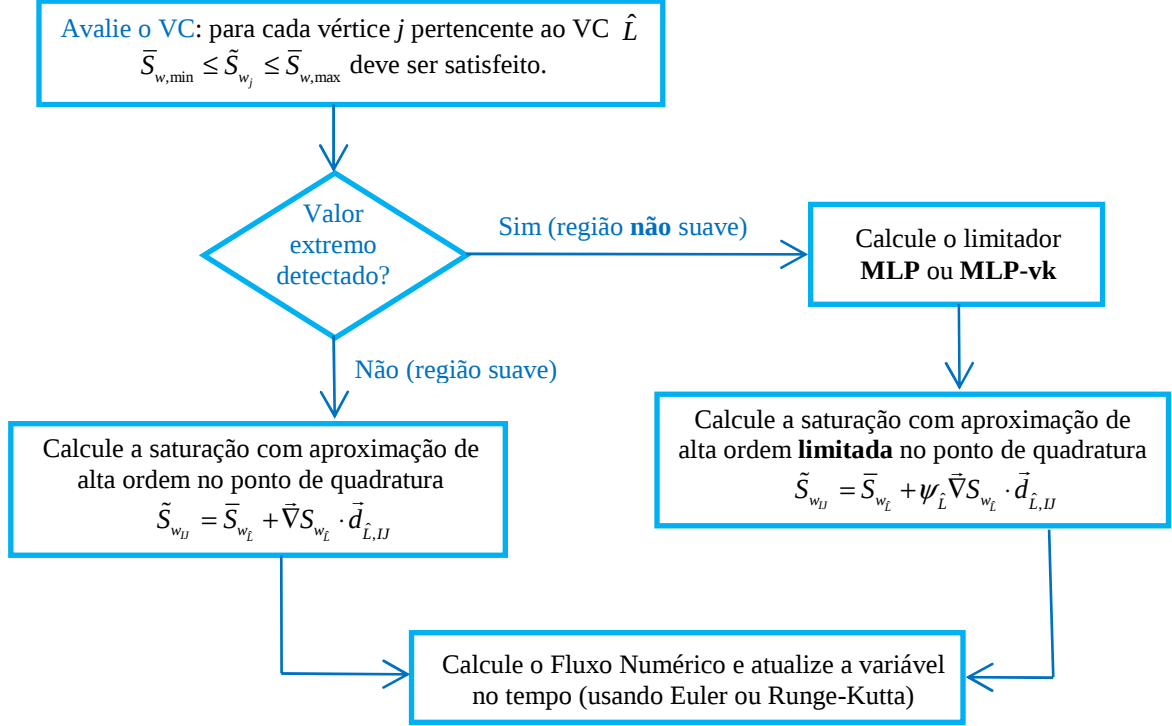


Figura 31. Algoritmo que representa a estratégia MLP e critérios de detecção de valores extremos para aproximações com polinômios de grau um.

Em aproximações de maior grau (terceira ordem ou maior), é necessário que as extrapolação no vértice j , a partir de todos os volumes de controle que constituem a vizinhança M_i sejam avaliadas em relação aos valores médios projetados, também atribuídos a essa vizinhança. A condição MLP é, portanto, estendida para todos os volumes de controle que compõe M_i (Park e Kim, 2014). Dessa forma, valores extremos “próximos” aos pontos de quadratura podem ser detectados. Esse critério adicional, nominado na literatura (Park e Kim, 2011; Park e Kim, 2012a; Park e Kim, 2014) como condição MLP aumentada ou *Augmented* MLP (A-MLP) é definido como segue:

$$\bar{S}_{w,\min} \leq \tilde{S}_{w_j,\min} \leq \tilde{S}_{w_j} \leq \tilde{S}_{w_j,\max} \leq \bar{S}_{w,\max} \quad (197)$$

onde $\tilde{S}_{w_j,\min}$ e $\tilde{S}_{w_j,\max}$ são, respectivamente, os valores mínimo e máximo dentre os projetados no vértice j , a partir da vizinhança M_i ($\forall j \in \hat{M}_i$), com a ordem de aproximação pretendida. O valor extrapolado no vértice j com ordem maior do que dois é definido, em uma forma mais simplificada, como segue (Park e Kim, 2012a; Park e Kim, 2014):

$$\tilde{S}_{w_j}(\vec{d}_{\hat{L},j}) = \bar{S}_{w_L} + \mathcal{P}_{\hat{L}}^{(1)}(\vec{d}_{\hat{L},j}) + \mathcal{P}_{\hat{L}}^{(2)}(\vec{d}_{\hat{L},j}) + \mathcal{P}_{\hat{L}}^{(3)}(\vec{d}_{\hat{L},j}) + \dots + \mathcal{P}_{\hat{L}}^{(\kappa)}(\vec{d}_{\hat{L},j}) \quad (198)$$

onde $\mathcal{P}_{\hat{L}}^{(1)}(\vec{d}_{\hat{L},j})$, $\mathcal{P}_{\hat{L}}^{(2)}(\vec{d}_{\hat{L},j})$, até $\mathcal{P}_{\hat{L}}^{(\kappa)}(\vec{d}_{\hat{L},j})$ representam a projeção, no vetor posição $\vec{d}_{\hat{L},j}$, do gradiente, matriz Hessiana e outros termos de ordem mais alta de S_w , respectivamente. O polinômio reconstrutor tem grau κ e proporciona uma aproximação com ordem $\kappa+1$ no erro de truncamento (ver Apêndice C). O sobrescrito $(1), (2), \dots, (\kappa)$ é uma referência ao grau do polinômio usado na reconstrução da variável. Para melhor entendimento, os termos polinômiais de grau um (aproximação de segunda ordem) e grau dois (aproximação de terceira ordem) são dados por (Park e Kim, 2012a; Park e Kim, 2014):

$$\mathcal{P}_{\hat{L}}^{(1)}(\vec{d}_{\hat{L},j}) = \vec{\nabla} S_{w_{\hat{L}}} \cdot \vec{d}_{\hat{L},j}; \quad \mathcal{P}_{\hat{L}}^{(2)}(\vec{d}_{\hat{L},j}) = \frac{1}{2} \vec{d}_{\hat{L},j}^T \tilde{H}_{w_{\hat{L}}} \cdot \vec{d}_{\hat{L},j} \quad (199)$$

onde $\tilde{H}_{w_{\hat{L}}}$ é a matriz Hessiana, definida no volume de controle $\hat{L}$ como:

$$\tilde{H}_{w_{\hat{L}}} = \begin{bmatrix} \frac{\partial^2 S_w}{\partial x^2} & \frac{\partial^2 S_w}{\partial x \partial y} \\ \frac{\partial^2 S_w}{\partial x \partial y} & \frac{\partial^2 S_w}{\partial y^2} \end{bmatrix}_{\hat{L}} \quad (200)$$

Outra diferença em relação às estratégias MLP voltadas para aproximação apenas de segunda ordem é que a função limitadora $\mathcal{B}_{j,\hat{L}}^{A-MLP}$, definida em cada vértice j para a condição MLP aumentada, assume um valor binário, 0 ou 1. Não há uma gama de valores de $\mathcal{B}_{j,\hat{L}}^{A-MLP}$ em função da razão $\Delta_{\text{sup}}/\Delta_{\text{inf}}$, como se vê no gráfico da figura 30. Os termos que produzem ordem maior do que dois (matriz Hessiana e termos com derivadas de maior ordem) são anulados ou não, a depender da satisfação da condição definida na equação (197). Dessa forma, tem-se:

$$\mathcal{B}_{j,\hat{L}}^{A-MLP} = \begin{cases} 1, & \text{se a equação (197) é satisfeita} \\ 0, & \text{se a equação (197) não é satisfeita} \end{cases} \quad (201)$$

Usando um procedimento análogo ao usado nas equações (191) e (196), a função limitadora aplicada a ordens maiores do que dois, $\Theta_{\hat{L}}$, válida para o volume de controle avaliado, é definida como:

$$\Theta_{\hat{L}} = \min_{\forall j \in \hat{L}} \left(\mathcal{B}_{j,\hat{L}}^{A-MLP} \right) \quad (202)$$

Adicionalmente, Park e Kim (2012a) propõem que as funções limitadoras, para ordens maiores do que dois, atuem de forma hierárquica. A extrapolação da variável sobre um ponto de quadratura q_1 , por exemplo, é dada por:

$$\tilde{S}_{w_{IJ},q_1}(\vec{d}_{\hat{L},q_1}) = \bar{S}_{w_{\hat{L}}} + \psi_{\hat{L}}^{MLP} \mathcal{P}_{\hat{L}}^{(1)}(\vec{d}_{\hat{L},q_1}) + \Theta_{\hat{L}}^{(2)} \left[\mathcal{P}_{\hat{L}}^{(2)}(\vec{d}_{\hat{L},q_1}) + \Theta_{\hat{L}}^{(3)} \mathcal{P}_{\hat{L}}^{(3)}(\vec{d}_{\hat{L},q_1}) \right] \quad (203)$$

É importante notar que a função limitadora que atua no termo de grau um, proporcionando aproximação de segunda ordem ($\psi_{\hat{L}}^{MLP}$ ou $\psi_{\hat{L}}^{MLP-vk}$), é diferente das funções limitadoras que atuam nos termos com grau maior ou igual a dois $\Theta_{\hat{L}}^{(2)}, \dots, \Theta_{\hat{L}}^{(\kappa)}$. A forma hierárquica proposta por Park e Kim (2012a) faz com que os termos de grau três ou maior sejam desconsiderados se a avaliação de $\Theta_{\hat{L}}^{(2)}$ indicar violação da condição MLP aumentada para qualquer vértice j do volume de controle $\hat{L}$. Por fim, Park e Kim (2012a) também propõem dois critérios adicionais, recomendados para detecção de valores extremos em reconstruções com grau maior do que dois, $\mathcal{P}_{\hat{L}}^{(\kappa>2)}$.

No primeiro critério, a equação (198), que extrapola a variável até o vértice j com a ordem desejada é decomposta nas partes constante, linear e de maior ordem, como:

$$\tilde{S}_{w_j}(\vec{d}_{\hat{L},j}) = \underbrace{\bar{S}_{w_{\hat{L}}}}_{\text{Constante}} + \underbrace{\mathcal{P}_{\hat{L}}^{(1)}(\vec{d}_{\hat{L},j})}_{\text{Linear}} + \underbrace{\mathcal{P}_{\hat{L}}^{(2)}(\vec{d}_{\hat{L},j}) + \mathcal{P}_{\hat{L}}^{(3)}(\vec{d}_{\hat{L},j}) + \dots + \mathcal{P}_{\hat{L}}^{(\kappa)}(\vec{d}_{\hat{L},j})}_{\text{Maior ordem}} \quad (204)$$

A equação (204) pode ser convenientemente escrita de modo mais compacto, por:

$$\tilde{S}_{w_j}(\vec{d}_{\hat{L},j}) = \bar{S}_{w_{\hat{L}}} + \mathcal{L}(\vec{d}_{\hat{L},j}) + \mathcal{A}(\vec{d}_{\hat{L},j}) \quad (205)$$

onde $\mathcal{L}(\vec{d}_{\hat{L},j})$ e $\mathcal{A}(\vec{d}_{\hat{L},j})$ representam, respectivamente, as partes linear e de ordem mais alta. Caso a condição MLP aumentada seja violada em qualquer vértice do volume de controle avaliado, o seguinte critério passa a ser avaliado em cada vértice j .

$$\mathcal{B}_{j,\hat{L}}^{A-MLP} = 0, \begin{cases} \text{se } \tilde{S}_{w_j}(\vec{d}_{\hat{L},j}) > \bar{S}_{w_{\min}} \text{ e } \mathcal{L}(\vec{d}_{\hat{L},j}) > 0 \text{ e } \mathcal{A}(\vec{d}_{\hat{L},j}) < 0 \text{ (Máx. local)} \\ \text{ou} \\ \text{se } \tilde{S}_{w_j}(\vec{d}_{\hat{L},j}) < \bar{S}_{w_{\max}} \text{ e } \mathcal{L}(\vec{d}_{\hat{L},j}) < 0 \text{ e } \mathcal{A}(\vec{d}_{\hat{L},j}) > 0 \text{ (Mín. local)} \end{cases} \quad (206)$$

Caso uma das alternativas na equação (206) seja confirmada, significa que há um valor extremo local (máximo ou mínimo) próximo ao vértice avaliado. O limitador para esse vértice é, portanto, ativado, $\mathcal{B}_{j,\hat{L}}^{A-MLP} = 0$.

O segundo critério para $\mathcal{P}_{\hat{L}}^{(\kappa>2)}$ visa evitar que a função limitadora seja acionada, em um dado vértice, em regiões suaves do campo de solução. Dessa forma, a relação que segue deve ser satisfeita para cada vértice j , desativando a função limitadora, i.e., $\mathcal{B}_{j,\hat{L}}^{A-MLP} = 1$, mesmo que o critério da equação (206) seja confirmado (Park e Kim, 2012a).

$$\left| \frac{\tilde{S}_{w_j} - \bar{S}_{w_{\hat{L}}}}{\bar{S}_{w_{\hat{L}}}} \right| \leq 0.001 \quad (207)$$

Na figura 32, o algoritmo da estratégia MLP para ordens maiores do que dois é apresentado.

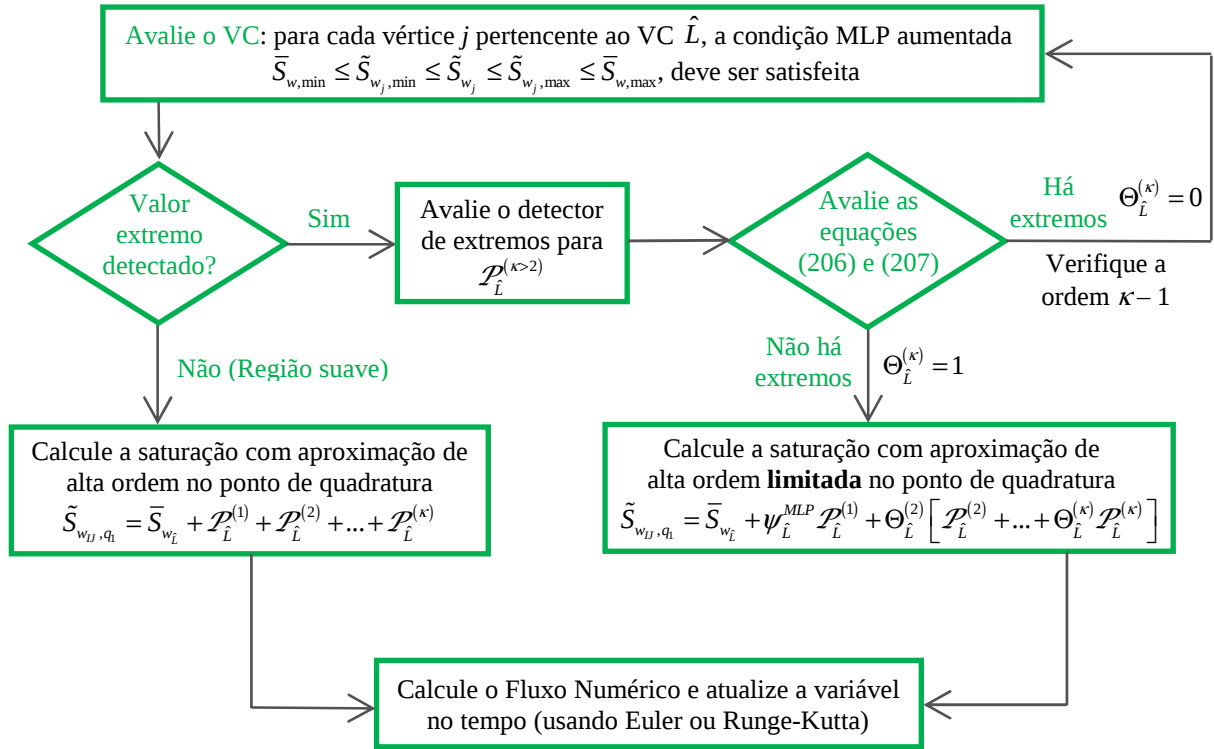


Figura 32. Algoritmo que representa a estratégia MLP aumentada e critérios de detecção de valores extremos para aproximações com polinômios de grau maior do que dois.

3.4.5. Fluxo Numérico e Resolvedores Aproximados de Riemann

No contexto do Método de Volumes Finitos (e Diferenças Finitas), algumas das estratégias mais populares para a discretização dos termos advectivos da equação de transporte são aquelas baseadas no método de Godunov e os esquemas numéricos ditos centrais. Esses esquemas são caracterizados, respectivamente, por fluxos numéricos com ponderação a montante, também chamados de fluxo do tipo *Upwind* (van Leer, 1979; Roe, 1981; Steger e Warming, 1981) e aqueles do tipo *Local Lax Friedrichs* (LLF) com adição de dissipação numérica (Kurganov e Tadmor, 2000; Kurganov *et al.*, 2001). Enquanto nos esquemas numéricos centrais, a velocidade de propagação da perturbação não exerce influência explícita sobre a discretização, devido à simetria aparente do estêncil com respeito ao sinal da velocidade de propagação, nos Métodos de Ponderação à Montante (*Upwind*), a discretização é feita seguindo a orientação da malha e direcionada de acordo com o sinal da velocidade de propagação da perturbação (Hirsch, 1992). Nos dois casos, dois estados são avaliados. Esses são definidos a esquerda e a direita, como se vê na figura 21 (seção 3.4.4) para aproximações de primeira à quarta ordem em uma representação unidimensional. O fluxo numérico $\tilde{\mathcal{F}}_{w_{IJ}}$ é então calculado nas interfaces *IJ* dos volumes de controle, onde ocorre a descontinuidade na variável, de acordo com a estratégia e ordem de aproximação adotados.

Para dar uma visão mais geral de como o fluxo numérico é definido no presente texto, uma aproximação de primeira ordem é tomada como referência. Nas aproximações de baixa resolução, ainda utilizada na maioria dos simuladores comerciais voltados para a simulação de escoamentos em reservatórios de petróleo (Lamine e Edwards, 2010), a variável primária é constante em cada volume de controle, como ilustrado na figura 21a. Nesses termos, um es-

queima numérico do tipo *Upwind* é preferencialmente empregado na solução da equação (148). Esse Resolvedor Aproximado de Riemann, também conhecido como Fluxo de Roe (Leveque, 1992) é dado como segue para a ordem de aproximação mencionada:

$$\vec{\mathcal{F}}_{w_{IJ}}^{Roe} \cdot \vec{N}_{IJ} = \begin{cases} \vec{\mathcal{F}}_{w_{IJ}}(\bar{S}_{w_L}) \cdot \vec{N}_{IJ}, & \text{se } \alpha_{IJ} \geq 0 \\ \vec{\mathcal{F}}_{w_{IJ}}(\bar{S}_{w_R}) \cdot \vec{N}_{IJ}, & \text{se } \alpha_{IJ} < 0 \end{cases} \quad (208)$$

O parâmetro α_{IJ} , que determina a ponderação no referido fluxo, é a velocidade característica, definida em um contexto unidimensional na equação (26). No presente caso, α_{IJ} é calculada para a face avaliada como segue (Leveque, 1992; Durlofsky, 1993; Helmig, 1997):

$$\alpha_{IJ} = \frac{\partial \vec{\mathcal{F}}_{w_{IJ}}(\bar{S}_w)}{\partial S_w} \cdot \vec{N}_{IJ} \quad (209)$$

Quando necessário, i.e., para correção de uma possível violação da entropia, um fluxo numérico do tipo *Local Lax-Friedrichs* (LLF) é utilizado como segue (Leveque, 1992):

$$\vec{\mathcal{F}}_{w_{IJ}}^{LLF} \cdot \vec{N}_{IJ} = \frac{1}{2} \left[\left(\vec{\mathcal{F}}_{w_{IJ}}(\bar{S}_{w_L}) + \vec{\mathcal{F}}_{w_{IJ}}(\bar{S}_{w_R}) \right) \cdot \vec{N}_{IJ} - \max |\alpha_{IJ}| (\bar{S}_{w_R} - \bar{S}_{w_L}) \right] \quad (210)$$

onde o termo $\max |\alpha_{IJ}| (\bar{S}_{w_R} - \bar{S}_{w_L})$ representa a dissipação numérica, característica de esquemas numéricos centrais (Leveque, 1992).

Tradicionalmente, a correção de entropia, proposta por Shu e Osher (1989), é empregada no modelo de Buckley-Leverett (Lamine, 2009). Nessa estratégia o sinal da velocidade característica α_{IJ} é avaliado nos estados à esquerda e à direita de cada face IJ avaliada. Nas figuras 33a a 33c são ilustradas inclinações (derivadas) tangentes a pontos correspondentes aos dois estados calculados para uma face genérica em um modelo unidimensional.

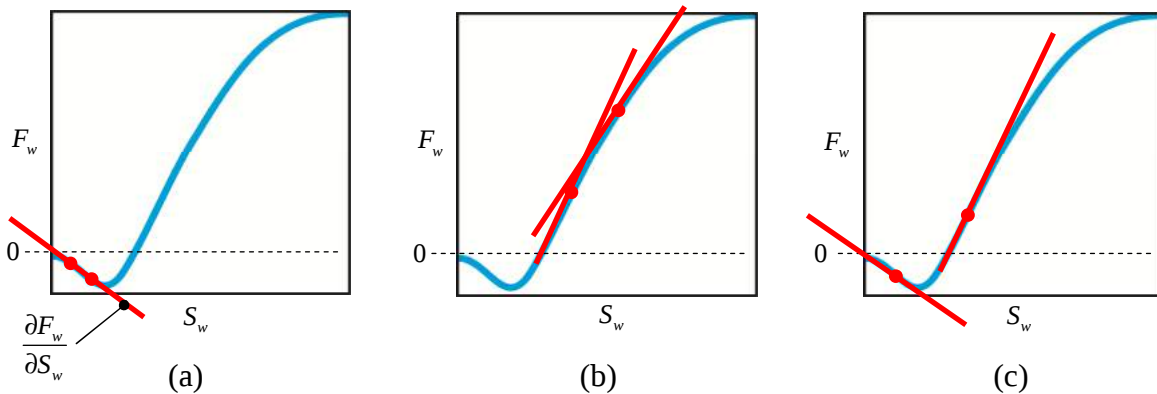


Figura 33. Curvas de fluxo em modelo 1-D com gravidade, onde $F_w = f_w v - f_w \lambda_o K (\rho_w - \rho_o) g$ e varia com S_w . Estados à esquerda e direita (pontos vermelhos) são indicados: (a) com estados à direita do ponto sônico; (b) com estados à esquerda do ponto sônico; (c) com estados em à esquerda e à direita do ponto sônico.

O comportamento do fluxo F_w (definido com velocidade total unitária) em função da saturação de água se dá, nesse caso, para um modelo com gravidade (Lamine, 2009), o qual se

caracteriza pela presença de um ponto de estagnação ou sônico, i.e., onde ocorre uma mudança de sinal na derivada desse fluxo (ver seção 2.3).

Enquanto os dois pontos, correspondentes aos dois estados, estão à esquerda (figura 33a) ou à direita (figura 33b) do chamado ponto sônico, a solução numérica se dá em concordância com o processo físico esperado, satisfazendo o princípio da entropia (Leveque, 1992; Lamine, 2009). Na figura 33c, os estados para a face avaliada são observados em diferentes lados do ponto sônico. Isso caracteriza uma mudança de sinal nos fluxos possíveis para a face avaliada, o que pode ocasionar violação do princípio da entropia na solução produzida (Helmig, 1997; Lamine, 2009). Para essa situação, o fluxo do tipo LLF é usado, adicionando mais difusão numérica, no sentido de corrigir a violação da entropia como já mencionado.

Nas figuras 34a a 34c, na ausência de um ponto sônico (gravidade desconsiderada), a correção de entropia proposta por Shu e Osher (1989) não atua. No entanto, a violação da entropia não ocorre apenas quando há ponto sônico na curva que representa o fluxo (Leveque, 1992; Helmig, 1997; Serna, 2009).

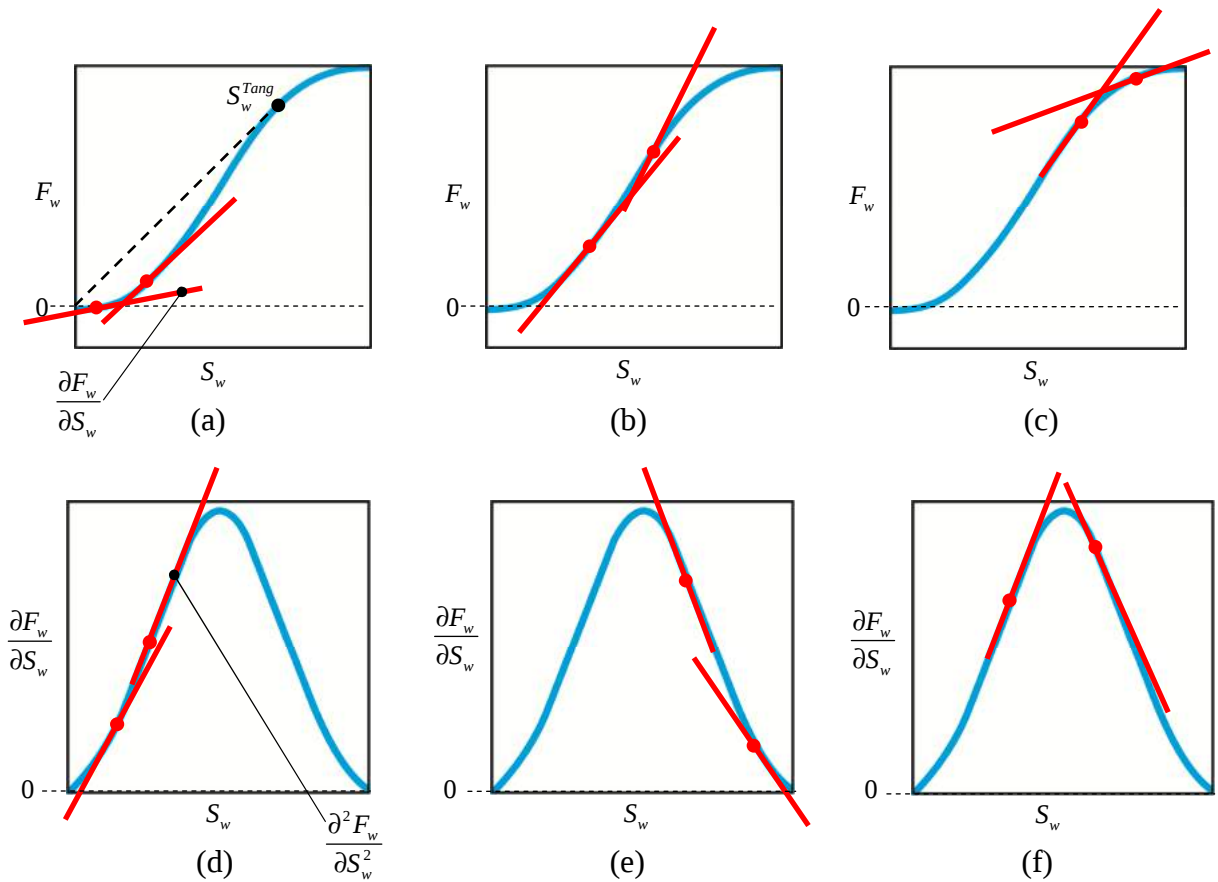


Figura 34. Curvas de fluxo sem gravidade e sua derivada em função de S_w , onde $F_w = f_w v$: (a) com indicação dos estados à esquerda e à direita (pontos vermelhos) e ponto de tangência onde ocorre o choque; (b) e (c) indicação dos estados à esquerda e à direita (pontos vermelhos); (d), (e) e (f) velocidades características positivas.

Avaliando a curva da derivada do fluxo com relação a saturação de água, ilustrada nas figuras 34d a 34f, para um modelo sem gravidade, fica claro que o ponto de inflexão nessas figuras representa a mudança de concavidade nas figuras 34a a 34c, característico de fluxos não convexos (Leveque, 1992). Para esses casos, nas velocidades características calculadas à esquerda do ponto de inflexão (ver figura 34d), se tem como resultado saturações maiores proporcionando maiores velocidades características, assim como menores saturações proporcionam menores velocidades características. Isso identifica uma região onde um choque, ou frente de saturação é produzida. Por outro lado, quando os estados (pontos vermelhos) são

definidos a direita do ponto de inflexão (ver figura 34e), valores elevados de saturação implicam em baixas velocidades características, assim como menores valores de saturação proporcionam velocidades características maiores. Essa região na referida curva, caracteriza uma zona de rarefação (Leveque, 1992). Segundo Helmig (1997), quando os estados são definidos à esquerda e à direita do ponto de inflexão, como ilustrado na figura 34f, a entropia pode ser violada. O autor também destaca que se a saturação de água utilizada como argumento em um dos estados for menor ou igual do que o valor de saturação correspondente ao ponto de tangência S_w^{Tang} na figura 34a, a entropia é satisfeita. No entanto, a definição desse ponto se dá com um procedimento não linear, seguindo o Método de Welge (1952, *apud* Fanchi, 2001).

No contexto de magneto-dinâmica, Serna (2009) propôs uma correção de entropia com aplicabilidade em modelos com e sem gravidade. A autora “invoca” o fluxo do tipo LLF para mudança de sinal na primeira deriva, calculada nos dois estados da face avaliada, tal como Shu e Osher (1989). Uma característica adicional dessa estratégia, leva em conta a avaliação de mudança de sinal na segunda derivada (ver figura 34f), igualmente obtida para cada estado.

O fluxo numérico proposto por Serna (2009) e adaptado ao contexto de escoamento em reservatórios de petróleo por Souza *et al.* (2015a), é definido na equação (211). Os fluxos numéricos de Roe (*Upwind*) e LLF são dados, respectivamente, pelas equações (208) e (210).

$$\vec{\mathcal{F}}_{w_{IJ}} \cdot \vec{N}_{IJ} = \begin{cases} \vec{\mathcal{F}}_{w_{IJ}}^{LLF} \cdot \vec{N}_{IJ}, & \text{se } \begin{cases} \frac{\partial f_w}{\partial S_w}(\bar{S}_{w_L}) \frac{\partial f_w}{\partial S_w}(\bar{S}_{w_R}) < 0 \\ \text{ou} \\ \frac{\partial^2 f_w}{\partial S_w^2}(\bar{S}_{w_L}) \frac{\partial^2 f_w}{\partial S_w^2}(\bar{S}_{w_R}) < 0 \end{cases} \\ \vec{\mathcal{F}}_{w_{IJ}}^{Roe} \cdot \vec{N}_{IJ}, & \text{caso contrário} \end{cases} \quad (211)$$

Nas aproximações de alta ordem do tipo MUSCL, a variável primária é reconstruída como descrito na seção 3.4.4 para que se tenha uma melhor representação do campo aproximado. Após a etapa de reconstrução e tomando a figura 35 como referência, a variável primária S_w , ou o fluxo fracionário $f_w(S_w)$, podem ser definidos em cada ponto de quadratura.

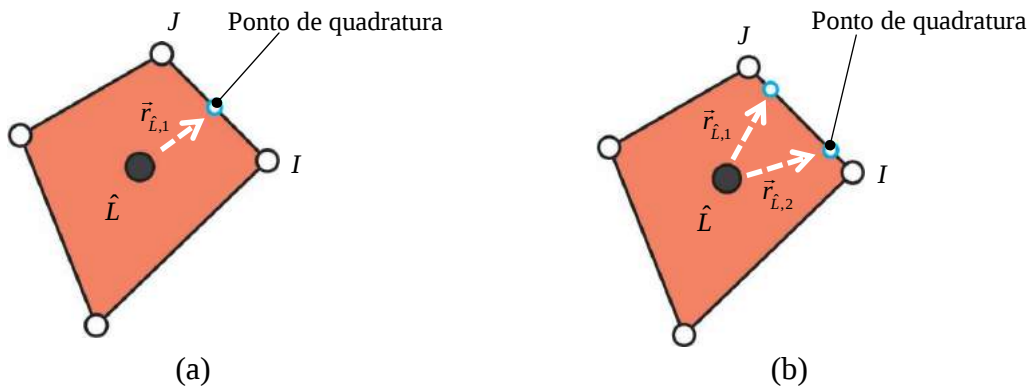


Figura 35. Pontos de quadratura na face genérica IJ : (a) para aproximação de segunda ordem; (b) para aproximações de terceira e quarta ordem.

A reconstrução da variável é, portanto, dada por (Pletcher *et al.*, 1995; Clain *et al.*, 2011; Ivan e Groth, 2011):

$$\tilde{S}_{w_{IJ},i}(\vec{d}_{\hat{L},i}) = \bar{S}_{w_{\hat{L}}} + \sum_{l=1}^{\kappa} \frac{1}{l!} \left(\Delta x_i \frac{\partial}{\partial x} + \Delta y_i \frac{\partial}{\partial y} \right)^l S_w(\vec{d}_{\hat{L},i}) \quad (212)$$

onde κ é o grau do polinômio reconstrutor, $\vec{d}_{\hat{L},i}$ é o vetor posição em $\mathfrak{R}^2$ que define a distância entre o centroide do volume de controle $\hat{L}$ e o ponto de quadratura i (ver figura 35), com $i = 1, 2, \dots, \mathcal{N}_q$ (número de pontos de quadratura por face).

As diferenças Δx_i e Δy_i são os componentes do vetor $\vec{d}_{\hat{L},i}$. Na aproximação de segunda ordem, apenas um ponto de quadratura é considerado. Já nas aproximações de terceira e quarta ordem, dois pontos de quadratura são considerados por superfície de controle (Goosh, 2002). A avaliação proposta na equação (211) é, portanto, feita em cada ponto de quadratura (Caraeni e Hill, 2010; Clain *et al.*, 2013). Assim, uma vez que se tem a variável reconstruída em cada um desses pontos, o fluxo numérico na face IJ é obtido como segue:

$$\vec{\mathcal{F}}_{w_{IJ}} \cdot \vec{N}_{IJ} = \begin{cases} \sum_{i=1}^{\mathcal{N}_q} \omega_i \vec{\mathcal{F}}_{w_i}^{LLF}(\tilde{S}_{w_{\hat{L}},i}, \tilde{S}_{w_{\hat{R}},i}) \cdot \vec{N}_{IJ}, & \text{se } \begin{cases} \frac{\partial f_w}{\partial S_w}(\tilde{S}_{w_{\hat{L}},i}) \frac{\partial f_w}{\partial S_w}(\tilde{S}_{w_{\hat{R}},i}) < 0 \\ \text{ou} \\ \frac{\partial^2 f_w}{\partial S_w^2}(\tilde{S}_{w_{\hat{L}},i}) \frac{\partial^2 f_w}{\partial S_w^2}(\tilde{S}_{w_{\hat{R}},i}) < 0 \end{cases} \\ \sum_{i=1}^{\mathcal{N}_q} \omega_i \vec{\mathcal{F}}_{w_i}^{Roe}(\tilde{S}_{w_{\hat{L}},i}, \tilde{S}_{w_{\hat{R}},i}) \cdot \vec{N}_{IJ}, & \text{caso contrário} \end{cases} \quad (213)$$

onde ω_i é o peso de Gauss associado a cada ponto de quadratura utilizado para a integração numérica de Gauss na face IJ (Goosh, 2002). Para uma integração de segunda ordem, $\omega_1 = 1$ e $\tilde{S}_{w_{\hat{L}},i} = \tilde{S}_{w_{\hat{L}}}$ (respectivamente, $\tilde{S}_{w_{\hat{R}},i} = \tilde{S}_{w_{\hat{R}}}$). Nas integrais de terceira e quarta ordem, tem-se $\omega_1 = \omega_2 = 0,5$ (Goosh e van Altena, 2002; Caraeni e Hill, 2010).

3.4.6. Formulações Verdadeiramente Multidimensionais

Os fluxos numéricos em equações hiperbólicas discretizadas são convencionalmente definidos com ponderação da variável, utilizando apenas um dos volumes de controle, determinado pela direção do escoamento, que compartilham a face IJ avaliada (Aziz e Settari, 1979; Leveque, 1992; Fanchi, 2001; Chen *et al.*, 2006; Islan *et al.*, 2010). Alternativamente, os dois volumes de controle também são utilizados nos chamados esquemas numéricos centrados (ver seção 3.4.5). Essa forma simples de ponderação é predominantemente utilizada nos esquemas numéricos, independente da orientação do escoamento ou grau de distorção da malha, como se vê na figura 36.

Mesmo para aproximações de alta ordem, apesar da estratégia de reconstrução da variável ter uma natureza multidimensional, devido à quantidade de volumes de controle (vizinhança) utilizada na etapa de reconstrução (ver seção 3.4.4), a variável é extrapolada, com a resolução desejada, até o ponto de quadratura na face IJ , a partir de um dos volumes de controle que constitui sua adjacência (Edwards e Rogers, 1998; Edwards, 2006; Chueh *et al.*, 2010; Kou e Sun, 2010). Essa forma unidimensional de aproximação produz resultados passíveis à orientação da malha utilizada, especialmente quando essa é estruturada (Levy *et al.*, 1989). Em áreas como aerodinâmica, esse tipo de influência tem sido investigado e algumas

estratégias numéricas foram propostas nos trabalhos de Levy *et al.* (1989), Powell e van Leer (1989) e Powell *et al.* (1993).

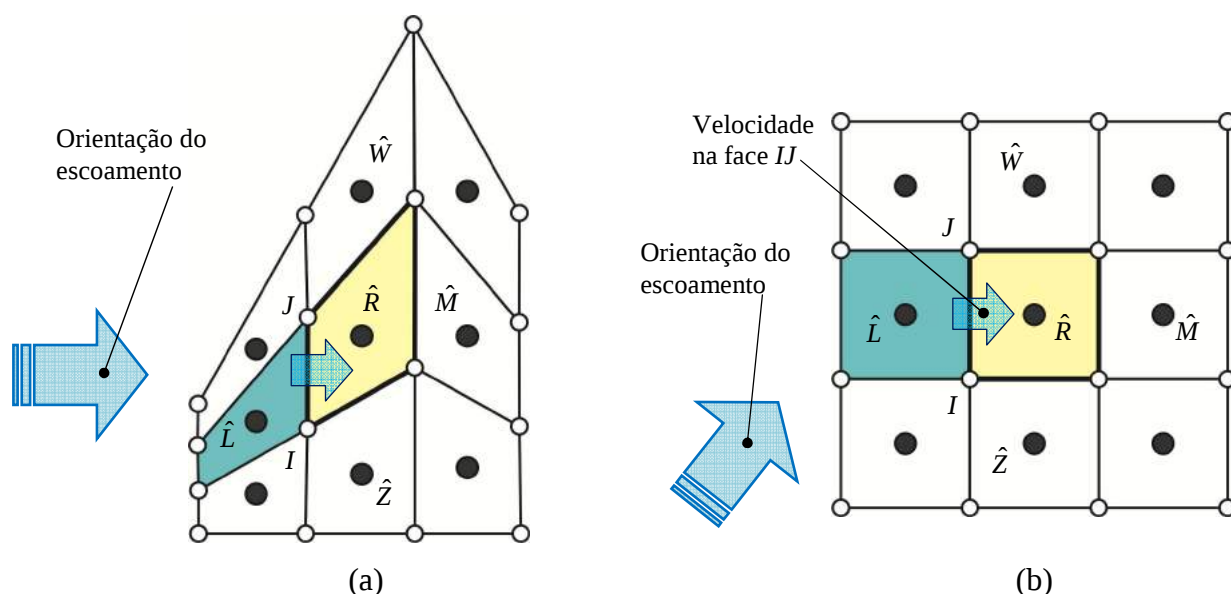


Figura 36. Casos onde a orientação da malha em relação à orientação do escoamento (onda) pode influenciar no valor de saturação de água obtido para o volume de controle $\hat{R}$: (a) malha distorcida e orientação do escoamento na horizontal; (b) malha ortogonal e orientação do escoamento inclinada.

No contexto de Simulação de Escoamentos em Reservatórios de Petróleo, o chamado Efeito de Orientação de Malha ou *Grid Orientation Effect* (GOE) foi observado pela primeira vez por Todd *et al.* (1972) em configurações de um quarto de cinco poços, tradicionalmente utilizados na literatura como exemplos de verificação para esquemas numéricos. Segundo os autores, diferentes resultados foram observados quando malhas cartesianas, com orientações paralela e diagonal à orientação do escoamento, foram empregadas. Os autores também relacionaram a influência da malha adotada sobre as soluções obtidas com a razão entre as mobilidades das fases M . Segundo Brand *et al.* (1991), para razões de mobilidade adversas ($M > 1$), instabilidades, inerentes à equação de transporte que está sendo resolvida, tornam o GOE mais pronunciado. Essas instabilidades não desaparecem com o refinamento da malha, tornando a solução não convergente (Yanosik e McCracken, 1979; Ko e Au, 1979; Bajor e Cormack, 1989; Brand *et al.*, 1991). Como consequência disso, soluções numéricas pouco confiáveis, mesmo para problemas muito simples, são produzidas (Brand *et al.*, 1991). Ko e Au (1979) se referem às instabilidades na frente de saturação, próximo ao poço injetor, como dedos numéricos (*numerical fingers*) que ocorrem para razões de mobilidade adversas. Os autores ressaltam que esses distúrbios numéricos produzem um tipo de heterogeneidade em meios homogêneos, gerando perfis de saturação em forma de “bala” (*bullet-like*) ou “chifre” (*horn-like*). Por outro lado, razões de mobilidade favoráveis ($M \leq 1$) ou unitária não deflagram essas instabilidades. No entanto, a influência de malhas cartesianas paralelas ou diagonais sobre as soluções obtidas permanece de forma moderada (Yanosik e McCracken, 1979; Brand *et al.*, 1991), tal como ocorre nos problemas de aerodinâmica, onde não há instabilidade oriunda de razões entre mobilidades.

A relação entre a difusão numérica da equação discreta e as instabilidades físicas que deflagram os chamados *numerical fingers* foi inicialmente avaliada, para escoamentos imiscíveis, por Brand *et al.* (1991). Os autores fizeram uma análise de estabilidade linear das equações de fluxo e transporte e, diferente de outras avaliações desse gênero (Chuoque *et al.*, 1959; Perinne, 1961; Hickernell e Yortsos, 1986; Yortsos e Huang, 1986; Chikhliwala e Yortsos,

1988), incluíram os efeitos do erro de truncamento. Dessa forma, pôde-se avaliar se pequenos erros, inerentes à equação na forma discreta, crescem e, quão rápido é esse crescimento para alguns parâmetros físicos e geométricos adotados na simulação.

Além da razão de mobilidade, que, como já dito, deflagra a instabilidade e acentua dramaticamente o GOE, fatores como a estratégia de aproximação das mobilidades nas superfícies de controle e as relações constitutivas consideradas na formulação do problema também podem favorecer ao crescimento das instabilidades. Nos escoamentos do tipo pistão (*piston-like*), nos quais há uma menor zona de transição entre as saturações das fases molhante e não molhante, o GOE é mais pronunciado (Yanosik e McCracken, 1979; Ko e Au, 1979; Bajor e Cormack, 1989). No que se refere à ordem de aproximação espacial adotada, Ko *et al.* (1981 *apud* Brand *et al.*, 1991) sugerem que, em geral, esquemas numéricos de alta ordem produzem tanto GOE quanto os de primeira ordem. No entanto, Brand *et al.* (1991) também apontam estudos onde aproximações de alta ordem reduzem a influência da orientação da malha em certos casos (Todd *et al.*, 1972; Frauenthal *et al.*, 1985; Taggart e Pinczewski, 1987). A densidade da malha também é citada por Brand *et al.* (1991) como um fator de extrema relevância no crescimento das instabilidades, uma vez que o erro de truncamento é inversamente proporcional ao número de volumes de controle (ou número de subdivisões no caso de Diferenças Finitas) que constitui a malha. Quão mais refinada a malha, mais severo é o GOE (Christie, 1989 *apud* Brand *et al.*, 1991). Ainda de acordo com Brand *et al.* (1991), a existência de uma difusão de natureza física, como efeito de capilaridade, praticamente não interfere no GOE, exceto em malhas refinadas ou onde os valores de velocidades são muito baixos.

Muitas estratégias têm sido propostas na literatura na tentativa de solucionar os problemas causados pelas instabilidades ou mesmo pelo GOE (Yanosik e McCracken, 1979; Ko e Au, 1979; Bajor e Cormack, 1989; Bourgeat e Koebbe, 1995; Chen *et al.*, 1991; Maliska e Czesnat, 2003). Na seção a seguir, algumas dessas estratégias são brevemente comentadas. Os esquemas numéricos ditos Verdadeiramente Multidimensionais ou *Truly Multidimensional* (TM), também chamadas de Orientados pelo Escoamento (Edwards, 2003; Hurtado *et al.*, 2007; Lamine e Edwards, 2010; Kozdon *et al.*, 2011; Kozdon *et al.*, 2012; Eymard *et al.*, 2011), que constituem a base da estratégia proposta no presente trabalho, também são apresentados nas principais variantes encontradas na literatura.

Estado da Arte para Formulações Verdadeiramente Multidimensionais (TM)

A multidimensionalidade das soluções e consequente minimização do GOE para o contexto de escoamento multifásico em meios porosos tem sido almejada desde as observações feitas por Todd *et al.* (1972). O conceito de solução Verdadeiramente Multidimensional (TM) não deve ser confundido com o conceito de Limitação Multidimensional, discutido na seção 3.4.4. No presente caso, há uma busca por se produzir soluções numéricas inteiramente comprometidas com a física do problema simulado, sem que nenhum tipo de viés seja produzido pela orientação da malha empregada. Sendo a discretização do domínio um procedimento inerente à maioria dos métodos numéricos (exceto os ditos *meshless*, onde a discretização convencional não é praticada), o desafio consiste na minimização do GOE para o uso de malhas quaisquer. Além das intervenções propostas por Yanosik e McCracken (1979) e Ko e Au (1979) na equação que define os fluxos de Darcy, brevemente discutidas na seção 3.3.3, trabalhos envolvendo diferentes técnicas para o tratamento da mobilidade total também são encontradas na literatura (Vinsome e Au, 1979; Brand *et al.*, 1991; Hurtado, 2005). Nessas técnicas, ganhos substanciais na redução do GOE são observados. Nos últimos vinte anos, estratégias de caráter multidimensional têm sido aplicadas à equação de transporte nas formulações segregadas. Nesses casos, os fluxos numéricos nas superfícies de controle têm sido ponderados de acordo com a orientação do escoamento, observada nas adjacências da face avaliada. Essas

estratégias são comumente denominadas na literatura como *Mass Weighted*, *Flow Oriented* ou *Truly Multidimensional*, (Schneider e Raw, 1986; Tran *et al.*, 2005; Lamine e Edwards, 2010).

As primeiras aplicações de formulações ditas TM no contexto do escoamento bifásico de água e óleo em reservatórios de petróleo foram feitas por Edwards (2003), restritas a malhas estruturadas e com aproximação de primeira ordem. Com base na proposta de Colella (1990), essa estratégia foi generalizada para malhas quaisquer por Lamine e Edwards (2010) e estendida para aproximações de alta ordem por Lamine e Edwards (2013). Hurtado *et al.* (2007) adaptaram as ideias de Schneider e Raw (1986), originalmente propostas no contexto da dinâmica dos fluidos computacional, e propuseram uma formulação TM com aproximação de primeira ordem e aplicável à malhas quaisquer. Em ambos os trabalhos, formulações *node-centered* foram empregadas.

Enquanto na adaptação de Edwards (2003), os fluxos multidimensionais nas superfícies de controle são escritos apenas em função de parâmetros conhecidos, na estratégia adotada por Hurtado *et al.* (2007), a composição multidimensional que define cada fluxo é função de um valor conhecido, associado ao volume de controle adjacente, bem como de um outro fluxo desconhecido. Isso implica na necessidade de se resolver um sistema algébrico local, formado por todas as aproximações na região de interação avaliada. Esse sistema é formado por matrizes com dimensão igual ao número de faces que concorrem para cada vértice da malha considerada, como ilustrado na figura 37a.

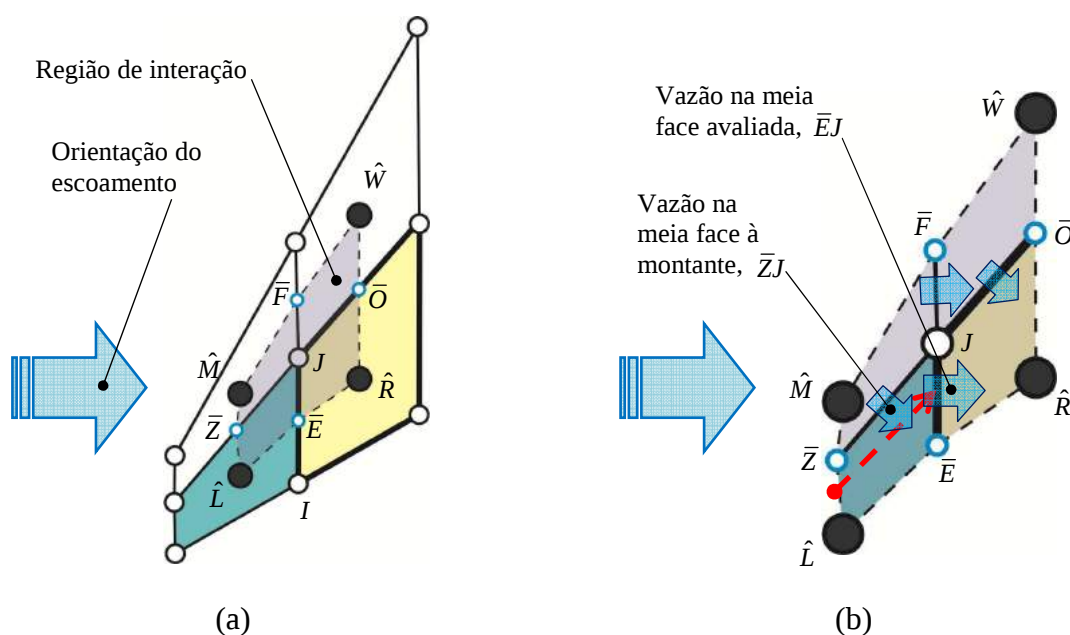


Figura 37. Definição de uma região de interação associada ao vértice J : (a) visão geral da região de interação em relação à malha; (b) indicação dos pontos auxiliares e entrada de massa nas meias faces $\bar{Z}J$ e $\bar{E}J$.

De certa forma, os coeficientes que compõem o fluxo numérico em cada meia face são obtidos implicitamente. Por isso, esse tipo de estratégia é denominada no presente texto de *Truly Multidimensional Scheme with Implicit Coefficients* (TMSIC). É importante destacar que coeficientes obtidos implicitamente não é a mesma coisa de uma aproximação implícita, em relação à marcha no tempo, para a equação de saturação. Apesar da necessidade de solução de sistemas algébricos locais, a equação de saturação aproximada com a estratégia TMSIC continua sendo explícita no que se refere ao avanço no tempo.

Uma variante, *cell-centered*, do esquema numérico adaptado por Hurtado *et al.* (2007), foi publicada por Kozdon *et al.* (2011), também com aproximação de primeira ordem no espaço. Devido à formulação adotada no presente texto ser inteiramente *cell-centered*, a variante proposta pelos autores é, portanto, usada como referência para entendimento do método (figuras, argumentos de entrada nas equações, etc).

É importante notar que a estratégia TM utilizada por Kozdon *et al.* (2011) faz a contribuição sobre a face IJ de maneira seccionada. Um fluxo numérico é calculado para cada meia face ($\bar{EI}$ e $\bar{EJ}$ na figura 37) e ambos são adicionados posteriormente. Diferente de Edwards (2003) que avaliou a influência da multidimensionalidade na saturação de água e fluxo fracionário, Kozdon *et al.* (2011) fazem a combinação linear convexa apenas para o fluxo fracionário. Nesse procedimento, regiões de interação são associadas a cada vértice da malha, como se vê na figura 37.

Assim, tomando como exemplo o vértice J , a região dual é delimitada pelos centroides dos volumes de controle ($\hat{L}$, $\hat{R}$, $\hat{W}$ e $\hat{M}$) e os pontos médios auxiliares ($\bar{E}$, $\bar{O}$, $\bar{F}$ e $\bar{Z}$) das meias faces em torno do referido vértice. O fluxo numérico na meia face $\bar{EJ}$, por exemplo, é dado, por:

$$\vec{\mathcal{F}}_{\bar{EJ}} \cdot \vec{N}_{\bar{EJ}} = \check{f}_{w_{\bar{EJ}}} \vec{v}_{\bar{EJ}} \cdot \vec{N}_{\bar{EJ}} \quad (214)$$

onde os parâmetros $\vec{\mathcal{F}}_{\bar{EJ}}$, $\vec{v}_{\bar{EJ}}$ e $\vec{N}_{\bar{EJ}}$ são, respectivamente, o fluxo numérico, a velocidade total e o vetor normal associados à meia face $\bar{EJ}$. O fluxo fracionário TM $\check{f}_{w_{\bar{EJ}}}$, calculado na meia face $\bar{EJ}$, é definido pela combinação linear convexa apresentada na equação (215). Essa combinação compreende um fluxo fracionário conhecido, associado ao volume de controle adjacente ($\hat{L}$), obtido da condição inicial ou passo de tempo anterior, e outro fluxo fracionário desconhecido, definido no ponto de quadratura da meia face à montante $\bar{ZJ}$ (ver figura 37b).

$$\check{f}_{w_{\bar{EJ}}} = (1 - w_{\bar{EJ}}) f_{w_{\hat{L}}} + w_{\bar{EJ}} f_{w_{\bar{ZJ}}} \quad (215)$$

O parâmetro de ponderação $w_{\bar{EJ}}$, estabelecido para a meia face $\bar{EJ}$, é função da razão Λ , definida entre as vazões calculadas nas meias faces à montante e avaliada, onde se tem:

$$\Lambda = \frac{(\vec{v} \cdot \vec{N})_{\text{à montante}}}{(\vec{v} \cdot \vec{N})_{\text{avaliada}}} \rightarrow \Lambda_{\bar{EJ}} = \frac{\vec{v}_{\bar{ZJ}} \cdot \vec{N}_{\bar{ZJ}}}{\vec{v}_{\bar{EJ}} \cdot \vec{N}_{\bar{EJ}}} \quad (216)$$

Para garantir que a combinação da equação (215) seja de fato convexa, uma função de controle, com ação limitadora, é empregada, produzindo um valor normalizado entre 0 e 1 para w . A função de controle proposta por Schneider e Raw (1986) e adotada por Tran *et al.* (2005), Hurtado *et al.* (2007) e Kozdon *et al.* (2011), faz com que o peso $w(\Lambda)$ assumam bruscamente o valor unitário para toda razão Λ maior do que 1, tal como se vê a seguir:

$$\mathcal{W}^{TMU}(\Lambda) = \min(1, \max(0, \Lambda)) = \begin{cases} 1, & \text{se } \Lambda > 1; \\ \frac{(\vec{v} \cdot \vec{N})_{\text{à montante}}}{(\vec{v} \cdot \vec{N})_{\text{avaliada}}}, & \text{se } \Lambda < 1; \\ 0, & \text{se } \Lambda \leq 0 \end{cases} \quad (217)$$

Kozdon *et al.* (2011) nomeiam essa função de controle como *Tight Multidimensional Upstream* (TMU). É importante destacar que o que está sendo chamada de função de controle no presente texto é, em geral, chamado de função limitadora. No entanto, essas funções não devem ser confundidas com as funções limitadoras utilizadas para garantir monotonicidade em aproximações de alta ordem (Kozdon *et al.*, 2011).

Nos casos em que Λ é maior do que 1, de acordo com a equação (215), $\tilde{f}_{w_{\bar{E}J}} = f_{w_{\bar{Z}J}}$, dado que $\mathcal{W}_{\bar{E}J} = 1$. Nessa circunstância há um desacoplamento de $f_{w_{\bar{E}J}}$ em relação a $f_{w_{\bar{Z}J}}$. Para entender a relação entre a razão Λ e a multidimensionalidade do fluxo numérico calculado em cada meia face, possíveis combinações entre as vazões nas faces à montante e avaliada, apresentadas na equação (217), são ilustradas na figura 38.

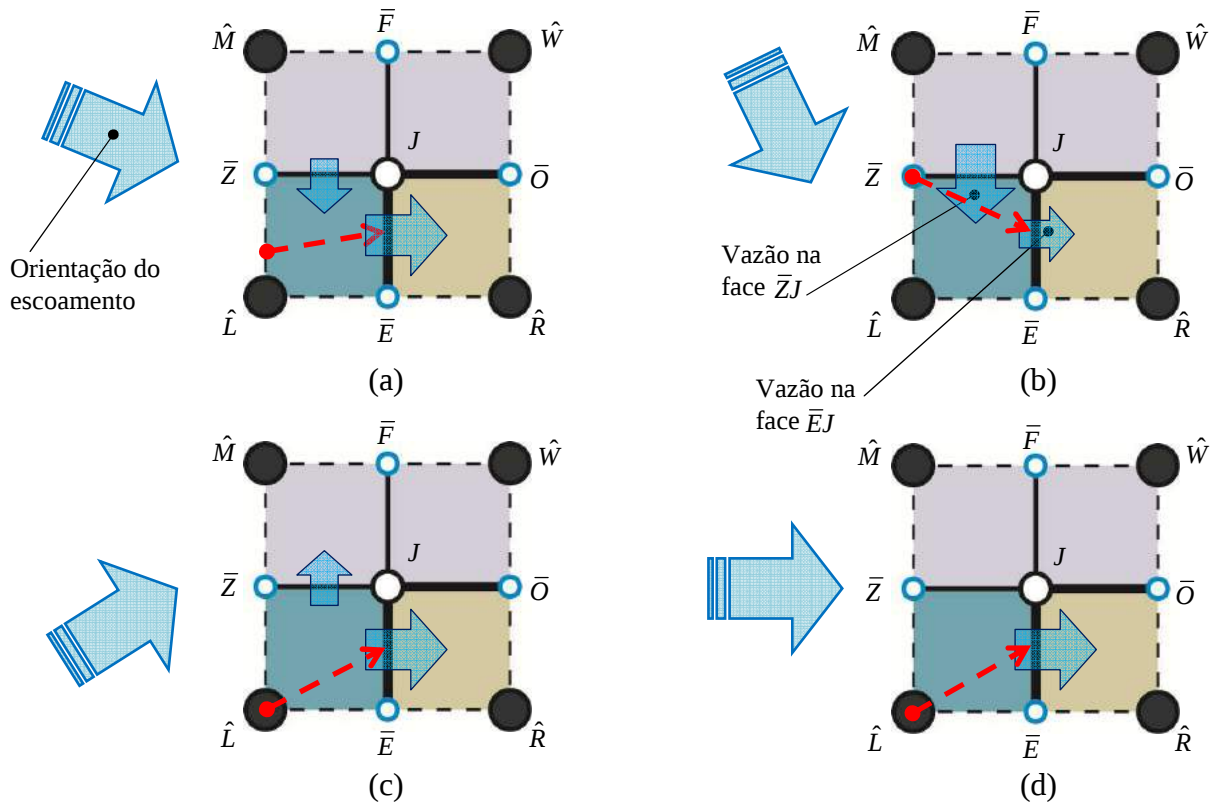


Figura 38. Vazões nas meias faces à montante ($\bar{Z}J$) e avaliada ($\bar{E}J$): (a) $\Lambda < 1$ devido à vazão na meia face adjacente ser de menor intensidade do que na meia face avaliada; (b) $\Lambda > 1$ devido à vazão na meia face à montante ser de maior intensidade do que na avaliada; (c) $\Lambda = 0$ devido à massa na face à montante sair do volume de controle $\hat{L}$; (d) $\Lambda = 0$ devido à vazão na meia face à montante ser nula.

As magnitudes das vazões nas discussões a seguir são associadas aos tamanhos das setas sobre as meias faces ilustradas na figura 38. No primeiro caso, ilustrado na figura 38a, uma fração de massa entra no volume de controle $\hat{L}$, por meio da meia face à montante $\bar{Z}J$, e

deixa o referido volume de controle pela meia face avaliada $\bar{E}J$. Dessa forma, a aproximação de $\tilde{f}_{w_{\bar{E}J}}$ se dá com contribuição dos dados à montante em relação à face avaliada, $f_{w_{\bar{Z}J}}$ e $f_{w_{\hat{L}}}$. Sendo a vazão na meia face $\bar{Z}J$ menor do que a vazão na meia face avaliada $\bar{E}J$, o peso Λ , estabelecido na equação (216), é menor do que 1. A segunda condição na equação (217), define o peso $\mathcal{W}^{TMU}(\Lambda)$.

No caso ilustrado na figura 38b, mais uma vez massa entra no volume de controle $\hat{L}$ por meio da meia face à montante $\bar{Z}J$ e sai pela meia face avaliada $\bar{E}J$. No entanto, a vazão na meia face à montante é maior do que a vazão na meia face avaliada. Considerando as equações (216) e (217), tem-se que $\mathcal{W}^{TMU}(\Lambda)=1$. Há uma predominância da informação associada à meia face à montante, em relação à informação associada ao volume de controle $\hat{L}$, sobre a meia face avaliada. Nesse caso, ocorre o desacoplamento de $f_{w_{\hat{L}}}$ no cálculo de $\tilde{f}_{w_{\bar{E}J}}$.

Nas figuras 38c e 38d, a aproximação de $\tilde{f}_{w_{\bar{E}J}}$ é equivalente à produzida por uma formulação unidimensional de primeira ordem com ponderação à montante. Na figura 38c, a vazão sai do volume de controle $\hat{L}$, pela face à montante. Assim, a única informação à montante da meia face avaliada é a associada ao volume de controle $\hat{L}$. Admitindo que a massa que sai pela meia face à montante implica em um valor negativo para a vazão utilizada na equação (216), tem-se que a terceira condição da equação (217) é utilizada. Consequentemente, $\mathcal{W}^{TMU}(\Lambda)=0$ e $\tilde{f}_{w_{\bar{E}J}} = f_{w_{\hat{L}}}$.

Na figura 38d, o escoamento está alinhado com a orientação da malha. Não há, portanto, vazão na face à montante e, naturalmente, a situação descrita para o caso anterior se repete. O esquema TM recai em uma aproximação convencional unidimensional (Hurtado *et al.*, 2007; Kozdon *et al.*, 2011; Keileglaven *et al.*, 2012). Isso indica que a formulação é TM apenas quando necessário.

Na figura 39 as duas regiões de interação são mostradas juntas. Na região de interação associada ao vértice I (ver figura 39b), $\tilde{f}_{w_{\bar{E}I}}$ é definido, para a meia face $\bar{E}I$ como uma combinação do fluxo fracionário avaliado no centroide $\hat{L}$ e na meia face $\bar{B}I$. Já na meia face $\bar{E}J$, de acordo com a discussão anterior, o fluxo simplesmente tem um caráter unidimensional. No entanto, o fluxo numérico calculado sobre a face inteira IJ permanece TM.

Hurtado (2005) propôs algumas funções de controle com natureza contínua, i.e, o desacoplamento observado no caso ilustrado na figura 38b não ocorre. Kozdon *et al.* (2011) nomearam de *Smooth Multidimensional Upstream* (SMU) a função que produziu, segundo (Hurtado, 2005), os melhores resultados. A função SMU é, portanto, definida como:

$$\mathcal{W}^{SMU}(\Lambda) = \frac{\Lambda}{(\Lambda + 1)} \quad (218)$$

Nessa abordagem, para qualquer valor de Λ , inclusive aqueles maiores do que 1, há contribuição dos dois termos da combinação linear convexa. Isso implica em uma suavidade nos resultados numéricos em alguns casos, como se observa no capítulo de aplicações.

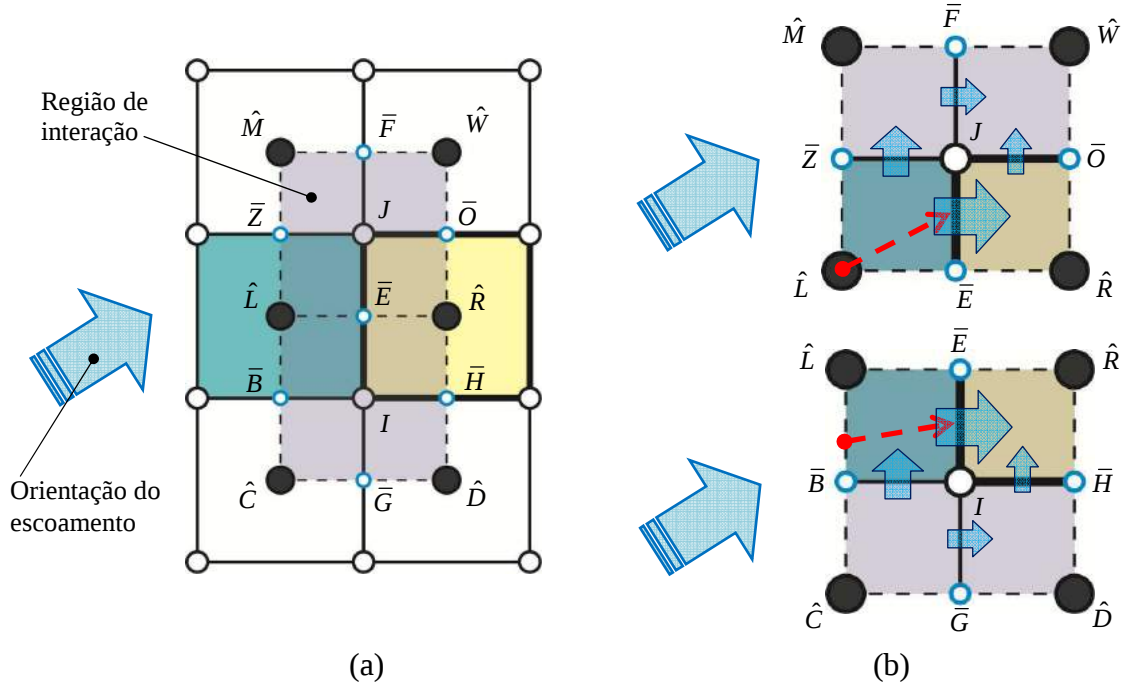


Figura 39. Regiões de interação I e J : (a) regiões de interação em relação à orientação do escoamento; (b) influência do escoamento sobre as combinações convexas que definem $\tilde{f}_{w_{E_I}}$ e $\tilde{f}_{w_{E_J}}$. Aproximação TM na região de interação I e unidimensional na região de interação J .

Na figura 40, a relação entre a razão Λ e o peso $w(\Lambda)$ é mostrada para duas funções de controle mencionadas.

Na função correspondente à estratégia TMU pode-se ver como a ponderação é bruscamente posta como unitária para qualquer razão $\Lambda > 1$. Com a função de controle do tipo SMU, diferentes valores de Λ , mesmo que maiores do que 1, produzem diferentes valores de $w(\Lambda)$. Dessa forma, $w(\Lambda) = 1$ só é obtido quando $\Lambda \rightarrow \infty$.

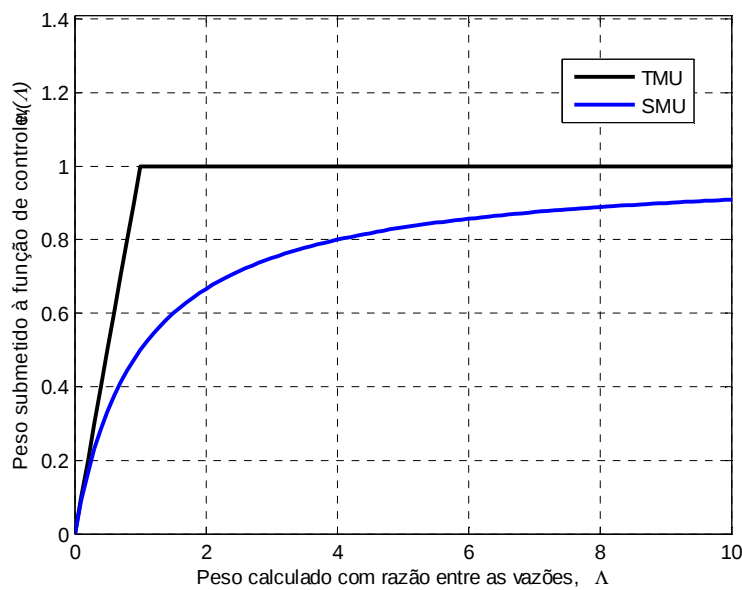


Figura 40. Gráficos das funções limitadoras TMU (Tran *et al.*, 2005) e SMU (Hurtado *et al.*, 2007).

Fazendo um raciocínio análogo ao desenvolvido para obter a equação (215), os fluxos fracionais para as outras meias faces pertencentes à região de interação J , ilustrada na figura 39b, são dadas por:

$$\bar{f}_{w_{\bar{O}J}} = (1 - w_{\bar{O}J}) f_{w_{\hat{R}}} + w_{\bar{O}J} f_{w_{\bar{E}J}} \quad (219)$$

$$\bar{f}_{w_{\bar{F}J}} = (1 - w_{\bar{F}J}) f_{w_{\hat{M}}} + w_{\bar{F}J} f_{w_{\bar{Z}J}} \quad (220)$$

$$\bar{f}_{w_{\bar{Z}J}} = (1 - w_{\bar{Z}J}) f_{w_{\hat{L}}} + w_{\bar{Z}J} f_{w_{\bar{E}J}} \quad (221)$$

Escrevendo a equação (215) juntamente com as equações (219) a (221) na forma matricial, separando os termos conhecidos dos não conhecidos chega-se a:

$$\begin{bmatrix} 1 & 0 & 0 & -w_{\bar{E}J} \\ -w_{\bar{O}J} & 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 & -w_{\bar{F}J} \\ -w_{\bar{Z}J} & 0 & 0 & 1 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} f_{w_{\bar{E}J}} \\ f_{w_{\bar{O}J}} \\ f_{w_{\bar{F}J}} \\ f_{w_{\bar{Z}J}} \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} (1 - w_{\bar{E}J}) & 0 & 0 & 0 \\ 0 & (1 - w_{\bar{O}J}) & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & (1 - w_{\bar{F}J}) \\ (1 - w_{\bar{Z}J}) & 0 & 0 & 0 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} f_{w_{\hat{L}}} \\ f_{w_{\hat{R}}} \\ f_{w_{\hat{M}}} \\ f_{w_{\hat{M}}} \end{bmatrix} \quad (222)$$

De maneira compacta, o sistema algébrico da equação (222) pode ser escrito, como:

$$\mathbf{A}\bar{\mathbf{f}}_w = \mathbf{B}\hat{\mathbf{f}}_w \quad (223)$$

onde os vetores $\hat{\mathbf{f}}_w$ e $\bar{\mathbf{f}}_w$ representam, respectivamente, os valores de fluxo fracionário calculados nos centroides dos volumes de controle ($f_{w_{\hat{L}}}$, $f_{w_{\hat{R}}}$, $f_{w_{\hat{W}}}$ e $f_{w_{\hat{M}}}$) e pontos médios auxiliares nas faces ($f_{w_{\bar{E}J}}$, $f_{w_{\bar{O}J}}$, $f_{w_{\bar{F}J}}$ e $f_{w_{\bar{Z}J}}$) associados à região de interação avaliada. Assim, os fluxos fracionais nos pontos auxiliares de cada meia face pertencente à região de interação avaliada são obtidos, como:

$$\bar{\mathbf{f}}_w = \mathbf{A}^{-1}\mathbf{B}\hat{\mathbf{f}}_w \quad (224)$$

Assim, os fluxos numéricos na equação (148) podem ser calculados para cada meia face do volume de controle avaliado. É importante ressaltar que, quanto maior a densidade da malha, mais sistemas algébricos locais, como o apresentado na equação (223), devem ser resolvidos. Não há na literatura, até o momento, uma discussão detalhada sobre a influência da solução *a priori* desses sistemas locais na elevação do custo computacional.

Na estratégia TM proposta por Edwards (2003) e aprimorada nos trabalhos de Lamine e Edwards (2010) e Lamine e Edwards (2013), não há necessidade de se resolver o sistema algébrico local apresentado na equação (222). Como já mencionado, a combinação convexa da variável em cada superfície de controle é feita considerando apenas variáveis conhecidas. Tomando o fragmento de malha ilustrado na figura 41, vê-se que para uma formulação centrada no vértice, a variável é associada aos vértices (I , B e T , por exemplo) e as faces do volume de controle dual são definidas entre os centroides da malha primal (face $\hat{M}\hat{W}$, por exemplo).

Para calcular a variável à esquerda da face $\hat{W}\hat{M}$ (ver figura 41) é necessário estimar qual volume de controle, dentre T e B compõem a combinação convexa junto com o volume de controle I . Analogamente, um volume de controle, dentre O e Z , também deve ser definido para compor, juntamente com o volume de controle J , a aproximação TM para o estado à direita da face avaliada.

A definição de quais volumes de controle são considerados à montante no cálculo de cada estado na face $\hat{W}\hat{M}$ se dá com base na avaliação da orientação da velocidade estimada sobre o ponto médio dessa face (seta clara sobre a face $\hat{W}\hat{M}$). Lamine e Edwards (2010) usam médias aritméticas das velocidades normais às faces que compartilham os vértices $\hat{W}$ e $\hat{M}$, respectivamente, mostradas na figura 41a. A média das velocidades normais às faces que concorrem para os pontos $\hat{M}$ e $\hat{W}$ levam a uma velocidade média, atribuída a cada um desses pontos como se vê na figura 41b. Uma nova média entre os vetores velocidade média calculados em cada centroide ($\hat{M}$ e $\hat{W}$), define a velocidade média final sobre a face avaliada (ver seta sobre o ponto $\bar{E}$ na figura 41).

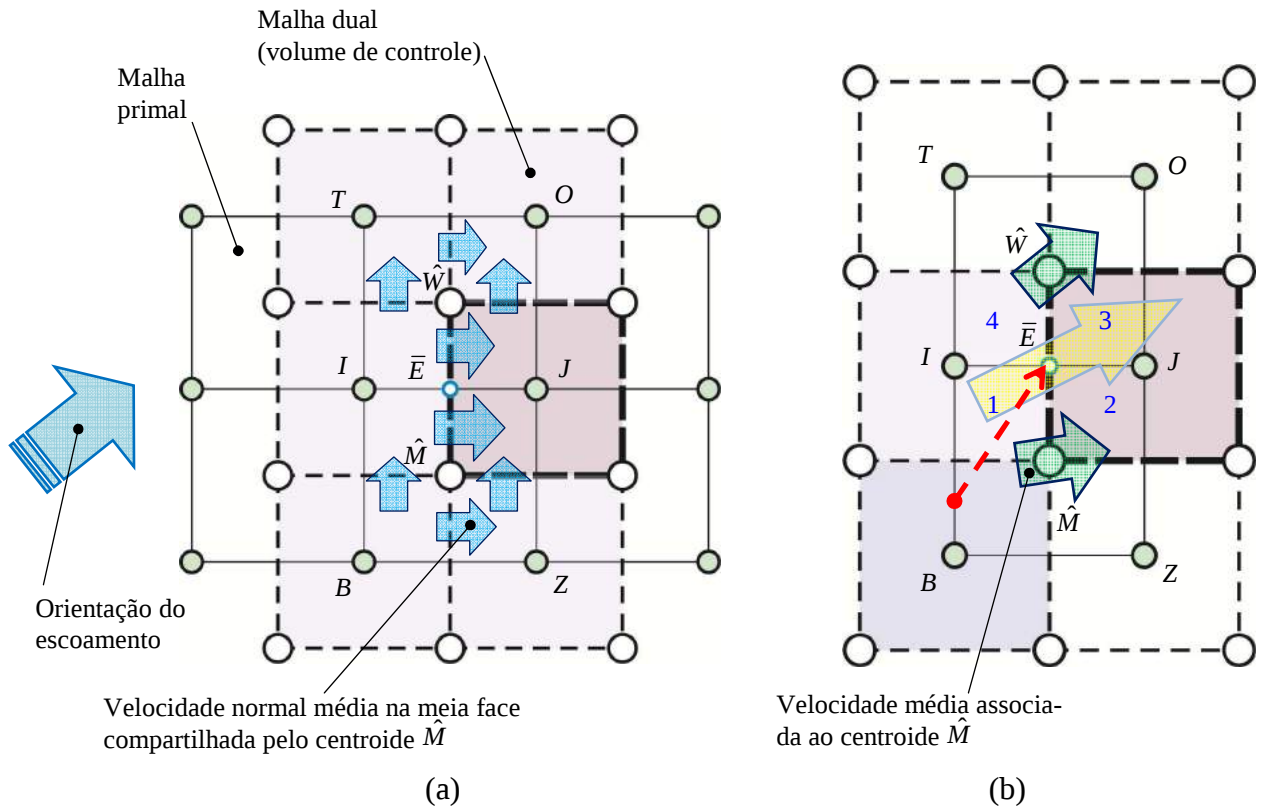


Figura 41. Esquema Verdadeiramente Multidimensional, centrada no vértice, com coeficientes explícitos: (a) fragmento de malha com volumes de controle duais e a distribuição das velocidades normais às meias faces que concorrem para os centroides $\hat{M}$ e $\hat{W}$; (b) velocidades médias associadas aos nós $\hat{M}$ e $\hat{W}$.

A orientação desse vetor resultante estabelece se $\zeta_{\bar{E}}$ assume valor 0 ou 1. Como consequência, isso define se a combinação convexa à esquerda, por exemplo, da face $\hat{W}\hat{M}$ é estabelecida entre S_{w_I} e S_{w_B} (se a seta sobre o ponto $\bar{E}$ sai de 1 para 3 na figura 41b) ou entre S_{w_I} e S_{w_T} (se a seta sobre o ponto $\bar{E}$ sai de 4 para 2 na figura 41b). Dessa forma, as combi-

nações convexas para a saturação de água $\tilde{S}_{w_{\hat{W}\hat{M}}}$ ou diretamente para o fluxo fracional $f_{w_{\hat{W}\hat{M}}}$, considerando o estado à esquerda da face $\hat{W}\hat{M}$ são dadas como:

$$\tilde{S}_{w_{\hat{W}\hat{M}}} = (1 - \xi_{\hat{M}\hat{W}}) S_{w_I} + \xi_{\hat{M}\hat{W}} \left[\zeta_{\bar{E}} S_{w_B} + (1 - \zeta_{\bar{E}}) S_{w_T} \right] \quad (225)$$

$$\tilde{f}_{w_{\hat{W}\hat{M}}} = (1 - \xi_{\hat{M}\hat{W}}) f_{w_I} + \xi_{\hat{M}\hat{W}} \left[\zeta_{\bar{E}} f_{w_B} + (1 - \zeta_{\bar{E}}) f_{w_T} \right] \quad (226)$$

O parâmetro $\xi_{\hat{M}\hat{W}}$ tem a mesma aplicabilidade do peso $\mathcal{W}_{EJ}$ na equação (215), i.e., define a proporção entre as superfícies de controle avaliada (I) e adjacente (B). Detalhes sobre como essa proporção se dá podem ser encontrados em Lamine (2009).

Deve-se notar que essa “dicotomia” não existe na estratégia proposta por Schneider e Raw (1986), adaptada por Hurtado *et al.* (2007), Kozdon *et al.* (2011) e Keileglaven *et al.* (2012). A avaliação dos termos que compõem a combinação convexa é restrita a cada região de interação como ilustrado na figura 39b.

Embora a obtenção de coeficientes explícitos pareça ser uma vantagem para as estratégias TM de Edwards (2003) e Lamine e Edwards (2010), a forma com que a orientação do escoamento é definida, usando médias de velocidades normais às faces, pode apresentar problemas do ponto de vista numérico. Segundo Lamine (2009), oscilações espúrias são verificadas nos experimentos numéricos quando significantes variações no campo de velocidades ou malhas muito distorcidas são consideradas. Isso ocorre, devido ao fato do esquema não respeitar a regra de positividade dos coeficientes, violando a segunda lei da termodinâmica localmente. Possivelmente, isso ocorre devido a uma não correspondência entre a orientação do escoamento definida segundo as médias de velocidades e uma orientação do escoamento definida de forma mais local, levando em conta apenas as vazões nas faces à montante e avaliada, tal como é feito por Hurtado *et al.* (2007), Kozdon *et al.* (2011) e Keileglaven *et al.* (2012).

Nas seções a seguir, duas novas estratégias TM são propostas. Características presentes nos esquemas numéricos de Hurtado *et al.* (2007) e Lamine e Edwards (2010) são combinadas de modo que se tenha uma multidimensionalidade da variável definida apenas com valores conhecidos sem, no entanto, ter que resolver sistemas algébricos locais, como feito por Kozdon *et al.* (2011). A definição da orientação do escoamento segundo médias de velocidades, como feito por Lamine e Edwards (2010), também é desnecessário. Adicionalmente, uma nova estratégia para reduzir o GOE em problemas com malhas não ortogonais também é incorporada às duas estratégias propostas a seguir.

Estratégia Verdadeiramente Multidimensional com Coeficientes Explícitos (TMSEC-1)

Na presente seção uma variante, *cell-centered*, das formulações TM apresentadas na seção anterior é proposta. Importantes características dos esquemas numéricos discutidos nos trabalhos de Edwards (2003), Hurtado *et al.* (2007), Lamine e Edwards (2010), Kozdon *et al.* (2011) e Lamine e Edwards (2013) são conservadas. Nessa proposta, a aproximação TM em cada meia face da região de interação avaliada é feita por meio apenas de valores conhecidos. Uma combinação linear convexa simples, com dois pontos, é empregada de acordo com a orientação do escoamento. Os coeficientes que definem os fluxos numéricos são, portanto, explícitos. Dessa forma, não há necessidade de resolver sistemas algébricos locais como na estratégia TMSIC. Essa primeira proposição é chamada no presente texto de *Truly Multidimensional Scheme with Explicit Coefficients 1* (TMSEC-1). Aproximações de primeira e segunda ordem são consideradas para essa proposta, tal como descrito a seguir.

Dado o fragmento de malha ilustrado na figura 42, regiões de interação são definidas para os vértices I e J , assim como feito para a estratégia TMSIC. Mais uma vez, cada região de interação é delineada pelos centroides e pontos auxiliares, definidos no meio de cada face.

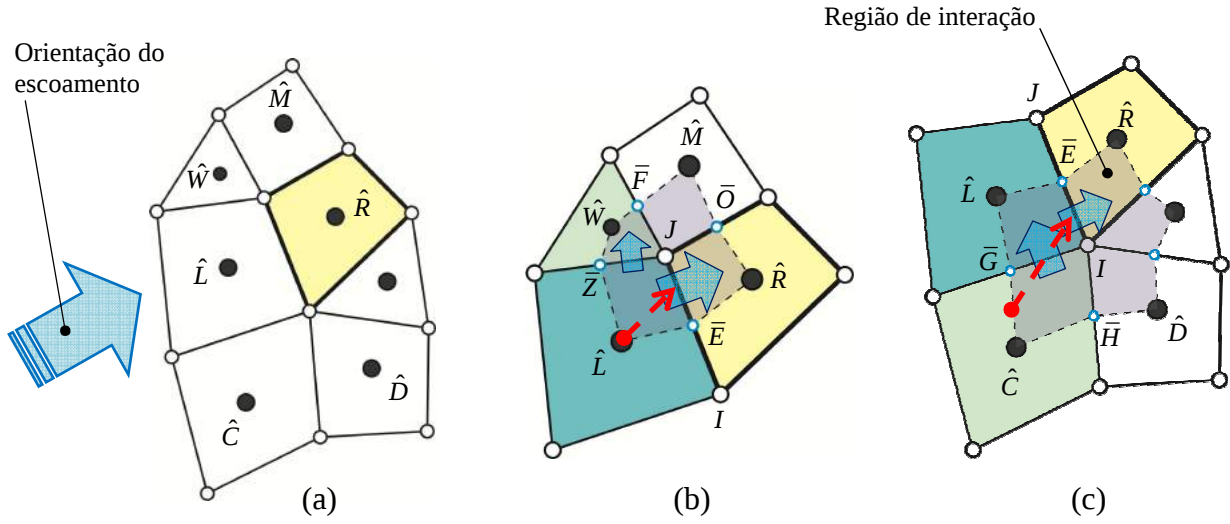


Figura 42. Regiões de interação associadas à face IJ : (a) visão geral do fragmento de malha com indicação do volume de controle no qual a equação discreta é resolvida; (b) região de interação J e vazões sobre as meias faces $\bar{E}J$ e $\bar{J}I$; (c) região de interação I e vazões sobre as meias faces $\bar{E}I$ e $\bar{G}I$.

Tomando como exemplo a região de interação I , ilustrada na figura 42c, se tem massa saindo do volume de controle $\hat{L}$ pela meia face $\bar{E}I$. Também se observa massa entrando no mesmo volume de controle por meio da meia face $\bar{G}I$. Seguindo um raciocínio análogo ao desenvolvido, na seção anterior, para fundamentar a estratégia TMSIC, fica claro que dados associados aos volumes de controle $\hat{L}$ (adjacente) e $\hat{C}$ (à montante) estão à montante em relação à face avaliada ($\bar{E}I$). Dessa forma, considerando uma aproximação TM de primeira ordem, definida apenas por valores conhecidos, o fluxo fracionário no ponto de quadratura da meia face avaliada é escrito como uma combinação linear convexa de valores de f_w , projetados nos volume de controle adjacente e à montante, tal como se observa a seguir:

$$\tilde{f}_{w_{\bar{E}I}} = (1 - w_{\bar{E}I}) f_{w_{\hat{L}}} + w_{\bar{E}I} f_{w_{\hat{C}}} \quad (227)$$

onde, assim como na equação (215), $\tilde{f}_{w_{\bar{E}I}}$ é o fluxo fracionário TM de primeira ordem. O peso $w_{\bar{E}I}$ é definido como nos trabalhos de Hurtado *et al.* (2007), Kozdon *et al.* (2011) e Keilegla-ven *et al.* (2012). As funções de controle, TMU, apresentada na equação (217), ou SMU, apresentada na equação (218), também são empregadas na definição adequada desses pesos.

No que se refere à região de interação J (ver figura 42b), o raciocínio é análogo ao desenvolvido para a figura 38c na estratégia TMSIC. Massa sai do volume de controle $\hat{L}$ pela meia face à montante, $\bar{J}I$. O volume de controle $\hat{W}$ não contribui para a abordagem TM. Assim, a única informação à montante em relação à meia face avaliada é a variável associada ao volume de controle adjacente $\hat{L}$. Por isso $w_{\bar{E}J} = 0$. O fluxo fracionário na meia face $\bar{E}J$ é, portanto, definido por:

$$\tilde{f}_{w_{\bar{E}J}} = (1 - w_{\bar{E}J}) f_{w_{\bar{L}}} + w_{\bar{E}J} f_{w_{\bar{W}}} \quad (228)$$

Uma vez que $w_{\bar{E}J} = 0$, da equação (228), tem-se que $\tilde{f}_{w_{\bar{E}J}} = f_{w_{\bar{L}}}$, tal como em uma aproximação convencional, do tipo *upwind*, com característica unidimensional.

Seguindo a proposta de Lamine e Edwards (2010), a aproximação TM também pode ser feita para a saturação de água. Para a meia face $\bar{E}J$, a versão TM de S_w é dada por:

$$\tilde{S}_{w_{\bar{E}J}} = (1 - w_{\bar{E}J}) S_{w_{\bar{L}}} + w_{\bar{E}J} S_{w_{\bar{W}}} \quad (229)$$

O fluxo fracionário passa, portanto, a ser TM pela relação dada a seguir:

$$\tilde{f}_{w_{\bar{E}J}} = \tilde{f}_{w_{\bar{E}J}} (\tilde{S}_{w_{\bar{E}J}}) \quad (230)$$

Em aproximações de alta ordem (com extrapolação do tipo MUSCL), o procedimento utilizado por Lamine e Edwards (2013) é aqui adaptado para um contexto centrado na célula. Os termos da combinação linear convexa presentes nas equações (227) e (228), ou mesmo na equação (229), para o caso em que S_w é TM, são extrapolações lineares a partir do centroide do volume de controle avaliado até as respectivas meias faces avaliada e à montante. Na figura 43 essas extrapolações são indicadas por setas (linhas contínuas). Uma indicação da combinação entre os valores extrapolados também é ilustrada (seta com linha tracejada).

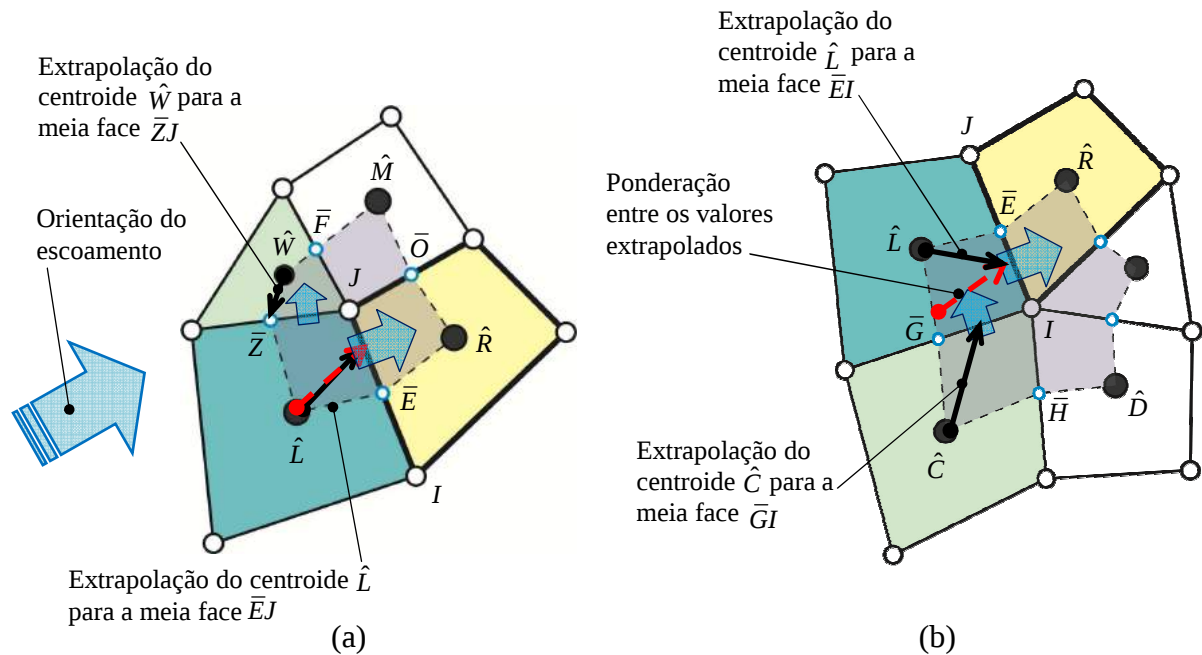


Figura 43. Indicação das extrapolações (tipo MUSCL) para as meias faces avaliada e à montante. As setas com linhas contínuas indicam a extrapolação: (a) para a região de interação J ; (b) para a região de interação I .

As composições apresentadas com aproximação de primeira ordem nas equações (227) e (228) são escritas com aproximação de segunda ordem, como:

$$\hat{f}_{w_{\bar{E}I}} = (1 - w_{\bar{E}I}) \tilde{f}_{w_{\bar{E}I}} + w_{\bar{E}I} \tilde{f}_{w_{\bar{G}I}} \quad (231)$$

$$\hat{f}_{w_{\bar{E}J}} = (1 - w_{\bar{E}J}) \tilde{f}_{w_{\bar{E}I}} + w_{\bar{E}J} \tilde{f}_{w_{\bar{Z}I}} \quad (232)$$

onde $\hat{f}_{w_{\bar{E}I}}$ e $\hat{f}_{w_{\bar{E}J}}$ são os valores TM dos fluxos fracionários com aproximação de alta ordem, obtidos nas meias faces $\bar{E}I$ e $\bar{E}J$, respectivamente (ver figura 43). O parâmetro $\tilde{f}_{w_{\bar{E}I}}$ é o fluxo fracionário obtido na meia face $\bar{E}I$ como uma função da saturação $\tilde{S}_{w_{\bar{E}I}}$, extrapolada de acordo com as equações (179) e (180), apresentadas na seção 3.4.4.

Analogamente, os parâmetros $\tilde{f}_{w_{\bar{G}I}}$ e $\tilde{f}_{w_{\bar{Z}I}}$ são os fluxos fracionários, de alta ordem, calculados nas meias faces à montante, para as combinações apresentadas nas equações (231) e (232). Assim como $\tilde{f}_{w_{\bar{E}I}}$, os fluxos fracionários $\tilde{f}_{w_{\bar{G}I}}$ e $\tilde{f}_{w_{\bar{Z}I}}$ também são obtidos a partir dos valores reconstruídos $\tilde{S}_{w_{\bar{G}I}}$ e $\tilde{S}_{w_{\bar{Z}I}}$ nas faces $\bar{G}I$ e $\bar{Z}I$, respectivamente.

Vale ressaltar que os termos $\hat{f}_{w_{\bar{E}I}}$ e $\tilde{f}_{w_{\bar{E}I}}$ não devem ser confundidos, uma vez que o primeiro é uma composição TM definida sobre a meia face avaliada. Já $\tilde{f}_{w_{\bar{E}I}}$, é um dos termos levados em conta nessa composição. No entanto, eventualmente, é possível se ter $\hat{f}_{w_{\bar{E}I}} = \tilde{f}_{w_{\bar{E}I}}$. Isso ocorre para $w_{\bar{E}J} = 0$, como ilustrado na figura 43a. Dessa forma, a aproximação TM recai na aproximação convencional de segunda ordem.

Aproximações com ordens maiores do que dois podem ser trivialmente deduzidas fazendo um raciocínio análogo ao desenvolvido para a aproximação de segunda ordem. Naturalmente, a reconstrução adequada e o número de pontos de quadratura envolvido na integração em cada meia face devem ser observados. Na seção 3.4.5, esse procedimento é detalhado para uma aproximação de até quarta ordem em esquemas numéricos convencionais, i.e., sem o caráter TM.

As estratégias TMSIC e TMSEC-1 podem ser comparadas no que se refere ao número de operações de ponto flutuante para se obter os coeficientes necessários ao cálculo dos fluxos numéricos. Na estratégia TMSIC, esses coeficientes são, para cada região de interação, obtidos após o cálculo da inversa de uma matriz $\mathbf{A}$ e posterior multiplicação dessa por uma segunda matriz $\mathbf{B}$, conforme se vê nas equações (223) e (224). Esses mesmos coeficientes são obtidos diretamente, já que são definidos explicitamente, como se vê nas equações (227) e (228), por exemplo.

Para aproximações de primeira ordem, onde a extrapolação do tipo MUSCL não é necessária, apenas a quantidade de operações de ponto flutuante (somas e multiplicações) é contabilizada para a operação observada na equação (224). Uma malha estruturada e regular, como a ilustrada na figura 38 é usada como referência. Segundo Hunger (2007), a relação $\mathbf{A}^{-1}\mathbf{B}$ quando $\mathbf{A}^{-1}$ é desconhecido, requer $(m_A^2 n_B + m_A n_B)/2$ multiplicações e $(m_A^2 n_B - m_A n_B)/2$ somas. Nesse caso, m_A e n_B são, respectivamente, o número de linhas da matriz $\mathbf{A}$ e o número de colunas da matriz $\mathbf{B}$. As duas matrizes tem número de linhas e colunas iguais ao número de meias faces pertencentes a cada região de interação, como se vê na equação (222). A decomposição de Cholesky é recomendada pelo autor para promover a inversão da matriz $\mathbf{A}$, dado seu desempenho em relação a outras técnicas. Uma vez que existe uma região de interação para cada vértice da malha, o número de somas e multiplicações cresce com o refinamento da malha.

Estratégia Verdaderamente Multidimensional com Coeficientes Explícitos (TMSEC-2)

Nesta seção, uma segunda estratégia TM com coeficientes calculados explicitamente é descrita. A proposição é aqui chamada de *Truly Multidimensional Scheme with Explicit Coefficients 2* (TMSEC-2). Assim como na proposta apresentada na seção anterior (TMSEC-1), na estratégia TMSEC-2 não há necessidade de montagem e solução de um sistema algébrico local para cada região de interação avaliada.

Como se sabe, na estratégia aqui chamada de TMSIC, as variáveis são escritas inicialmente com dependência em outras variáveis, também desconhecidas. As equações (233) a (237) são um exemplo dessa abordagem. Após a solução do sistema algébrico local para uma dada região de interação, tal como se vê no procedimento descrito entre as equações (223) e (224), essas variáveis passam a ser definidas apenas em função de termos conhecidos. A proposta aqui é produzir esse resultado sem que seja necessário resolver o referido sistema algébrico. A avaliação da estrutura das matrizes obtidas com a abordagem do tipo TMSIC fundamenta a criação de uma equação geral, explícita, para cada meia face avaliada. Nesse caso, aproximações idênticas às do tipo TMSIC são obtidas. Além disso, aproximações com segunda ordem de acurácia também são naturalmente definidas, como se verifica no final desta seção.

Algumas possibilidades de distribuição de velocidades em uma região de interação genérica são ilustradas na figura 44. A avaliação desses cenários leva ao entendimento de como reescrever explicitamente a aproximação do tipo TMSIC.

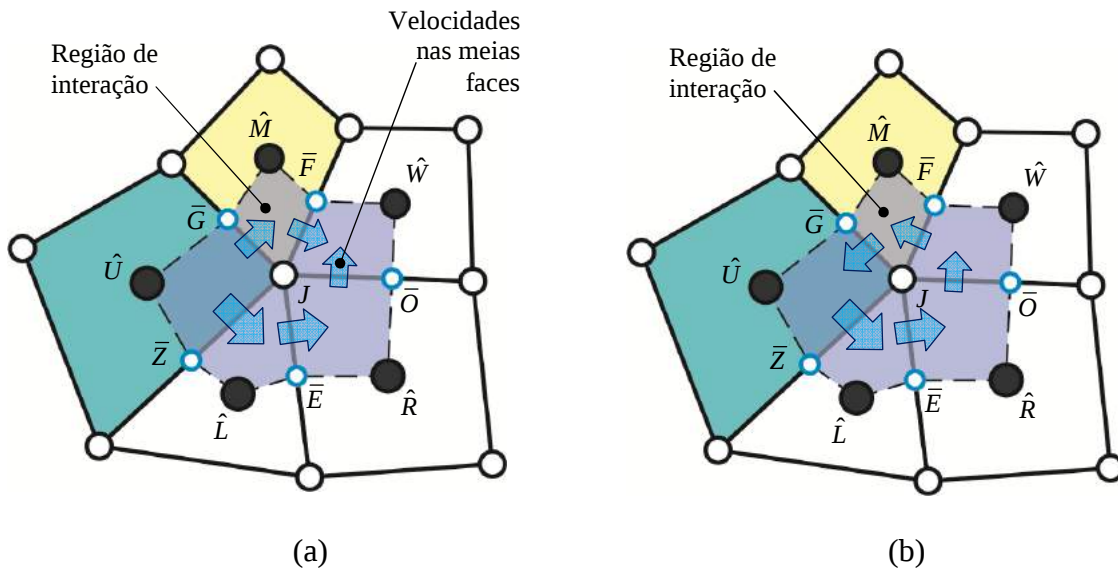


Figura 44. Regiões de interação J com distribuição de velocidade entre as meias faces: (a) velocidades em sentido horário e anti-horário na mesma região de interação; (b) apenas um sentido (anti-horário) é observado para a mesma região de interação.

Inicialmente, a saturação TM no ponto de quadratura de cada meia face da região de interação J , ilustrada na figura 44a, é escrita, segundo a estratégia TMSIC, da seguinte forma:

$$\tilde{S}_{w_{\bar{E}J}} = (1 - w_{\bar{E}J}) S_{w_{\bar{L}}} + w_{\bar{E}J} \tilde{S}_{w_{\bar{Z}}} \quad (233)$$

$$\tilde{S}_{w_{\bar{O}J}} = (1 - w_{\bar{O}J}) S_{w_{\bar{R}}} + w_{\bar{O}J} \tilde{S}_{w_{\bar{E}}} \quad (234)$$

$$\tilde{S}_{w_{\bar{F}J}} = (1 - w_{\bar{F}J}) S_{w_M} + w_{\bar{F}J} \tilde{S}_{w_{\bar{G}J}} \quad (235)$$

$$\tilde{S}_{w_{\bar{G}J}} = (1 - w_{\bar{G}J}) S_{w_{\hat{U}}} + w_{\bar{G}J} \tilde{S}_{w_{\bar{Z}J}} \quad (236)$$

$$\tilde{S}_{w_{\bar{Z}J}} = (1 - w_{\bar{Z}J}) S_{w_{\hat{U}}} + w_{\bar{Z}J} \tilde{S}_{w_{\bar{G}J}} \quad (237)$$

Alguns conceitos fundamentais devem ser introduzidos antes de avaliar a relação TMSIC – TMSEC-2. Para cada meia face avaliada, há nenhuma, uma ou mais meias faces ditas à montante. Para entender esse conceito, a meia face $\bar{O}J$, no fragmento de malha ilustrado na figura 44a, é tomada como exemplo. O sentido da velocidade (ver setas) nessa meia face é o mesmo observado nas meias faces $\bar{E}J$ e $\bar{Z}J$, i.e., nessas três meias faces a velocidade é distribuída no sentido anti-horário. Assim, pode-se dizer que as meias faces $\bar{E}J$ e $\bar{Z}J$ estão à montante em relação à meia face $\bar{O}J$. Da mesma forma, a meia face $\bar{Z}J$ está à montante em relação à meia face $\bar{E}J$ e, analogamente, a meia face $\bar{G}J$ também está à montante em relação à meia face $\bar{F}J$, porém no sentido horário (ver figura 44a).

O número de meias faces à montante em relação a uma certa meia face avaliada é, nesse texto, representado por $\mathcal{N}_{UHF}$, com UHF significando *Upstream Half Faces*. O número total de meias faces, em cada região de interação, é definido por $\mathcal{N}_{HF}$, com HF significando *Half Faces*. Deve-se notar que para cada meia face pertencente à região de interação J na figura 44a, tem-se $\mathcal{N}_{UHF} \neq \mathcal{N}_{HF}$. Seguindo o mesmo raciocínio, para as mesmas meias faces na figura 44b, $\mathcal{N}_{UHF} = \mathcal{N}_{HF}$. Essa relação é relevante para a obtenção da aproximação explícita pretendida nesta seção.

Outro entendimento importante está no que acontece quando uma dada meia face não está à montante em relação à meia face avaliada. Tomando a meia face $\bar{G}J$ na figura 44a, se observa que a meia face $\bar{Z}J$, por exemplo, não está à montante em relação à meia face avaliada. A massa sai do volume de controle $\hat{U}$ pelas referidas meias faces. Nesse caso, a única informação à montante para a meia face avaliada ($\bar{G}J$), representada na equação (236) segundo a estratégia TMSIC, é composta exclusivamente pela variável associada ao volume de controle $\hat{U}$. Isso é equivalente a uma aproximação unidimensional tradicional, onde se tem:

$$w_{\bar{G}J} = 0 \quad \text{e} \quad \tilde{S}_{w_{\bar{G}J}} = S_{w_{\hat{U}}} \quad (238)$$

Por outro lado, quando se avalia a meia face $\bar{F}J$, se observa que a meia face $\bar{G}J$ está à montante, como já mencionado. Assim, substituindo a equação (236) na equação (235) e fazendo algumas manipulações algébricas, se obtém:

$$\tilde{S}_{w_{\bar{F}J}} = (1 - w_{\bar{F}J}) S_{w_M} + w_{\bar{F}J} (1 - w_{\bar{G}J}) S_{w_{\hat{U}}} + w_{\bar{F}J} w_{\bar{G}J} \tilde{S}_{w_{\bar{Z}J}} \quad (239)$$

A saturação TM definida na equação (239), para a meia face $\bar{F}J$, ainda é dependente de $\tilde{S}_{w_{\bar{Z}J}}$, que também é um valor a ser determinado. No entanto, tendo em vista a equação (238), a equação (239) pode ser reescrita como:

$$\tilde{S}_{w_{\bar{F}J}} = (1 - w_{\bar{F}J}) S_{w_M} + w_{\bar{F}J} S_{w_{\hat{U}}} \quad (240)$$

A aproximação da equação (240) é equivalente à que seria obtida com a estratégia TMSEC-1 para a meia face $\bar{F}J$. Essa equivalência ocorre quando a meia face avaliada tem apenas uma meia face à montante, como discutido na próxima seção.

Em um caso um pouco mais complexo, a meia face $\bar{O}J$, ilustrada na figura 44a, tem as meias faces $\bar{E}J$ e $\bar{Z}J$ à montante. A aproximação TM da variável segundo a estratégia TMSEC-2 é, portanto, obtida substituindo a equação (237) na equação (233), que por sua vez é substituída na equação (234). Adicionalmente, admite-se $w_{\bar{Z}J} = 0$, com argumentos semelhantes aos empregados para definir a equação (238). Após algumas manipulações algébricas, se obtém:

$$\tilde{S}_{w_{\bar{O}J}} = (1 - w_{\bar{O}J}) S_{w_{\bar{R}}} + w_{\bar{O}J} (1 - w_{\bar{E}J}) S_{w_{\bar{L}}} + w_{\bar{O}J} w_{\bar{E}J} S_{w_{\bar{J}}} \quad (241)$$

Deve-se observar que para a meia face $\bar{O}J$ a aproximação TM, estabelecida na equação (241), envolve dados associados a três volumes de controle. Todos à montante da meia face avaliada (ver setas na figura 44a)

Um terceiro caso, ilustrado na figura 44b, envolve uma situação extrema, porém possível de ocorrer. Nesse caso, há um escoamento cíclico, em torno do ponto J . A relação $\mathcal{N}_{UHF} = \mathcal{N}_{HF}$ ocorre para todas as meias faces avaliadas. Tendo em vista a distribuição de velocidades ilustrada na figura 44b, as saturações nas meias faces são aproximadas segundo a estratégia TMSIC, onde se obtém:

$$\tilde{S}_{w_{\bar{E}J}} = (1 - w_{\bar{E}J}) S_{w_{\bar{L}}} + w_{\bar{E}J} \tilde{S}_{w_{\bar{Z}J}} \quad (242)$$

$$\tilde{S}_{w_{\bar{O}J}} = (1 - w_{\bar{O}J}) S_{w_{\bar{R}}} + w_{\bar{O}J} \tilde{S}_{w_{\bar{E}J}} \quad (243)$$

$$\tilde{S}_{w_{\bar{F}J}} = (1 - w_{\bar{F}J}) S_{w_{\bar{W}}} + w_{\bar{F}J} \tilde{S}_{w_{\bar{O}J}} \quad (244)$$

$$\tilde{S}_{w_{\bar{G}J}} = (1 - w_{\bar{G}J}) S_{w_{\bar{M}}} + w_{\bar{G}J} \tilde{S}_{w_{\bar{F}J}} \quad (245)$$

$$\tilde{S}_{w_{\bar{Z}J}} = (1 - w_{\bar{Z}J}) S_{w_{\bar{U}}} + w_{\bar{Z}J} \tilde{S}_{w_{\bar{G}J}} \quad (246)$$

Mais uma vez, pretende-se reescrever essas aproximações sem que seja necessário propriamente resolver um sistema algébrico local. Nesse caso não há nenhum peso w igual a 0, tal como observado nos dois casos anteriores. No entanto, independente disso, o procedimento desenvolvido até aqui se repete. Assim, tomando a meia face $\bar{E}J$, por exemplo, tem-se as meias faces $\bar{Z}J$, $\bar{G}J$, $\bar{F}J$ e $\bar{O}J$ à montante. Substituindo as equações (243) a (246) na equação (242), se obtém:

$$\begin{aligned} \tilde{S}_{w_{\bar{E}J}} = & (1 - w_{\bar{E}J}) S_{w_{\bar{L}}} + w_{\bar{E}J} \left[(1 - w_{\bar{Z}J}) S_{w_{\bar{U}}} + w_{\bar{Z}J} \left[(1 - w_{\bar{G}J}) S_{w_{\bar{M}}} + \right. \right. \\ & \left. \left. w_{\bar{G}J} \left[(1 - w_{\bar{F}J}) S_{w_{\bar{W}}} + w_{\bar{F}J} \left[(1 - w_{\bar{O}J}) S_{w_{\bar{R}}} + w_{\bar{O}J} \tilde{S}_{w_{\bar{E}J}} \right] \right] \right] \right] \end{aligned} \quad (247)$$

Após passar todos os termos relacionados a $\tilde{S}_{w_{EJ}}$ para o lado esquerdo da equação (247) e algumas manipulações algébricas, se obtém:

$$\begin{aligned} \tilde{S}_{w_{EJ}} = \frac{1}{(1 - w_{EJ} w_{ZJ} w_{GJ} w_{FJ} w_{OJ})} & \left[(1 - w_{EJ}) S_{w_{iL}} + w_{EJ} (1 - w_{ZJ}) S_{w_{iU}} + \right. \\ & w_{EJ} w_{ZJ} (1 - w_{GJ}) S_{w_{iM}} + w_{EJ} w_{ZJ} w_{GJ} (1 - w_{FJ}) S_{w_{iW}} + \\ & \left. w_{EJ} w_{ZJ} w_{GJ} w_{FJ} (1 - w_{OJ}) S_{w_{iR}} \right] \end{aligned} \quad (248)$$

As aproximações obtidas nas equações (240), (241) e (248) podem ser escritas como uma formulação generalizada para cada meia face avaliada. A figura 45a é tomada como referência, inclusive para a nomenclatura usada.

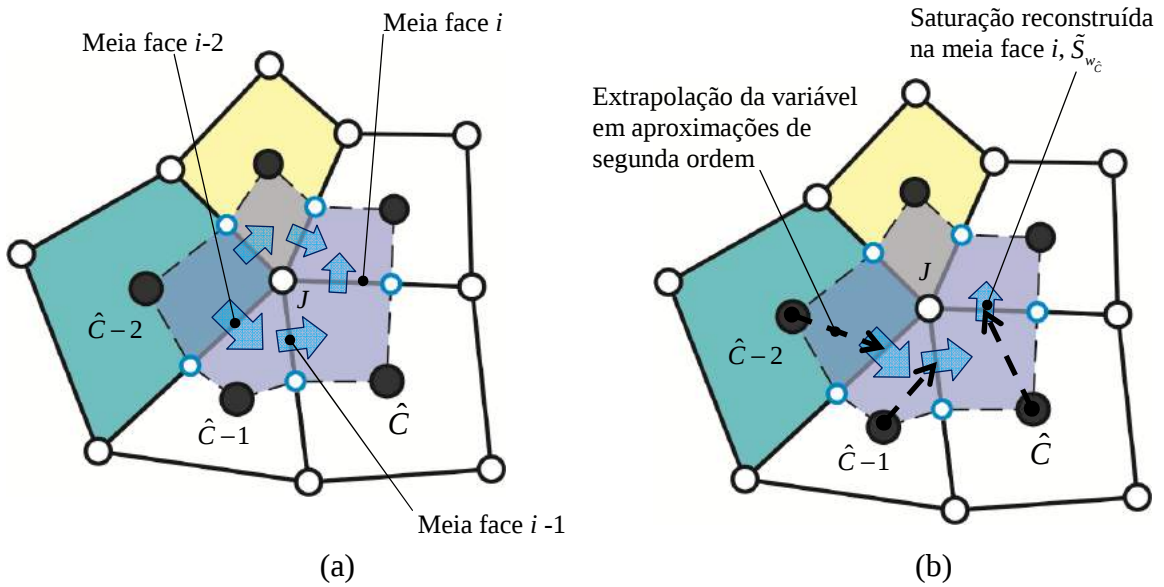


Figura 45. Regiões de interação J : (a) com indicação da meia face avaliada i e outras à montante $i-1$ e $i-2$. O mesmo raciocínio se aplica aos volumes de controle avaliados $\hat{C}$ e à montante $\hat{C}-1$ e $\hat{C}-2$; (b) com indicação das extrapolações até os pontos de quadratura nas aproximações de segunda ordem.

Assim, para cada meia face em uma dada região de interação, a variável ($\tilde{S}_w$ ou $\tilde{f}_w$) pode ser calculada com aproximação de primeira ordem, segundo a orientação do escoamento, por:

$$\tilde{S}_{w_i} = \frac{1}{\left(1 - \prod_{j=1}^{\mathcal{N}_{HE}} w_j\right)} \left[(1 - w_i) S_{w_{\hat{C}}} + \sum_{k=1}^{\max(1, \mathcal{N}_{UHE})} \left(\prod_{m=0}^{k-1} w_{i-m} \right) (1 - w_{i-k}) S_{w_{\hat{C}-k}} \right] \quad (249)$$

Relacionando a equação (249) com a figura 45a se observa que a meia face avaliada é referenciada por i . As meias faces à montante são, portanto, $i-1$, $i-2$, ..., $i - \mathcal{N}_{UHE}$. Da mesma forma, o volume de controle imediatamente à montante, adjacente à meia face avaliada, é referenciado por $\hat{C}$, assim como outros, mais à montante, são $\hat{C}-1$, $\hat{C}-2$, ...,

$\hat{C} - \mathcal{N}_{UHE}$. As saturações $S_{w_{\hat{C}}}$, $S_{w_{\hat{C}-1}}$, etc, são aproximações de primeira ordem, com valor projetado sobre todo o volume de controle.

Deve-se notar que a equação (248) é prontamente obtida com a equação (249). Basta assumir que $i = \bar{E}J$, $i-1 = \bar{Z}J$, $i-2 = \bar{G}J$ e assim por diante. No que se refere aos volumes de controle, $\hat{C} = \hat{L}$, $\hat{C}-1 = \hat{U}$ e $\hat{C}-2 = \hat{M}$. Como todas as meias faces têm pesos w diferentes de zero, já que $\mathcal{N}_{UHE} = \mathcal{N}_{HE}$, o produto no denominador da equação (249) também é diferente de zero.

O mesmo não ocorre com as equações (240) e (241) uma vez que $\mathcal{N}_{UHE} \neq \mathcal{N}_{HE}$ (ver figura 44a). Nesses casos, pelo menos um peso w é nulo, fazendo com que o denominador na equação (249) seja unitário. Mesmo quando não há meias faces à montante da meia face avaliada, a equação (249) recai na aproximação tradicional unidimensional, tal como pode ser observado fazendo $i = \bar{G}J$ no cenário ilustrado na figura 44a. Nesse caso, $\mathcal{N}_{UHE} = 0$ e a equação (238) é obtida.

Uma forma equivalente à apresentada para a equação (249), porém com aproximação de segunda ordem no erro de truncamento, pode ser naturalmente obtida como:

$$\hat{S}_{w_i} = \frac{1}{\left(1 - \prod_{j=1}^{\mathcal{N}_{HE}} w_j\right)} \left[(1 - w_i) \tilde{S}_{w_{\hat{C}}} + \sum_{k=1}^{\max(1, \mathcal{N}_{UHE})} \left(\prod_{m=0}^{k-1} w_{i-m} \right) (1 - w_{i-k}) \tilde{S}_{w_{\hat{C}-k}} \right] \quad (250)$$

onde $\hat{S}_{w_i}$ é a saturação TM com aproximação de segunda ordem (não confundir $\tilde{S}_{w_i}$ com $\hat{S}_{w_i}$). As saturações $\tilde{S}_{w_{\hat{C}}}$, $\tilde{S}_{w_{\hat{C}-1}}$, etc, são extrapolações avaliadas nos pontos de quadratura das meias faces i , $i-1$, etc, a partir dos respectivos volumes de controle à montante $\hat{C}$, $\hat{C}-1$, etc, tal como indicado na figura 45b (setas tracejadas). Por fim, é importante observar que as equações (249) e (250) podem ser facilmente escritas tendo o fluxo fracionário como variável.

Comparação Entre as Estratégias TMSIC, TMSEC-1 e TMSEC-2

Na presente seção, diferentes variantes da estratégia TM são comparadas no que se refere à aproximação da variável nas meias faces de cada volume de controle avaliado.

A estratégia comum aos trabalhos de Hurtado *et al.* (2007), Kozdon *et al.* (2011) e Keileglaven *et al.* (2012), aqui chamada de TMSIC, é comparada com as duas proposições apresentadas na seção anterior, nominadas TMSEC-1 e TMSEC-2. Na figura 46 dois fragmentos de malha são ilustrados e tomados como referência para a comparação entre as referidas estratégias.

Dado que a abordagem de Hurtado *et al.* (2007) é *node-centered*, por razões didáticas, e sem que se perca generalidade, as análises comparativas são todas feitas com abordagem *cell-centered*, tal como nos trabalhos de Kozdon *et al.* (2011) e Keileglaven *et al.* (2012) e nas proposições apresentadas na seção anterior.

Inicialmente, o caso ilustrado na figura 46a é avaliado. A distribuição de velocidades, mostrada para a região de interação J , na figura 46b, é frequentemente encontrada em problemas clássicos como o de $\frac{1}{4}$ de cinco poços com malha cartesiana (Edwards e Rogers, 1998).

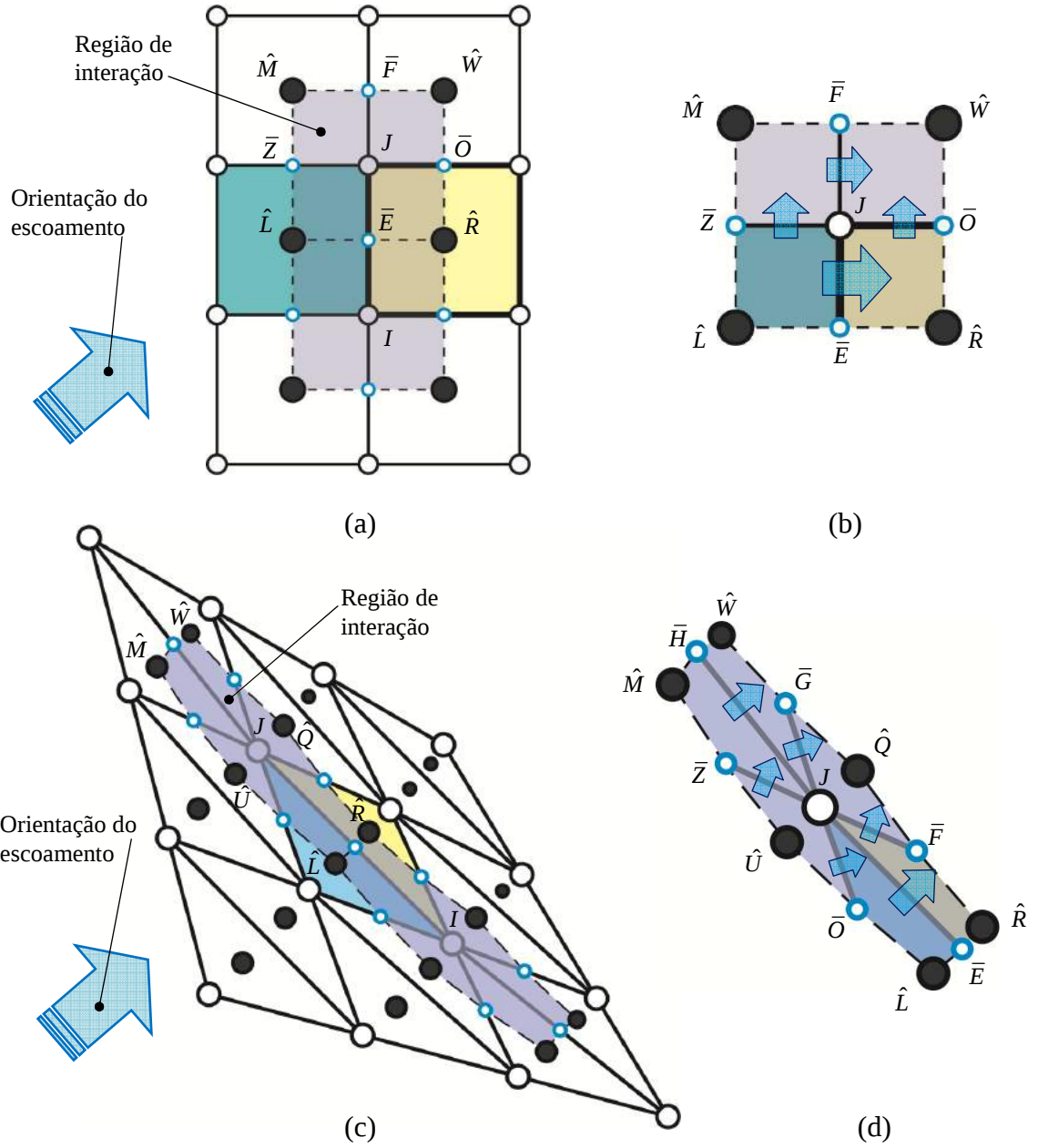


Figura 46. Regiões de interação I e J para duas malhas: (a) fragmento de malha quadrangular com regiões de interação definidas; (b) detalhe da região de interação J com indicação das velocidades nas meias faces; (c) fragmento de malha triangular com regiões de interação definidas; (d) detalhe da região de interação J com indicação das velocidades nas meias faces.

Assim, considerando a estratégia TMSIC com aproximação de primeira ordem, os valores TM de S_w para as meias faces $\bar{E}J$, $\bar{O}J$, $\bar{F}J$ e $\bar{Z}J$, pertencentes à região de interação J , são obtidos da seguinte forma:

$$\tilde{S}_{w_{\bar{E}J}} = (1 - w_{\bar{E}J}) S_{w_{\hat{L}}} + w_{\bar{E}J} \tilde{S}_{w_{\bar{Z}J}} \quad (251)$$

$$\tilde{S}_{w_{\bar{O}J}} = (1 - w_{\bar{O}J}) S_{w_{\hat{R}}} + w_{\bar{O}J} \tilde{S}_{w_{\bar{E}J}} \quad (252)$$

$$\tilde{S}_{w_{\bar{F}J}} = (1 - w_{\bar{F}J}) S_{w_{\hat{M}}} + w_{\bar{F}J} \tilde{S}_{w_{\bar{Z}J}} \quad (253)$$

$$\tilde{S}_{w_{\bar{Z}J}} = (1 - w_{\bar{Z}J}) S_{w_{\bar{L}}} + w_{\bar{Z}J} \tilde{S}_{w_{\bar{E}J}} \quad (254)$$

Nota-se que as equações (251) a (254) são dependentes de valores conhecidos, associados aos respectivos volumes de controle à montante, e valores desconhecidos, associados às respectivas meias faces à montante. Escrevendo as equações (251) a (254) na forma matricial, tal como na equação (222), se obtém:

$$\begin{bmatrix} 1 & 0 & 0 & -w_{\bar{E}J} \\ -w_{\bar{O}J} & 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 & -w_{\bar{F}J} \\ -w_{\bar{Z}J} & 0 & 0 & 1 \end{bmatrix} \begin{Bmatrix} \tilde{S}_{w_{\bar{E}J}} \\ \tilde{S}_{w_{\bar{O}J}} \\ \tilde{S}_{w_{\bar{F}J}} \\ \tilde{S}_{w_{\bar{Z}J}} \end{Bmatrix} = \begin{bmatrix} (1 - w_{\bar{E}J}) & 0 & 0 & 0 \\ 0 & (1 - w_{\bar{O}J}) & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & (1 - w_{\bar{F}J}) \\ (1 - w_{\bar{Z}J}) & 0 & 0 & 0 \end{bmatrix} \begin{Bmatrix} S_{w_{\bar{L}}} \\ S_{w_{\bar{R}}} \\ S_{w_{\bar{W}}} \\ S_{w_{\bar{M}}} \end{Bmatrix} \quad (255)$$

As saturações $\tilde{S}_{w_{\bar{E}J}}$, $\tilde{S}_{w_{\bar{O}J}}$, $\tilde{S}_{w_{\bar{F}J}}$ e $\tilde{S}_{w_{\bar{Z}J}}$ são, portanto, obtidas com a determinação da inversa da matriz do lado esquerdo da equação (255) e consequente multiplicação dessa pela matriz do lado direito da referida equação. Com o auxílio do Wolfram Mathematica® (Wolfram, 1991), as saturações nos pontos de quadratura das meias faces pertencentes à região de interação J são definidas como:

$$\begin{Bmatrix} \tilde{S}_{w_{\bar{E}J}} \\ \tilde{S}_{w_{\bar{O}J}} \\ \tilde{S}_{w_{\bar{F}J}} \\ \tilde{S}_{w_{\bar{Z}J}} \end{Bmatrix} = \begin{bmatrix} 1 & 0 & 0 & 0 \\ w_{\bar{O}J} & (1 - w_{\bar{O}J}) & 0 & 0 \\ w_{\bar{F}J} & 0 & 0 & (1 - w_{\bar{F}J}) \\ 1 & 0 & 0 & 0 \end{bmatrix} \begin{Bmatrix} S_{w_{\bar{L}}} \\ S_{w_{\bar{R}}} \\ S_{w_{\bar{W}}} \\ S_{w_{\bar{M}}} \end{Bmatrix} \quad (256)$$

Uma vez que a forma matricial apresentada na equação (256) é dependente apenas de valores conhecidos de saturação, associados aos volumes de controle pertencentes à região de interação J , as equações (251) a (254) podem ser reescritas da seguinte forma:

$$\tilde{S}_{w_{\bar{E}J}} = S_{w_{\bar{L}}} \quad (257)$$

$$\tilde{S}_{w_{\bar{O}J}} = (1 - w_{\bar{O}J}) S_{w_{\bar{R}}} + w_{\bar{O}J} S_{w_{\bar{L}}} \quad (258)$$

$$\tilde{S}_{w_{\bar{F}J}} = (1 - w_{\bar{F}J}) S_{w_{\bar{M}}} + w_{\bar{F}J} S_{w_{\bar{L}}} \quad (259)$$

$$\tilde{S}_{w_{\bar{Z}J}} = S_{w_{\bar{L}}} \quad (260)$$

Para a configuração ilustrada na figura 46b, a avaliação da região de interação J segundo as duas variantes TM propostas no presente trabalho, recaem no mesmo resultado obtido com a estratégia descrita nos trabalhos de Kozdon *et al.* (2011) e Keileglaven *et al.* (2012).

Na proposta TMSEC-1, a variável TM é simplesmente escrita como uma combinação convexa entre dois valores conhecidos, associados aos volumes de controle ditos adjacente e à montante, tal como descrito na página 123 e equações (227) a (232). Quanto à avaliação das meias faces $\bar{E}J$ e $\bar{Z}J$, as aproximações de $\tilde{S}_{w_{\bar{E}J}}$ e $\tilde{S}_{w_{\bar{Z}J}}$ com TMSEC-1 recaem nas equações

(257) e (260), respectivamente. Nas duas meias faces, a massa sai do volume de controle $\hat{L}$ pelas respectivas meias faces ditas à montante. Assim, os pesos $w_{\bar{E}J}$ e $w_{\bar{Z}J}$ são nulos e a única informação à montante para as duas aproximações é a saturação associada ao volume de controle adjacente $\hat{L}$ (ver figura 46b). Da mesma forma, empregando a estratégia TMSEC-2, na qual a variável em cada meia face é definida pela equação (249), as equações (257) a (260) também são igualmente reproduzidas. Nesse caso, não há diferença entre as três estratégias avaliadas. No entanto, tomando uma segunda configuração de malha e distribuição de velocidades, ilustrada nas figuras 46c e 46d, diferenças significantes aparecem a depender da estratégia TM empregada. As equações definidas para cada meia face da região de interação J , segundo a proposta TMSIC, são dadas da seguinte forma:

$$\tilde{S}_{w_{\bar{E}J}} = (1 - w_{\bar{E}J}) S_{w_{\bar{L}}} + w_{\bar{E}J} \tilde{S}_{w_{\bar{O}J}} \quad (261)$$

$$\tilde{S}_{w_{\bar{F}J}} = (1 - w_{\bar{F}J}) S_{w_{\bar{R}}} + w_{\bar{F}J} \tilde{S}_{w_{\bar{E}J}} \quad (262)$$

$$\tilde{S}_{w_{\bar{G}J}} = (1 - w_{\bar{G}J}) S_{w_{\bar{W}}} + w_{\bar{G}J} \tilde{S}_{w_{\bar{H}J}} \quad (263)$$

$$\tilde{S}_{w_{\bar{H}J}} = (1 - w_{\bar{H}J}) S_{w_{\bar{M}}} + w_{\bar{H}J} \tilde{S}_{w_{\bar{Z}J}} \quad (264)$$

$$\tilde{S}_{w_{\bar{Z}J}} = (1 - w_{\bar{Z}J}) S_{w_{\bar{U}}} + w_{\bar{Z}J} \tilde{S}_{w_{\bar{O}J}} \quad (265)$$

$$\tilde{S}_{w_{\bar{O}J}} = (1 - w_{\bar{O}J}) S_{w_{\bar{U}}} + w_{\bar{O}J} \tilde{S}_{w_{\bar{Z}J}} \quad (266)$$

Assim como feito na equação (255), as equações (233) a (266) são escritas em uma forma matricial, na qual se obtém:

$$\begin{bmatrix} 1 & 0 & 0 & 0 & 0 & -w_{\bar{E}J} \\ -w_{\bar{F}J} & 1 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 & -w_{\bar{G}J} & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 1 & -w_{\bar{H}J} & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 1 & -w_{\bar{Z}J} \\ 0 & 0 & 0 & 0 & -w_{\bar{O}J} & 1 \end{bmatrix} \begin{Bmatrix} \tilde{S}_{w_{\bar{E}J}} \\ \tilde{S}_{w_{\bar{F}J}} \\ \tilde{S}_{w_{\bar{G}J}} \\ \tilde{S}_{w_{\bar{H}J}} \\ \tilde{S}_{w_{\bar{Z}J}} \\ \tilde{S}_{w_{\bar{O}J}} \end{Bmatrix} = \begin{bmatrix} (1 - w_{\bar{E}J}) & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & (1 - w_{\bar{F}J}) & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & (1 - w_{\bar{G}J}) & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & (1 - w_{\bar{H}J}) & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & (1 - w_{\bar{Z}J}) & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & (1 - w_{\bar{O}J}) \end{bmatrix} \begin{Bmatrix} S_{w_{\bar{L}}} \\ S_{w_{\bar{R}}} \\ S_{w_{\bar{Q}}} \\ S_{w_{\bar{W}}} \\ S_{w_{\bar{M}}} \\ S_{w_{\bar{U}}} \end{Bmatrix} \quad (267)$$

Mais uma vez, seguindo o procedimento descrito para o caso anterior, necessário à obtenção da equação (256), as saturações nos pontos de quadraturas das meias faces pertencentes à região de interação J (ver figura 46d) são escritas da seguinte forma:

$$\begin{Bmatrix} \tilde{S}_{w_{\bar{E}J}} \\ \tilde{S}_{w_{\bar{F}J}} \\ \tilde{S}_{w_{\bar{G}J}} \\ \tilde{S}_{w_{\bar{H}J}} \\ \tilde{S}_{w_{\bar{Z}J}} \\ \tilde{S}_{w_{\bar{O}J}} \end{Bmatrix} = \begin{bmatrix} (1-w_{\bar{E}J}) & 0 & 0 & 0 & 0 & w_{\bar{E}J} \\ w_{\bar{F}J}(1-w_{\bar{E}J}) & (1-w_{\bar{F}J}) & 0 & 0 & 0 & w_{\bar{F}J}w_{\bar{E}J} \\ 0 & 0 & 0 & (1-w_{\bar{G}J}) & w_{\bar{G}J}(1-w_{\bar{H}J}) & w_{\bar{G}J}w_{\bar{H}J} \\ 0 & 0 & 0 & 0 & (1-w_{\bar{H}J}) & w_{\bar{H}J} \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 1 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 1 \end{bmatrix} \begin{Bmatrix} S_{w_{\bar{L}}} \\ S_{w_{\bar{R}}} \\ S_{w_{\bar{Q}}} \\ S_{w_{\bar{W}}} \\ S_{w_{\bar{M}}} \\ S_{w_{\bar{U}}} \end{Bmatrix} \quad (268)$$

Deve-se notar que, após a solução do sistema algébrico definido na equação (267), novamente as saturações nas meias faces são função apenas de valores conhecidos, associados aos volumes de controle pertencentes à região de interação J . Nesses termos, as equações (233) a (266) podem ser reescritas como:

$$\tilde{S}_{w_{\bar{E}J}} = (1-w_{\bar{E}J})S_{w_{\bar{L}}} + w_{\bar{E}J}S_{w_{\bar{U}}} \quad (269)$$

$$\tilde{S}_{w_{\bar{F}J}} = (1-w_{\bar{F}J})S_{w_{\bar{R}}} + w_{\bar{F}J}(1-w_{\bar{E}J})S_{w_{\bar{L}}} + w_{\bar{F}J}w_{\bar{E}J}S_{w_{\bar{U}}} \quad (270)$$

$$\tilde{S}_{w_{\bar{G}J}} = (1-w_{\bar{G}J})S_{w_{\bar{W}}} + w_{\bar{G}J}(1-w_{\bar{H}J})S_{w_{\bar{M}}} + w_{\bar{G}J}w_{\bar{H}J}S_{w_{\bar{U}}} \quad (271)$$

$$\tilde{S}_{w_{\bar{H}J}} = (1-w_{\bar{H}J})S_{w_{\bar{M}}} + w_{\bar{H}J}S_{w_{\bar{U}}} \quad (272)$$

$$\tilde{S}_{w_{\bar{Z}J}} = S_{w_{\bar{U}}} \quad (273)$$

$$\tilde{S}_{w_{\bar{O}J}} = S_{w_{\bar{U}}} \quad (274)$$

Essas mesmas aproximações, porém obtidas com a estratégia TMSEC-1, são definidas da seguinte forma:

$$\tilde{S}_{w_{\bar{E}J}} = (1-w_{\bar{E}J})S_{w_{\bar{L}}} + w_{\bar{E}J}S_{w_{\bar{U}}} \quad (275)$$

$$\tilde{S}_{w_{\bar{F}J}} = (1-w_{\bar{F}J})S_{w_{\bar{R}}} + w_{\bar{F}J}S_{w_{\bar{L}}} \quad (276)$$

$$\tilde{S}_{w_{\bar{G}J}} = (1-w_{\bar{G}J})S_{w_{\bar{W}}} + w_{\bar{G}J}S_{w_{\bar{M}}} \quad (277)$$

$$\tilde{S}_{w_{\bar{H}J}} = (1-w_{\bar{H}J})S_{w_{\bar{M}}} + w_{\bar{H}J}S_{w_{\bar{U}}} \quad (278)$$

$$\tilde{S}_{w_{\bar{Z}J}} = S_{w_{\bar{U}}} \quad (279)$$

$$\tilde{S}_{w_{\bar{O}J}} = S_{w_{\hat{U}}} \quad (280)$$

Assim como nas equações (257) e (260), para o primeiro caso avaliado (ver figura 46a), as equações (279) e (280) também têm um caráter unidimensional. Isso ocorre devido à massa sair do volume de controle $\hat{U}$ pelas meias faces $\bar{Z}J$ e $\bar{O}J$. Dessa forma, a única informação à montante para essas meias faces é a variável associada ao referido volume de controle, $S_{w_{\hat{U}}}$ (ver figura 46d), tal como ocorre nas formulações mais tradicionais.

Por outro lado, comparando as equações (269) a (274) com as equações (275) a (280), fica evidente a diferença entre as equações (270) e (271) em relação às equações (276) e (277) respectivamente. Na estratégia TMSIC, utilizada por Kozdon *et al.* (2011) e Keileglaven *et al.* (2012), o acoplamento entre as equações em algumas meias faces produz uma certa robustez à essas aproximações. Nesse caso, as saturações nas meias faces $\bar{F}J$ e $\bar{G}J$, por exemplo, são uma composição dos dados associados aos volumes de controle $\hat{R}$, $\hat{L}$ e $\hat{U}$ (ver equação (270)) e $\hat{W}$, $\hat{M}$ e $\hat{U}$ (ver equação (271)), respectivamente. O mesmo resultado é obtido com a estratégia TMSEC-2, onde o valor da variável em cada meia face é definido pela equação (249). Por outro lado, as aproximações com TMSEC-1, apresentadas nas equações (276) e (277), são compostas, respectivamente, por dados associados aos volumes de controle $\hat{R}$, $\hat{L}$ e $\hat{W}$, $\hat{M}$. A consequência dessa diferença pode ser observada no exemplo, apresentado na seção 4.3.4 (escoamento tipo pistão com elevada razão de mobilidade).

Basicamente, o que diferencia as estratégias TMSIC e TMSEC-2 da estratégia TMSEC-1 é que nas duas primeiras, o cálculo da variável em cada meia face é influenciado por todas as meias faces com velocidade à montante em relação à meia face avaliada. Na estratégia TMSEC-1, apenas uma meia face à montante é considerada na composição multidimensional, independente da configuração de malha e distribuição de velocidades. Tomando como exemplo a meia face $\bar{G}J$ na qual a massa vai do volume de controle $\hat{W}$ para o volume de controle $\hat{Q}$. A vazão calculada sobre as meias faces $\bar{H}J$ e $\bar{Z}J$ seguem a mesma orientação de $\bar{G}J$. Dessa forma, os dados à montante dessas três meias faces contribuem para o cálculo implícito (TMSIC) ou explícito (TMSEC-2) de $\tilde{S}_{w_{\bar{G}J}}$, tal como se vê na equação (271).

Deve-se observar também que na avaliação da meia face $\bar{H}J$, apenas a meia face $\bar{Z}J$ tem vazão com orientação semelhante (ver figura 46d). Por isso a aproximação obtida com TMSIC e TMSEC-2, apresentada na equação (272), é idêntica à obtida com a estratégia TMSEC-1.

Modificação para Malhas Distorcidas

Na presente seção, a aproximação TM que convencionalmente segue a orientação do escoamento apenas pela razão Λ entre as vazões nas meias faces avaliada e à montante, é modificada. O efeito da multidimensionalidade da aproximação em cada superfície de controle é aumentado ou diminuído em função da distorção da malha adotada. Dependendo do ângulo θ entre as referidas meias faces (ver figura 47), um fator multiplicador $0 \leq \chi(\theta) \leq 2$ modifica a razão Λ e, consequentemente, o peso w^{SMU} .

A modificação, aqui proposta, é restrita à função de controle do tipo SMU devido ao seu comportamento suave (ver figura 40). Para qualquer razão Λ , há um valor correspondente de w^{SMU} . Assim, a influência de um fator multiplicador $\chi(\theta)$ sobre a razão Λ , elevando ou diminuindo seu valor, sempre vai proporcionar um novo peso w^{M-SMU} (*Modified Smooth*

Multidimensional Upstream). O mesmo não ocorre para a função de controle do tipo $\mathcal{W}^{TMU}$, na qual se tem $\mathcal{W}^{TMU} = 1$ para qualquer razão $\Lambda > 1$ (ver figura 40). Nesse caso, eventuais valores de $\chi(\theta) > 1$, representando um aumento na multidimensionalidade da aproximação, não influenciam $\mathcal{W}^{TMU}$ se Λ , definido pela razão entre vazões, já tiver valor unitário ou maior do que um.

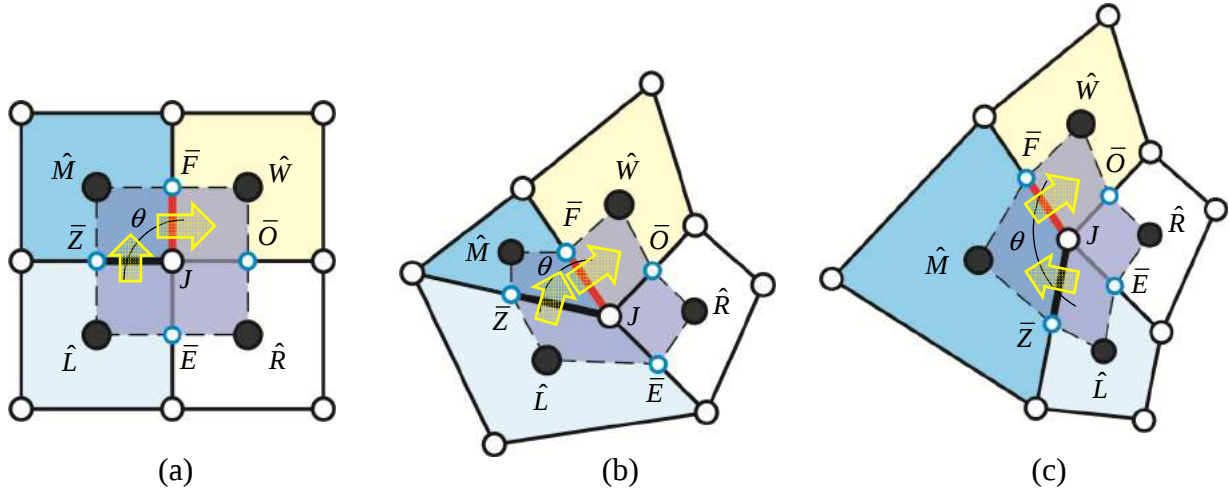


Figura 47. Malhas onde a multidimensionalidade da solução é ampliada ou restringida: (a) não há influência da distorção angular, $\theta = 90^\circ$, $\chi(\theta) = 1$; (b) o volume de controle $\hat{L}$ está mais à montante da meia face $J\bar{F}$, $\theta < 90^\circ$, $\chi(\theta) > 1$; (c) o volume de controle $\hat{L}$ está menos à montante da meia face $J\bar{F}$, $\theta > 90^\circ$, $\chi(\theta) < 1$.

Assim, o peso $\mathcal{W}^{SMU}$, originalmente calculado pela equação (218), é modificado pela influência da distorção angular da malha, sendo, portanto, dado como:

$$\mathcal{W}^{M-SMU} = \frac{\chi(\theta)\Lambda}{[1 + \chi(\theta)\Lambda]} \quad (281)$$

Tomando a figura 47 como referência, o valor TM de S_w é definido na meia face $J\bar{F}$, dependendo da orientação do escoamento, pela combinação convexa entre $\bar{S}_{w_M}$ e $\bar{S}_{w_L}$, em aproximações de primeira ordem, ou $\tilde{S}_{w_M}$ e $\tilde{S}_{w_L}$ em aproximações de alta ordem. O raciocínio é análogo para f_w . A ideia dessa intervenção é que para malhas ortogonais, onde $\theta = 90^\circ$ (figura 47a), se tenha $\chi(\theta) = 1$, e consequentemente, $\mathcal{W}^{M-SMU} = \mathcal{W}^{SMU}$. Apenas a razão entre as vazões nas meias face avaliada e à montante determinam o quão multidimensional é a aproximação. Por outro lado, distorções na malha devem influenciar a combinação linear convexa dada pelas equações (227) a (229), (231) e (232), a depender do ângulo θ formado entre as meias faces $J\bar{F}$ e $J\bar{Z}$, no exemplo ilustrado na figura 47. Para $\theta < 90^\circ$, o volume de controle $\hat{L}$ está mais próximo da meia face $J\bar{F}$ onde o fluxo numérico é calculado (ver figura 47b). Nesse caso, a contribuição de S_w ou f_w a partir desse volume de controle deve ser mais atuante. Na presente proposta, o valor máximo admitido para $\chi(\theta)$ é 2, dobrando o valor de Λ quando o ângulo θ tende para 0. Seguindo o mesmo raciocínio, para o caso ilustrado na figura 47c, onde $\theta > 90^\circ$, a contribuição da variável avaliada a partir do volume de controle $\hat{L}$

sobre o fluxo na meia face $J\bar{F}$ deve ser reduzida. Assim, $\chi(\theta)$ tende a zero para um ângulo θ próximo de 180° .

A relação entre o ângulo θ e o fator multiplicador $\chi(\theta)$ é, no presente trabalho, dada pelas seguintes funções:

$$\chi_1(\theta) = \max \left[0, \left(2 - \frac{\theta}{90^\circ} \right) \right] \quad (282)$$

$$\chi_2(\theta) = \max \left[0, \left(1 - \sqrt[3]{\frac{\theta}{90^\circ} - 1} \right) \right] \quad (283)$$

Na figura 48, os gráficos relacionando o ângulo de distorção θ com os fatores multiplicadores $\chi_1(\theta)$ e $\chi_2(\theta)$ são ilustrados.

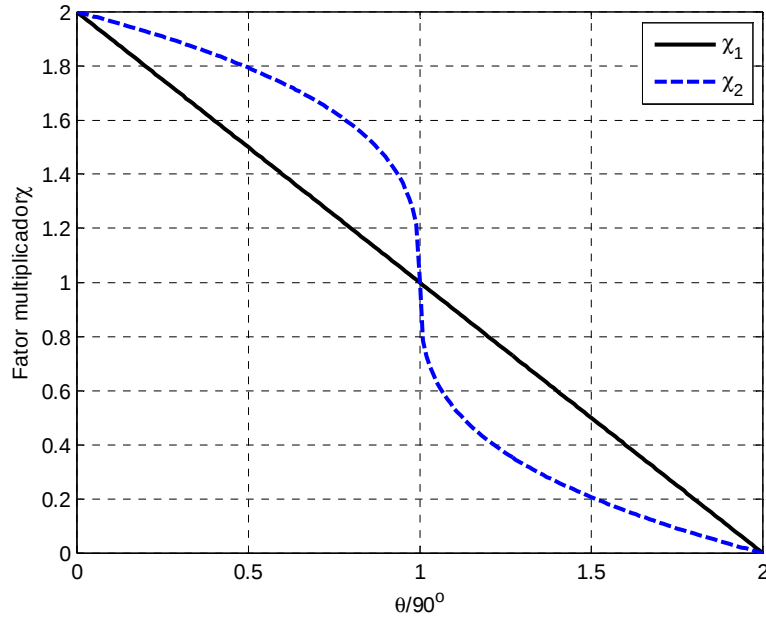
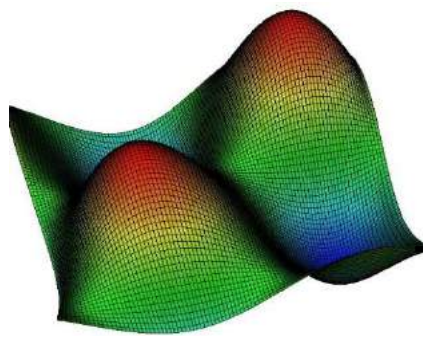


Figura 48. Gráficos que relacionam o ângulo θ formado entre as meias faces avaliada e à montante com o fator multiplicador $\chi(\theta)$ para as duas estratégias apresentadas nas equações (282) e (283).

É possível verificar que, na prática, a diferença entre as duas propostas para $\chi(\theta)$ está no valor do fator multiplicador para um dado ângulo de distorção θ . No entanto, ambos têm em comum o valor unitário para malhas ortogonais ($\theta = 90^\circ$). No capítulo de aplicações, o efeito das funções apresentadas nas equações (282) e (283) são observados. Os resultados obtidos com a combinação convexa, definida com o peso modificado w^{M-SMU} , são devidamente comparados com os resultados obtidos com as aproximações TM definidas com os pesos w^{TMU} (Schneider e Raw, 1986; Tran *et al.*, 2005) e w^{SMU} (Hurtado *et al.*, 2007; Kozdon *et al.*, 2011).



4

Aplicações

4.1. Introdução

No presente capítulo as técnicas numéricas apresentadas ao longo deste trabalho têm seu desempenho avaliado na solução de problemas propostos na literatura (*benchmarks*). Em alguns casos, há a necessidade de adaptação do problema, em relação à abordagem original. Essas adaptações compreendem mudança na malha ou relações constitutivas adotadas nas publicações de referência. Assim, características particulares da formulação avaliada podem ser melhores exploradas. Inicialmente, problemas que representam o escoamento monofásico em reservatórios de petróleo, heterogêneos, anisotrópicos ou com as duas características, são avaliados. O desempenho das formulações baseadas no Método de Volumes Finitos do tipo MPFA, reproduzidas da literatura (Aavatsmark *et al.*, 1998; Edwards e Zheng, 2008; Chen *et al.*, 2008) e descritas na seção 3.3.2, é confrontado com o desempenho obtido com o tradicional Método de Volumes Finitos TPFA, largamente usado em simuladores comerciais para aproximar os fluxos de Darcy (Peaceman, 1977; Ponting, 1989 *apud* Aavatsmark, 2002).

Nas aplicações voltadas para o escoamento bifásico, alguns algoritmos já existentes na literatura ou aqui propostos são avaliados pela primeira vez no contexto da simulação de escoamentos em reservatório de petróleo, incluindo as funções limitadoras do tipo MLP, propostas por Park *et al.* (2010), a correção de entropia, proposta por Serna (2009), e uma variante das formulações ditas Verdadeiramente Multidimensionais com correção para malhas distorcidas, além das soluções obtidas com ou sem o tratamento de poço apresentado na seção 3.4.2. As equações que representam as relações constitutivas utilizadas nos problemas de escoamento bifásico foram todas apresentadas no capítulo 2 e aqui são apenas referenciadas com possíveis mudanças em seus coeficientes.

Em alguns problemas, há a necessidade de quantificar os erros nos campos de pressão, vazão ou saturação, obtidos numericamente, em relação a valores de referência. Esses, por sua vez, podem ser a solução analítica do problema ou soluções numéricas obtidas com malhas muito refinadas e uma formulação clássica e robusta disponível na literatura, uma vez que nem sempre se tem a solução analítica do problema. As normas do máximo (E_{L_∞}), L_1 (E_{L_1}) e L_2 (E_{L_2}) são empregadas na quantificação desses erros, não necessariamente no mesmo problema. Cada uma das referidas normas é dada, respectivamente, pelas seguintes relações (Carvalho, 2005):

$$E_{L_\infty}^u = \max |u(\bar{x}) - \hat{u}| \quad (284)$$

$$E_{L_1}^u = \frac{\sum_{i=1}^{\mathcal{N}_{VC}} |u(\vec{x}) - \hat{u}| \Omega_i}{\sum_{i=1}^{\mathcal{N}_{VC}} \Omega_i} \quad (285)$$

$$E_{L_2}^u = \sqrt{\frac{\sum_{i=1}^{\mathcal{N}_{VC}} (u(\vec{x}) - \hat{u})^2 \Omega_i}{\sum_{i=1}^{\mathcal{N}_{VC}} \Omega_i}} \quad (286)$$

onde $u(\vec{x})$ e $\hat{u}$ são os valores da pressão, velocidade normal à face ou saturação, calculados em cada ponto de colocação com coordenada $\vec{x}$, obtidos por meio das soluções analítica e numérica, respectivamente. O parâmetro Ω_i é o volume (área em 2-D) de cada volume de controle i onde a solução é avaliada. Na avaliação dos erros para o campo de velocidades, Ω_i é substituído por Γ_i , que representa a área de cada face (comprimento da aresta em domínios 2-D) que constitui o volume de controle. Essa modificação se dá uma vez que a velocidade é obtida nas faces dos volumes de controle. As taxas de convergência nas aproximações numéricas dos campos de pressão, velocidade e saturação R_u , são calculadas, como:

$$R_u = \frac{\log \left[E_{L_i}^u(h_2) / E_{L_i}^u(h_1) \right]}{\log(h_2/h_1)}, \quad \text{com } u = p, v, S_w \text{ e } i = \infty, 1, 2 \quad (287)$$

onde h é o tamanho médio do volume de controle em cada direção coordenada (x e y). Esse parâmetro é equivalente a $\Delta x = \Delta y$ em uma malha cartesiana regular. Mesmo em malhas não estruturadas, h é aproximadamente equivalente ao tamanho do domínio em cada direção coordenada, dividido pelo número de subdivisões adotado (1/8; 1/16; 1/32; etc.).

4.2. Escoamento Monofásico

Na presente seção, a equação (24) é resolvida numericamente para três problemas *benchmark* encontrados na literatura. Os dois primeiros casos têm solução analítica conhecida. Dessa forma, a representação exata de campos lineares e a obtenção da taxa de convergência esperada, para cada formulação, é avaliada. Descontinuidades no campo de permeabilidade, distorções na malha e anisotropia são fatores que podem implicar na inabilidade de se obter soluções lineares por parte e com taxa de convergência de segunda ordem (Aavatsmark, 2002; Lipnikov *et al.*, 2007). No terceiro caso, o respeito ao princípio dos extremos (valores máximos ou mínimos) é avaliado para um meio heterogêneo, com elevada anisotropia e sujeito à condições de contorno que delimitam o máximo e mínimo valores admissíveis para se ter coerência com a física envolvida no problema.

4.2.1. Escoamento Monofásico Unidimensional em Reservatório Heterogêneo e Isotrópico

Inicialmente, avaliam-se as formulações numéricas adotadas no presente trabalho para resolver a equação de pressão, quanto à sua capacidade em reproduzir, exatamente, um campo de pressões com distribuição linear. Para isso, um problema adaptado de Rees *et al.* (2004 *apud* Carvalho, 2005) é utilizado na presente seção. Variações desse *benchmark* podem ser encontradas nos trabalhos de Eigestad e Klausen (2005) e Queiroz *et al.*, (2014). O problema consiste em um domínio com dimensões $[0,2] \times [0,1]$, ilustrado na figura 49a. Esse é constituído de dois materiais isotrópicos com diferentes valores de permeabilidade, cujos tensores $\tilde{K}_1$ e $\tilde{K}_2$ (ver figura 49a) são dados, respectivamente, por:

$$\tilde{K}_1 = \begin{bmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1 \end{bmatrix}, \quad x < 1; \quad \tilde{K}_2 = \begin{bmatrix} 2 & 0 \\ 0 & 2 \end{bmatrix}, \quad x > 1 \quad (288)$$

Condições de contorno de valor prescrito (Dirichlet), com $p_{Esq} = 0$ em $x = 0$ e $p_{Dir} = 1$ em $x = 2$, são atribuídas às faces Γ_D , à esquerda e à direita do domínio ilustrado na figura 49a, respectivamente. Adicionalmente, uma condição de fluxo nulo é atribuída às faces Γ_N superior e inferior do referido domínio.

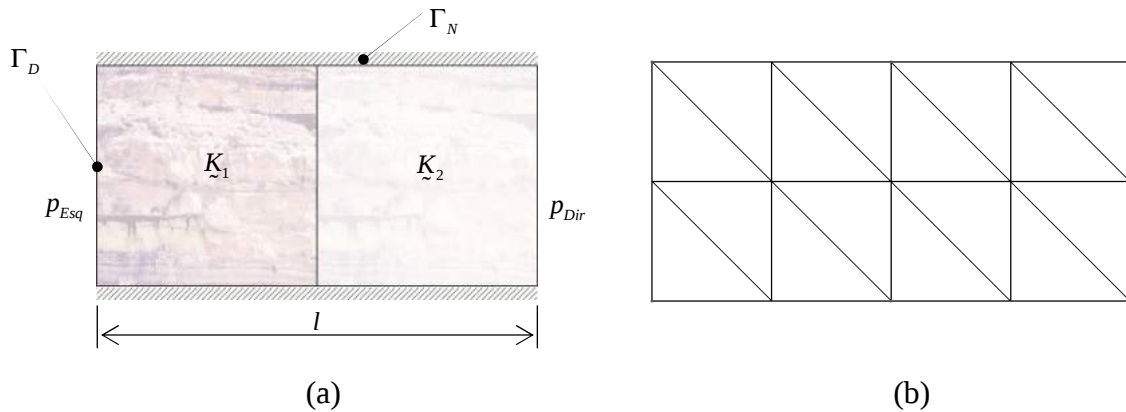


Figura 49. Escoamento monofásico unidimensional em reservatório heterogêneo e isotrópico: (a) domínio computacional e representação das duas rochas; (b) malha triangular utilizada com 4x2 subdivisões.

A solução analítica, utilizada como parâmetro de referência no cálculo das normas de erro, é dada da seguinte forma:

$$p(x) = \begin{cases} p_{Esq} + \left(\frac{p_{Esq} - p_{Dir}}{(l_1 - l) - \frac{K_2}{K_1} l_1} \right) \frac{K_2}{K_1} x, & \text{se } x \leq 1 \\ p_{Dir} - \left(\frac{p_{Esq} - p_{Dir}}{(l_1 - l) - \frac{K_2}{K_1} l_1} \right) (l - x), & \text{se } x > 1 \end{cases} \quad (289)$$

onde l_1 e l são os comprimentos do trecho à esquerda da descontinuidade de material e do reservatório inteiro, respectivamente (ver figura 49a). Os escalares K_1 e K_2 , multiplicam uma matriz identidade $\underline{I}$ e definem os tensores apresentados na equação (288).

Em problemas com natureza unidimensional (ver figura 49a), cuja distribuição de permeabilidade se dá de forma descontínua, soluções numéricas ditas lineares por parte (Aavatsmark *et al.*, 1996; Eigestad e Klausen, 2005; Gao e Wu, 2010), são exatas em cada trecho do domínio, à montante e à jusante da descontinuidade. Isso confere à formulação numérica uma característica relevante (Aavatsmark *et al.*, 1996).

Na tabela 1, se verifica que as formulações TPFA, MPFA-O, MPFA-FPS e MPFA-*Enriched* produzem, para o problema em discussão, erros equivalentes ao “zero de máquina”, i.e., conseguem reproduzir a solução exata, por partes. Uma malha triangular, estruturada, com 16 volumes de controle (ver figura 49b) é utilizada. No entanto, para qualquer densidade de malha utilizada, a mesma solução é obtida.

Tabela 1. Erros, segundo as normas do máximo (L_∞) e L_2 , para o campo de pressões e velocidades obtidos com os esquemas numéricos TPFA, MPFA-O, MPFA-FPS e MPFA-*Enriched*.

Método	$E_{L_\infty}^p$	$E_{L_2}^p$	$E_{L_2}^{\vec{v} \cdot \vec{N}}$
TPFA	$1,65 \times 10^{-13}$	$5,80 \times 10^{-14}$	$3,43 \times 10^{-14}$
MPFA-O	$2,33 \times 10^{-15}$	$1,39 \times 10^{-15}$	$3,75 \times 10^{-15}$
FPS	$7,77 \times 10^{-16}$	$2,22 \times 10^{-16}$	$2,47 \times 10^{-15}$
MPFA- <i>Enriched</i>	$1,33 \times 10^{-15}$	$5,64 \times 10^{-16}$	$2,60 \times 10^{-15}$

É importante ressaltar que muitas formulações numéricas, mesmo do tipo MPFA, não são hábeis para obter esse tipo de aproximação (Rees *et al.*, 2004 *apud* Carvalho, 2005; Chang e Yuan, 2009). Queiroz *et al.* (2014) observam que formulações centradas na célula com construção não linear do operador elíptico (Lepotier, 2005; Lipnikov *et al.*, 2007; Chang e Yuan, 2009), podem não preservar a linearidade das soluções. Em geral, nessas formulações, a vazão em cada face do volume de controle é construída também com o auxílio de valores nodais de pressão. Esses, por sua vez, são interpolados e escritos com dependência nas pressões associadas aos volumes de controle em torno de cada nó. Para certas estratégias de interpolação, possíveis descontinuidades na distribuição de permeabilidade são suavizadas (Lipnikov *et al.*, 2007; Chang e Yuan, 2009). Nesses casos, a solução aproximada não reproduz exatamente campos lineares por parte (Queiroz *et al.*, 2014).

4.2.2. Escoamento Monofásico em Reservatório Heterogêneo e Levemente Anisotrópico

No problema, obtido de Edwards e Rogers (1998), o reservatório é levemente anisotrópico (ortótropo) e heterogêneo. Dois materiais compõem um domínio quadrado de dimensões $[0,1]^2$ com descontinuidade em $x=0,5$, como mostrado na figura 50a. Os tensores de permeabilidade considerados são dados, como:

$$\underline{K}_1 = \begin{bmatrix} 50 & 0 \\ 0 & 1 \end{bmatrix}, \quad x < \frac{1}{2}; \quad \underline{K}_2 = \begin{bmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 10 \end{bmatrix}, \quad x > \frac{1}{2} \quad (290)$$

A solução analítica, que também é aplicada em Γ_D como condição de contorno de Dirichlet, é dada por:

$$p(x, y) = \begin{cases} \mathcal{P}_1(x, y), & \text{se } x \leq 0,5 \\ \mathcal{P}_2(x, y), & \text{se } x > 0,5 \end{cases} \quad (291)$$

onde $\mathcal{P}_1(x, y)$ e $\mathcal{P}_2(x, y)$ são, respectivamente, obtidos por:

$$\mathcal{P}_1(x, y) = \left[\frac{K_1^{xx} K_1^{yy}}{K_2^{xx} K_2^{yy}} \frac{4}{\left(\left(\frac{K_1^{xx}}{K_2^{xx}} - 2 \right) \frac{K_1^{yy}}{K_2^{yy}} + 1 \right)} \right] x^2 - \left[\frac{K_2^{xx}}{K_2^{yy}} \frac{4}{\left(\left(\frac{K_1^{xx}}{K_2^{xx}} - 2 \right) \frac{K_1^{yy}}{K_2^{yy}} + 1 \right)} \right] y^2 \quad (292)$$

$$\mathcal{P}_2(x, y) = 1 + \left[\left(\frac{K_1^{yy}}{K_2^{yy}} - 1 \right) \frac{4x}{\left(\left(\frac{K_1^{xx}}{K_2^{xx}} - 2 \right) \frac{K_1^{yy}}{K_2^{yy}} + 1 \right)} \right] + \left[\frac{4x^2}{\left(\left(\frac{K_1^{xx}}{K_2^{xx}} - 2 \right) \frac{K_1^{yy}}{K_2^{yy}} + 1 \right)} \right] - \left[\frac{K_2^{xx}}{K_2^{yy}} \frac{4y^2}{\left(\left(\frac{K_1^{xx}}{K_2^{xx}} - 2 \right) \frac{K_1^{yy}}{K_2^{yy}} + 1 \right)} \right] \quad (293)$$

Os parâmetros K_1^{xx} e K_1^{yy} , nas equações (292) e (293) são os componentes diagonais do tensor de permeabilidade $\underline{K}_1$, à esquerda da descontinuidade. Analogamente, K_2^{xx} e K_2^{yy} são componentes do tensor $\underline{K}_2$, à direita da descontinuidade, como indicado na figura 50a.

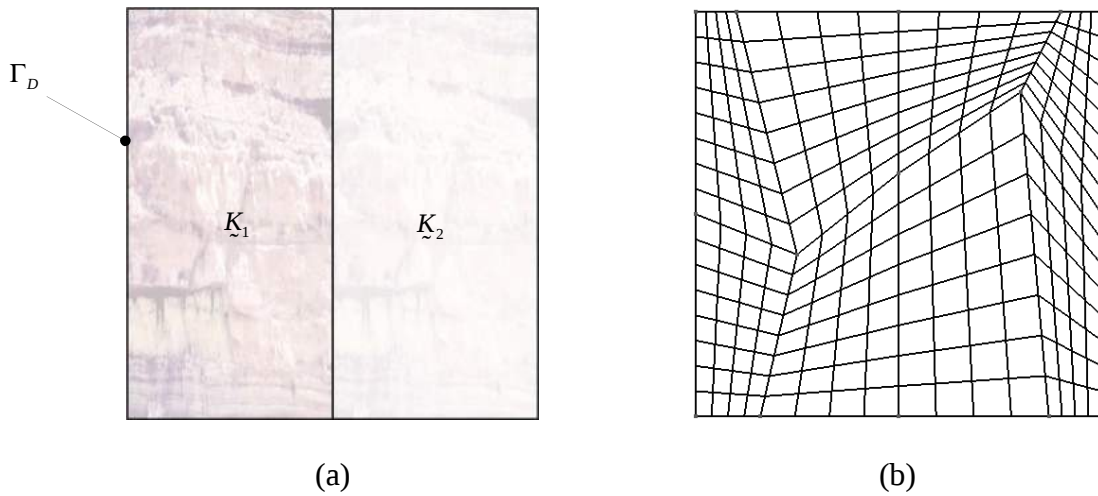


Figura 50. Escoamento monofásico em reservatório heterogêneo e ortotrópico: (a) domínio com dois materiais; (b) uma das malhas utilizadas (com 16x16 subdivisões) na avaliação de cada formulação.

No presente caso, uma malha quadrangular distorcida, obtida de Edwards e Rogers (1998) é empregada com densidades variando entre 8 a 128 subdivisões em cada direção (x,y). Erros e taxa de convergência para os esquemas numéricos aqui abordados são, portanto, apresentados nas tabelas 2, 3 e 4. Os erros são obtidos para as normas do máximo valor (L_∞), apenas para a pressão, e L_2 , para pressão e velocidade. A taxa de convergência para pressão e velocidade é calculada segundo a equação (287).

Tabela 2. Erros e taxas de convergência para o campo de pressão, segundo a norma do máximo valor (L_∞), para os esquemas numéricos TPFA, MPFA-O, MPFA-FPS e MPFA-Enriched.

Método	Norma do Max. /taxa de converg.	$h = 1/8$	$h = 1/16$	$h = 1/32$	$h = 1/64$	$h = 1/128$
TPFA	$E_{L_\infty}^p$	$5,49 \times 10^{-1}$	$6,09 \times 10^{-1}$	$6,55 \times 10^{-1}$	$6,75 \times 10^{-1}$	$6,86 \times 10^{-1}$
	$R_{L_\infty}^p$	----	$-1,48 \times 10^{-1}$	$-1,05 \times 10^{-1}$	$-4,30 \times 10^{-2}$	$-2,34 \times 10^{-2}$
MPFA-O	$E_{L_\infty}^p$	$1,35 \times 10^{-2}$	$5,45 \times 10^{-3}$	$1,65 \times 10^{-3}$	$4,68 \times 10^{-4}$	$1,27 \times 10^{-4}$
	$R_{L_\infty}^p$	----	1,31	1,72	1,81	1,88
MPFA-FPS	$E_{L_\infty}^p$	$1,34 \times 10^{-2}$	$5,14 \times 10^{-3}$	$1,60 \times 10^{-3}$	$4,54 \times 10^{-4}$	$1,27 \times 10^{-4}$
	$R_{L_\infty}^p$	----	1,38	1,67	1,82	1,83
MPFA-Enriched	$E_{L_\infty}^p$	$1,37 \times 10^{-2}$	$5,30 \times 10^{-3}$	$1,57 \times 10^{-3}$	$4,56 \times 10^{-4}$	$1,52 \times 10^{-4}$
	$R_{L_\infty}^p$	----	1,37	1,75	1,78	1,58

Tabela 3. Erros e taxas de convergência para o campo de pressão, segundo a norma L_2 , para os esquemas numéricos TPFA, MPFA-O, MPFA-FPS e MPFA-Enriched.

Método	Norma L_2 /taxa de converg.	$h = 1/8$	$h = 1/16$	$h = 1/32$	$h = 1/64$	$h = 1/128$
TPFA	$E_{L_2}^p$	$1,42 \times 10^{-1}$	$1,39 \times 10^{-1}$	$1,49 \times 10^{-1}$	$1,50 \times 10^{-1}$	$1,50 \times 10^{-1}$
	$R_{L_2}^p$	----	$3,04 \times 10^{-2}$	$-9,47 \times 10^{-2}$	$-8,16 \times 10^{-3}$	$-2,15 \times 10^{-3}$
MPFA-O	$E_{L_2}^p$	$4,74 \times 10^{-3}$	$1,50 \times 10^{-3}$	$4,14 \times 10^{-4}$	$1,08 \times 10^{-4}$	$2,74 \times 10^{-5}$
	$R_{L_2}^p$	----	1,66	1,85	1,94	1,97
MPFA-FPS	$E_{L_2}^p$	$4,78 \times 10^{-3}$	$1,61 \times 10^{-3}$	$4,58 \times 10^{-4}$	$1,20 \times 10^{-4}$	$3,08 \times 10^{-5}$
	$R_{L_2}^p$	----	1,56	1,81	1,92	1,97
MPFA-Enriched	$E_{L_2}^p$	$4,63 \times 10^{-3}$	$1,53 \times 10^{-3}$	$4,34 \times 10^{-4}$	$1,14 \times 10^{-4}$	$2,94 \times 10^{-5}$
	$R_{L_2}^p$	----	1,59	1,82	1,91	1,96

Conforme esperado, a solução numérica do problema em discussão não converge, para pressão ou velocidade, quando o TPFA é usado. A distorção angular da malha, associada aos tensores de permeabilidade adotados, produzem termos não representados pelo TPFA. Isso leva a solução numérica de outro problema físico, como demonstrado em Carvalho (2005).

Comparando os resultados obtidos com as formulações do tipo MPFA, se verifica nas tabelas 3 e 4 e figura 51, taxas de convergência de, aproximadamente, segunda ordem para o capo de pressão. A avaliação dos erros na velocidade, indicam uma taxa de convergência de ordem maior do que um. Apenas a norma L_2 é empregada nesse caso. Embora seja menos conservadora, em relação à norma do máximo valor (L_∞), a norma L_2 é largamente empregada na literatura nesse tipo de análise (Crompton *et al.*, 1995; Lipnikov *et al.*, 2007; Chen *et al.*, 2008; Edwards e Zheng, 2008; Gao e Wu, 2010).

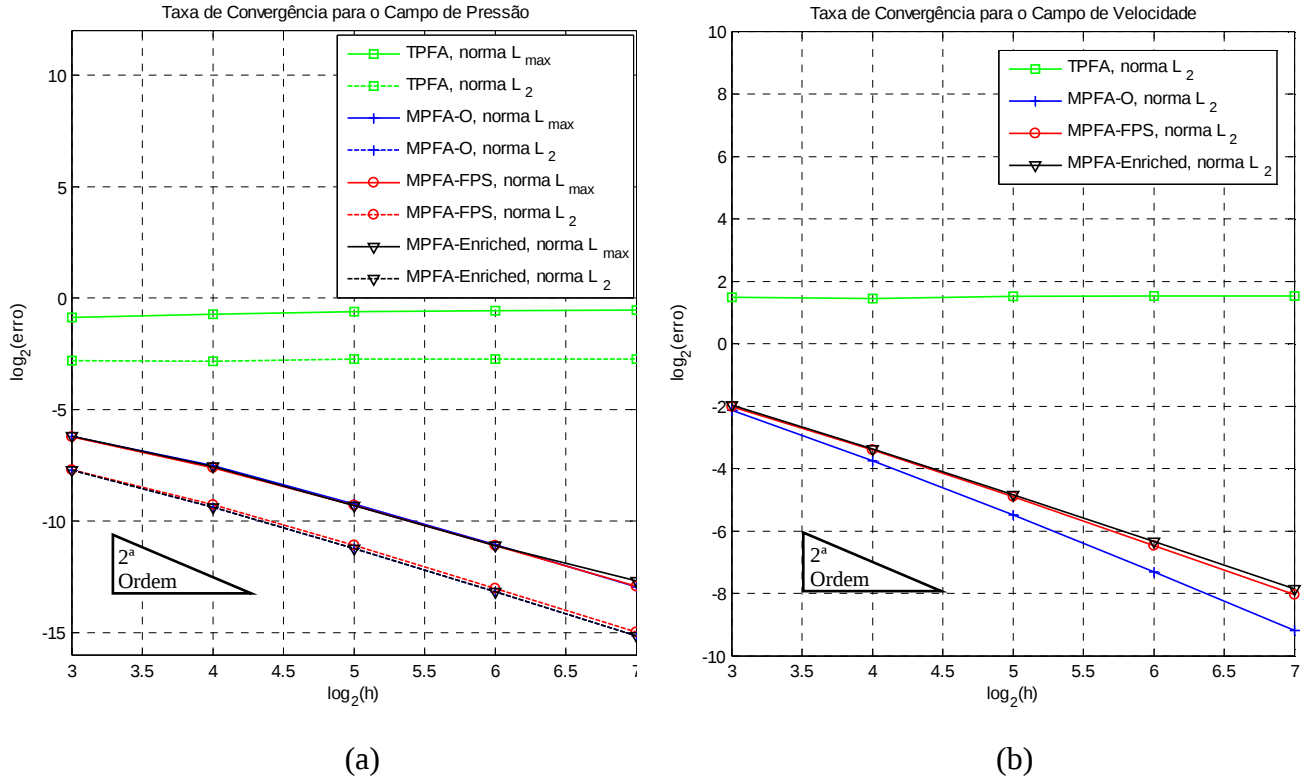


Figura 51. Gráficos de taxa de convergência: (a) para o campo de pressão utilizando as normas do máximo valor L_∞ e L_2 ; (b) para o campo de velocidade utilizando a norma L_2 .

Ainda de acordo com os dados apresentados nas tabelas 3 e 4, a formulação MPFA-O proporciona o menor erro dentre os obtidos com os esquemas numéricos do tipo MPFA. Utilizando a norma L_2 , obteve-se um erro de $2,74 \times 10^{-5}$ para o campo de pressão e $1,72 \times 10^{-3}$ para o campo de velocidade (ver tabelas 3 e 4). Ambos obtidos com malha de 128×128 subdivisões.

Os esquemas numéricos MPFA-FPS e MPFA-Enriched têm comportamentos similares para a referida norma de erro (ver figura 51a). Pequenas melhorias são observadas na avaliação da pressão para o MPFA-Enriched. Da mesma forma, essa leve melhoria também é vista na avaliação da velocidade com o uso do MPFA-FPS.

Para os erros obtidos com a norma do máximo (L_∞), apresentados na tabela 2 apenas na avaliação da pressão, se observa, em geral, um desempenho equilibrado entre os métodos do tipo MPFA, avaliados até a malha de 64×64 subdivisões. Para a malha com 128×128 subdivisões, o MPFA-Enriched apresenta uma pequena degradação na taxa de convergência, com erro de $1,52 \times 10^{-4}$ e taxa de convergência de 1,58.

Tabela 4. Erros e taxas de convergência para o campo de velocidade, segundo a norma L_2 , para os esquemas numéricos TPFA, MPFA-O, MPFA-FPS e MPFA-Enriched.

Método	Norma L_2 / taxa de converg.	$h = 1/8$	$h = 1/16$	$h = 1/32$	$h = 1/64$	$h = 1/128$
TPFA	$E_{L_2}^v$	2,80	2,73	2,86	2,87	2,87
	$R_{L_2}^v$	----	$3,74 \times 10^{-2}$	$-6,78 \times 10^{-2}$	$-6,58 \times 10^{-3}$	$-3,53 \times 10^{-4}$
MPFA-O	$E_{L_2}^v$	$2,29 \times 10^{-1}$	$7,46 \times 10^{-2}$	$2,22 \times 10^{-2}$	$6,29 \times 10^{-3}$	$1,72 \times 10^{-3}$
	$R_{L_2}^v$	----	1,62	1,74	1,82	1,87
MPFA-FPS	$E_{L_2}^v$	$2,47 \times 10^{-1}$	$9,44 \times 10^{-2}$	$3,33 \times 10^{-2}$	$1,12 \times 10^{-2}$	$3,78 \times 10^{-3}$
	$R_{L_2}^v$	----	1,38	1,50	1,56	1,57
MPFA-Enriched	$E_{L_2}^v$	$2,55 \times 10^{-1}$	$9,59 \times 10^{-2}$	$3,50 \times 10^{-2}$	$1,23 \times 10^{-2}$	$4,31 \times 10^{-3}$
	$R_{L_2}^v$	----	1,41	1,45	1,50	1,52

As formulações MPFA-O e MPFA-FPS apresentam, ambos, erro de $1,27 \times 10^{-4}$ e taxa de convergência de 1,88 e 1,83, respectivamente. Na figura 52, a distribuição de pressão é ilustrada para os esquemas numéricos TPFA (figura 52a), MPFA-O (figura 52b).

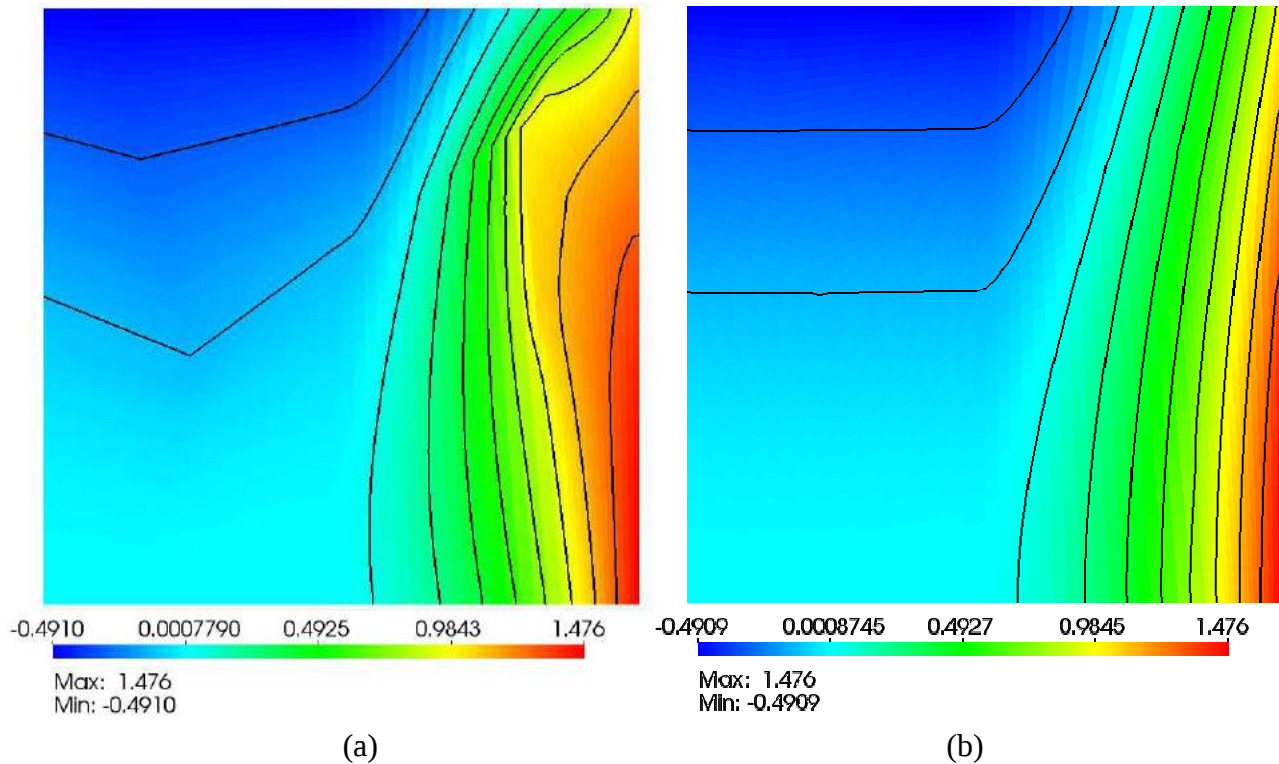


Figura 52. Campo de pressão obtido com malha quadrangular com 64×64 subdivisões em reservatório heterogêneo e ortotrópico: (a) usando o método TPFA; (b) usando o método MPFA-O.

Os esquemas numéricos MPFA-FPS e MPFA-Enriched reproduzem exatamente o campo de pressão apresentado na figura 52b. Enquanto as soluções com os métodos MPFA

apresentam a mesma distribuição de pressão, a solução obtida com o método TPFA sofre forte influência da malha adotada, como se pode ver na figura 52b.

4.2.3. Escoamento Monofásico em Reservatório Heterogêneo e Muito Anisotrópico com Furo Quadrado

O problema obtido de Queiroz *et al.* (2014) envolve um domínio quadrado de dimensões $[0,1]^2$, porém com um furo quadrado no centro com dimensões $[4/9, 5/9]^2$. Dois materiais K_1 e K_2 com elevada razão de anisotropia compõem esse domínio, ilustrado na figura 53a.

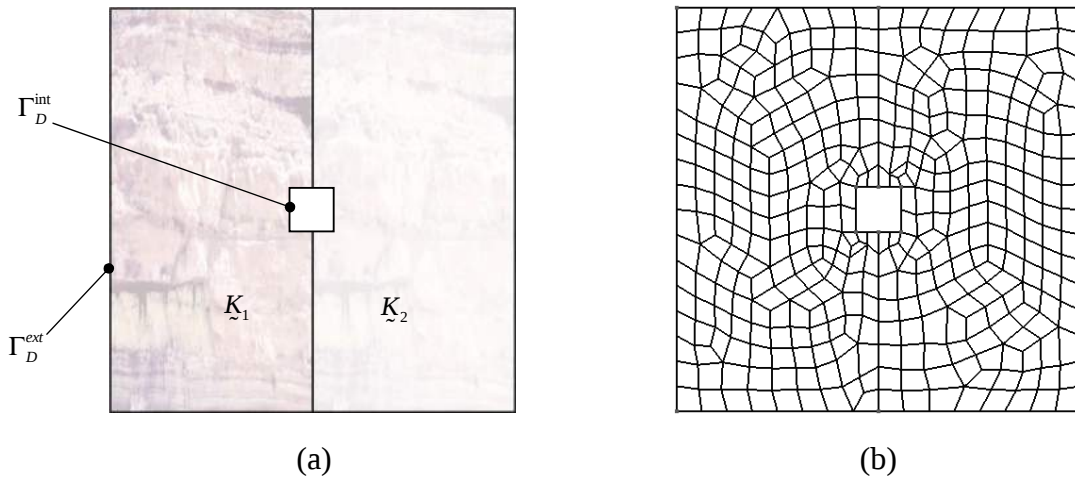


Figura 53. Reservatório heterogêneo e muito anisotrópico com furo quadrado: (a) domínio com dois materiais; (b) uma das malhas quadrangulares não-estruturadas utilizadas na solução (com 16x16 subdivisões).

A descontinuidade na permeabilidade ocorre em $x = 0,5$ e os tensores que representam essa propriedade, para cada tipo de rocha, são definidos como (Lipnikov *et al.*, 2007; Herbin e Hubert, 2008):

$$\tilde{K}(x, y) = \begin{cases} \begin{bmatrix} \cos \theta & -\sin \theta \\ \sin \theta & \cos \theta \end{bmatrix} \begin{bmatrix} 100 & 0 \\ 0 & 0.01 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \cos \theta & \sin \theta \\ -\sin \theta & \cos \theta \end{bmatrix}, & \text{se } x \leq 0,5 \\ \begin{bmatrix} y_1^2 + \varepsilon x_1^2 & -(1-\varepsilon)x_1 y_1 \\ -(1-\varepsilon)x_1 y_1 & x_1^2 + \varepsilon y_1^2 \end{bmatrix}, & \text{com } \varepsilon = 10^3, \text{ se } x > 0,5 \end{cases} \quad (294)$$

onde os parâmetros θ , x_1 e y_1 são dados por:

$$\theta = \frac{\pi}{2}; \quad x_1 = x + 10^{-3}; \quad y_1 = y + 10^{-3} \quad (295)$$

As condições de contorno de Dirichlet, impostas sobre as fronteiras disjuntas Γ_D^{ext} (externa) e Γ_D^{int} (interna), são, respectivamente, $\bar{p}_{\text{ext}} = 0$ e $\bar{p}_{\text{int}} = 2$. Dado que a distribuição de pressão no domínio deve variar entre o máximo valor, atribuído a Γ_D^{int} , e o mínimo valor, atribuído a Γ_D^{ext} , pressões aproximadas maiores do que 2 e menores do que 0 violam a física re-

presentada no problema. A solução analítica não é conhecida. Malhas quadrangulares não estruturadas, com aproximadamente 8x8 a 64x64 subdivisões são utilizadas nas simulações. Na figura 53b, uma dessas malhas é ilustrada.

De modo geral, o problema tem características muito desafiadoras, mesmo para formulações potencialmente robustas para lidar com tensores e malhas arbitrários. Na tabela 5, os valores máximos e mínimos de pressão são apresentados para cada formulação avaliada.

Tabela 5. Valores máximos e mínimos de pressão para os diferentes métodos e densidades de malha adotados.

Método	Valores max. e min. de pressão	$h = \frac{1}{8}$	$h = \frac{1}{16}$	$h = \frac{1}{32}$	$h = \frac{1}{64}$
TPFA	$p_{Max.}$	1,99	1,99	1,99	1,99
	$p_{Min.}$	$5,99 \times 10^{-8}$	$2,05 \times 10^{-7}$	$1,99 \times 10^{-8}$	$1,61 \times 10^{-10}$
MPFA-O	$p_{Max.}$	$2,74 \times 10^2$	2,48	2,50	2,52
	$p_{Min.}$	$-2,05 \times 10^2$	-3,16	$9,08 \times 10^{-1}$	-1,06
MPFA-FPS	$p_{Max.}$	1,93	2,04	2,03	2,28
	$p_{Min.}$	$-2,80 \times 10^{-1}$	$-4,43 \times 10^{-1}$	$-9,76 \times 10^{-2}$	$-8,90 \times 10^{-2}$
MPFA- <i>Enriched</i>	$p_{Max.}$	1,98	2,03	26,46	8,66
	$p_{Min.}$	$-9,77 \times 10^{-1}$	$-7,82 \times 10^{-1}$	-28,62	-11,37

A extrema variação na permeabilidade entre as diferentes rochas, além da elevada razão de anisotropia, em cada uma dessas, faz com que os três métodos do tipo MPFA não sejam capazes de honrar os valores extremos impostos aos contornos e, consequentemente, preservar a positividade da solução.

Nos resultados obtidos com o TPFA os valores de pressão honram os limites físicos do problema (tabela 5). No entanto, isso é uma consequência da incapacidade do referido método em representar as componentes tangenciais dos tensores de permeabilidade, que, na forma como são descritos na equação (294), são tensores completos ou não diagonais. Seguindo exemplos usados por Nikitin e Vassilevski (2012), problemas cuja permeabilidade é representada por um tensor cheio, têm apenas os valores da diagonal principal levados em conta no cálculo das vazões para soluções com TPFA. Dessa forma, efetivamente outro problema, é resolvido. Nas figuras 54 e 55, a distribuição de pressão é ilustrada para os quatro métodos abordados nas malhas com aproximadamente 16x16 e 64x64 subdivisões, respectivamente. Como se vê nas figuras 54a e 55a, a solução com o TPFA destoa da solução obtida com o MPFA-FPS (figura 54c e 55c), que teve o melhor desempenho, dentre os métodos avaliados.

Os métodos MPFA-O e MPFA-*Enriched* apresentam, em geral, o pior desempenho dentre os métodos avaliados. Para o MPFA-O, a falha na representação das variações abruptas de pressão é esperada. As zonas de extrapolação na representação da pressão, devido às funções lineares (com suporte triangular), produzem essas oscilações, tal como descrito na seção 3.3.2. Extremos de $2,74 \times 10^2$ e $-2,05 \times 10^2$ são obtidos para a malha menos refinada. No entanto, apesar das elevadas oscilações, presentes em todas as malhas avaliadas para o MPFA-O, o comportamento esperado para a solução do problema se mantém, como se vê nas figuras 54b e 55b. O mesmo não ocorre com o TPFA para nenhuma das malhas avaliadas, como já mencionado. Surpreendentemente, o MPFA-*Enriched* não é hábil para representar adequadamente o problema em discussão, apesar do suporte completo de pressão, equivalente à proposta de

Edwards e Zheng (2008) para o MPFA-FPS (ver seção 3.3.2). Embora nas malhas com 16x16 subdivisões e 32x32 subdivisões os resultados sejam equivalentes aos produzidos com MPFA-FPS, para malhas mais refinadas a solução é caracterizada por elevadas oscilações espúrias (ver figuras 55d e 56b). Essas ocorrem especialmente no lado do domínio cuja anisotropia varia em cada volume de controle, como indicado na equação (294).

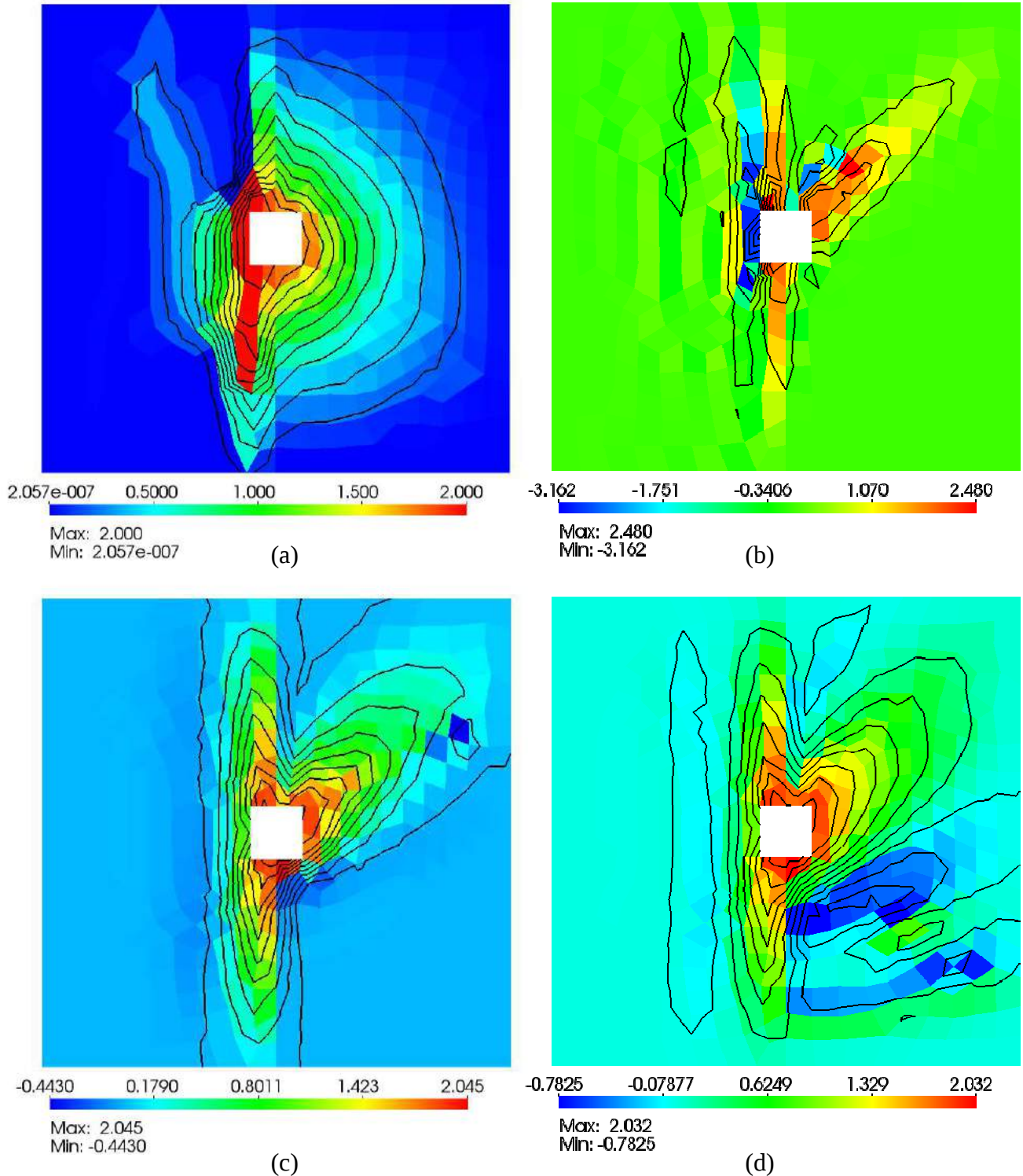


Figura 54. Campo de pressão com diferentes métodos para escoamento monofásico em reservatório heterogêneo e muito anisotrópico com furo quadrado. Uma malha quadrangular, não estruturada e com aproximadamente 16x16 subdivisões é utilizada: (a) TPFA; (b) MPFA-O; (c) MPFA-FPS; (d) MPFA-Enriched.

Extremos entre 26,46 e -28,62 são observados para a malha de 32x32 subdivisões e, com valores um pouco mais moderados, as oscilações variam entre 8,66 e -11,37 para a malha mais refinada (64x64 subdivisões) dentre as adotadas, tal como observado na figura 55b. Em contraponto, o MPFA-FPS apresentou um extremo máximo de 2,28, com malha de 64x64 subdivisões (ver figura 55a) e mínimo de $-4,43 \times 10^{-1}$, na malha de 16x16 subdivisões.

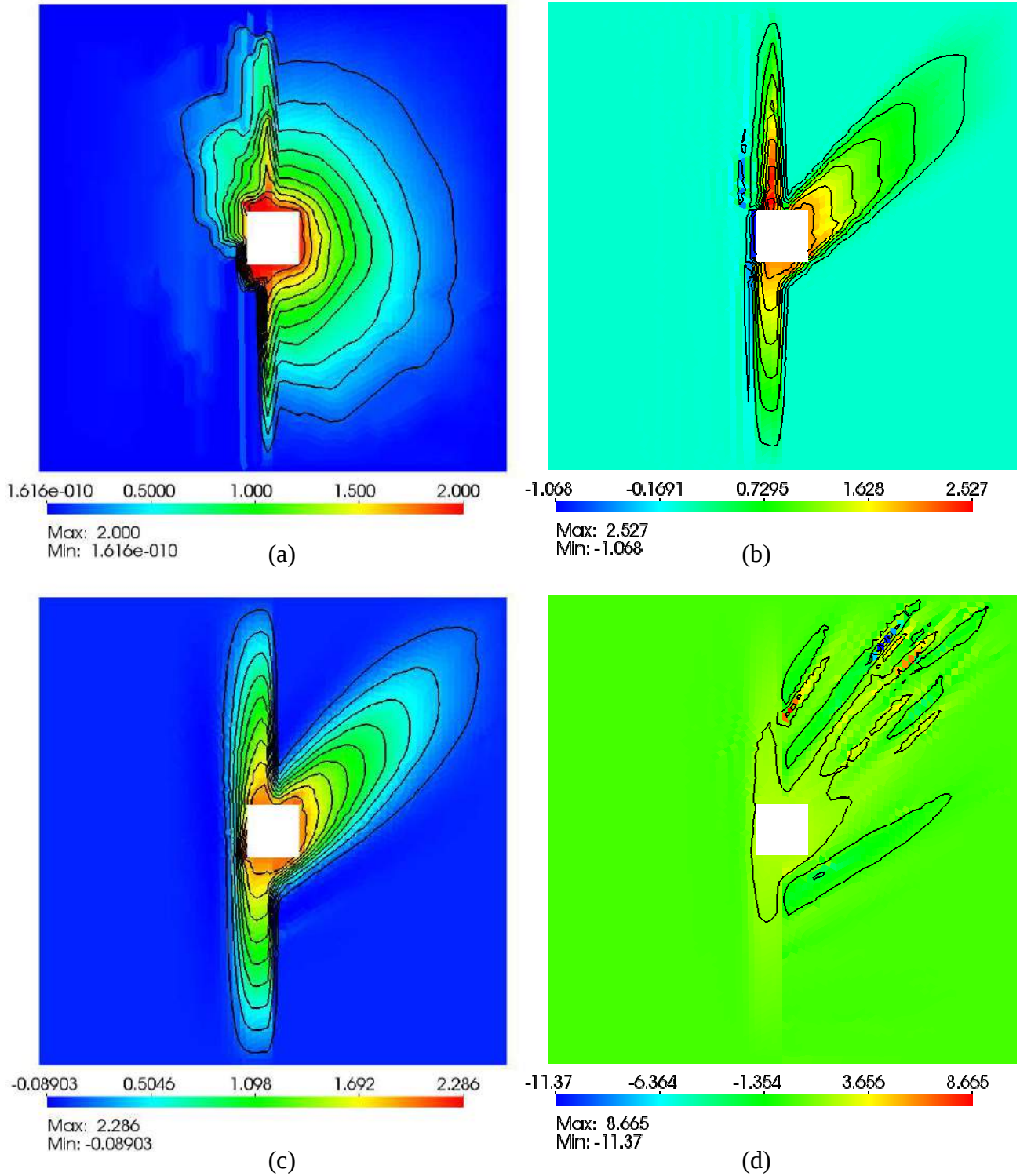


Figura 55. Campo de pressão para escoamento monofásico em reservatório heterogêneo e anisotrópico com furo quadrado. Uma malha quadrangular, não estruturada e com aproximadamente 64x64 subdivisões é utilizada: (a) TPFA; (b) MPFA-O; (c) MPFA-FPS; (d) MPFA-Enriched.

Dados esses resultados, o MPFA-FPS é a formulação “eleita” para a solução da equação de pressão nos exemplos *benchmark* com escoamento bifásico e tensor anisotrópico abordados no presente trabalho. Para meios isotrópicos, o MPFA-O é empregado. É importante ressaltar que apesar da falha destacada para o presente problema, o MPFA-*Enriched* se mostrou hábil a reprodução de campos lineares por partes e honrou a taxa de convergência esperada, para pressão e velocidade, nos problemas apresentados na seção anterior.

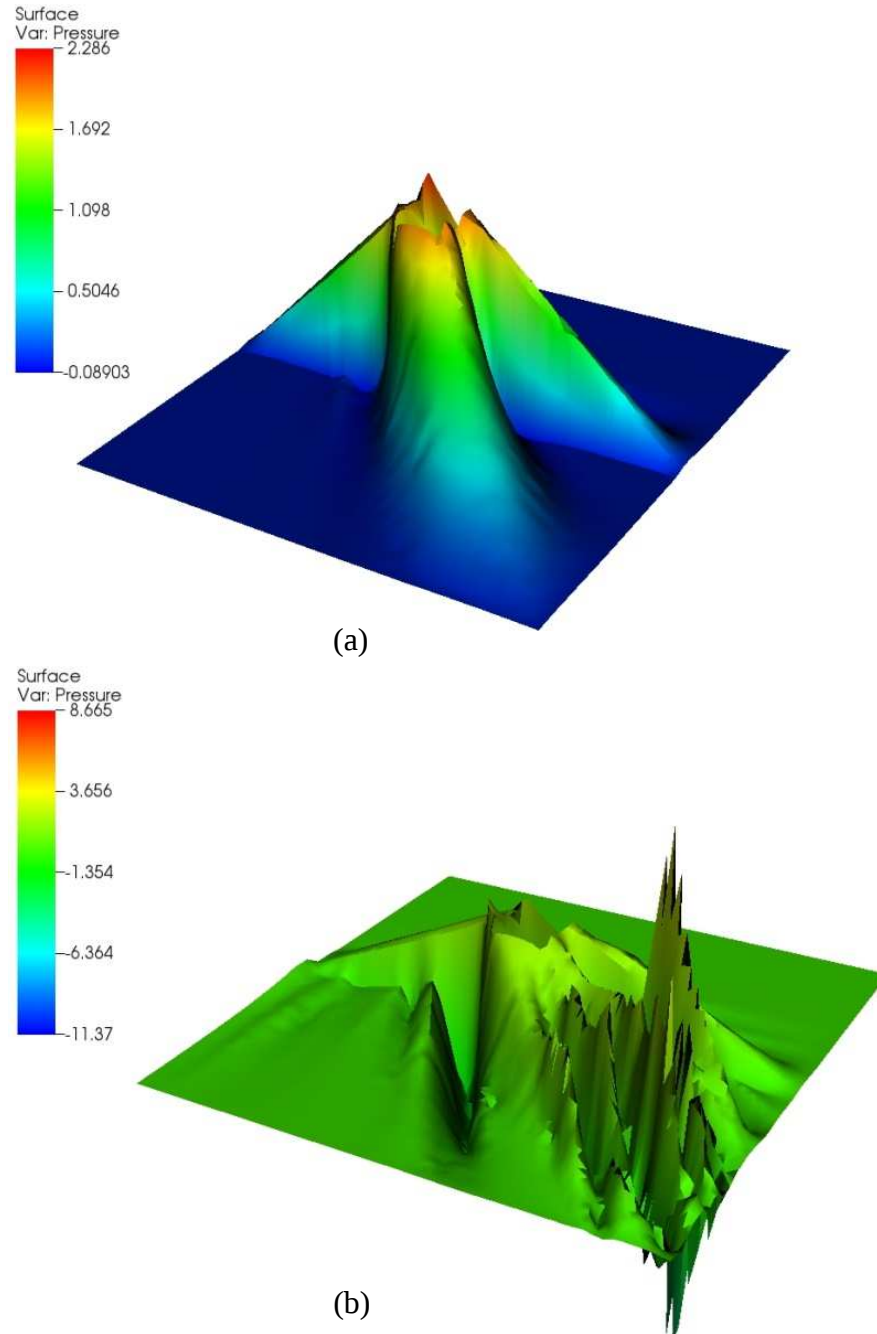


Figura 56. Elevação do campo de pressão para escoamento monofásico em reservatório heterogêneo e anisotrópico com furo quadrado: (a) obtido com o MPFA-FPS; (b) obtido com o MPFA-*Enriched*.

Também é relevante destacar que os chamadas métodos MPFA mais ortodoxos, dentre os quais se destacam o MPFA-O, MPFA-L (Aavatsmark *et al.*, 2008; Cao *et al.*, 2009), MPFA-FPS e MPFA-*Enriched*, não são propostos com a intensão de definitivamente eliminar as oscilações espúrias, resultantes de certas relações entre o gradiente de pressão, o tensor de

permeabilidade e orientação da malha para meios muito anisotrópicos (Zheng, 2008). Ocorre que para algumas formulações, dentre as citadas (MPFA-L, MPFA-FPS e MPFA-*Enriched*), há uma promessa de amenização das oscilações, em anisotropias “patológicas”, quando comparado aos resultados obtidos com o MPFA-O. Dessa forma, algum grau de oscilação em problemas como o avaliado na presente seção sempre é esperado para as formulações numéricas aqui adotadas. Por outro lado, também há na literatura uma gama de formulações com construção do tipo MPFA que, dada a natureza de sua construção, garantem o respeito aos extremos impostos pelas condições de contorno (Lepotier, 2005; Lipnikov *et al.*, 2007; Chang e Yuan, 2009; Sheng e Yuan, 2011; Chang e Yuan, 2012; Sheng e Yuan, 2012). No entanto, o preço pago por essa vantagem é o uso de um operador numérico não linear, mesmo para problemas lineares. Procedimentos iterativos são empregados para se obter uma solução convergente e isso pode demandar muito tempo computacional, especialmente em problemas com elevada razão de anisotropia (Queiroz *et al.*, 2014).

4.3. Escoamento Bifásico (água e óleo)

A equação (14) é resolvida na presente seção utilizando todas as técnicas numéricas apresentadas na seção 3.4. Seis exemplos *benchmark*, encontrados na literatura, são avaliados para testar o desempenho desses procedimentos. No primeiro exemplo, o modelo simplificado de Buckley-Leverett é resolvida para as aproximações de 1ª a 4ª ordem. As diferentes técnicas de limitação detalhadas na seção 3.4.4 também são comparadas para as aproximações de alta ordem. O modelo com gravidade também é verificado. O tratamento de poço descrito na seção 3.4.2 é avaliado para um problema de ¼ de cinco poços no segundo exemplo. Em seguida, as aproximações de alta ordem são novamente avaliadas para um problema que envolve escoamento bifásico (água e óleo) em meio muito heterogêneo. Nesse problema a habilidade das aproximações de alta ordem em representar *fingers* e regiões de baixa permeabilidade é avaliada. Nos últimos exemplos as formulações TM e suas variantes são testadas em comparadas em diferentes problemas. Por fim, um análogo de reservatório é utilizado para um sétimo caso, com propósito apenas ilustrativo.

4.3.1. Problema de Buckley-Leverett

Na presente seção, o modelo simplificado de Buckley-Leverett, adaptado de Carvalho (2005), é resolvido numericamente utilizando aproximações de 1ª a 4ª ordem para o erro de truncamento. Nesse caso, a forma simplificada do reservatório de petróleo consiste em um domínio homogêneo e isotrópico com permeabilidade $\tilde{K} = \underline{I}$ e dimensões $[0,1] \times [0,1/2]$, tal como ilustrado na figura 57.

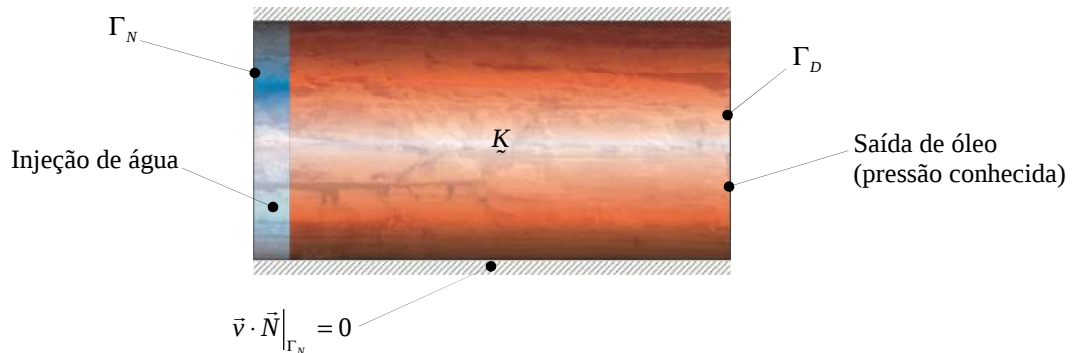


Figura 57. Domínio computacional e indicação de condições de contorno para o modelo de Buckley-Leverett.

Condições de contorno de fluxo e saturação de água unitários são prescritas na face esquerda do domínio computacional, representando a injeção de água na rocha inicialmente saturada por óleo. Fluxo nulo também é prescrito nas faces superior e inferior desse domínio, representando superfícies selantes. Na face direita, a pressão é conhecida e tem valor nulo. Nesse problema, as saturações, irreduzível de água e residual de óleo, são dadas por $S_{wi} = S_{or} = 0,1$. A razão de mobilidade é $M = 1$ e o modelo de Brooks-Corey com expoentes $n_w = n_o = 2$ é empregado como relação constitutiva.

O escoamento é avaliado para um tempo adimensional de 0,2 VPI (Volume Poroso Injetado) com número de Courant $C = 0,6$. As soluções numéricas são comparadas com a solução semi-analítica de Welge (1959 *apud* Pinder e Gray, 2008). Uma sequência de malhas quadrilaterais, com 16 a 256 subdivisões na direção longitudinal, é utilizada para obter essas soluções numéricas. Para quantificar os erros, a norma L_1 , apresentada na equação (285), foi empregada. Taxas de convergência também são obtidas tal como apresentado na equação (287). No entanto, como esperado, a descontinuidade na solução degrada a taxa de convergência nominal esperada para cada ordem de aproximação (Bastian e Helmig, 1999).

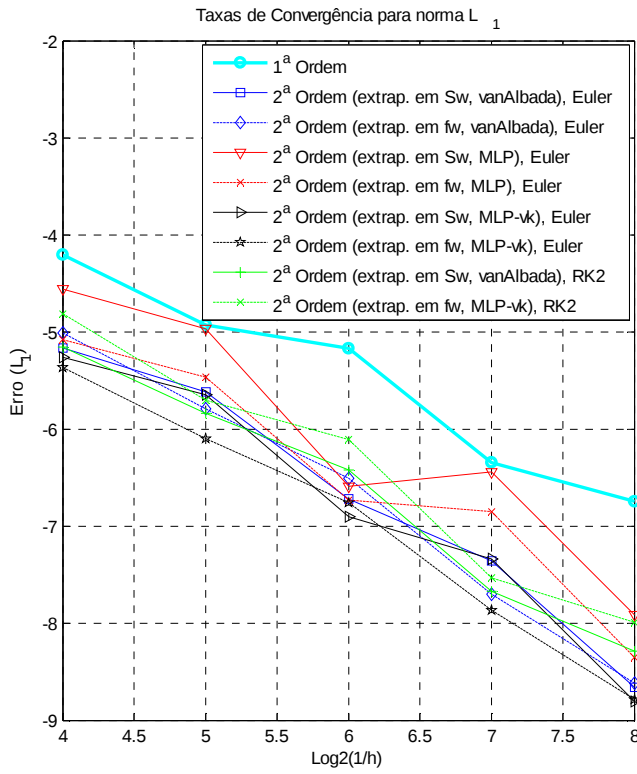
Nos gráficos apresentados na figura 58, os erros obtidos com a norma L_1 podem ser observados para as diferentes densidades de malha adotadas. As aproximações de 1ª a 4ª ordem são comparadas para diferentes abordagens. Os valores dos erros e taxas de convergência para cada uma das abordagens podem ser consultados nas tabelas D.1 a D.12, contidas no apêndice D.

Para a aproximação de 2ª ordem, a acurácia das soluções obtidas com as funções limitadoras van Albada (Löhner, 2001; Carvalho, 2005), MLP (Park *et al.*, 2010) e MLP-vk (Park e Kim, 2012a) é avaliada. Para cada uma dessas configurações, extrapolações em S_w e f_w também são comparadas. O mesmo ocorre nas aproximações com 3ª e 4ª ordem para o erro de truncamento. No entanto, apenas as funções limitadoras do tipo MLP e MLP-vk são avaliadas, dada sua flexibilidade para atuação em ordens de acurácia arbitrárias (Park e Kim, 2012). A influência da integração numérica no tempo (ver seção 3.4.1) também é avaliada. Nas tabelas de D.1 a D.10, os resultados são obtidos com aproximação do tipo Euler progressivo para discretizar o termo temporal. Os resultados mais acurados entre os obtidos com esse tipo de aproximação são novamente avaliados com a aproximação de Runge-Kutta (2ª ordem), apresentada na equação (151).

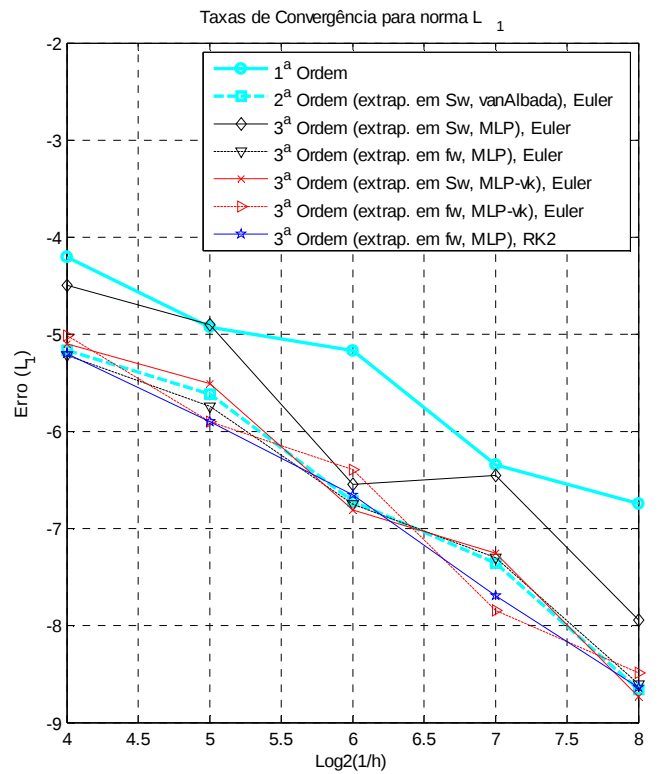
Tendo em vista os gráficos da figura 58 e dados apresentados nas tabelas D.1 a D.12, se observa que, em geral, os erros diminuem com o refinamento da malha. Apenas duas exceções foram observadas para as aproximações de 2ª e 3ª ordem, com extrapolação em S_w e limitadas com a função MLP. O erro segundo a norma L_1 aumentou moderadamente entre as malhas de 64 e 128 subdivisões. Nos dois casos, o erro voltou a diminuir para a malha de 256 subdivisões (ver figura 58a e 58b).

Devido à descontinuidade no campo de saturação, característico do problema de Buckley-Leverett, as taxas de convergência, para a norma L_1 , não alcançaram o valor nominal para as respectivas ordens de aproximação espacial empregadas. Essa degradação na taxa de convergência tem sido observada na literatura para a solução do modelo de Buckley-Leverett com aproximações de 1ª ordem (Bastian, 1999; Bastian e Helmig, 1999) e ordens mais elevadas (Bastian, 2002; Contreras *et al.*, 2015). Dessa forma, no presente texto, o parâmetro de avaliação de desempenho entre as ordens de aproximação é o valor do erro na norma adotada, obtido com as várias densidades de malha utilizadas.

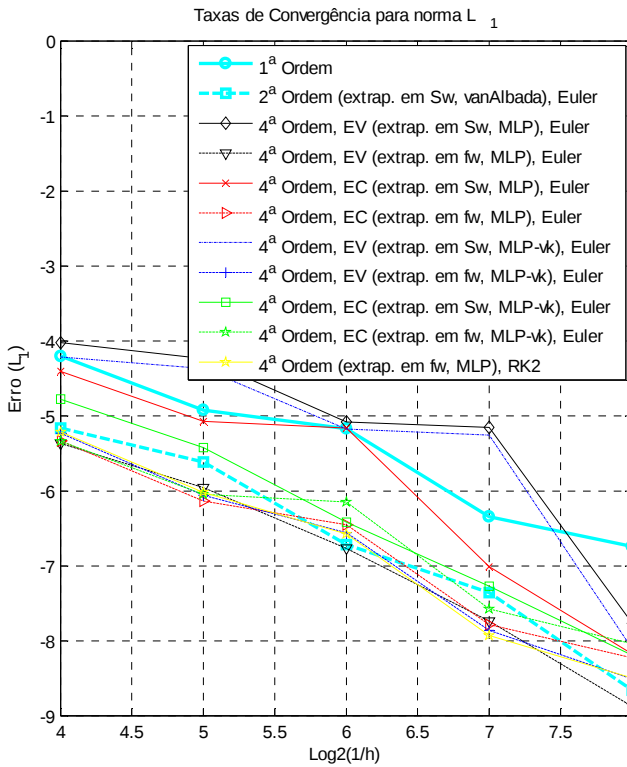
Como esperado, todas as aproximações de alta ordem produzem resultados mais acurados do que os obtidos com a tradicional aproximação de 1ª ordem. A diminuição dos erros nos resultados obtidos com MUSCL/van Albada, por exemplo, em relação à aproximação de 1ª ordem, é substancial como se observa na figura 58.



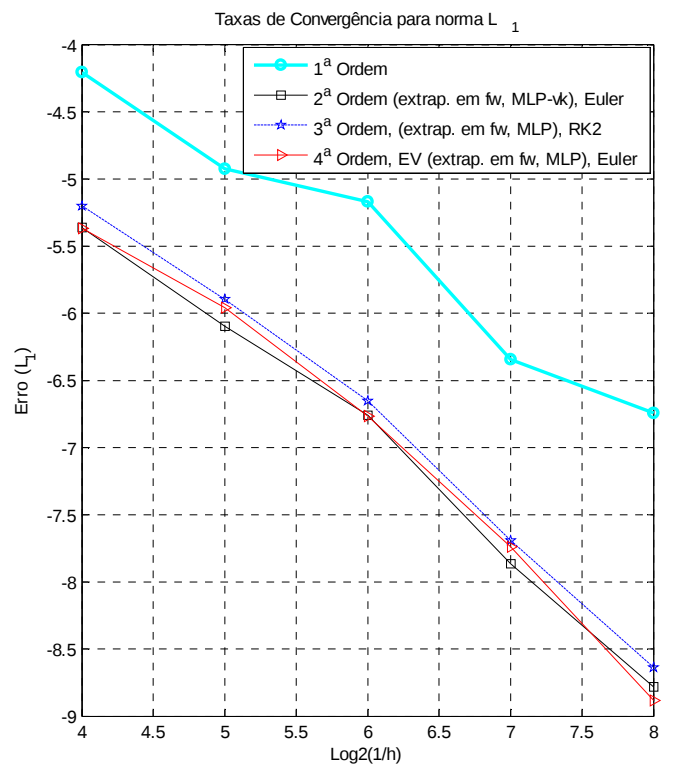
(a)



(b)



(c)



(d)

Figura 58. Gráficos com erros obtidos para várias densidades de malha adotadas na solução do modelo de Buckley-Leverett: (a) compara aproximação de 1ª ordem e várias estratégias com aproximação de 2ª ordem; (b) compara aproximação de 1ª ordem e várias estratégias com aproximação de 3ª ordem; (c) compara aproximação de 1ª ordem e várias estratégias com aproximação de 4ª ordem; (d) compara aproximação de 1ª ordem e os melhores resultados obtidos para alta ordem.

Em geral, uma malha com 64 subdivisões, para uma aproximação de 1ª ordem, produz resultados equivalentes aos obtidos com uma malha de 16 subdivisões com aproximação de 2ª ordem. Essa diferença de duas densidades de malha também foi observada por Bastian e Helmig (1999). Os ganhos de acurácia nas aproximações de terceira e quarta ordem, por outro lado, não foram satisfatórios quanto àqueles da comparação entre 1ª e 2ª ordem, mencionados anteriormente.

No que se refere à influência da variável extrapolada, nas aproximações de alta ordem, observam-se diferentes comportamentos para cada ordem de aproximação ou mesmo estratégia de limitação empregada. As aproximações de 2ª ordem são comparadas nos gráficos ilustrados nas figuras 58a e 59. Nessa última, os perfis de saturação são ilustrados para diversas variantes no que se refere à variável extrapolada e estratégia de limitação.

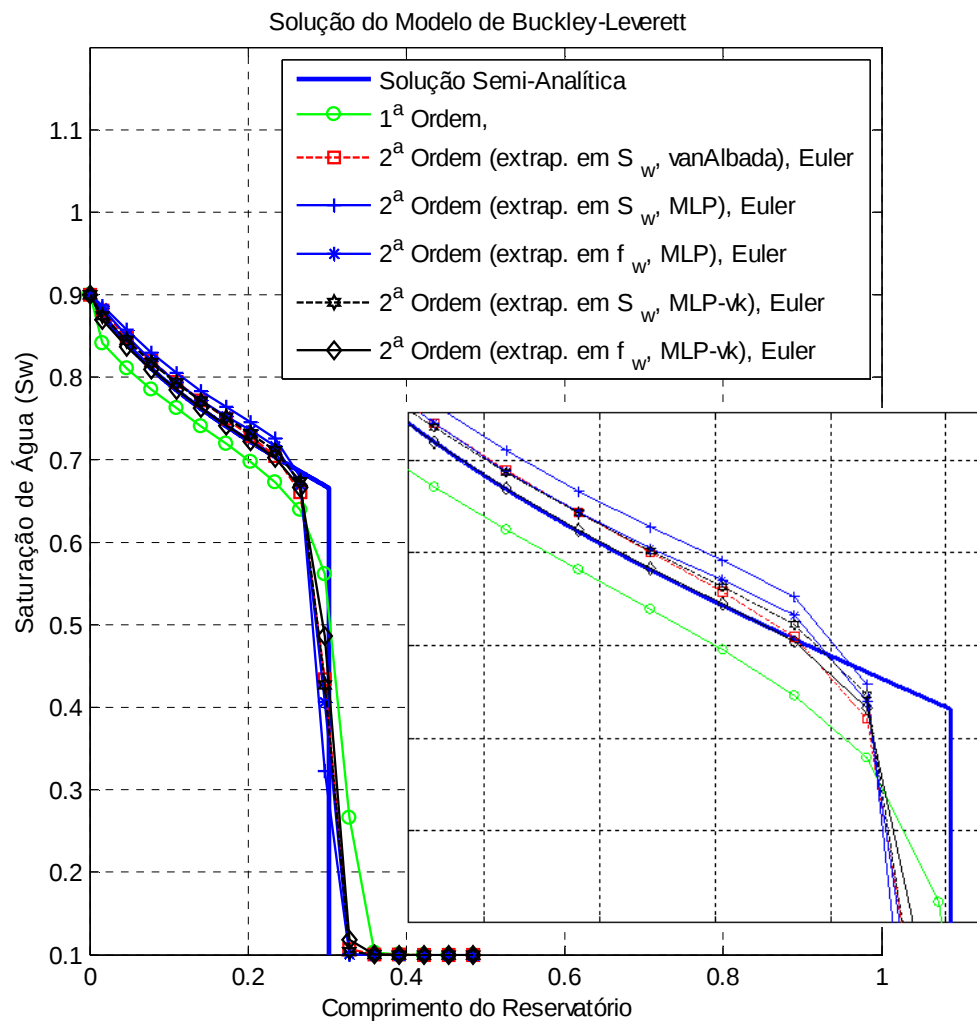


Figura 59. Comparação entre a solução semi-analítica e soluções numéricas do modelo de Buckley-Leverett. Aproximações com 1ª ordem e várias abordagens com 2ª ordem no erro de truncamento são apresentadas.

Para a variante MUSCL/van Albada, observa-se que os erros obtidos com extrapolação em S_w são, em geral, menores do que os obtidos com extrapolações em f_w . Nas aplicações com MUSCL/MLP (tabela D.3 no apêndice D), se verifica um comportamento contrário. Os erros obtidos com a extrapolação em f_w são universalmente menores do que os obtidos com a extrapolação em S_w . O mesmo é observado para a variante MUSCL/MLP-vk. No en-

tanto, há densidades de malha (64 e 256 subdivisões) onde a extrapolação em S_w apresenta erros moderadamente menores. Comparando essas três variantes, observa-se que a aproximação do tipo MUSCL/MLP-vk com extrapolação em f_w é a mais acurada (ver figura 59).

Para aproximações de 3ª ordem, apenas as variantes MLP e MLP-vk são comparadas como ilustrado na figura 58b. Nos dois casos, observam-se menores erros com extrapolação em f_w . Quanto à melhor estratégia de limitação, nesse caso a variante MUSCL/MLP é a mais indicada. A aproximação no termo de tempo do tipo Runge-Kutta, 2ª ordem, produziu, em geral, os menores erros e consequentemente a melhor solução para a aproximação de 3ª ordem no espaço (ver figuras 58b e 58d). Na figura 60 o perfil de saturação para a aproximação de 3ª ordem no espaço e 2ª ordem no tempo é ilustrado junto com a solução semi-analítica e outras soluções de 1ª, 2ª e 4ª ordem. A solução obtida com a aproximação de 2ª ordem, extrapolação de f_w e limitação com MLP-vk permanece mais acurada, mesmo quando comparada com a melhor aproximação para 3ª ordem.

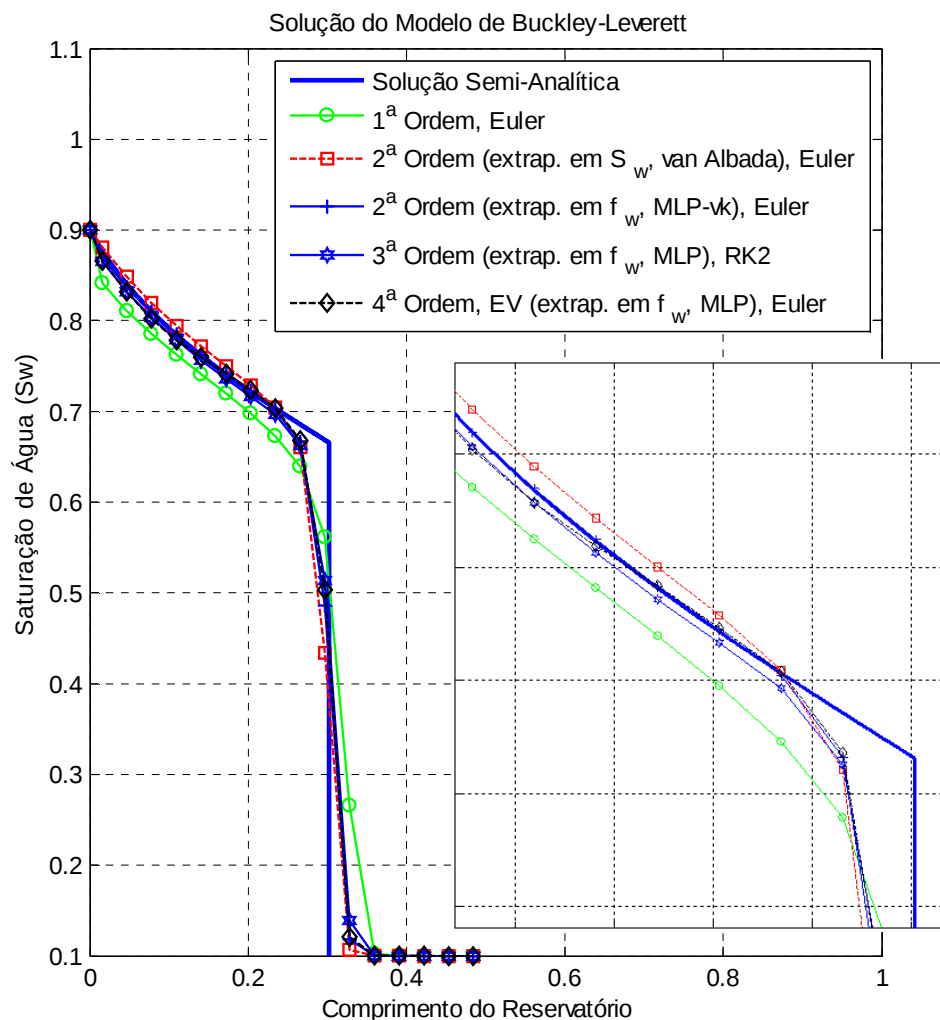


Figura 60. Comparação entre a solução semi-analítica e soluções numéricas do modelo de Buckley-Leverett. A aproximação de 1ª ordem é comparada com os melhores resultados obtidos para 2ª e 4ª ordem no erro de truncamento.

Nas aproximações de 4ª ordem, além da variável extrapolada e estratégias de limitação, a influência do uso de um estêncil com viés à montante (EV) também é investigada. Observando os gráficos das figuras 58c e 61, além das tabelas do apêndice D (tabelas D.5 a D.6 e

D.9 a D.10) é possível ver que, de modo geral, o uso de um estêncil com viés à montante, ilustrado na figura 62b, produz menores erros quando comparado com o estêncil convencional (EC), simétrico, ilustrado na figura 62a. A melhoria nos resultados é particularmente mais significativa quando a extrapolação é feita para f_w .

Em relação ao desempenho das estratégias MLP e MLP-vk e a determinação da melhor variável para extrapolação, a aproximação de 4ª ordem segue a mesma tendência observada na aproximação de terceira ordem, i.e., os melhores resultados são obtidos com MUSCL/MLP e extrapolação em f_w .

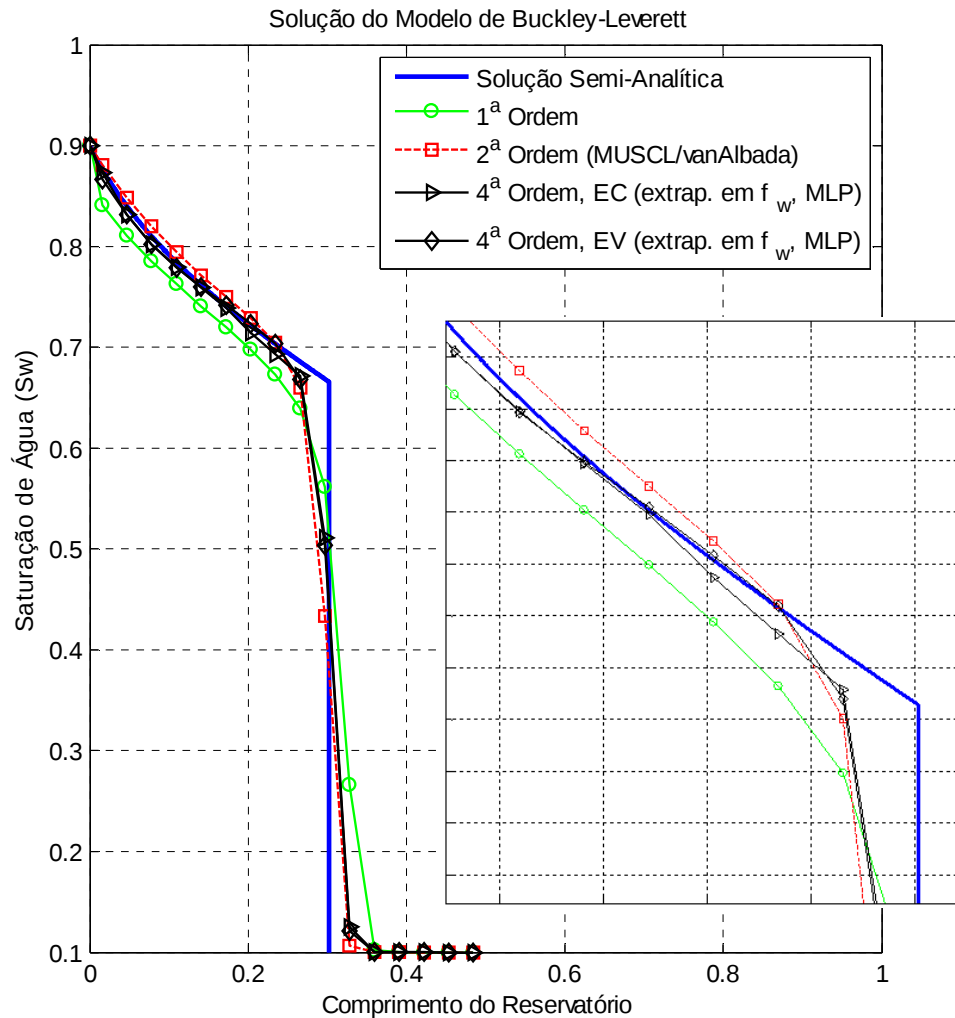


Figura 61. Comparação entre a solução semi-analítica e soluções numéricas do modelo de Buckley-Leverett. A aproximação de primeira ordem é comparada com a tradicional aproximação de 2ª ordem (MUSCL/vanAlbada) e duas variantes da aproximação de 4ª ordem no erro de truncamento (com estêncil convencional e à montante).

Por fim, os resultados apresentados nas tabelas D.11 e D.12 (apêndice D), obtidos com 2ª ordem no tempo (Runge-Kutta), são comparados com os resultados apresentados nas demais tabelas, onde a aproximação do tipo Euler progressivo é utilizada. Esses dados sugerem o melhor desempenho com Euler progressivo nas aproximações de 2ª ordem, o que também foi observado por Lamine (2009) em seus testes. O mesmo é verificado nas aproximações, no espaço, com 4ª ordem. A utilização de alta ordem no tempo produz certa suavidade na representação do choque diminuindo a acurácia da solução. Para aproximações de 3ª ordem no espaço, a aproximação do tipo Runge-Kutta (2ª ordem) produziu erros, de modo geral, meno-

res, como já mencionado e ilustrado nos gráficos da figura 58b. Nas densidades de malha com 64 e 128 subdivisões, no entanto, ainda se observa erros menores para a aproximação no tempo do tipo Euler progressivo (ver figura 58b). Em problemas com solução suave, aproximações de alta ordem no tempo são fundamentais como mostrado nos experimentos numéricos de Clain *et al.* (2011).

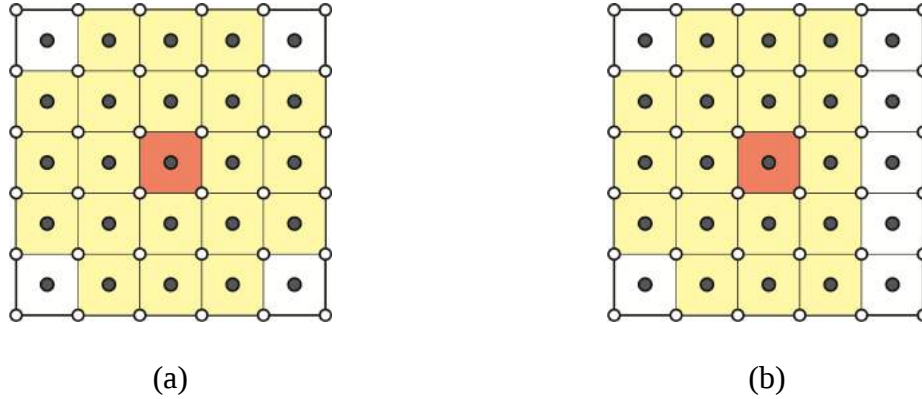


Figura 62. Estêncils para aproximação de 4ª ordem em malha estruturada quadrilateral: (a) estêncil convencional; (b) estêncil à montante, orientado para a posição do poço injetor.

As observações feitas para esse exemplo servem como referência para as próximas aplicações. Dessa forma, a escolha do tipo de limitador ou variável extrapolada para cada ordem de aproximação é feita de acordo a discussão feita na presente seção, exceto quando especificado o contrário.

Verificação da Influência da Gravidade no Modelo de Buckley-Leverett

Uma variação do problema apresentado na seção anterior é aqui investigada. Nesse caso, o efeito gravitacional é incorporado ao modelo de Buckley-Leverett de acordo com a proposta de Durlofsky (1993). Tendo a figura 57 como referência, a ação da gravidade se dá na direção horizontal, com sentido contrário à orientação de x (agindo da direita para a esquerda). Algumas propriedades atribuídas a esse modelo na seção anterior são alteradas para manter a coerência com a proposta do referido autor. Dessa forma, as viscosidades da água e do óleo são, respectivamente, $\mu_w = 0,2$ e $\mu_o = 1$. As massas específicas da água e do óleo, consideradas quando o efeito gravitacional é incorporado, são, respectivamente, $\rho_w = 1$ e $\rho_o = 0,8$. As saturações irreduzível de água e residual de óleo são nulas ($S_{wi} = S_{or} = 0$) e a relação constitutiva segue o modelo de Brooks-Corey com expoentes $n_w = n_o = 2$. As soluções numéricas são produzidas com tempo adimensional de 0,25 VPI e número de Courant $C = 0,6$.

É importante ressaltar que para esse caso não serão avaliados erros ou taxas de convergência tal como na seção anterior. O objetivo aqui é apenas verificar a validade do termo gravitacional no modelo aqui adotado. Para isso, os resultados obtidos com 1ª ordem e 2ª ordem, com limitadores van Albada e MLP-vk, são comparados com o resultado de referência obtido por Durlofsky (1993) usando uma aproximação de 2ª ordem no espaço em uma malha triangular com 80 subdivisões.

Nos gráficos apresentados nas figuras 63 e 64, esses resultados podem ser observados para malhas quadrangulares com 10, 20, 40 e 80 subdivisões.

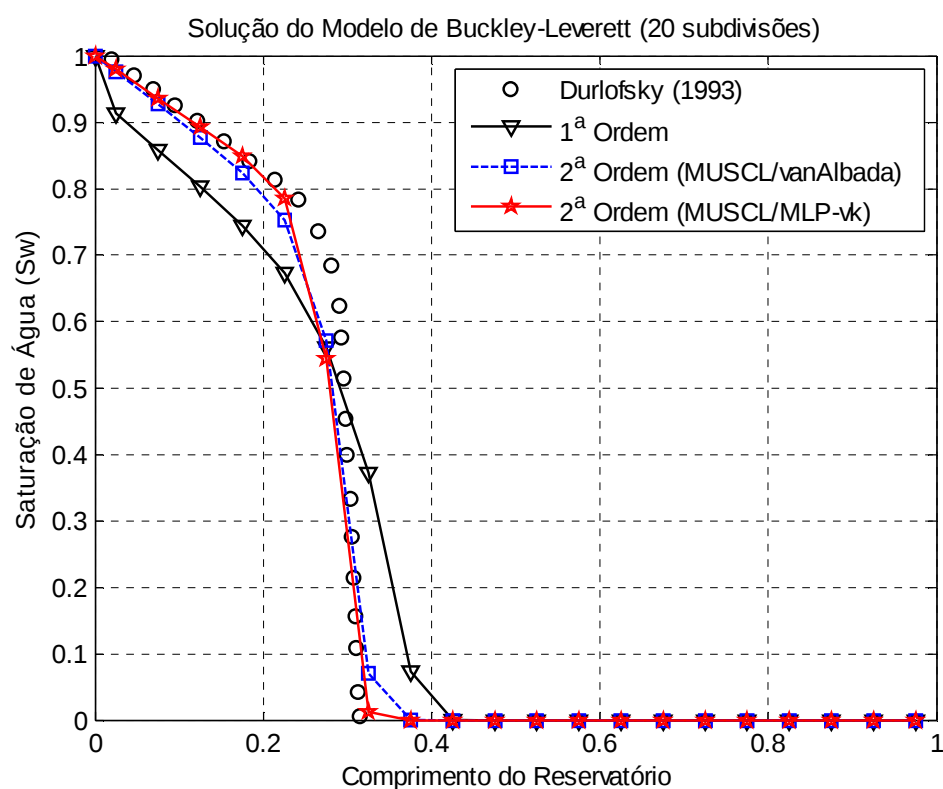
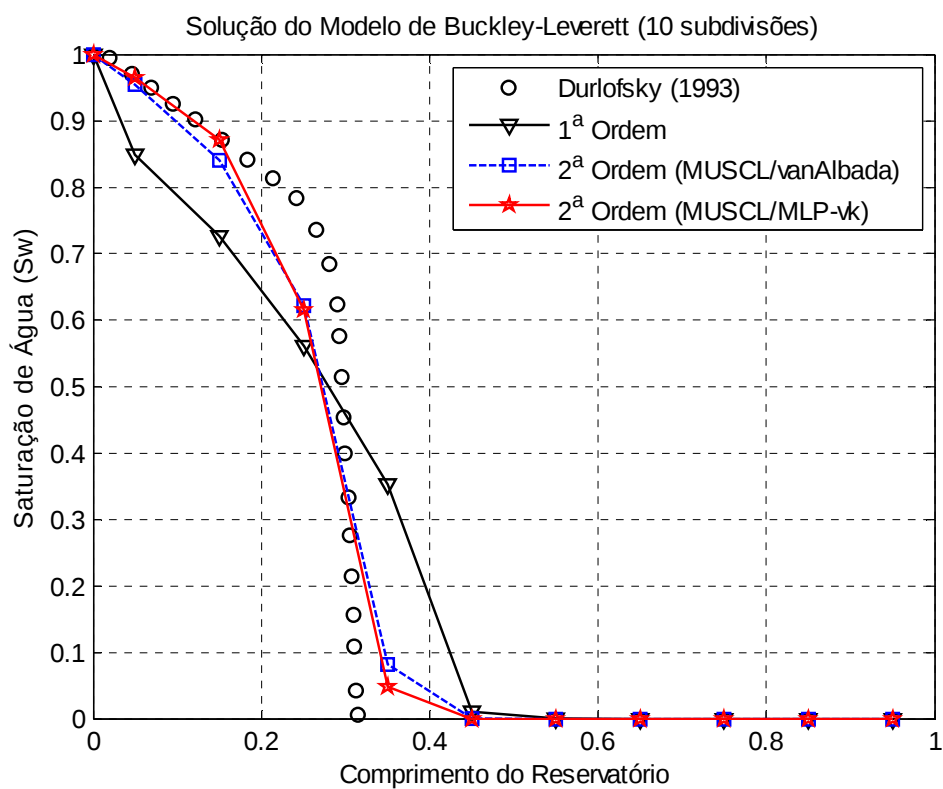


Figura 63. Perfis de saturação de água para o modelo de Buckley-Leverett com gravidade. Soluções com 1ª ordem e 2ª ordem, com limitadores van Albada e MLP-vk, são comparadas com uma solução de referência obtida de Durlofsky (1993): (a) soluções obtidas com malha quadrangular com 10 subdivisões; (b) soluções obtidas com malha quadrangular com 20 subdivisões.

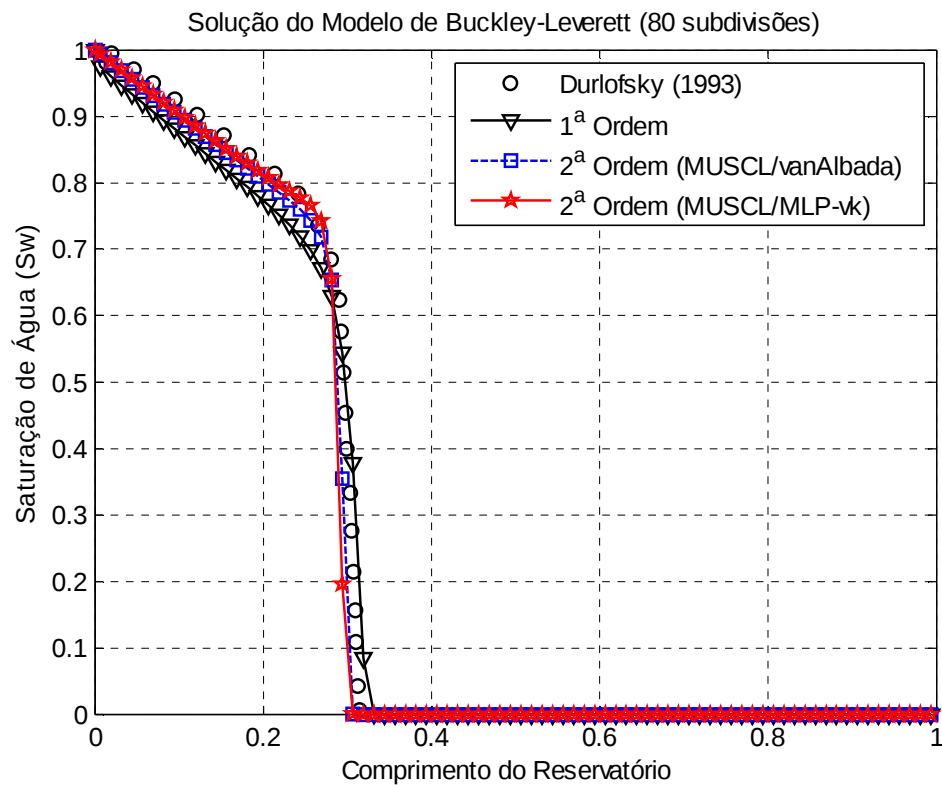
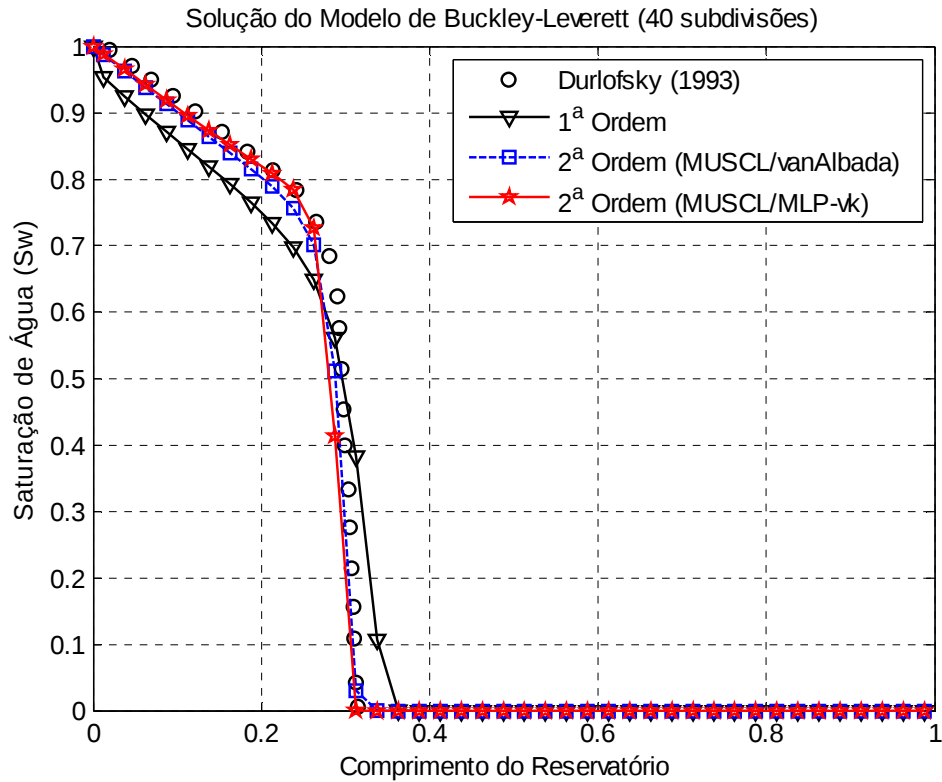


Figura 64. Perfis de saturação de água para o modelo de Buckley-Leverett com gravidade. Soluções com 1ª ordem e 2ª ordem, com limitadores van Albada e MLP-vk, são comparadas com uma solução de referência obtida de Durlofsky (1993): (a) soluções obtidas com malha quadrangular com 40 subdivisões; (b) soluções obtidas com malha quadrangular com 80 subdivisões.

Em todas as aproximações o efeito da ação da gravidade é reproduzido. As aproximações de 1ª ordem apresentam o “espalhamento” típico da frente de saturação, mesmo para a malha mais fina adotada. Dentre os resultados obtidos com aproximações de 2ª ordem, os com limitador do tipo MLP-vk representam melhor a solução de referência para todas as densidades de malha avaliadas. Dessa forma, o desempenho superior do limitador MLP-vk, frente ao limitador do tipo van Albada, se mantém tal como na seção anterior, onde o termo de gravidade não foi considerado.

4.3.2. Escoamento Bifásico em ¼ de Cinco Poços em Reservatório Isotrópico e Homogêneo

O problema obtido de Durlfisky (1993) consiste em uma versão adimensional de um quarto do padrão com cinco poços (um injetor e quatro produtores em arranjo simétrico). Admite-se um meio isotrópico e homogêneo, com $\tilde{K} = \tilde{I}$, para o domínio com dimensões $[0,1]^2$, tal como ilustrado na figura 65a.

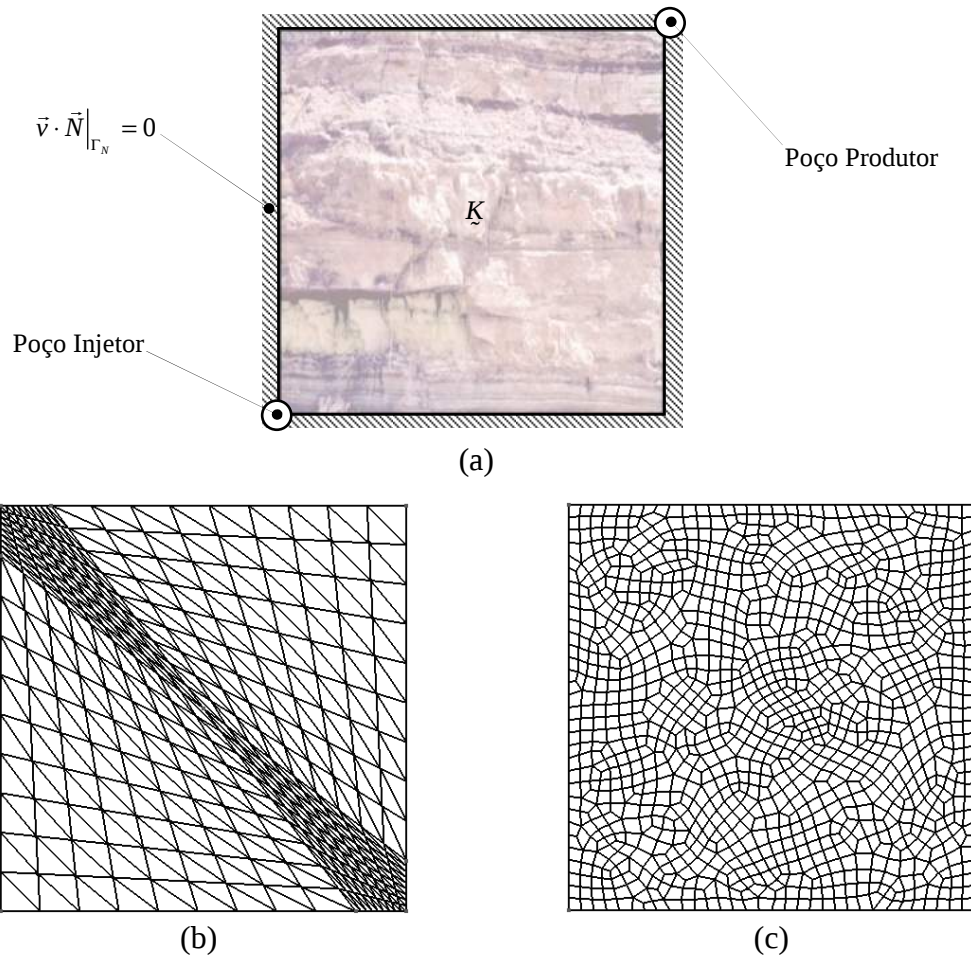


Figura 65. Domínio computacional e malhas utilizadas para o problema de ¼ de cinco poços: (a) indicação da fronteira de Neumann e poços injetor e produtor; (b) malha triangular estruturada com 18x18 subdivisões; (c) malha não estruturada com aproximadamente 32x32 subdivisões e 1.143 volumes de controle quadrangulares.

Dada à simetria característica do problema abordado, condições de contorno com fluxo nulo são prescritas em todo o contorno Γ_N . Vazão e saturação de água unitárias são prescritas no volume de controle associado ao poço injetor, localizado no canto inferior esquerdo

do domínio (ver figura 65a). No poço produtor, localizado no canto superior direito do domínio, pressão nula é imposta. Os valores da saturação irreduzível de água e residual de óleo são dados por $S_{wi} = S_{or} = 0$. O modelo de Brooks-Corey é adotado como relação constitutiva tal como apresentado na equação (8). Os expoentes para água e óleo são, respectivamente, $n_w = n_o = 2$. O número de Courant utilizado foi $C = 0,6$ e os resultados foram obtidos para um tempo adimensional de 1,0 VPI.

É importante destacar que nesse estudo de caso não há pretensão em avaliar o desempenho das formulações numéricas abordadas no presente trabalho. Apenas as propostas para tratamento de poço, descritas na seção 3.4.2, e a influência das estratégias de aproximação para a mobilidade total são avaliadas. As duas malhas ilustradas nas figuras 65b e 65c são empregadas para esse fim.

As curvas de produção apresentadas nas figuras 66 e 67 foram obtidas com MPFA-O, para solução da equação de pressão, e uma aproximação do tipo MUSCL de 2ª ordem para a equação saturação. Quando nenhum tratamento de poço é adotado, oscilações mais severas nas curvas de produção são observadas com extrapolação em S_w e função limitadora do tipo MLP-vk. Por isso essa configuração foi adotada para o presente caso.

Para efeito de comparação, as curvas de produção de óleo são apresentadas em quatro propostas, descritas em detalhes na seção 3.4.2. Tem-se, portanto, formulações:

- sem nenhum tratamento no poço;
- com passo fracionado e termo de relaxação com $\mathcal{r} = 0,5$ (ver seção 3.4.2);
- com passo fracionado sem termo de relaxação ($\mathcal{r} = 1$);
- com passo fracionado e termo de relaxação $\mathcal{r} = 0,5$, associado ao um passo de tempo Δt reduzido apenas no poço produtor (ver seção 3.4.2).

Os quatro casos acima foram obtidos para as duas estratégias de aproximação de mobilidade total, descritas na seção 3.3.1. A aproximação definida na equação (37) é referenciada nos gráficos como “*mob1*”. A segunda proposta, definida nas equações (38) e (39), é referenciada como “*mob2*”. Todas as curvas são comparadas com uma solução de referência, obtida com malha triangular, não estruturada e uniforme com aproximadamente 120x120 subdivisões (37.996 volumes de controle). Para essa solução de referência, o método MPFA-O é empregado na solução da equação de pressão e um método de ponderação à montante de primeira ordem é usado para aproximar a equação de saturação. As duas formulações são reconhecidamente robustas na literatura (Aziz e Settari, 1979; Lipnikov *et al.*, 2007; Gao e Wu, 2010).

Nas soluções obtidas com a malha triangular (ver figura 65b), a associação entre o passo fracionado, o termo de relaxação $\mathcal{r} = 0,5$ e o passo de tempo reduzido localmente (“*passo frac., relx = 0,5 e Δt red.*”) produziu as curvas com menor tendência à oscilação para as duas estratégias de aproximação da mobilidade total “*mob1*” e “*mob2*”, como se observa na figura 66. As soluções sem nenhum tratamento de poço (“*sem Trat. poço*”) e com passo fracionado sem o termo de relaxação (“*p. frac., relx = 1*”) apresentam maior tendência à oscilação. Isso indica que o uso do passo fracionado, tal como definido em Leveque (1992) e Carvalho (2005), não é suficiente para conter certos níveis de oscilação para o presente problema, utilizando a malha ilustrada na figura 65b e configurações descritas anteriormente. O uso do termo de relaxação $\mathcal{r} = 0,5$ sugerido em Date (2005) contribui para a minimização das oscilações. Nesse caso, também se observa que a utilização de um passo de tempo local, como descrito na seção 3.4.2 não faz muita diferença em relação ao resultado obtido apenas com o passo fracionado e o termo de relaxação.

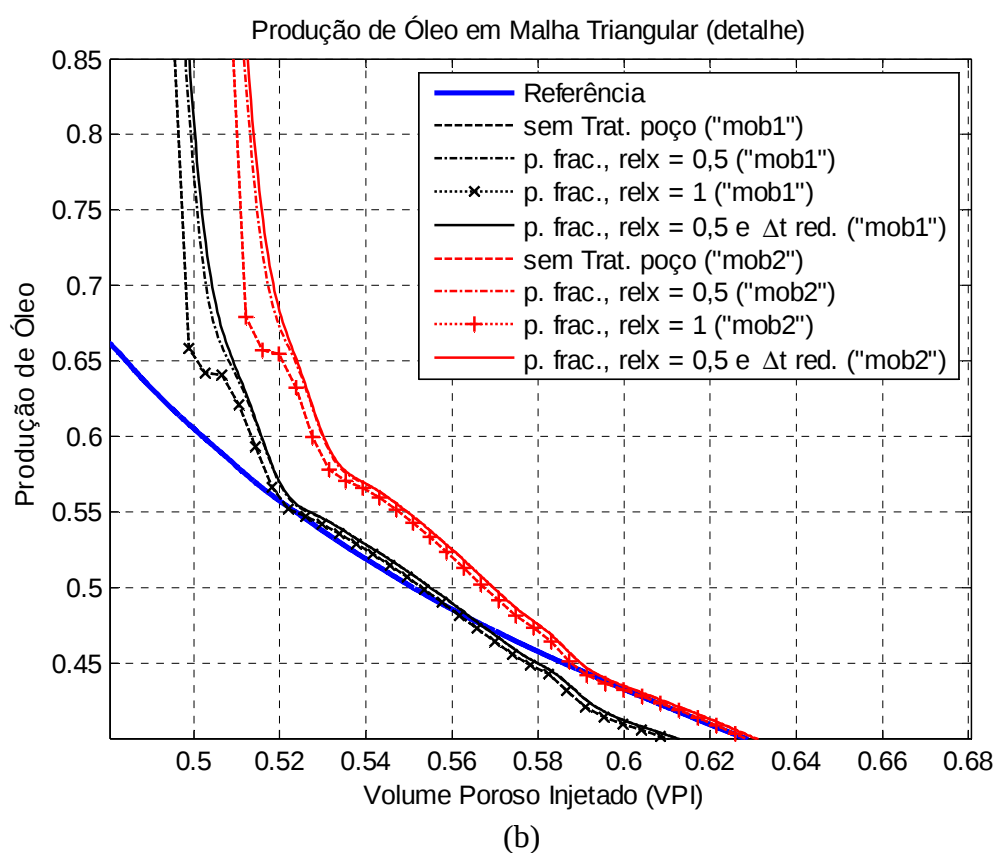
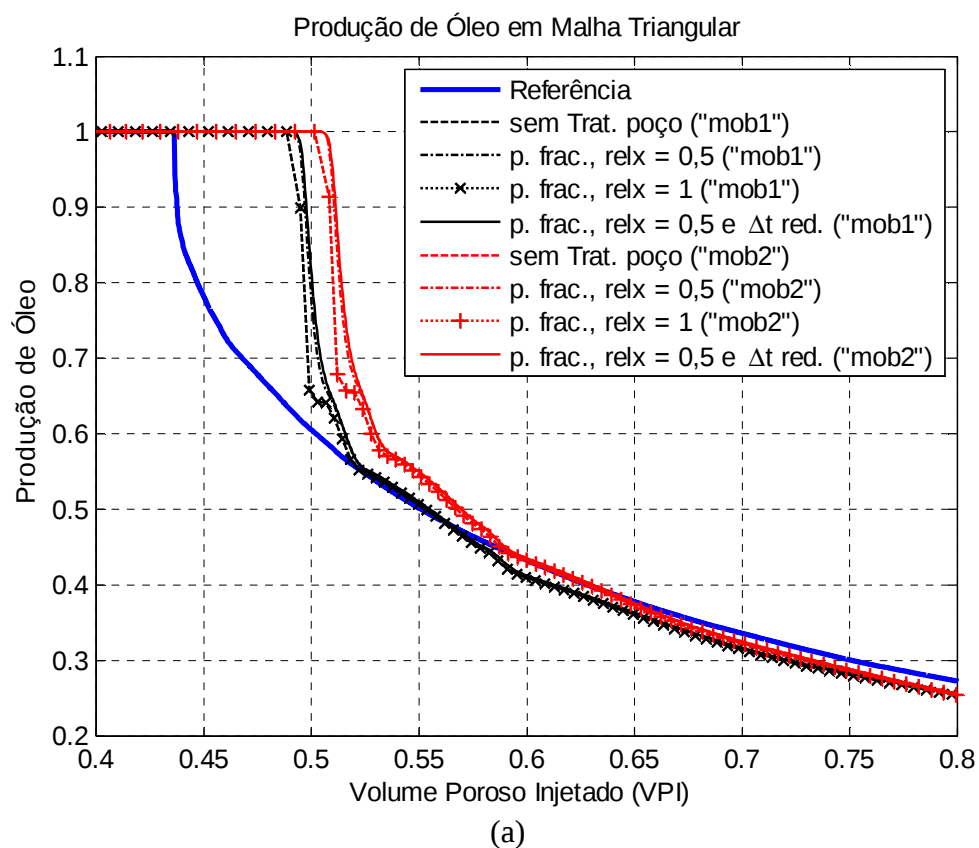


Figura 66. Gráficos de produção de óleo para malha triangular com 18x18 subdivisões (648 volumes de controle). Resultados com as diversas estratégias para tratamento de poço são comparados com os resultados sem qualquer tratamento: (a) vista geral; (b) detalhe mostrando onde ocorrem oscilações.

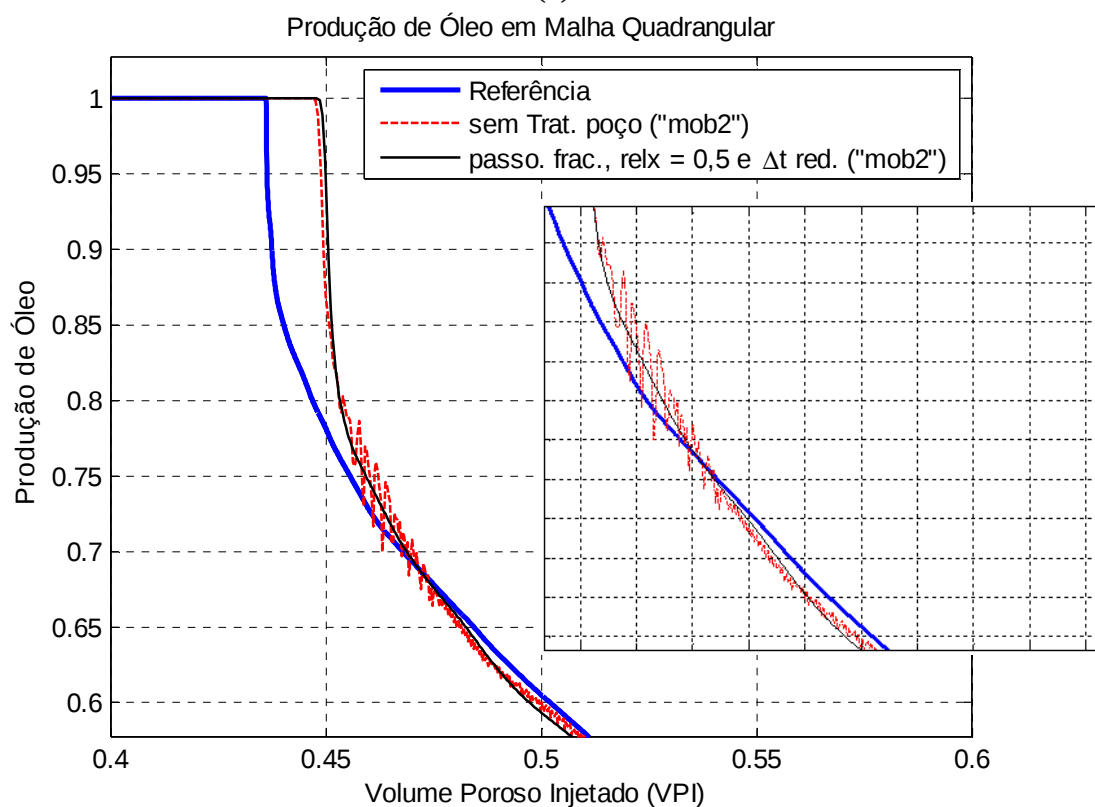
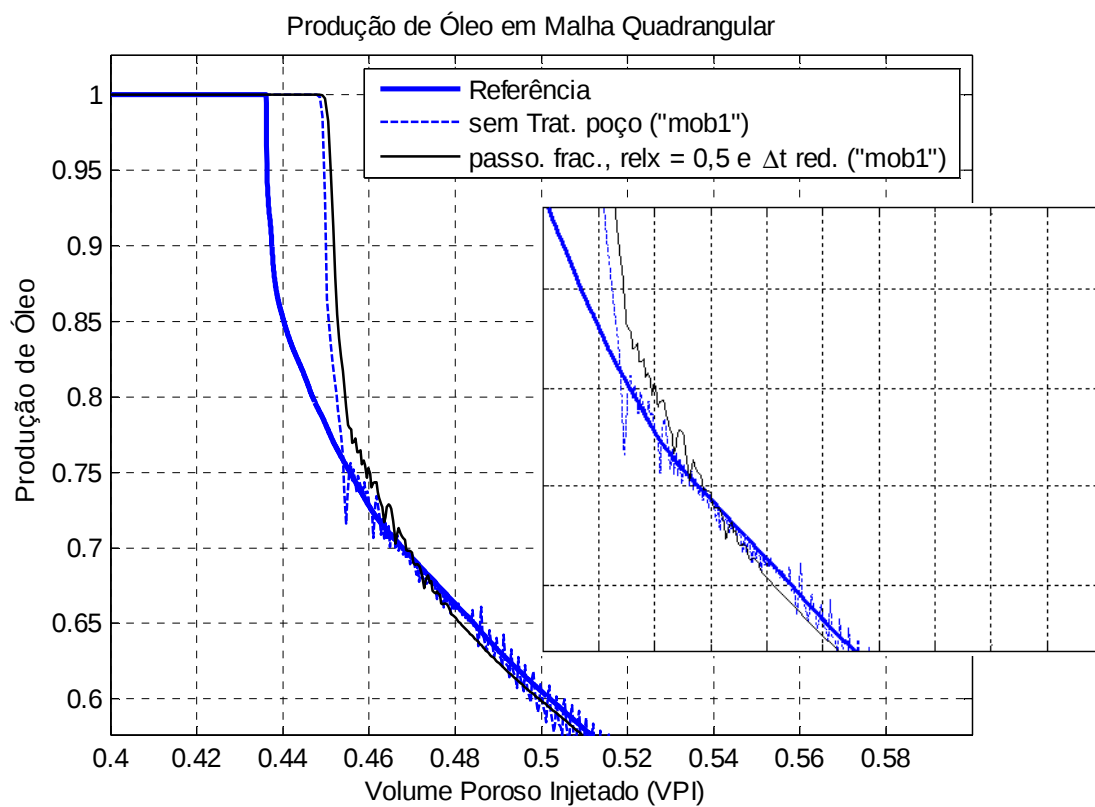


Figura 67. Gráficos de produção de óleo para malha quadrangular com 32x32 subdivisões (1.143 volumes de controle): (a) resultados obtidos para estratégia “mob1” na aproximação de $\lambda(S_w)$; (b) resultados obtidos para estratégia “mob2” na aproximação de $\lambda(S_w)$.

No que se refere à influência do tipo de aproximação para os termos de mobilidade, como se vê nos gráficos da figura 66, o *breakthrough* obtido com a estratégia “mob1” é mais próximo da curva de referência do que o obtido com a estratégia “mob2”. Isso ocorre devido à localidade dos dados utilizados com a estratégia “mob1” em relação à estratégia “mob2”. Essa última estratégia tende a ser mais difusiva por usar uma média entre valores de mobilidade nodais, calculados com ponderação dos volumes de controle da vizinhança próxima (ver seção 3.4.2).

Um segundo caso envolve soluções discretas obtidas com a malha quadrangular não estruturada ilustrada na figura 65c. As oscilações nas curvas de produção são mais severas do que na malha triangular da primeira avaliação, conforme pode ser visto na figura 67.

Nesse caso, para evitar conflito na leitura dos gráficos, apenas o pior e o melhor cenário são comparados nos gráficos da figura 67 para as aproximações de mobilidade total “mob1” (figura 67a) e “mob2” (figura 67b). Nota-se que a associação entre passo fracionado, fator de relaxação com $\mathcal{r} = 0,5$ e Δt reduzido no poço produtor (“*passo frac., relx = 0,5 e Δt red.*”) suaviza substancialmente as oscilações espúrias. Essa suavização é muito mais intensa para a aproximação da mobilidade total “mob2”, onde quase toda oscilação é contida.

4.3.3. Escoamento Bifásico de Água e Óleo em Reservatório Isotrópico e Muito Heterogêneo

Este problema, adaptado de Chueh *et al.* (2010), consiste em um reservatório isotrópico, com dimensões $[0,1]^2$, cuja permeabilidade é dada por uma distribuição aleatória (ver figura 68c), definida como:

$$K(\vec{x}) = k(\vec{x})I, \quad \text{com} \quad k(\vec{x}) = \min \left\{ \max \left\{ \sum_{l=1}^N \Phi(\vec{x}), 0.01 \right\}, 4 \right\} \quad (296)$$

onde o parâmetro $\Phi(\vec{x})$ é dado por:

$$\Phi(\vec{x}) = \exp \left[- \left(\frac{|\vec{x} - \vec{x}_{rand}|}{0.05} \right)^2 \right] \quad (297)$$

Os vetores posição $\vec{x}$ e $\vec{x}_{rand}$ correspondem, respectivamente, às coordenadas de cada centroide dos volumes de controle da malha adotada e de 40 pontos no interior do domínio cuja distribuição é aleatória (Chueh *et al.*, 2010). Para garantir que as soluções a seguir possam ser reproduzidas, os valores de $\vec{x}_{rand}$ são apresentados na tabela D.13 (ver apêndice D). Uma malha cartesiana quadrangular com 64x64 subdivisões, ilustrada na figura 68b, é utilizada.

Condições de contorno de fluxo prescrito nulo são atribuídas às faces superior e inferior, como indicado na figura 68a. Nas faces esquerda e direita, fluxo unitário e pressão nula são, respectivamente, prescritos. Um valor unitário de saturação de água também é prescrito na face esquerda do reservatório, representando a injeção de água na rocha. Os resultados são obtidos para o tempo adimensional de 0,3 VPI e número de Courant $\mathcal{C} = 0,6$.

A ordem de aproximação é levada em conta na definição do passo de tempo como se observa na equação (150). A razão entre mobilidades adotada para esse problema é $M = 5$. Adicionalmente, os valores da saturação irreduzível de água e residual de óleo são $S_{wi} = S_{or} = 0$ e o modelo de Brooks-Corey com expoentes dados por $n_w = n_o = 2$, é utilizado.

Aproximações de 1ª a 4ª ordem no espaço são empregadas na solução desse problema. Nos resultados com aproximação de 2ª ordem, a eficiência dos limitadores de face e de volume de controle é comparada no que se refere à capacidade de representação dos detalhes do escoamento. O limitador de face do tipo van Albada (Löhner, 2001) é utilizado, em uma estratégia do tipo MUSCL, em uma abordagem onde S_w é a variável extrapolada. Ainda para a aproximação de 2ª ordem, o limitador de volume de controle do tipo MLP-vk (Park e Kim, 2012b) é utilizado para extrapolações em f_w .

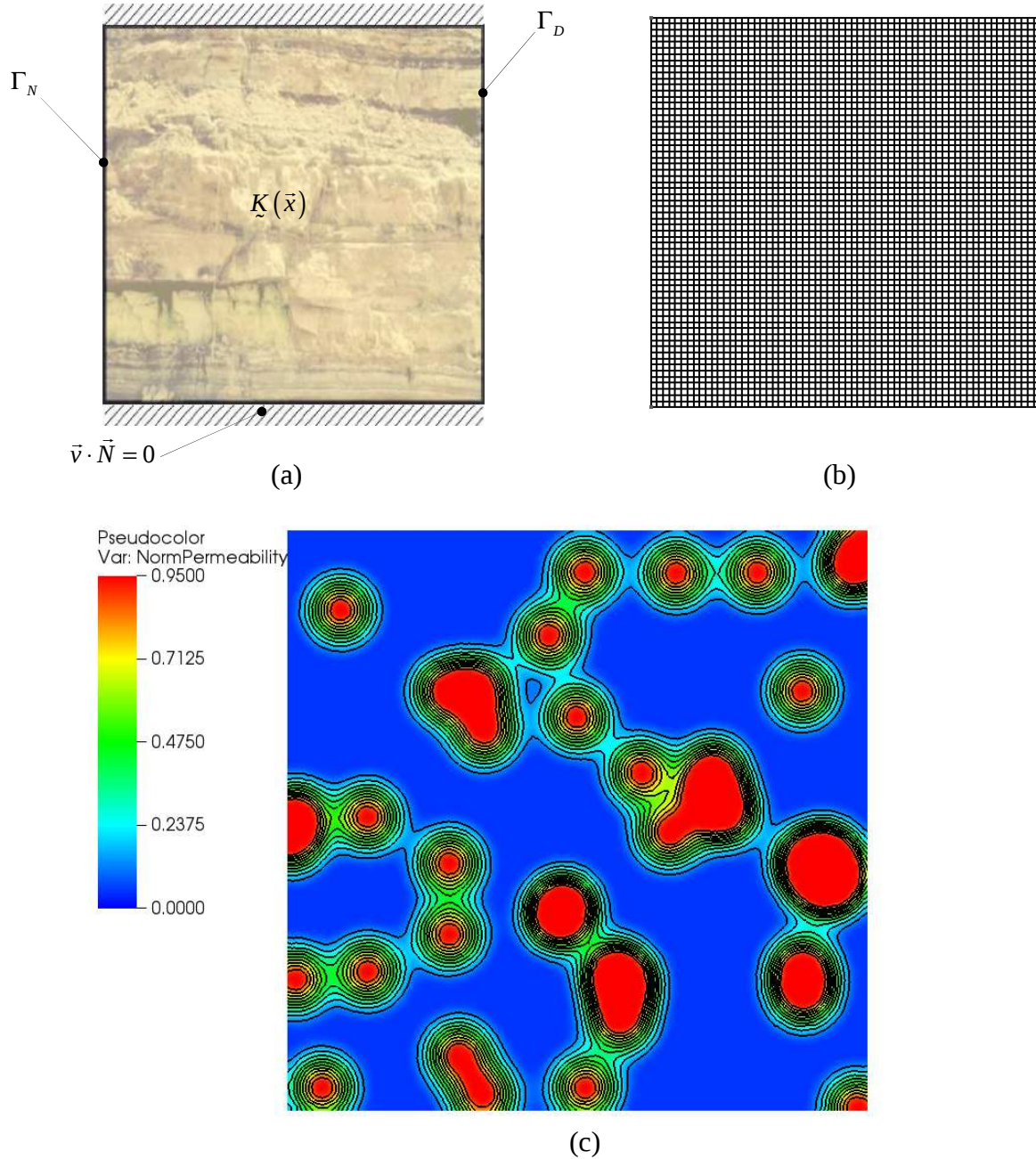


Figura 68. Escoamento bifásico de água e óleo em reservatório isotrópico e heterogêneo: (a) domínio com condições de contorno; (b) malha quadrangular cartesiana com 64x64 subdivisões; (c) campo de permeabilidade.

É importante observar que essa configuração que relaciona o tipo de limitador com a variável extrapolada (e a ordem de aproximação) produziu, para as respectivas estratégias de limitação, os melhores resultados no modelo unidimensional de Buckley-Leverett abordado

na seção 4.3.1. Tais resultados são usados aqui como uma referência para a escolha do limitador e variável a ser extrapolada. Seguindo a mesma referência, as aproximações do tipo MUSCL com 3ª e 4ª ordem são ambas obtidas com extrapolação em f_w e limitadas com a estratégia MLP (Park *et al.*, 2014). Em todos os casos, a equação de pressão é resolvida com a formulação MPFA-O, descrita na seção 3.3.3.

Uma solução de referência, ilustrada na figura 69, foi obtida com malha triangular, não estruturada e uniforme com aproximadamente 120x120 subdivisões (37.996 volumes de controle). Para isso, os esquemas numéricos MPFA-O e *upwind* de primeira ordem foram empregados na solução das equações de pressão e saturação, respectivamente.

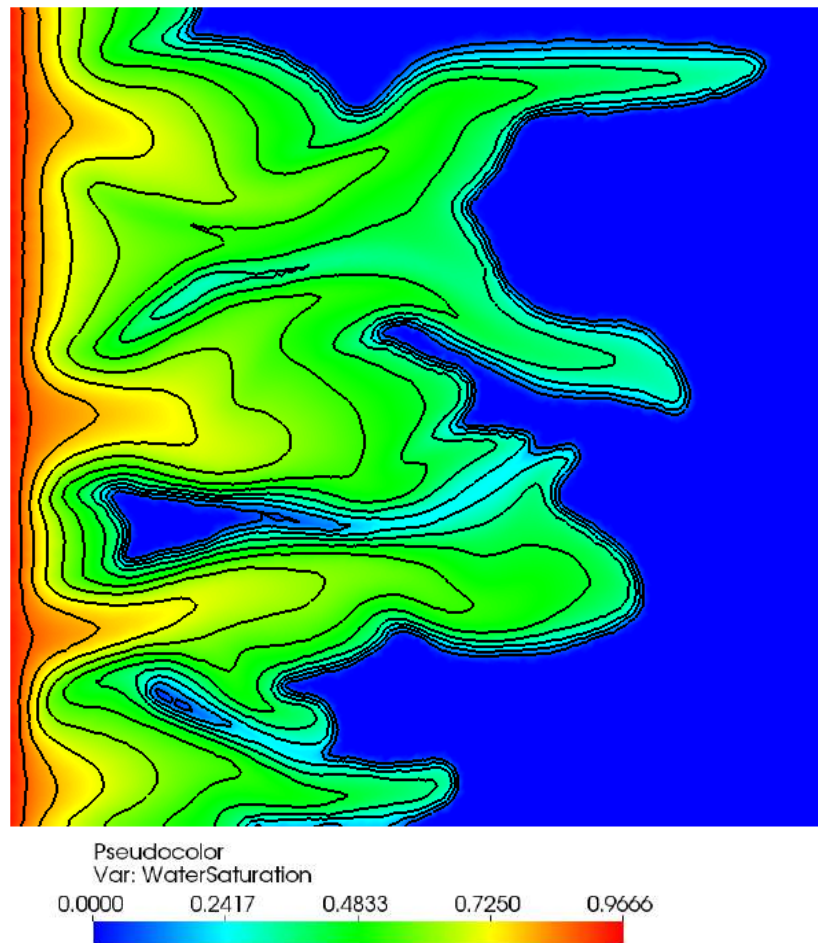
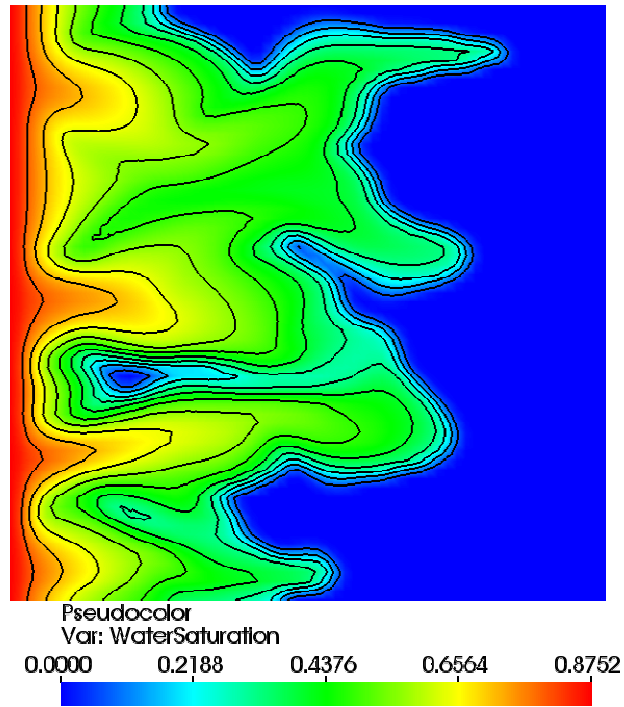


Figura 69. Solução de referência obtida com malha triangular, não estruturada e uniforme com aproximadamente 120x120 subdivisões (37.996 volumes de controle).

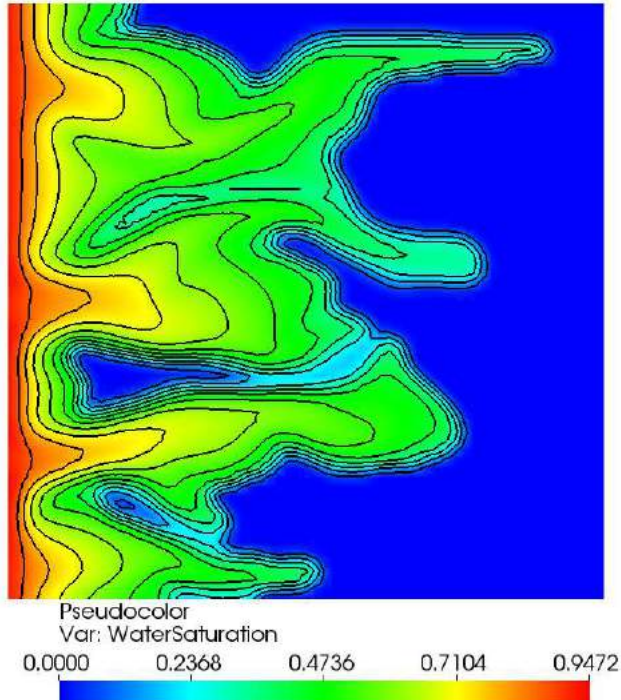
Como se vê nas figuras 69 a 71, a distribuição aleatória de permeabilidade (ver figura 68c) faz com que o fluido menos viscoso, injetado no reservatório, avance facilmente nas regiões de alta permeabilidade. Os chamados *fingers* físicos são, portanto, formados. É esperado que, para maiores ordens de aproximação, mais bem definidos sejam esses *fingers*. De fato, todas as aproximações de alta ordem (figuras 70b, 70c e 71) representam melhor as abruptas variações na saturação de água do que a aproximação de primeira ordem (figura 70a). Isso ocorre devido à excessiva difusão numérica, própria de aproximações de baixa ordem.

A solução com aproximação de 2ª ordem com o limitador de face de van Albada representou, de forma mais bem definida, certos detalhes do escoamento quando se compara à aproximação de mesma ordem, obtida com o limitador MLP-vk (ver figuras 70b e 70c).

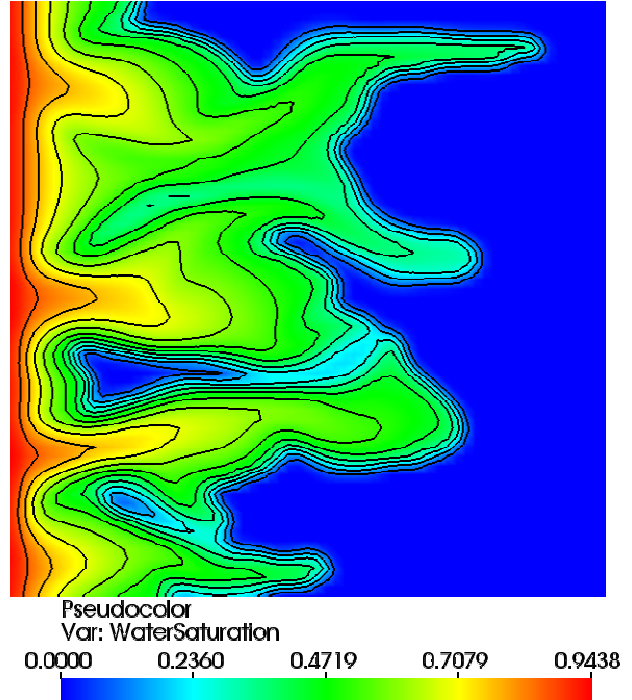
De forma geral, os resultados obtidos com aproximação de 3ª ordem, ilustrado na figura 71a, produzem aproximações com mais resolução do que as obtidos com 2ª ordem, para qualquer tipo de função limitadora.



(a)



(b)



(c)

Figura 70. Escoamento bifásico de água e óleo em meio heterogêneo para diferentes ordens de aproximação no espaço: (a) solução com aproximação de 1ª ordem; (b) solução com aproximação de 2ª ordem e limitador de face van Albada; (c) solução com aproximação de 2ª ordem e limitador de volume de controle MLP-vk.

O uso de uma função limitadora que avalia a ocorrência de extremos em toda a vizinhança do volume de controle tem uma tendência maior a produzir soluções com mais difusão numérica (Woodfield *et al.*, 2004; Berger *et al.*, 2005). Por outro lado, distorções na malha ou algumas características do escoamento podem levar a soluções não monótonas quando um limitador com natureza unidimensional, como o van Albada, é utilizado tal como observado por Contreras *et al.* (2015). Esse tipo de situação é abordado no problema descrito na seção 4.3.6.

No resultado obtido com aproximação de 4ª ordem, ilustrado na figura 71b, o campo de saturação de água, como um todo, tem maior resolução do que os resultados obtidos com ordens inferiores de aproximação. É importante destacar que a escolha de um estêncil com viés à montante para a reconstrução das derivadas, como o ilustrado na figura 62, é fundamental para esse desempenho, tal como também se conclui na seção 4.3.1, para o modelo unidimensional de Buckley-Leverett.

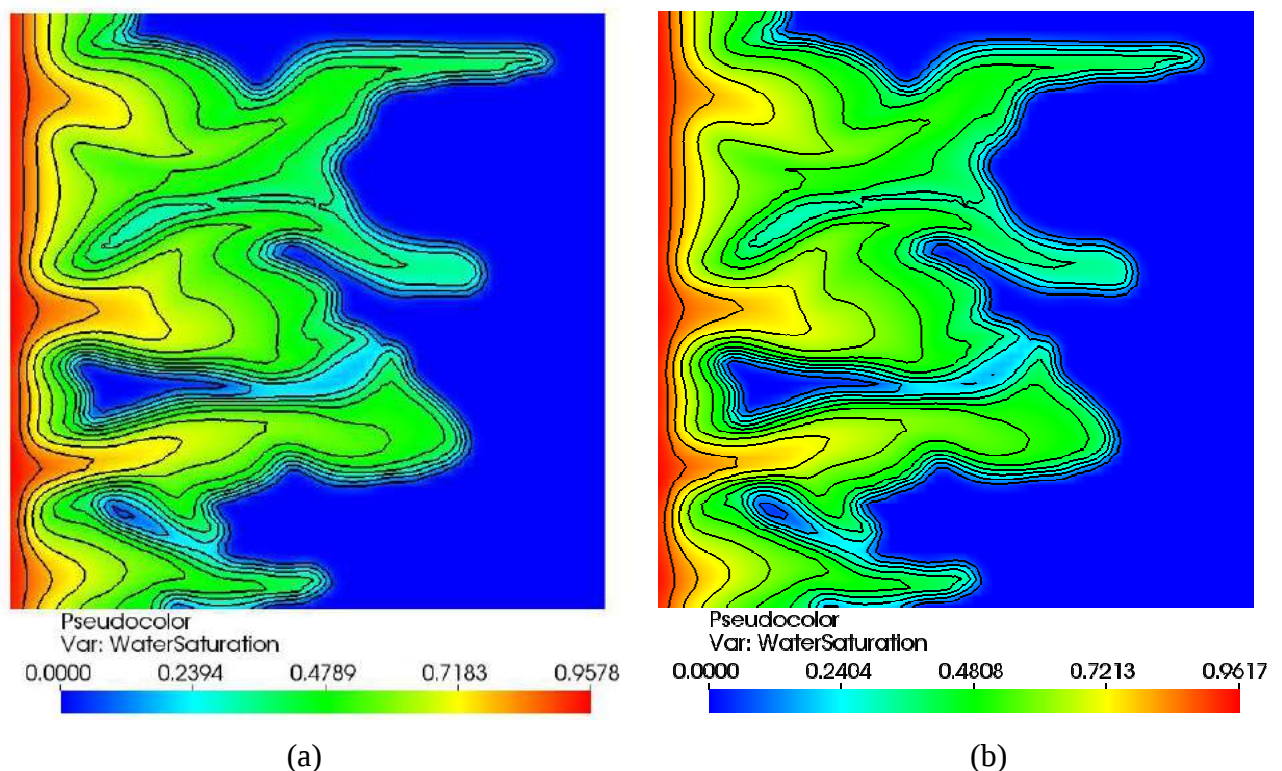


Figura 71. Escoamento bifásico de água e óleo em meio heterogêneo para diferentes ordens de aproximação no espaço: (a) solução com aproximação de 3ª ordem e limitador de volume de controle MLP; (b) solução com aproximação de 4ª ordem e limitador de volume de controle MLP.

Na estratégia de limitação do tipo MLP, a função limitadora atua sobre o volume de controle, baixando a ordem de aproximação quando valores extremos são detectados (Park e Kim, 2012). Na figura 72, tem-se uma visão geral de como essa função limitadora atua no domínio computacional para as aproximações de alta ordem aqui consideradas. Comparando as figuras referentes a cada ordem, verifica-se que, conforme a ordem de aproximação aumenta, mais vezes a função limitadora atua. No entanto, essa atuação ocorre preferencialmente na região após a frente de saturação.

Dessa forma, em geral, a excessiva atuação do limitador na aproximação de 4ª ordem não prejudica a resolução de detalhes localizados mais à montante do choque.

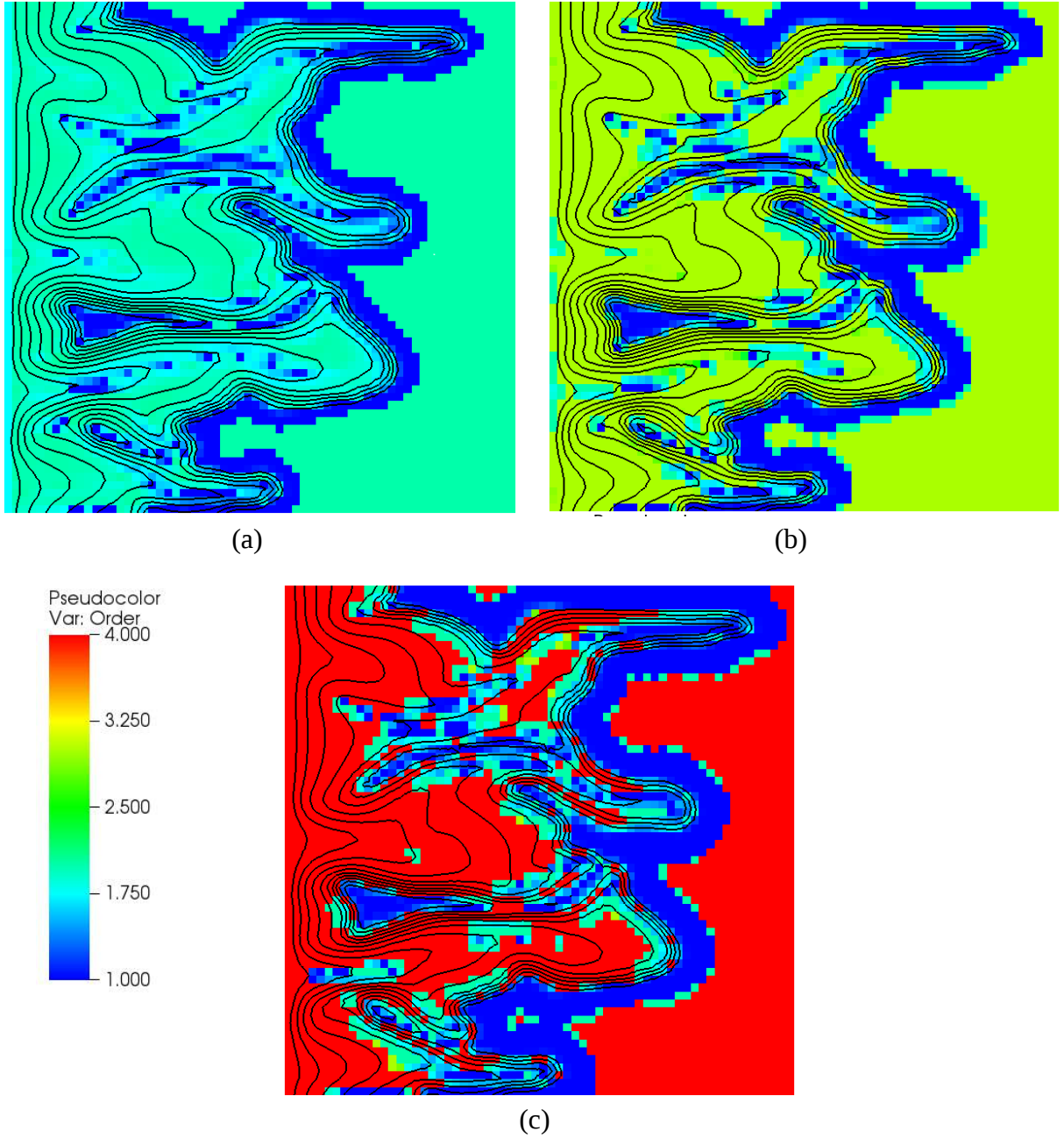


Figura 72. Distribuição de ordens de aproximação obtidas após atuação da estratégia MLP: (a) aproximações de 2ª ordem com MLP-vk; (b) aproximações de 3ª ordem com MLP; (c) aproximações de 4ª ordem com MLP.

4.3.4. Escoamento Bifásico de Água e Óleo (Tipo Pistão) em Reservatório Homogêneo e Isotrópico

O problema com o padrão de $\frac{1}{4}$ de cinco poços em meio isotrópico ($K = I$) e homogêneo é novamente avaliado na presente seção. O domínio unitário ilustrado na figura 65a é tomado como referência. Tal como na seção 4.3.2, uma condição de contorno de fluxo nulo é atribuída em todo o contorno Γ_N . Vazão unitária é prescrita no poço injetor e pressão nula é atribuída ao poço produtor. Nesse caso, apesar da simplicidade geométrica e de propriedade de rocha, a relação constitutiva do tipo pistão (*piston-like*), adotada de Yanosik e McCracken (1979) e representada na equação (11), torna o problema desafiador. A razão

de mobilidade adversa, aqui definida como $M = 100$ (Hurtado *et al.*, 2007), e o uso de uma malha com orientação preferencial propiciam o surgimento de instabilidades na solução numérica.

Para avaliar o desempenho de cada formulação abordada, frente a essas instabilidades, duas malhas são utilizadas. Uma malha quadrangular, estruturada com 20x20 subdivisões, ilustrada na figura 66a e uma malha, também como 20x20 subdivisões, ilustrada na figura 66b. Nota-se que a malha triangular tem mais graus de liberdade do que a malha quadrangular.

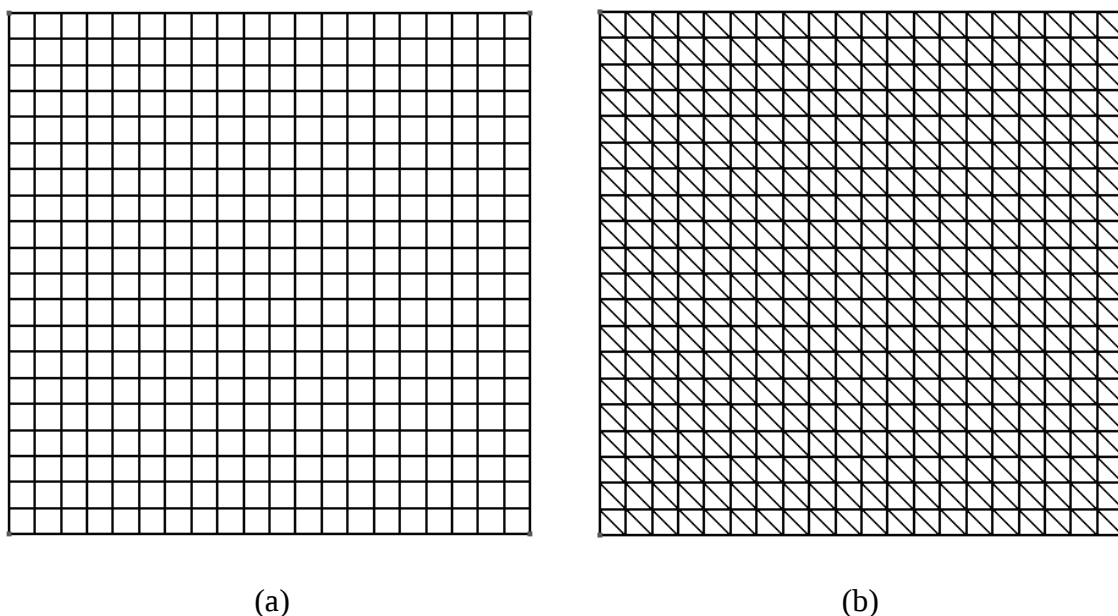


Figura 73. Malhas empregadas para o problema de $\frac{1}{4}$ de cinco poços com escoamento do tipo pistão: (a) malha quadrangular estruturada com 20x20 subdivisões; (b) malha triangular estruturada com 20x20 subdivisões.

Os esquemas numéricos standard (*stdr*) e TMSIC, com abordagens TMU e SMU, e aproximação com 1ª ordem de acurácia são comparados para diferentes formas de aproximar a mobilidade total (mobilidade à montante, “*mob1*” e “*mob2*”). Os perfis de saturação de água são ilustrados na figura 74, para um tempo adimensional de 0,2 VPI e solução com a malha a quadrangular ilustrada na figura 73a.

Nesse caso, fica evidente a influência do tipo de aproximação para a mobilidade total sobre o desempenho da formulação avaliada. Mesmo o esquema numérico com natureza unidimensional (*stdr*), apresenta redução do GOE para a estratégia “*mob2*”, como se pode ver na figura 74c. Ainda para a formulação *stdr*, a mobilidade à montante apresentou o pior resultado, i.e., com maior tendência do escoamento em seguir a orientação da malha adotada. Nos esquemas numéricos TM, a estratégia “*mob1*” produziu os melhores resultados para as abordagens TMU (ver figura 74e) e SMU (ver figura 74h). Dentre esses, no entanto, o esquema numérico TMSIC/SMU produziu o melhor resultado, praticamente sem GOE, como se pode ver na figura 74h. A aproximação com mobilidade à montante também produziu os piores resultados, nesse contexto (ver figura 74d e 74g).

Em uma segunda avaliação, as formulações TM (TMSIC, TMSEC-1 e TMSEC-2) são comparadas para as duas malhas ilustradas na figura 73. Tendo em vista os resultados apresentados na figura 74, apenas a aproximação “*mob1*” para a mobilidade total é empregada. Como se observa na figura 75, para a malha quadrangular estruturada, os três esquemas numéricos TM apresentam, qualitativamente, o mesmo resultado nas abordagens TMU e SMU. Por outro lado, o mesmo não ocorre quando a malha triangular estruturada ilustrada na figura 73b é empregada (ver figura 76). Uma vez que a malha triangular é transversal ao escoamen-

to, é esperado que, em geral, o perfil de saturação de água receba a influência dessa forma de orientação da malha considerada. Na figura 76, no entanto, se observa que as formulações TMSIC e TMSEC-2 são menos passíveis a essa influência quando, em relação à formulação TMSEC-1. Isso fica mais evidente para a abordagem TMU.

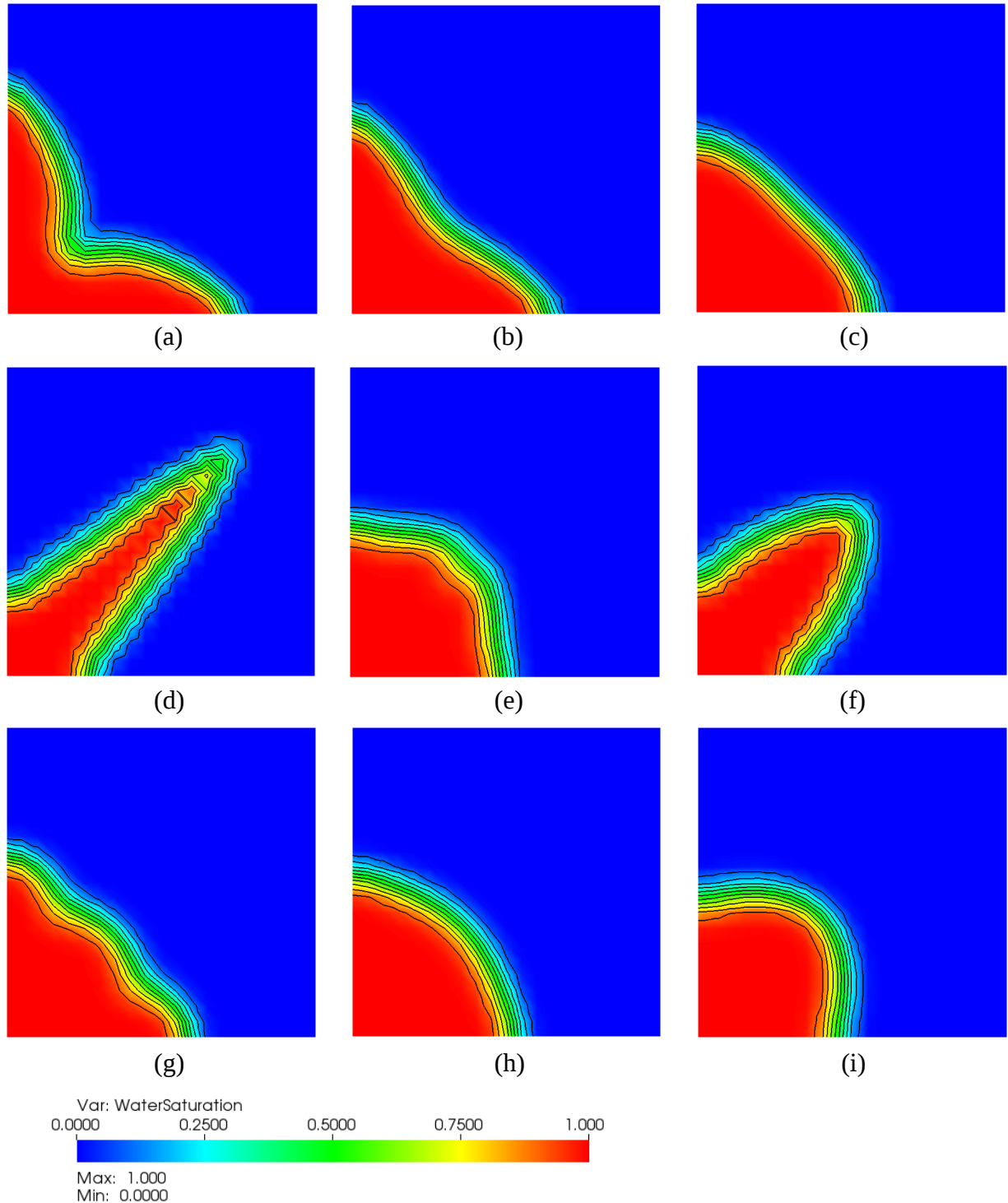


Figura 74. Saturação de água com 1ª ordem para diferentes formas de aproximação do fluxo numérico e da mobilidade total: (a) *stdr* com mobilidade total à montante; (b) *stdr* com estratégia “*mob1*”; (c) *stdr* com estratégia “*mob2*”; (d) TMSIM/TMU com mobilidade total à montante; (e) TMSIM/TMU com estratégia “*mob1*”; (f) TMSIM/TMU com estratégia “*mob2*”; (g) TMSIM/SMU com mobilidade total à montante; (h) TMSIM/SMU com estratégia “*mob1*”; (i) TMSIM/SMU com estratégia “*mob2*”.

Conforme discutido na subseção da página 123, a proposta com coeficientes explícitos TMSEC-1 utiliza sempre dois pontos na combinação linear convexa que dá a característica multidimensional dessa aproximação. Isso não necessariamente ocorre com as aproximações TMSIC e TMSEC-2.

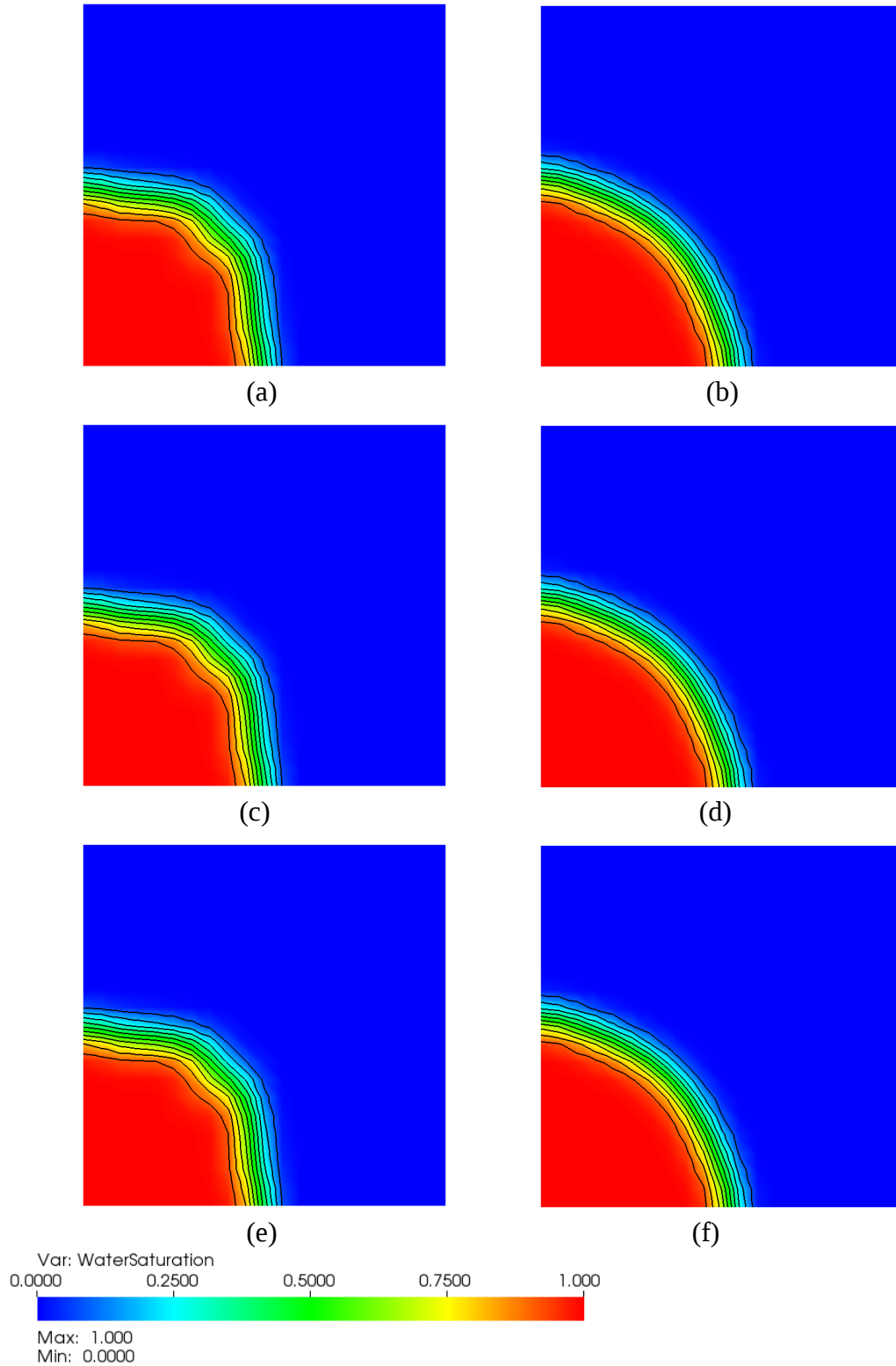


Figura 75. Perfis de saturação de água com 1ª ordem de acurácia, obtidos em malha quadrangular estruturada (20x20 subdivisões) e aproximação “mob1” para a mobilidade total: (a) TMSIC/TMU; (b) TMSIC/SMU; (c) TMSEC-1/TMU; (d) TMSEC-1/SMU; (e) TMSEC-2/TMU; (f) TMSEC-2/SMU.

Como se vê na figura 46 e discussão naquela seção, para a malha triangular, mais do que dois pontos definem a combinação convexa para a aproximação do tipo TMSIC. Consequentemente, o mesmo ocorre para TMSEC-2, uma vez que esse reproduz o TMSIC, porém com coeficientes explícitos, i.e., sem resolver sistemas algébricos locais.

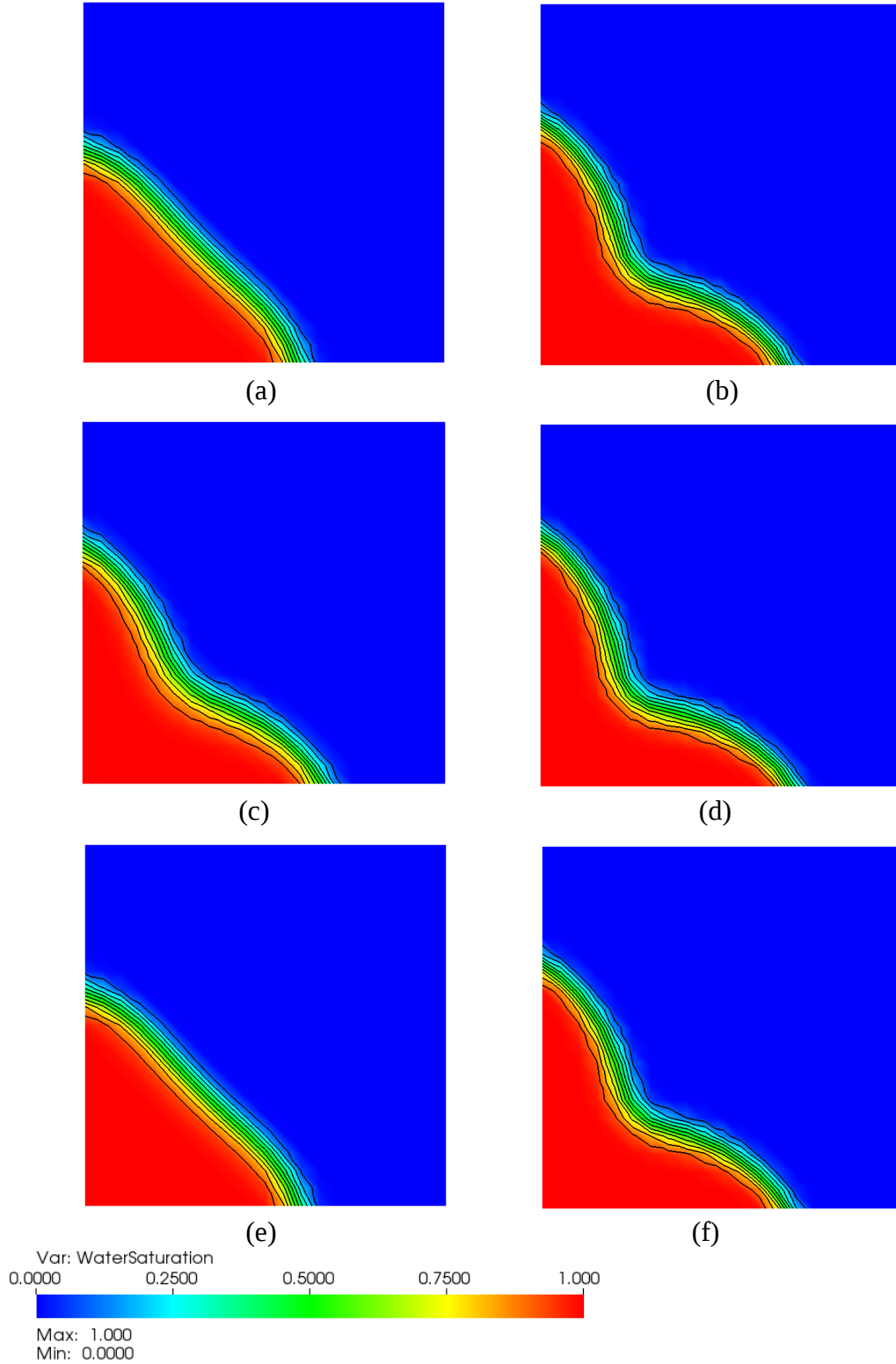


Figura 76. Perfis de saturação de água com 1ª ordem de acurácia, obtidos em malha triangular estruturada (20x20 subdivisões) e aproximação “*mob1*” para a mobilidade total: (a) TMSIC/TMU; (b) TMSIC/SMU; (c) TMSEC-1/TMU; (d) TMSEC-1/SMU; (e) TMSEC-2/TMU; (f) TMSEC-2/SMU.

Dado o desempenho da variante TMSEC-2, aqui proposta, em relação ao TMSEC-1, na figura 77 resultados obtidos com aproximações de 1ª e 2ª ordem no erro de truncamento são comparados.

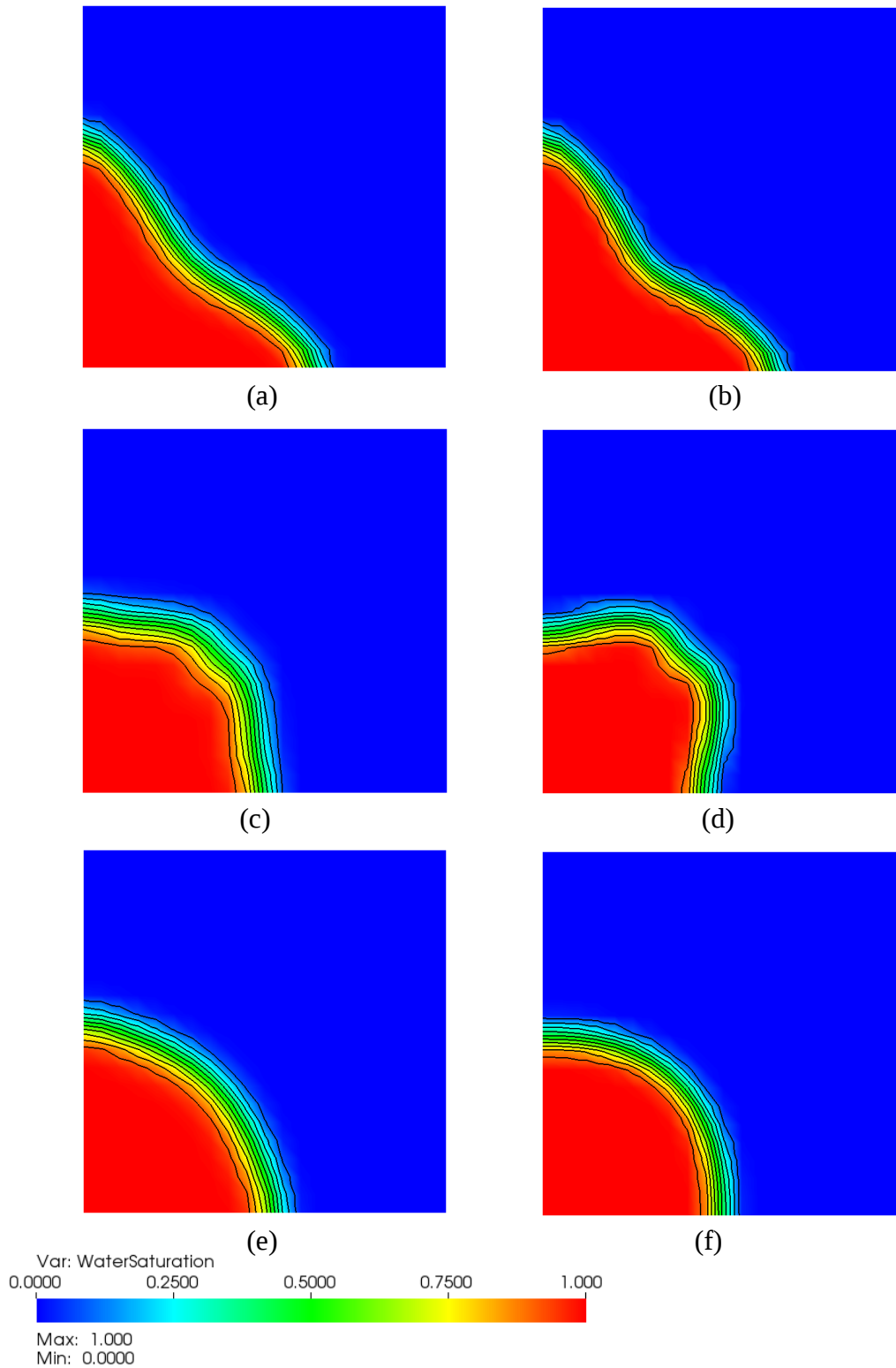


Figura 77. Perfis de saturação de água obtidos em malha quadrangular estruturada (20x20 subdivisões) e aproximação “mob1” para a mobilidade total: (a) *stdr*, 1ª ordem; (b) *stdr*, 2ª ordem (MLP-vk); (c) TMSEC-2/TMU, 1ª ordem; (d) TMSEC-2/TMU, 2ª ordem (MLP-vk); (e) TMSEC-2/SMU, 1ª ordem; (d) TMSEC-2/SMU, 2ª ordem (MLP-vk).

Esses resultados são obtidos para a malha quadrangular da figura 73a, com estratégia de limitação MLP-vk e mobilidade total calculada com a estratégia “mob1”. O comportamento verificado na aproximação de 1ª ordem se repete para a aproximação de alta ordem. No entanto, nota-se uma melhora na acurácia das soluções, especialmente para os esquemas numéricos TM.

Por fim, uma última avaliação para esse caso consiste em comparar os resultados obtidos com malhas diagonal e paralela ao escoamento. As duas malhas quadrangulares estruturadas, com indicação dos poços injetores e produtores, são ilustradas na figura 78. A formulação menos passível ao GOE deve apresentar a menor diferença entre os resultados obtidos com as duas malhas, dado que a física simulada é a mesma.

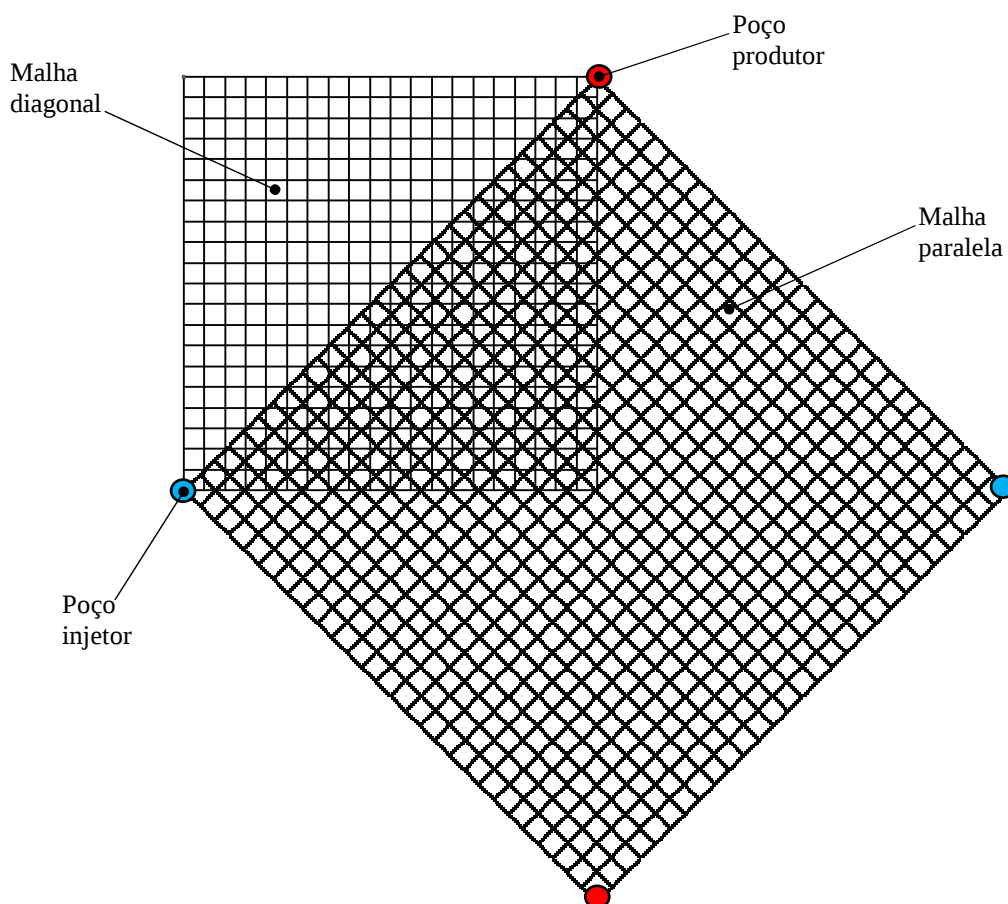


Figura 78. Malhas quadrangulares estruturadas, diagonal e paralela ao escoamento, com indicação dos poços injetores e produtores.

Nessa aplicação foram empregadas aproximações de 1ª e 2ª ordem para os esquemas numéricos *stdr*, e TMSEC-2 com abordagens TMU e SMU. Na figura 79 a sobreposição dos domínios, tal como ilustrado na figura 78, é apresentada para cada caso simulado. Se observa que dentre as aproximações de 1ª ordem (ver figuras 79a a 79c), a abordagem TMU apresenta a menor diferença entre as isolinhas obtidas com a malha diagonal (linhas escuras) e com a malha paralela (linhas brancas). Como esperado, a formulação *stdr* apresentou a maior passividade dos resultados à orientação da malha empregada. Nas aproximações de 2ª ordem (ver figuras 79d a 79f), a abordagem SMU praticamente não apresenta diferença entre os resultados obtidos com malha diagonal e paralela. Isso reproduz o bom desempenho já observado na figura 77f, também para malha quadrangular diagonal. Apesar da boa concordância entre os resultados obtidos nas diferentes malhas, a abordagem TMU (ver figura 79e) apresentou vari-

ações nas isolinhas que não condizem com o comportamento esperado para um escoamento em meio homogêneo e isotrópico.

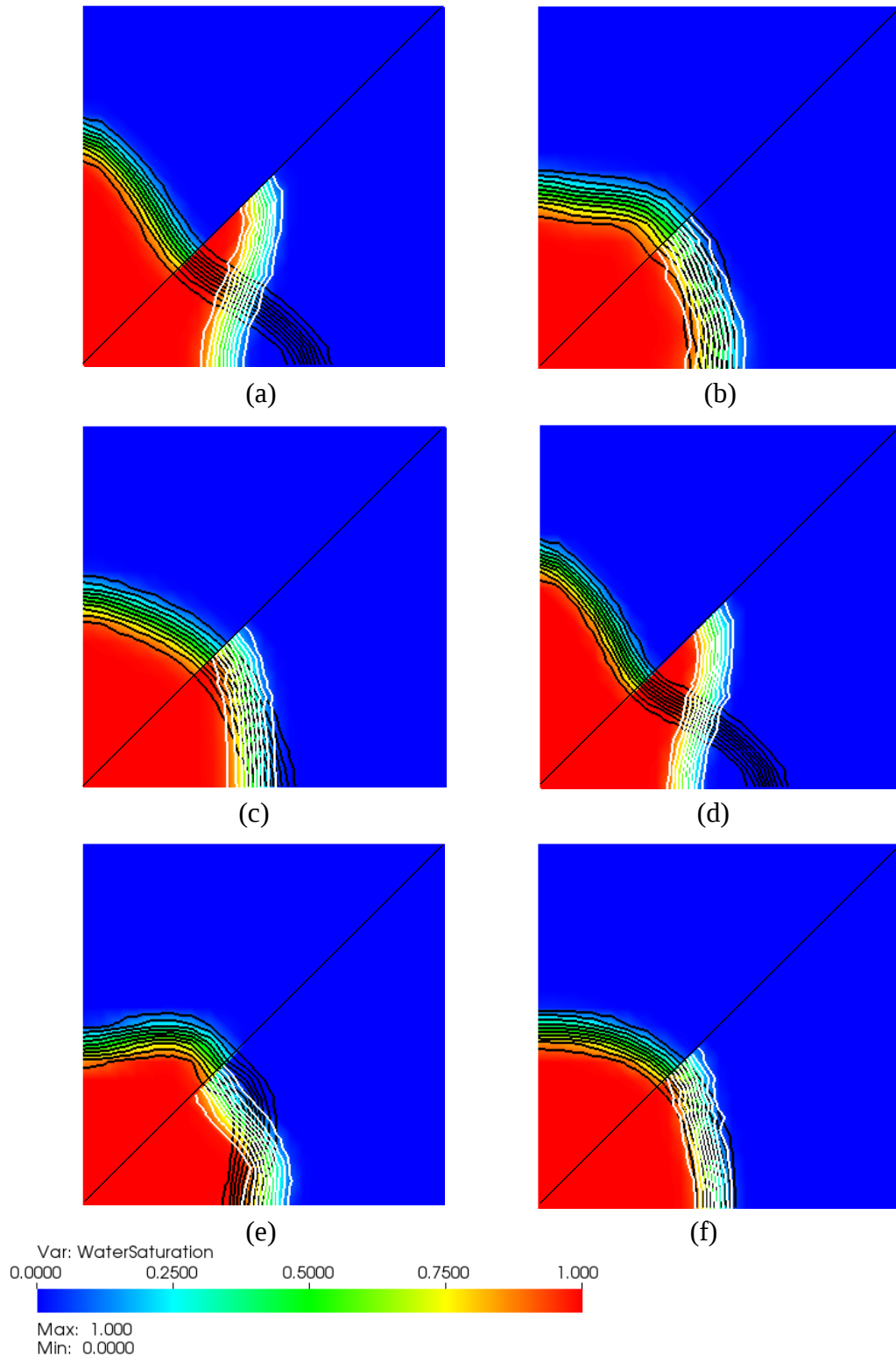


Figura 79. Perfis de saturação de água obtidos em malha quadrangular estruturada diagonal com 20x20 subdivisões (linhas escuras) e paralela com 28x28 subdivisões (linhas brancas) e aproximação “mob1” para a mobilidade total: (a) *stdr*, 1ª ordem; (b) TMSEC-2/TMU, 1ª ordem; (c) TMSEC-2/SMU, 1ª ordem; (d) *stdr*, 2ª ordem (MLP-vk); (e) TMSEC-2/TMU, 2ª ordem (MLP-vk); (f) TMSEC-2/SMU, 2ª ordem (MLP-vk).

4.3.5. Escoamento Bifásico em Meio Homogêneo e Isotrópico com 3 Poços

O presente problema, obtido de Kozdon *et al.* (2011), consiste em um meio isotrópico, com dimensões $[-0,5;0,5]^2$ e inicialmente saturado por óleo. Duas regiões, circular e externa (ver figura 80), têm diferentes tensores de permeabilidade, definidos por:

$$\tilde{K}_{circ} = \begin{bmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1 \end{bmatrix}; \quad \tilde{K}_{ext} = \begin{bmatrix} 10^{-6} & 0 \\ 0 & 10^{-6} \end{bmatrix} \quad (298)$$

Embora existam duas regiões com propriedades distintas, o escoamento é restrito à região circular, o que torna o problema, de certa forma, homogêneo. Condição de contorno de fluxo nulo é imposta em todo o contorno. Um poço injetor é localizado no centro do domínio, Como ilustrado na figura 80a, no qual vazão unitária é prescrita. Dois poços produtores 1 e 2, à esquerda e à direita, respectivamente, são simetricamente postos (ver figura 80). Pressão nula é prescrita nos dois e suas coordenadas são definidas como:

$$x_{1,2}; y_{1,2} = \{\mp 0,3 \cos(\pi/6); -0,3 \sin(\pi/6)\} \quad (299)$$

Na proposta de Kozdon *et al.* (2011), o domínio é rotacionado em vários ângulos enquanto a posição dos poços permanece fixa. O emprego de uma malha cartesiana quadrangular com 51x51 subdivisões torna esse teste uma excelente forma de avaliação da formulação numérica quanto sua passividade a efeitos de orientação de malha. A assimetria provocada pela posição dos poços produtores em relação à orientação da malha pode trazer resultados bem diferentes do esperado, fisicamente, para as curvas de produção. No presente texto, apenas a rotação do domínio em 30° , além do domínio sem rotação, é avaliada (ver figura 80).

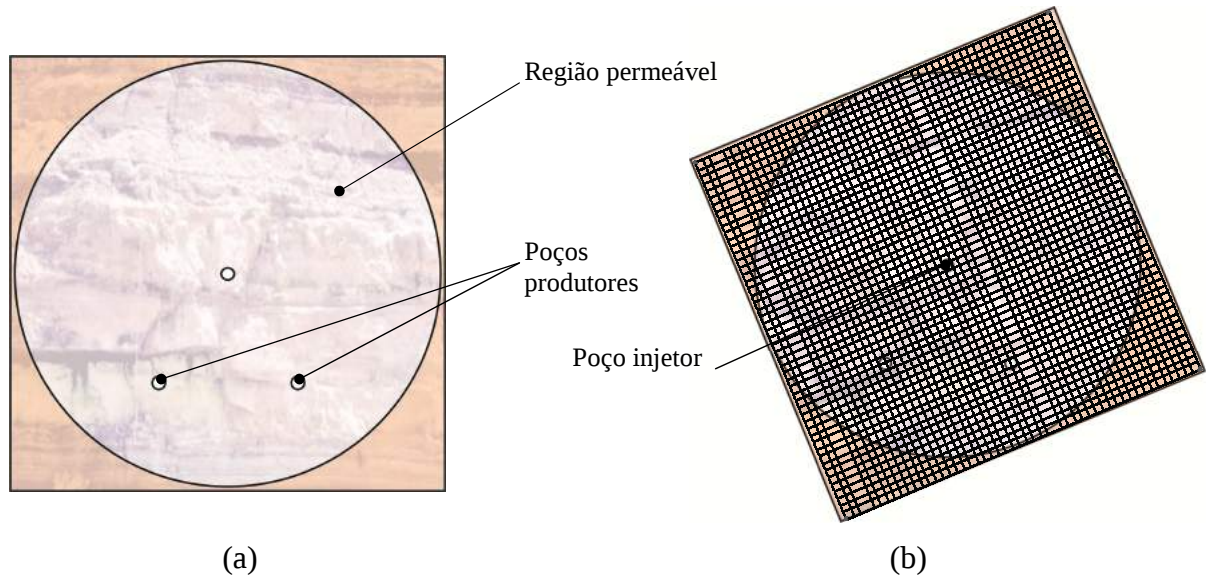


Figura 80. Domínio computacional com dois meios de diferentes valores de permeabilidade: (a) sem rotação com indicação dos poços injetor e produtores; (b) rotacionado em 30° graus e malha quadrangular estruturada com 51x51 subdivisões.

Adicionalmente, a relação de Brooks-Corey, definida na equação (8), é adotada como relação constitutiva. Os coeficiente para água e óleo são, respectivamente, $n_w = 4$ e $n_o = 2$.

Além disso, a razão entre viscosidades e o tempo de simulação adotados são, respectivamente, $M = 100$ e $0,1VPI$, exceto quando definido com outros valores. A porosidade é considerada unitária.

Inicialmente, a influência do tipo de aproximação no termo de mobilidade total $\lambda(S_w)$ é investigada. Os resultados obtidos com as três estratégias empregadas na aproximação de $\lambda(S_w)$, definidas nas equações (36) a (39) são comparados. Na figura 81 o perfil de saturação de água com aproximação de primeira ordem é ilustrado para o domínio sem rotação em relação à posição dos poços. Os resultados obtidos por Kozdon *et al.* (2011), mostrados nas figuras 81a a 81c, são reproduzidos qualitativamente com a aproximação à montante de $\lambda(S_w)$, como se observa nas figuras 81d a 81f. Para esse caso, a aproximação do tipo SMU proporciona os melhores resultados no que se refere à ocorrência de GOE. Todas as aproximações TM, nessa seção, são obtidas com a abordagem TMSEC-2, proposta no presente trabalho.

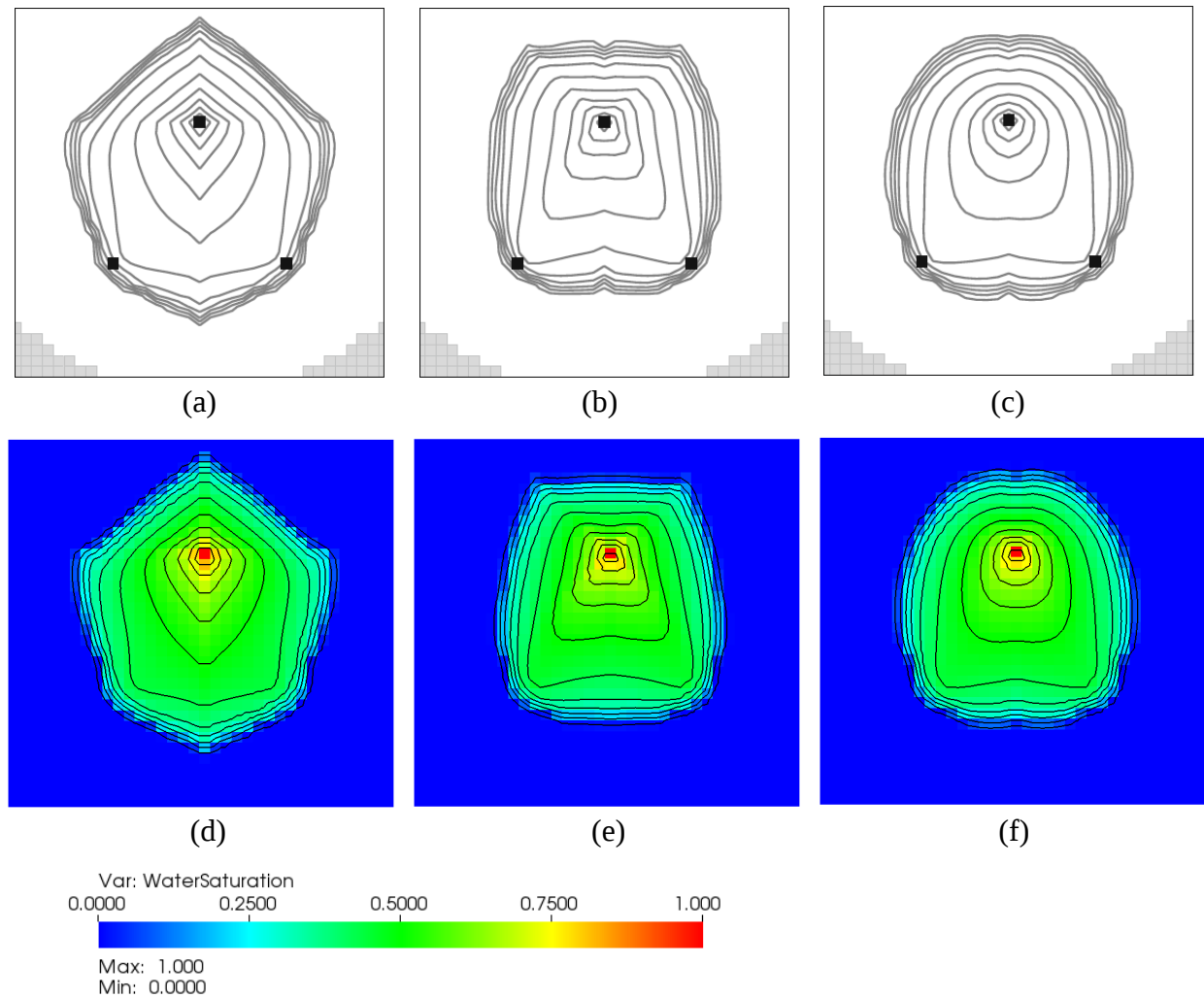


Figura 81. Perfis de saturação de água para o problema de três poços, sem rotação do domínio. Diferentes estratégias de aproximação, com primeira ordem de acurácia, são usadas: (a) *stdr*, obtida de Kozdon *et al.* (2011); (b) TMU, obtida de Kozdon *et al.* (2011); SMU, obtida de Kozdon *et al.* (2011); (d) *stdr* reproduzido com $\lambda(S_w)$ à montante; (e) TMU reproduzido com $\lambda(S_w)$ à montante; (f) SMU reproduzido com $\lambda(S_w)$ à montante.

No entanto, a vantagem da aproximação do tipo SMU frente às outras estratégias não é invariável. Na figura 82, os perfis ilustrados nas figuras 81d a 81f são novamente comparados

com outros perfis, obtidos com as estratégias de aproximação para mobilidade total, “*mob1*” e “*mob2*”, definidas, respectivamente, nas equações (37) e (38).

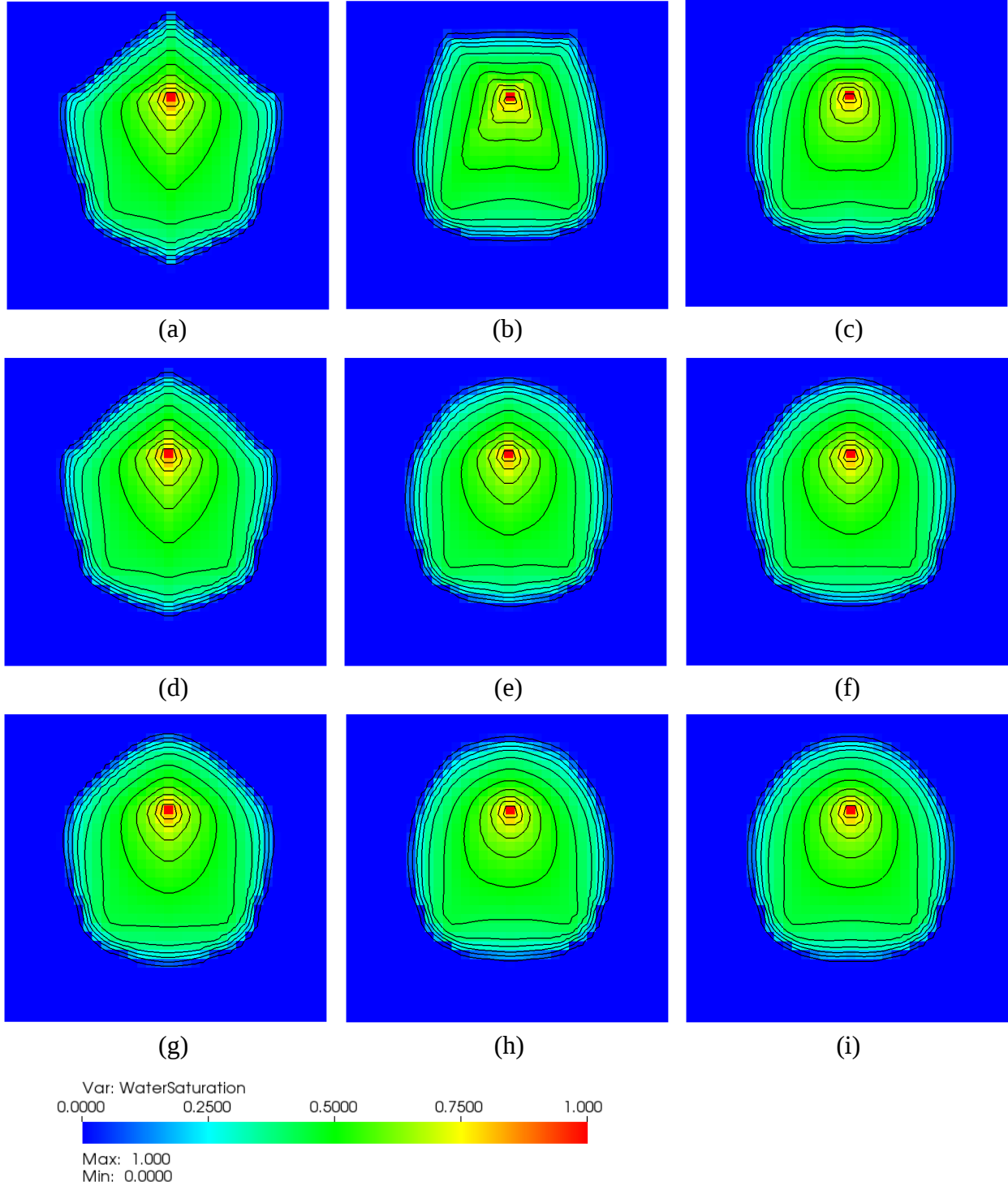


Figura 82. Saturação de água em domínio sem rotação para diferentes estratégias de aproximação com 1ª ordem de acurácia: (a) *stdr* com $\lambda(S_w)$ à montante; (b) TMU com $\lambda(S_w)$ à montante; (c) SMU com $\lambda(S_w)$ à montante; (d) *stdr* e *mob1* para $\lambda(S_w)$; (e) TMU e *mob1* para $\lambda(S_w)$; (f) SMU e *mob1* para $\lambda(S_w)$; (g) *stdr* e *mob2* para $\lambda(S_w)$; (h) TMU e *mob2* para $\lambda(S_w)$; (i) SMU e *mob2* para $\lambda(S_w)$.

Nota-se como a estratégia TMU, em especial, tem o GOE reduzido quando outras formas de aproximar a mobilidade total são empregadas. Essa diferença fica mais evidente na figura 83, onde os resultados são obtidos com a orientação da malha rotacionada em 30° com relação à posição dos poços, tal como ilustrado na figura 80b.

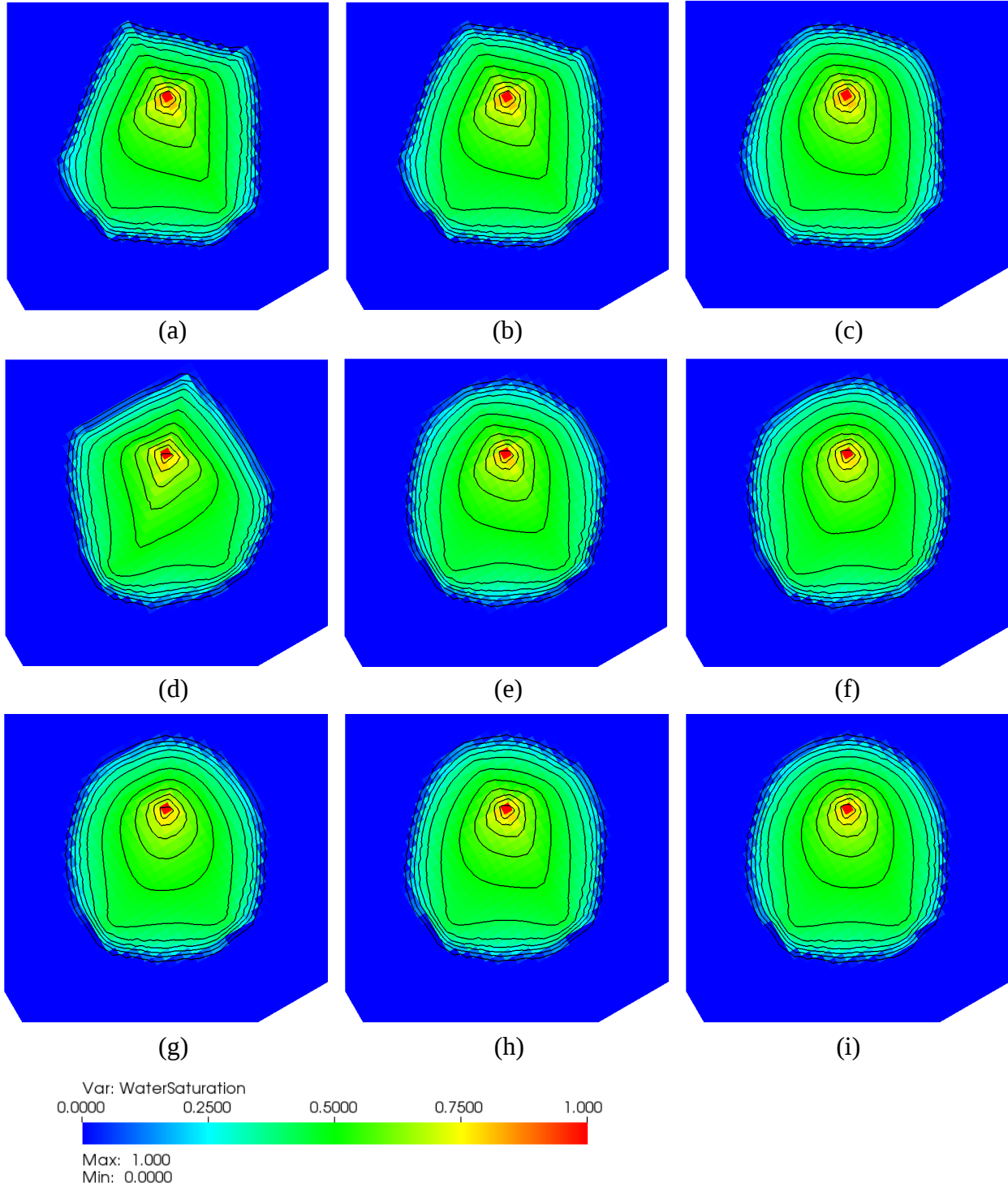


Figura 83. Saturação de água em domínio rotacionado em 30° para diferentes estratégias de aproximação com 1ª ordem de acurácia: (a) *stdr* com $\lambda(S_w)$ à montante; (b) TMU com $\lambda(S_w)$ à montante; (c) SMU com $\lambda(S_w)$ à montante; (d) *stdr* e *mob1* para $\lambda(S_w)$; (e) TMU e *mob1* para $\lambda(S_w)$; (f) SMU e *mob1* para $\lambda(S_w)$; (g) *stdr* e *mob2* para $\lambda(S_w)$; (h) TMU e *mob2* para $\lambda(S_w)$; (i) SMU e *mob2* para $\lambda(S_w)$.

Nesse caso, dada a assimetria do escoamento em relação à orientação da malha, nota-se, nos gráficos ilustrados na figura 84, uma diferença entre as curvas de corte de água (*water cut*) para os dois poços produtores. Esse comportamento destoa, fisicamente, do esperado uma vez que o meio é isotrópico e homogêneo. A diferença entre as curvas obtidas para cada poço produtor é mais acentuada para formulações mais passíveis ao GOE. Assim, o afastamento entre as curvas obtidas em cada poço produtor é um indicador da passividade da formulação ao GOE. Nesses termos, se observa que para a formulação tradicional, com aproximação unidimensional ou *standard* (*stdr*), a estratégia “mob2” produz os melhores resultados, tal como se vê na figura 84a. O mesmo ocorre para as aproximações do tipo TMU, onde praticamente não há GOE com a estratégia “mob2” (ver figura 84b). Por outro lado, para as aproximações do tipo SMU, ilustradas na figura 84c, a mobilidade à montante propicia os melhores resultados. No entanto, quando se compara a aproximação SMU, obtida com mobilidade à montante, com a aproximação TMU, obtida com a estratégia “mob2”, se observa que essa última formulação apresenta os melhores resultados, tal como ilustrado na figura 84d.

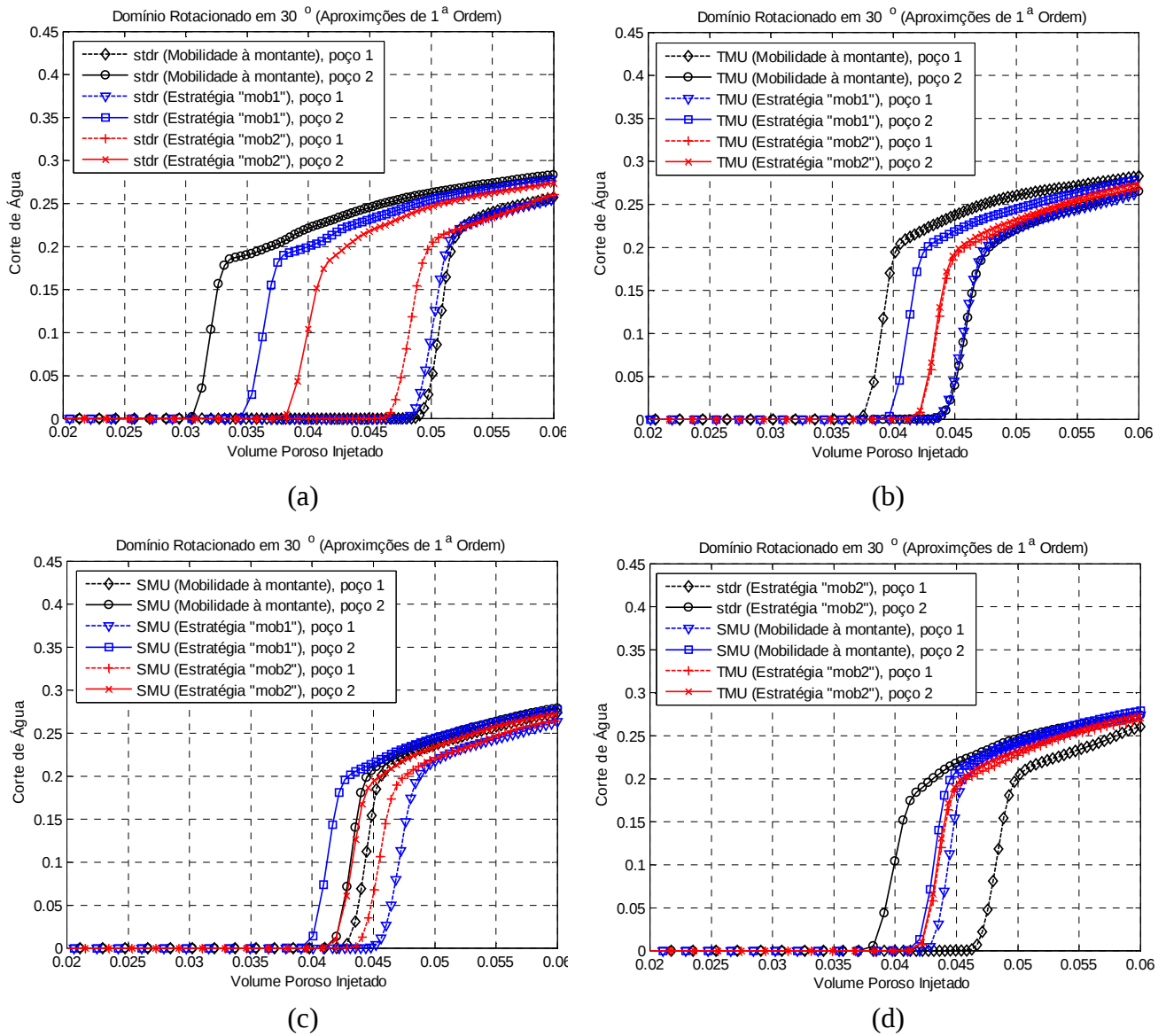


Figura 84. Gráficos de corte de água (*water cut*) para diferentes estratégias de aproximação da mobilidade total: (a) aproximações unidimensionais ou *standard* (*stdr*); (b) aproximações do tipo TMU; (c) aproximações do tipo SMU; (d) comparação entre os melhores resultados para as aproximações *stdr*, TMU e SMU.

Para as aproximações de 2ª ordem, os perfis de saturação de água apresentam, como esperado, menos “espalhamento” em relação aos resultados mostrados na figura 83. As aproximações do tipo MUSCL são obtidas com extrapolação de S_w e estratégia MLP-vk como função limitadora. As aproximações TM são feitas no fluxo fracionário f_w , onde se verificou os melhores resultados no que se refere à minimização de GOE. Na figura 85 esses perfis são ilustrados para as aproximações *stdr*, TMU e SMU no domínio rotacionado em 30°. Para cada uma dessas abordagens, as estratégias “*mob1*” e “*mob2*”, propostas no presente trabalho, são empregadas para aproximar a mobilidade total $\lambda(S_w)$.

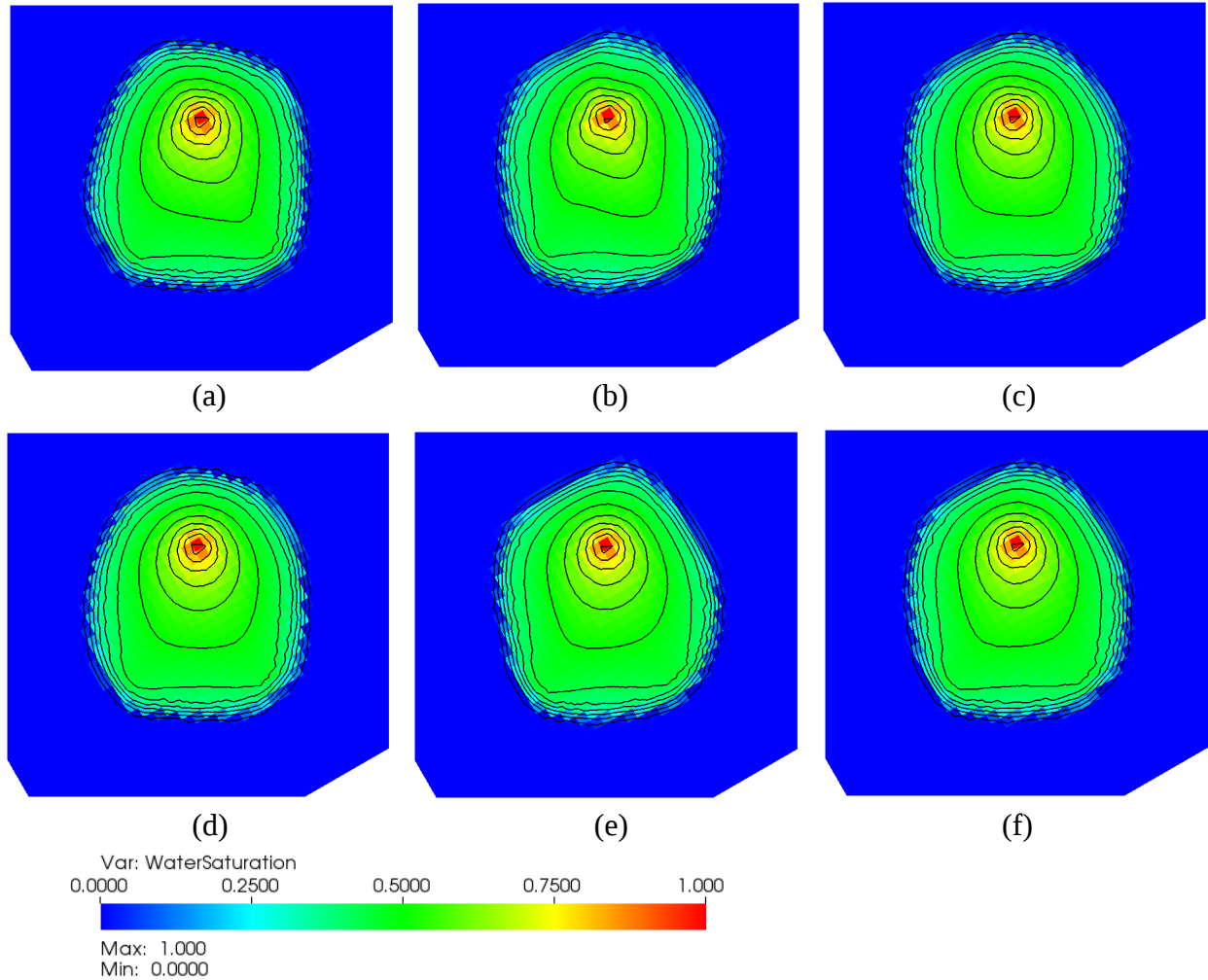
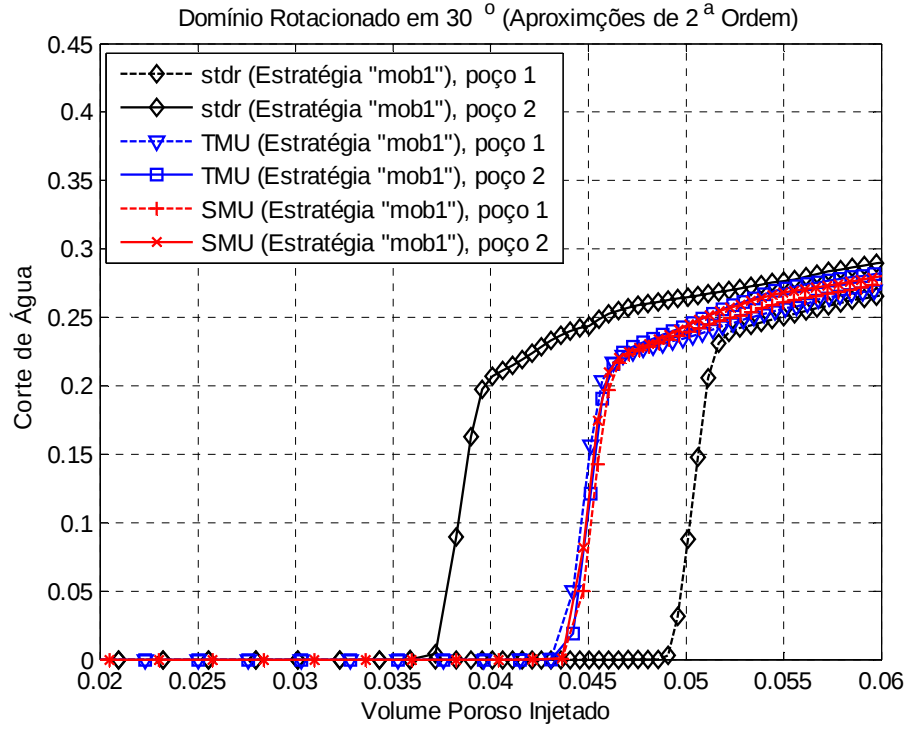


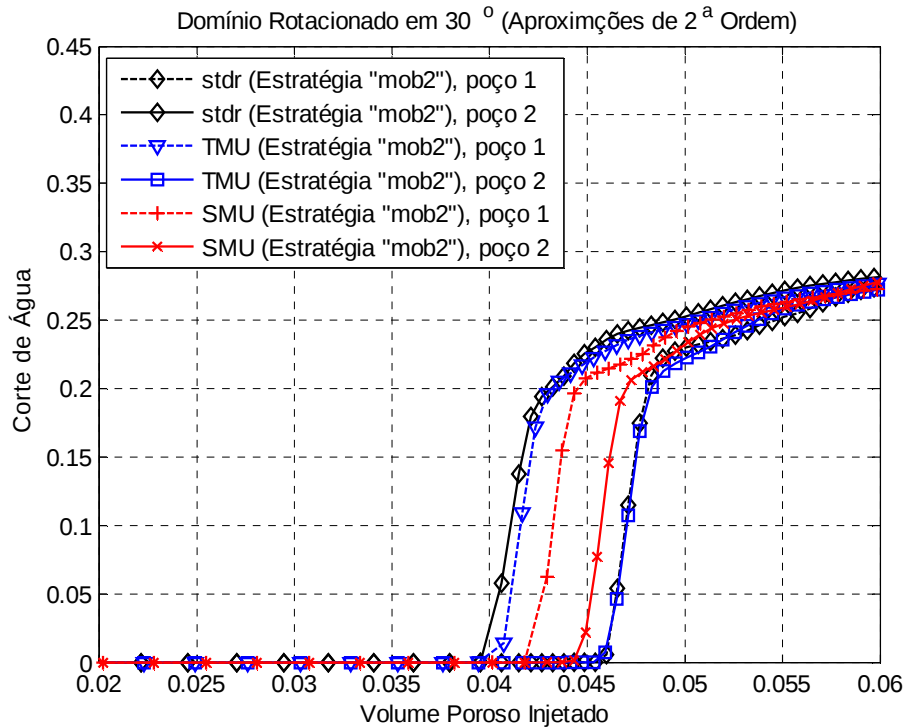
Figura 85. Saturação de água em domínio rotacionado em 30° para diferentes estratégias de aproximação com 2ª ordem de acurácia e limitador MLP-vk: (a) *stdr* e *mob1* para $\lambda(S_w)$; (b) TMU e *mob1* para $\lambda(S_w)$; (c) SMU e *mob1* para $\lambda(S_w)$; (d) *stdr* e *mob2* para $\lambda(S_w)$; (e) TMU e *mob2* para $\lambda(S_w)$; (f) SMU e *mob2* para $\lambda(S_w)$.

Tendo em vista os perfis de saturação de água ilustrados na figura 85, as abordagens SMU com $\lambda(S_w)$ aproximado pela estratégia “*mob1*” e *stdr* com $\lambda(S_w)$ aproximado pela estratégia “*mob2*” parecem receber a menor influência da orientação da malha em relação à posição dos poços. Por outro lado, as curvas de corte de água correspondentes, ilustradas na figura 86, indicam que as abordagens TMU e SMU com mobilidade total “*mob1*” apresentam as menores defasagens entre os momentos de *breakthrough* em cada poço produtor. Avaliando a figura 86a, é possível ver que há ainda uma moderada melhoria da abordagem SMU (li-

nhas em vermelho) em relação à abordagem TMU (linhas em azul). Para as abordagens *stdr*, a estratégia “*mob2*”, para aproximação de $\lambda(S_w)$, apresentou os melhores resultados.



(a)



(b)

Figura 86. Gráficos de corte de água (*water cut*) para diferentes estratégias de aproximação da mobilidade total: (a) abordagens *stdr*, TMU e SMU com aproximação do tipo “*mob1*” para $\lambda(S_w)$; (b) abordagens *stdr*, TMU e SMU com aproximação do tipo “*mob2*” para $\lambda(S_w)$.

Quando se compara esses resultados com os da abordagem *stdr*, obtidos na aproximação de 1ª ordem (ver figura 84d), se observa que a aproximação de 2ª ordem diminuiu o espaçamento entre as curvas de corte de água. No entanto, isso ocorre apenas com a aproximação do tipo “*mob2*” para a mobilidade total.

4.3.6. Escoamento Bifásico de Água e Óleo em Reservatório Homogêneo e Anisotrópico

No presente exemplo, adaptado de Lamine e Edwards (2010), um reservatório homogêneo e anisotrópico é considerado para uma adaptação do problema clássico de ¼ de cinco poços. O reservatório com dimensões $[0,1]^2$, ilustrado na figura 87b, tem o tensor de permeabilidade com razão de anisotropia $K_{xx}/K_{yy} = 10$ e direções principais inclinadas em um ângulo de 45° em relação às direções cartesianas. Dessa forma, a permeabilidade é representada por um tensor completo, definido da seguinte forma:

$$\tilde{K} = \begin{bmatrix} \cos(45^\circ) & -\sin(45^\circ) \\ \sin(45^\circ) & \cos(45^\circ) \end{bmatrix} \begin{bmatrix} 10 & 0 \\ 0 & 1 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \cos(45^\circ) & \sin(45^\circ) \\ -\sin(45^\circ) & \cos(45^\circ) \end{bmatrix} \quad (300)$$

Condições de contorno de fluxo nulo são atribuídas a todas as faces do contorno Γ_N do reservatório. Vazão e saturação de água unitárias são prescritas no poço injetor. A razão de mobilidades considerada é $M = 50$. Valores de saturação irreduzível de água e residual de óleo são $S_{wi} = S_{or} = 0$ e o modelo de Brooks-Corey, apresentado na equação (8), rege as relações constitutivas com expoentes $n_w = 5$ e $n_o = 1$. A simulação ocorre até 0,4 VPI.

Nesse exemplo, a influência exercida pela distorção da malha sobre os resultados é avaliada. Dessa forma, a malha obtida de Hermeline (2007), ilustrada na figura 87c, é utilizada. A equação de pressão é resolvida com o MPFA-FPS, dada a anisotropia do problema. Para a solução da equação de transporte, a abordagem mais convencional (não multidimensional) é comparada com a variante TMSEC-2, proposta no presente trabalho. A intervenção que leva em conta a distorção da malha para adaptar a multidimensionalidade da solução também é considerada. Todos os resultados foram comparados com uma solução de referência (ver figura 87a), obtida com uma malha triangular não estruturada com aproximadamente 120x120 subdivisões (37.996 volumes de controle). Neste caso, os métodos MPFA-O e de ponderação à montante de 1ª ordem foram usados para resolver, respectivamente, as equações de pressão e saturação.

Dada a quantidade de variantes a se verificar, avaliações preliminares foram feitas para duas malhas quadrangulares, estruturadas e distorcidas, com 16x16 subdivisões (ver figura D.1 no apêndice D). Os gráficos obtidos nessas avaliações estão presentes no apêndice D. Esses resultados são indicadores de que a combinação convexa feita para o fluxo fracionário, nos esquemas numéricos TM, produzem os melhores resultados. Dentre as estratégias para aproximação da mobilidade total, a nominada “*mob1*” também se mostrou mais eficaz, tal como já verificado em outros exemplos apresentados neste capítulo. As estratégias de correção para malhas distorcidas também foram avaliadas, para o presente problema, no referido apêndice. Se observou nessas comparações que a estratégia SMU-modif.2, definida na equação (283), apresentou os melhores resultados para as duas malhas adotadas.

Na presente seção, a malha quadrangular distorcida com 32x32 subdivisões, adaptada de Hermeline (2007) e ilustrada na figura 80c, é utilizada para produzir os resultados. Aproximações de 1ª e 2ª ordem são comparadas para os esquemas numéricos *stdr*, TMSEC-2/SMU, TMSEC-2/SMU-modif.2 e TMSEC-2/TMU.

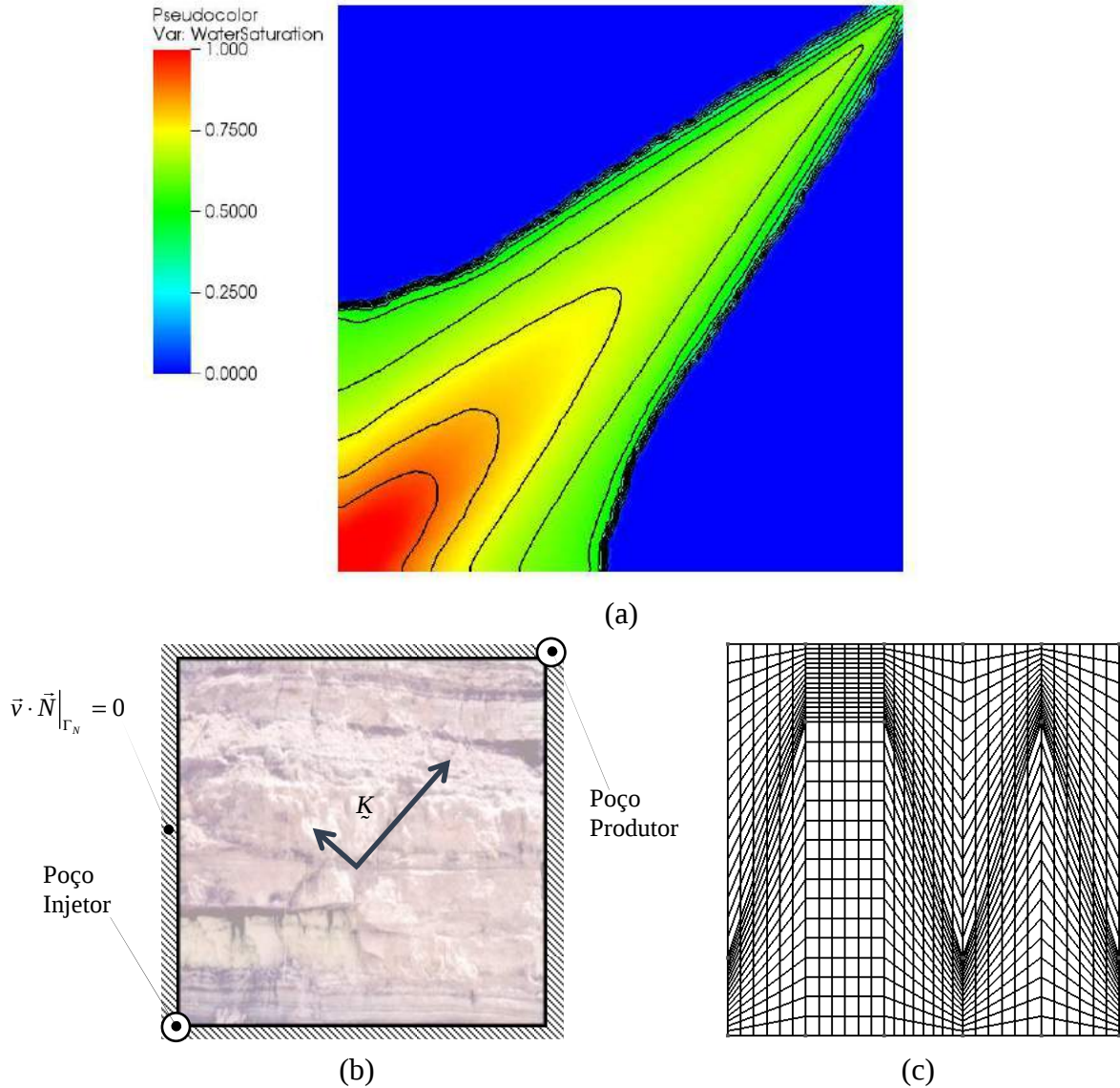


Figura 87. Escoamento bifásico de água e óleo em reservatório homogêneo e anisotrópico para problema de $\frac{1}{4}$ de cinco poços: (a) solução de referência; (b) domínio computacional com indicação dos poços injetor e produtor; (c) malha quadrangular estruturada com 32×32 subdivisões adaptada de Hermeline (2007).

Nas figura 88 os perfis de saturação são apresentados para aproximações de 1ª e 2ª ordem (com limitador MLP-vk). É possível perceber como a distorção da malha desvia o campo de saturação de água em relação ao poço produtor. Assim, para cada ordem de aproximação avaliada, a depender da formulação empregada, tem-se um momento diferente para o *break-through*. Se observa, no entanto, que a utilização dos métodos TM minimiza esse desvio, como se vê nas figuras 88b, 88c, 88e e 88f e nos gráficos da figura 89. As aproximações de 2ª ordem, em geral, também minimizam essa dispersão.

Observando as curvas de produção ilustradas na figura 89, fica claro que dentre as funções de controle empregadas na estratégia TM, a função TMU produziu os melhores resultados, i.e., mais próximos da solução de referência. Já a função de controle SMU-modif. 2, proposta no presente trabalho, apresentou resultados melhores do que os obtidos com o SMU. É importante mencionar que embora as curvas com cada método ainda pareçam relativamente distantes da solução de referência, nota-se (observando também as curvas do apêndice D) que

à medida que se refina a malha, as soluções numéricas produzidas se aproximam mais da solução de referência.

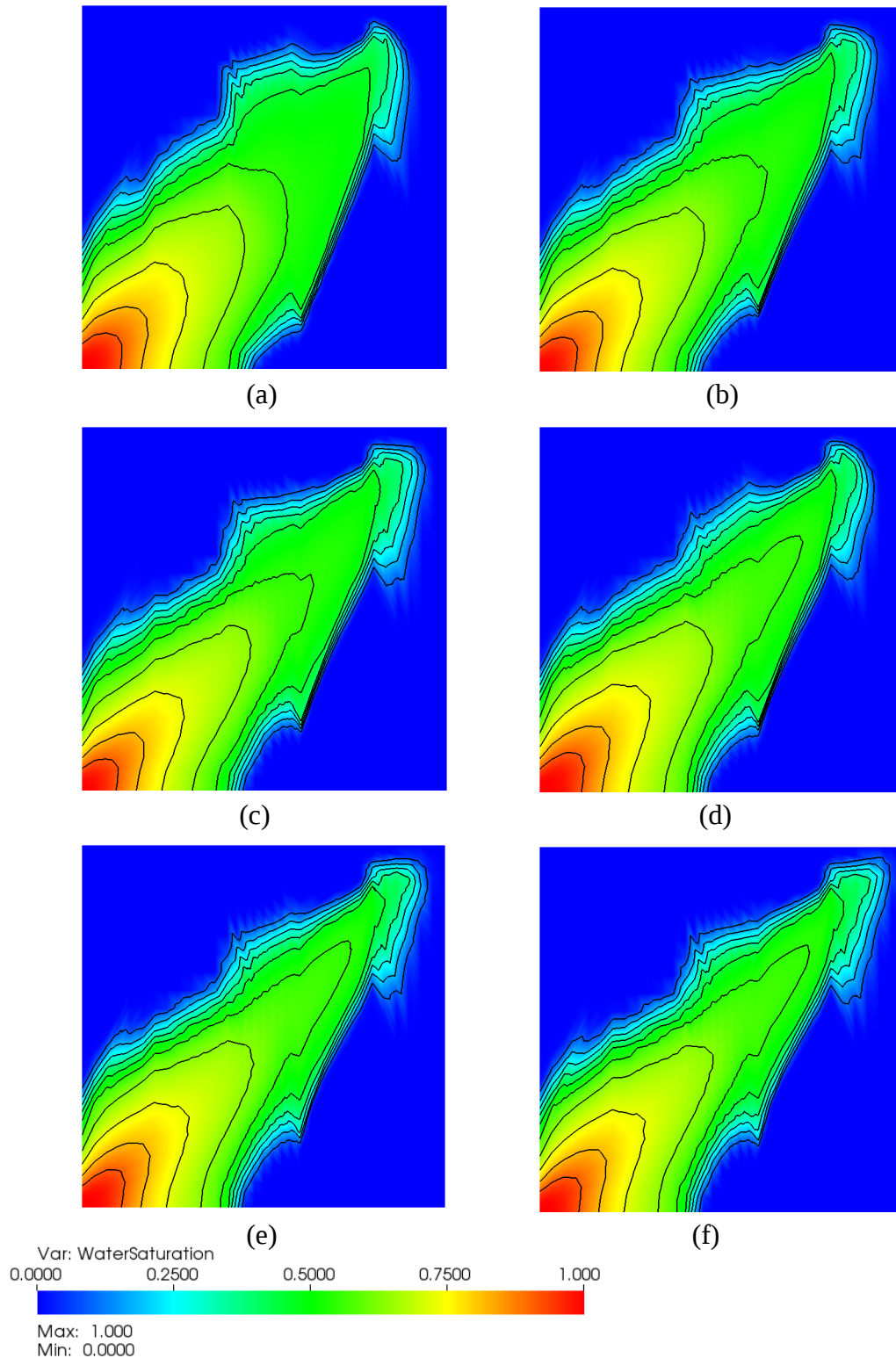


Figura 88. Escoamento bifásico de água e óleo em reservatório homogêneo e anisotrópico para problema de $\frac{1}{4}$ de cinco poços para a malha Chevron com mobilidade “mob1”: (a) abordagem *stdr* com aproximação de 1ª ordem; (b) abordagem SMU-modif. 2, 1ª ordem; (c) abordagem TMU, 1ª ordem; (d) abordagem *stdr* com aproximação de 2ª ordem (MLP-vk); (e) abordagem SMU-modif. 2, 2ª ordem (MLP-vk); (f) abordagem TMU, 2ª ordem (MLP-vk).

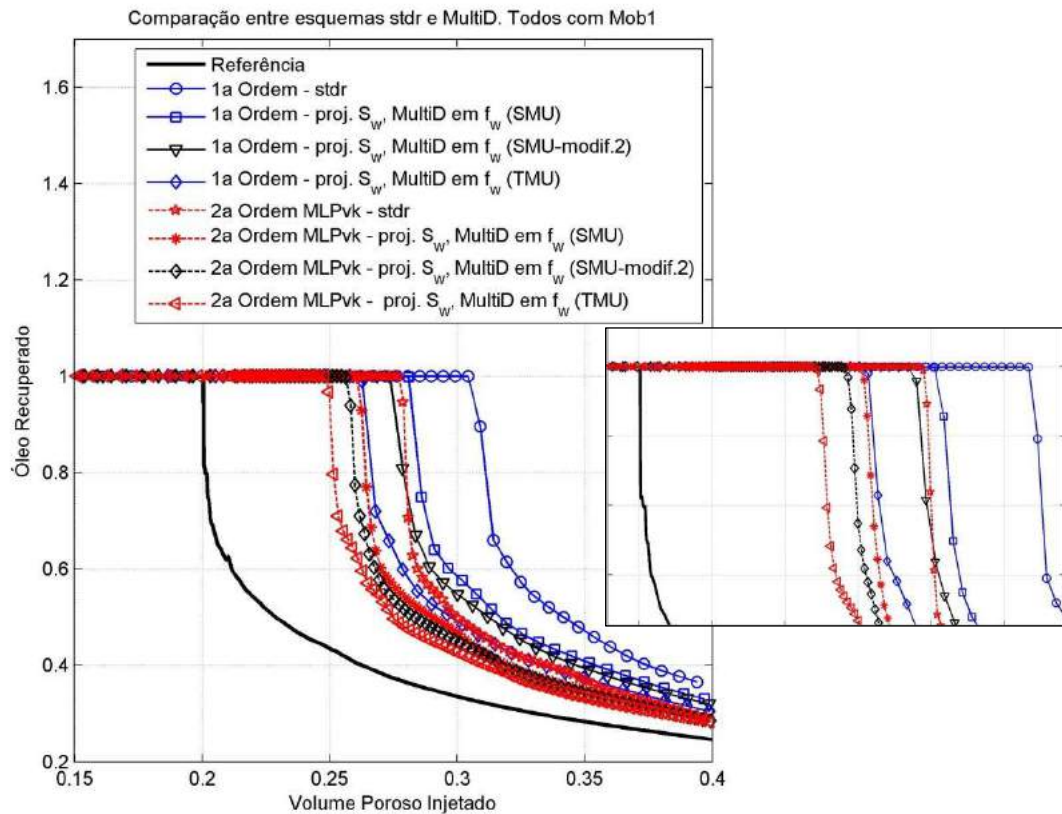


Figura 89. Curvas de produção obtidas em malha quadrangular distorcida com 32x32 subdivisões para escoamento bifásico de água e óleo em reservatório homogêneo e anisotrópico. Abordagens convencional (*stdr*) e TMSEC-2 (TMU, SMU e SMU-modif.2) são comparadas para 1ª e 2ª ordem.

Uma segunda avaliação consiste na comparação entre o desempenho dos limitadores van Albada e MLP-vk no que se refere à produção de soluções positivas em malhas distorcidas. Na figura 90 são mostrados perfis de saturação obtidos com a malha adotada.

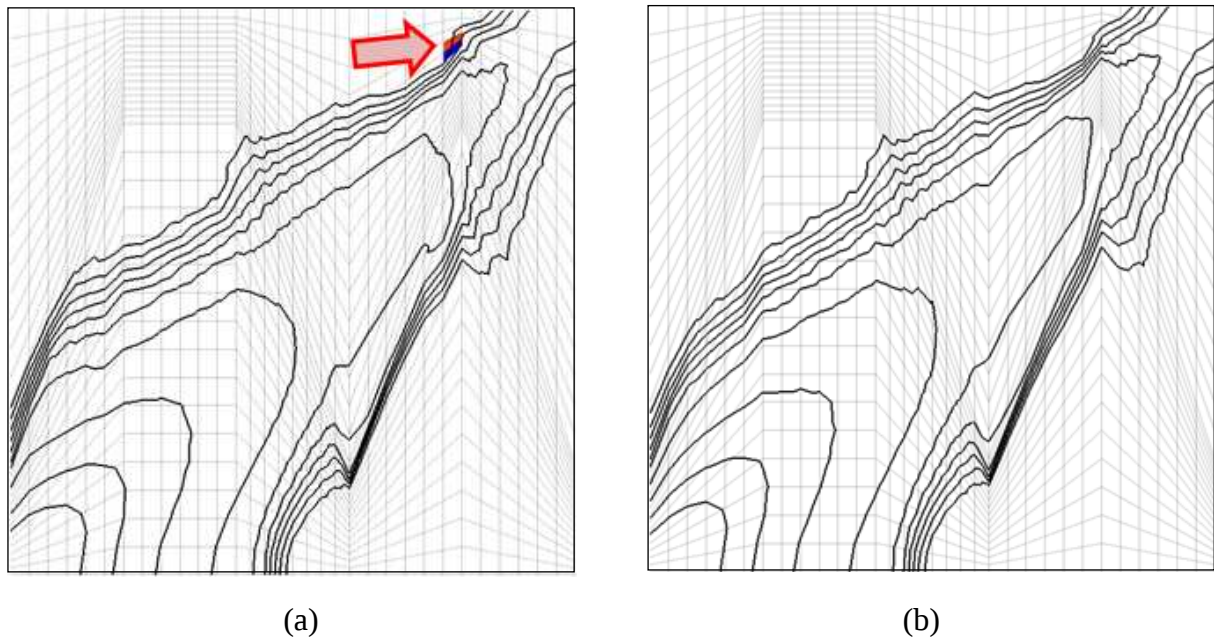


Figura 90. Indicação de valores negativos para perfis de saturação obtidos com aproximação de 2ª ordem em malha Hermeline: (a) com função limitadora van Albada; (b) com função limitadora MLP-vk.

Nos resultados obtidos com o limitador van Albada, valores negativos são observados. Os volumes de controle são marcados (ver seta). Já as soluções obtidas com MLP-vk são monótonas, como se observa na figura 90b e tabela 6.

Tabela 6. Valores máximos e mínimos para aproximações de 2ª ordem usando funções limitadoras baseadas na avaliação da face (van Albada) e do volume de controle (MLP-vk) para o escoamento bifásico de água e óleo em reservatório homogêneo e anisotrópico para problema de $\frac{1}{4}$ de cinco poços.

Estratégia de mobilidade	Limitador van Albada		Limitador MLP-vk	
	Máximo Valor	Mínimo Valor	Máximo Valor	Mínimo Valor
Estratégia “mob1”	1,00	$-3,45 \times 10^{-3}$	1,00	0,00
Estratégia “mob2”	1,00	$-3,93 \times 10^{-3}$	1,00	0,00

A forma construtiva da função limitadora MLP-vk tem um caráter multidimensional. Possíveis ocorrências de extremos são avaliadas em toda a vizinhança do volume de controle. Por outro lado, nas funções limitadoras baseadas apenas na avaliação das superfícies de controle, valores extremos que não estejam diretamente associados à superfície de controle avaliada podem não ser “percebidos” pela função limitadora. Consequentemente, soluções não positivas podem ser produzidas. A distorção da malha adotada contribui para esse tipo fenômeno, como afirmam Delis e Nikilos (2012). É importante mencionar que um efeito colateral da avaliação multidimensional, característica das estratégias como o MLP e outras encontradas na literatura (Woodfield *et al.*, 2004), é uma difusão artificial mais elevada, atribuída às soluções numéricas de modo a garantir que essas satisfaçam o DMP. Os efeitos dessa difusão artificial foram observados no exemplo da seção 4.3.3 para um escoamento em meio muito heterogêneo.

4.3.7. Escoamento Bifásico de Água e Óleo em Reservatório Análogo, Heterogêneo e Anisotrópico

O último exemplo, adaptado de Guimarães *et al.* (2002), não tem um caráter de *benchmark*. Esse caso consiste apenas em uma aplicação prática de algumas formulações abordadas no presente trabalho. O análogo de reservatório denominado “Barreiras do Boqueirão”, localizado no estado de Alagoas, é uma formação turbidítica com diferentes litologias, tal como ilustrado na figura 91.



Figura 91. Análogo “Barreiras do Boqueirão” (Alagoas), obtido de Guimarães *et al.* (2002).

O reservatório tem 56 m de comprimento e 6,8 m de altura. Análises estratigráficas (Guimarães *et al.*, 2002) indicam que três litologias compõem o referido análogo: uma argila (*clay*) isotrópica com permeabilidade K_1 e porosidade 0,3; um arenito grosso (*coarse sandstone*) ortotrópico com permeabilidade K_2 e porosidade 0,195. As direções principais desse

tensor são rotacionadas em 15° (anti-horário) em relação às direções x e y . A terceira camada, mais permeável, é constituída também por um meio ortotrópico (*medium sandstone*), rotacionado em 30° (anti-horário), e uma porosidade de 0,25. Na figura 92a, uma representação do reservatório é ilustrada com indicação de cada litologia. Os tensores correspondentes a cada material também são indicados. Condição de contorno de Neumann é aplicada em toda a fronteira, com exceção das superfícies associadas aos poços injetor e produtor, com indicação $Q_{injetor}$ e $p_{produtor}$ na figura 92a, respectivamente. A vazão mássica atribuída à superfície injetora (completação com aproximadamente 0,86 m de altura) é de $0,1 \text{ kg}/\text{dia}$, e a pressão no poço produtor é de $220 \text{ kgf}/\text{cm}^2$. As viscosidades do óleo e da água são, respectivamente, $\mu_o = 5 \text{ cp}$ e $\mu_w = 0,5 \text{ cp}$. Na mesma sequencia, as massas específicas desses fluidos são, respectivamente, $\rho_o = 888,7 \text{ kg}/\text{m}^3$ e $\rho_w = 1000 \text{ kg}/\text{m}^3$. A gravidade atua na direção vertical com $g = 9,81 \text{ m}/\text{s}^2$ (ver figura 92a). Adicionalmente, o modelo de van Genuchten (1980 *apud* Pinde e Gray, 2008), apresentado na equação (10), é utilizado como relação constitutiva. O parâmetro livre nesse modelo é $\zeta = 2$. As saturações irreduzíveis de água e residual de óleo são $S_{wi} = S_{or} = 0,1$. Todas as grandezas mencionadas acima foram convertidas para unidades do sistema internacional (SI) de modo a produzir uma solução com coerência dimensional.

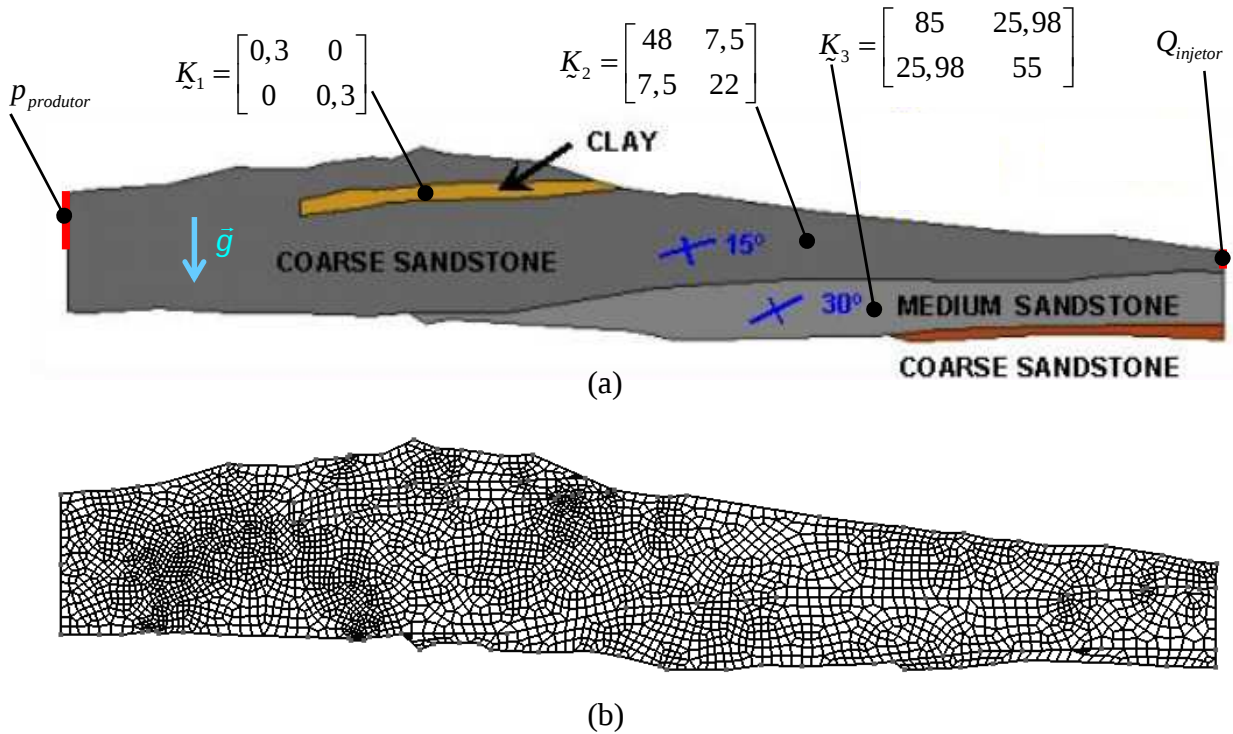


Figura 92. Domínio que representa o reservatório análogo “Serras do Boqueirão”: (a) representação do domínio com indicações das litologias; (b) malha quadrangular não estruturada com 3484 volumes de controle.

Dada a anisotropia de dois dos três materiais, e a inclinação desses tensores em relação à orientação de x e y , esses materiais são representados por tensores completos (ver figura 92a). Concomitante a isso, uma malha quadrangular não estruturada com 3484 volumes de controle é empregada na discretização do domínio que representa o reservatório análogo, tal como ilustrado na figura 92b. Dessa forma, a geometria irregular do reservatório pode ser honrada sem que seja necessário uma grande quantidade de volumes de controle. A combinação dos tensores completos com a malha não estruturada requer o uso de formulações robustas para a solução do problema descrito acima. Para isso, as formulações MPFA-FPS e

MUSCL/MLP são empregadas para a solução numérica das equações de pressão e saturação, respectivamente. Na figura 93 são apresentados os campos de pressão e saturação de água para um período de 72 dias. Se observa na figura 93a, a influência da ação da gravidade nas isolinhas de pressão. O modelo de Buckley-Leverett com gravidade foi verificado na seção 4.3.1. No campo de saturação, ilustrado na figura 93b, se observa a massa de água avançando ao longo da camada denominada “*coarse sandstone*”, com direções principais inclinadas em 15°. Observa-se também parte dessa massa de água permeando a camada denominada “*medium sandstone*”, provavelmente devido à ação da gravidade.

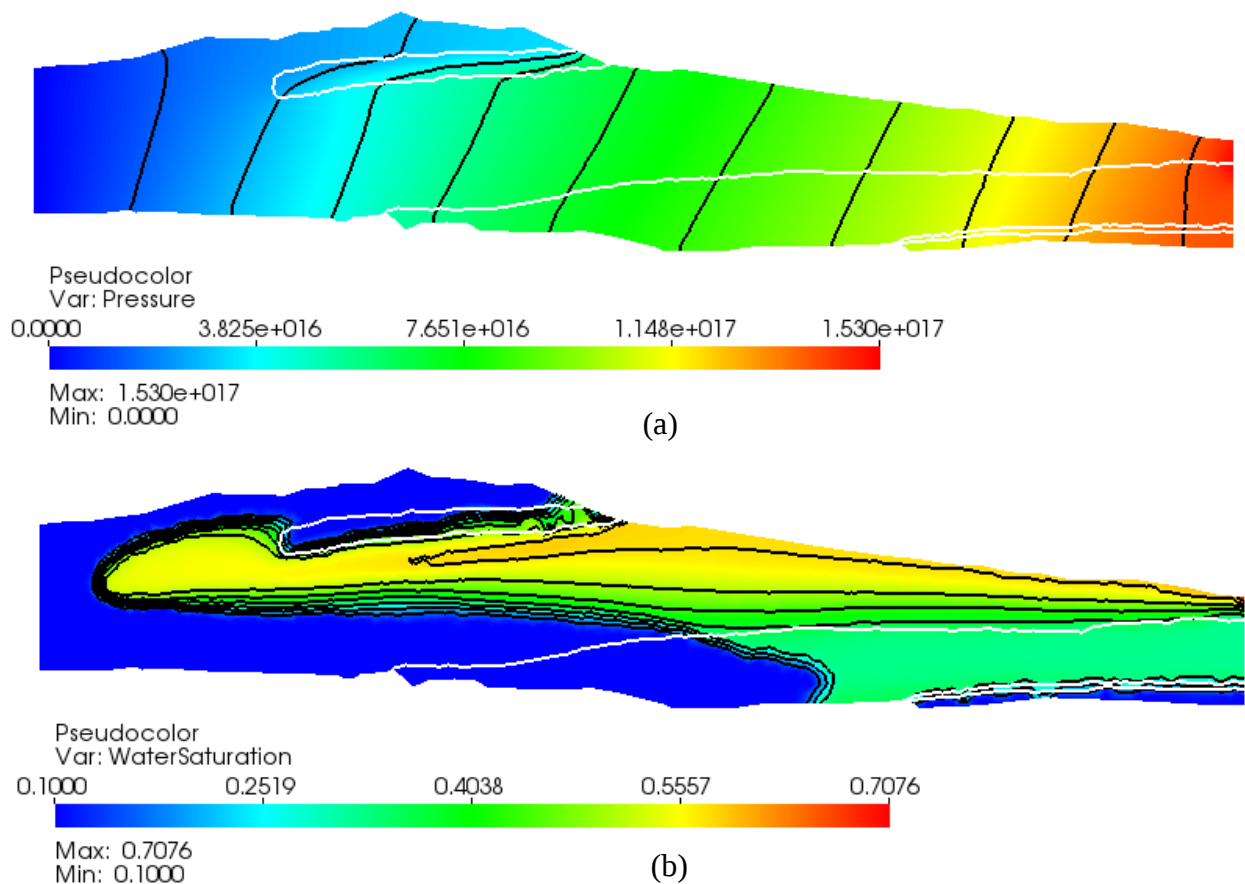
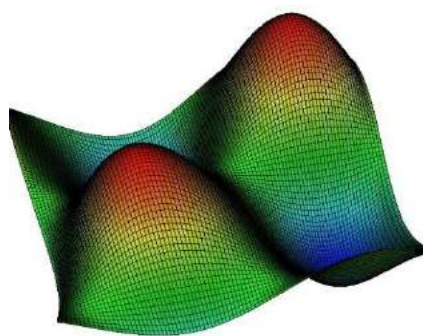


Figura 93. Escoamento bifásico de água e óleo em reservatório análogo, heterogêneo e anisotrópico para 72 dias: (a) campo de pressão, dado em Pa; (b) campo de saturação de água.

É importante ressaltar que embora não se tenha uma solução para fazer a devida comparação, acredita-se que as formulações empregadas para obter as soluções ilustradas na figura 93 são mais acuradas e convergentes do que se obteria com uma formulação TPFA associado ao *upwind* de 1ª ordem, frequentemente empregados em simuladores comerciais voltados para a indústria do petróleo.



5

Conclusão e Trabalhos Futuros

5.1. Conclusão

No presente trabalho, foi estudada uma formulação do Método de Volumes Finitos *cell-centered* para a discretização das equações que descrevem o escoamento bifásico de água e óleo em reservatórios de petróleo heterogêneos e anisotrópicos. O modelo adotado descreve o problema através de um sistema de equações segregado envolvendo uma equação de pressão e uma de saturação, acopladas através da velocidade de Darcy. Uma estratégia tipo IMPES foi utilizada para a solução sequencial dessas equações.

Para a discretização da equação de pressão, formulações robustas para lidar com tensores de permeabilidade e malhas arbitrários foram adotadas da literatura (MPFA). Essas formulações foram comparadas com a aproximação clássica do Método de Volumes Finitos (TPFA), largamente empregada em simuladores na indústria petrolífera. Conforme esperado, nos experimentos numéricos, feitos com problemas *benchmark* da literatura, verificou-se que todas as formulações avaliadas, são capazes de produzir soluções exatas para campos lineares de pressão (ver seção 4.2.1) inclusive para reservatórios com permeabilidade descontínua. Para as formulações com aproximação de fluxo por múltiplos pontos (MPFA-O, MPFA-FPS e MPFA-*Enriched*), taxas de convergência de 2ª ordem no campo de pressão e ordem superior a 1 no campo de velocidade foram obtidas, mesmo para um reservatório com tensor de permeabilidade ortotrópico, heterogêneo e utilizando malhas distorcidas (ver seção 4.2.2). O mesmo não ocorreu com a aproximação do tipo TPFA, devido à sua inabilidade em representar termos de difusão cruzada adequadamente provenientes da distorção imposta à malha adotada ou da anisotropia do meio.

Na avaliação da positividade das soluções em problemas com elevada razão de anisotropia, conforme esperado, apenas o TPFA apresentou soluções monótonas. No entanto, essas não condizem com a física do problema devido à inabilidade desse método em aproximar fluxos com tensores completos de permeabilidade (ver seções 3.3.2 e 4.2.3). Nenhum dos métodos do tipo MPFA foi hábil para produzir soluções monótonas para esse problema, mesmo os mais robustos MPFA-FPS e MPFA-*Enriched*. O desempenho do MPFA-FPS foi superior ao dos outros métodos da mesma classe. No entanto, oscilações espúrias também foram observadas, violando o Princípio do Máximo Discreto (DMP). As soluções obtidas com o MPFA-O apresentaram oscilações espúrias intensas, que foram diminuindo com o refinamento da malha. No entanto, mantiveram amplitudes maiores do que as observadas para o MPFA-FPS. A aproximação linear da pressão (com suporte triangular), característica do MPFA-O, implica em regiões em que a pressão não é interpolada e sim extrapolada (ver seção 3.3.3). Dessa forma, é esperado que oscilações espúrias ocorram para problemas com elevada razão de anisotropia e malhas que não são k-ortogonais (Lipnikov *et al.*, 2007; Chen *et al.*, 2008;

Edwards e Zheng, 2008). Por outro lado, contrariando as expectativas, o MPFA-*Enriched*, que tem suporte completo de pressão, tal como o MPFA-FPS, apresentou elevados níveis de oscilação para malhas mais refinadas. Apesar da aparente semelhança, os métodos MPFA-FPS e MPFA-*Enriched* têm formas diferentes de aproximar a pressão nos pontos harmônicos. Provavelmente, o baixo desempenho do MPFA-*Enriched* em relação ao MPFA-FPS, para o referido problema, seja resultado dessa diferença. Uma analogia pode ser feita com as duas interpolações propostas por Gao e Wu (2010) que apesar da semelhança entre si em sua forma construtiva, apresentam resultados bem distintos, inclusive no que se refere à obtenção de taxas de convergência em problemas *benchmark* (Gao e Wu, 2010).

A equação de transporte (saturação) foi discretizada utilizando duas abordagens. Na mais convencional, onde o fluxo numérico não segue a orientação da onda, aproximações de 1ª a 4ª ordem para o erro de truncamento foram utilizadas. Nas aproximações de alta ordem, uma nova estratégia de limitação (MLP e variante, MLP-vk), proposta por Park *et al* (2010) e Park e Kim (2012a), no contexto das equações de Euler, foi aplicada pela primeira vez a simulação de escoamentos em reservatórios de petróleo. O desempenho dessa estratégia foi comparado com o obtido para uma estratégia mais convencional de limitação encontrada na literatura (Löhner, 2001; Carvalho, 2005). Além disso, resultados obtidos com a extrapolação de S_w e f_w , seguindo uma metodologia do tipo MUSCL, também foram comparados. Conforme esperado, para a solução numérica do modelo de Buckley-Leverett com característica unidimensional (ver seção 4.3.1), as taxas de convergência nominais das aproximações utilizadas não foram alcançadas. Isso se deu devido à descontinuidade característica da solução desse problema. No entanto, como reconhecido na literatura, (Bastian, 2002), os erros absolutos obtidos com cada ordem de aproximação são um indicador do desempenho das mesmas, no espaço e no tempo. Isso também é verdade para as diferentes estratégias de limitação e variáveis extrapoladas.

Como esperado, foi verificado, portanto, que todas as aproximações de alta ordem apresentaram desempenho superior à tradicional aproximação de 1ª ordem. Tal como relatado por Bastian e Helmig (1999), no caso do problema de Buckley-Leverett, para a aproximação com erro de truncamento de 1ª ordem, é necessária uma malha com o dobro do refinamento para a obtenção de erros equivalentes aos obtidos com uma formulação de segunda ordem. Comparando apenas as aproximações de 2ª ordem, os resultados obtidos com a estratégia de limitação MLP-vk produziram erros menores do que os obtidos com as estratégias MLP e van Albada (convencional). No que se refere à variável extrapolada, em geral, para os resultados obtidos com MLP e MLP-vk, se observou nas extrapolações de f_w , aproximações mais acuradas nas regiões de expansão e posterior ao choque. Nas aproximações limitadas com a estratégia van Albada, as extrapolações em S_w foram, em geral, mais acuradas. Nas aproximações de 3ª e 4ª ordem, o limitador MLP, atuando na extrapolação de f_w , produziu os melhores resultados. O uso de um estêncil com viés à montante, apenas nas aproximações de 4ª ordem, proporcionou soluções com menores erros, especialmente para malhas mais refinadas (ver seção 4.3.1). Adicionalmente, a utilização de aproximações de alta ordem no tempo (Runge-Kutta de 2ª ordem) produziu erros maiores quando comparado com a integração através do método de primeira ordem do tipo Euler progressivo.

Ainda na seção 4.3.1, o modelo de Buckley-Leverett com força gravitacional incorporada foi verificado. Resultados numéricos obtidos para 1ª e 2ª ordem (com diferentes estratégias limitação) foram comparados com uma solução de referência obtida de Durlofsky (1993). Todas as aproximações reproduziram o perfil de referência. Contudo, a aproximação com 2ª ordem limitada com a estratégia MLP-vk produziu as soluções mais próximas da referência. A ação da gravidade é novamente abordada no último exemplo (seção 4.3.7) para um análogo

de reservatório. Embora não se tenha uma solução de referência nesse caso, os resultados para o campo de pressão e saturação são condizentes com o esperado.

No problema envolvendo o escoamento em um meio muito heterogêneo (ver seção 4.3.3), os resultados obtidos com aproximação de 2ª ordem e função limitadora van Albada representaram *fingers* físicos e regiões de baixa permeabilidade de forma mais definida, em relação às soluções com aproximação de mesma ordem, limitada com o MLP-vk. Nesse caso, para um problema com características multidimensionais, uma função limitadora que avalia a ocorrência de extremos em todo o volume de controle (MLP e MLP-vk) impõe mais difusão numérica à solução do que uma estratégia que faz essa avaliação apenas nas faces do volume de controle (limitador van Albada). Apesar disso, as aproximações de 3ª e 4ª ordem representaram as heterogeneidades do reservatório com maior resolução do que qualquer aproximação de 1ª ou 2ª ordem. Certos detalhes do escoamento são vistos apenas com a aproximação de 4ª ordem (ver seção 4.3.3).

Em uma segunda abordagem na discretização da equação de saturação, esquemas numéricos multidimensionais ou TM foram comparados. O esquema numérico aqui chamado de TMSIC (Kozdon *et al.*, 2011) foi comparado com as duas propostas apresentadas no presente trabalho (TMSEC-1 e TMSEC-2). Nessas o fluxo numérico é calculado de forma explícita, seguindo a orientação do escoamento. Nessas abordagens, aproximações de 1ª e 2ª ordem no espaço foram avaliadas. Por outro lado, apenas aproximações de 1ª ordem são empregadas com TMSIC na literatura voltada para problemas de escoamento em reservatório de petróleo. Os resultados obtidos para problemas desafiadores da literatura (ver seção 4.3.4 a 4.3.6) indicam que os esquemas numéricos TMSIC e TMSEC-2 apresentam os melhores desempenhos, especialmente quando malhas triangulares foram empregadas. Isso ocorreu devido à forma construtiva desses esquemas TM. Enquanto a abordagem TMSEC-1 emprega apenas dois pontos na combinação linear convexa, para todos os casos, as outras abordagens são “flexíveis” para usar mais pontos, a depender do tipo de malha e orientação do escoamento. Duas estratégias empregadas na aproximação da mobilidade total, descritas na seção 3.3.1, também foram comparadas, além da influência da extrapolação de S_w e f_w nas aproximações de 2ª ordem. Predominantemente, a aproximação da mobilidade total nominada “*mob1*” produziu os melhores resultados. Em todos os casos testados, a aproximação TM de 2ª ordem, com estratégia de limitação do tipo MLP-vk, produziu resultados mais acurados. As curvas de produção obtidas foram mais próximas da solução de referência do que a abordagem, de mesma classe, com aproximação de 1ª ordem (ver seção 4.3.6). Observou-se também que, para alguns casos, a aproximação de 1ª ordem TM obteve desempenho melhor do que a abordagem convencional ou *standard* (“*stdr*” nos gráficos) de 2ª ordem. Novamente, a proximidade das curvas de produção em relação à solução de referência é um indicador dessa conclusão.

A forma adaptativa para o cálculo dos fluxos numéricos multidimensionais, proposta no presente trabalho para o tratamento de malhas distorcidas, também foi avaliada. Para um problema anisotrópico do tipo ¼ de cinco poços (ver seção 4.3.6), a aproximação TM modificada (com correção para malhas distorcidas) produziu resultados menos susceptíveis à orientação preferencial de malhas distorcidas do que a abordagem de mesma classe do tipo SMU. No entanto, as duas estratégias tiveram desempenho pior do que a estratégia do tipo TMU para aproximações de 1ª e 2ª ordem. Associado a isso, também foi observado que extrapolações em S_w , porém com combinação convexa em f_w , produzem os melhores resultados para o problema e malhas avaliados. Essa configuração foi utilizada por Lamine e Edwards (2013) em aproximações de 2ª ordem. Os autores também destacam o bom desempenho desse tipo de abordagem.

Na comparação entre as diferentes estratégias de limitação, a abordagem do tipo MLP proporcionou soluções positivas mesmo para malhas distorcidas. O mesmo não foi observado para as aproximações de 2ª ordem com o limitador tradicional baseado na avaliação da face

(limitador van Albada). Para essa abordagem, valores negativos de saturação foram observados, conforme observado na tabela 6 (ver seção 4.3.6).

Por fim, no presente trabalho, foi sugerida uma combinação de estratégias para tratar oscilações nas curvas de produção quando formulações explícitas são utilizadas. Soluções com moderada ou excessiva oscilação foram observadas para um problema simples de $\frac{1}{4}$ de cinco poços em meio isotrópico e homogêneo. Duas malhas foram utilizadas para esse fim. Como se vê na seção 4.3.2, tais oscilações foram contidas e, em outro caso, minimizadas. Comparando as intervenções propostas, o uso de passo fracionário, tal como apresentado por Leveque (1992) e Carvalho (2005), não foi suficiente para minimizar as oscilações observadas. Por outro lado, a intervenção de um fator de relaxação, como proposto por Date (2005), para tratamento de termos fonte “rígidos”, fez uma diferença substancial na minimização das referidas oscilações. A terceira intervenção que consiste em utilizar um passo de tempo local para os volumes de controle associados ao poço produtor (ver seção 3.4.2) não fez muita diferença em relação à atuação do passo fracionário associado ao fator de relaxação.

De forma, geral, os resultados obtidos no presente trabalho parecem promissores, especialmente no que se refere à abordagem Verdadeiramente Multidimensional e às aproximações com ordem maior do que 2. No entanto, algumas conclusões discutidas nessa seção seriam mais sedimentadas com a realização de mais experimentos numéricos, em problemas com diferentes características e tipos de malha. Por outro lado, as análises efetuadas aqui, de certa forma, abrem caminhos para o surgimento de novas ferramentas numéricas aplicadas à indústria do petróleo. A aplicabilidade das formulações estudadas no presente trabalho em modelos de física mais complexa ou a investigação de novas formulações e procedimentos numéricos podem ter como ponto de partida os resultados aqui discutidos. Na seção seguinte, são listadas possibilidades para extensão imediata do presente trabalho.

5.2. Trabalhos Futuros

A extensão do presente trabalho pode ser visualizada em várias frentes. No que se refere à equação de pressão, novos métodos, com estratégias não lineares, podem ser usados para resolver o problema elíptico. Algumas propostas discutidas na literatura já possibilitam soluções que respeitam o DMP e reproduzem, de forma exata e sob certas restrições, soluções lineares por parte (Gao e Wu, 2015). Alguns inconvenientes relacionados ao custo computacional desses métodos ainda é um desafio. A associação desses métodos com aproximações de alta ordem usando limitadores do tipo MLP possibilitaria soluções bastante acuradas e que honram o DMP, tanto para os campos de pressão quanto de saturação.

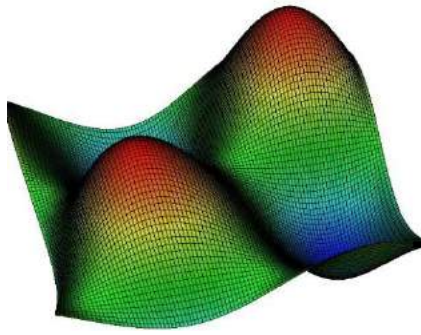
Modelos que contemplam reservatórios fraturados utilizando modelos com redução dimensional foram recentemente desenvolvidos para meios anisotrópicos e com malhas arbitrárias (Ahmed *et al.*, 2014). Os autores adaptaram o MPFA-O para lidar com as equações adicionais do referido modelo e utilizaram um método de ponderação à montante de primeira ordem para aproximar a equação de transporte. Uma extensão possível do presente trabalho é a inserção de uma abordagem TM para resolver o problema do escoamento bifásico de água e óleo em reservatórios fraturados. Aproximações de alta ordem também representam uma contribuição nesse caso de grande interesse prático para a indústria.

Os estêncis utilizados no presente trabalho, pouco locais e não otimizados, para a recuperação dos gradientes e dos outros termos de ordem mais alta podem ser um problema para a representação acurada das descontinuidades características do modelo de Buckley-Leverett. Algumas formulações baseadas no método de volumes finitos, recentemente propostas na literatura (Gao e Wang, 2013) produzem polinômios reconstrutores envolvendo apenas informações da célula avaliada, tal como num método DG (Yu *et al.*, 2014). O acoplamento

desses métodos com formulações MPFA é uma possível frente para a continuação deste trabalho.

No que se refere à abordagem TM das equações de transporte, apesar dos resultados promissores obtidos, os efeitos de orientação de malha não foram reduzidos satisfatoriamente com as propostas abordadas. Uma nova classe de métodos TM foi proposta por Eymard *et al.* (2012). Nesse trabalho os autores propõem um procedimento diferente das abordagens de Hurtado *et al.* (2007) e Lamine e Edwards (2010). Nesse caso, há uma tentativa de produzir erros de truncamento com um caráter isotrópico, minimizando a variação de difusão com o ângulo do escoamento em relação à malha. No entanto, a proposta foi publicada apenas para malhas estruturadas e aproximações de primeira ordem. Ainda há um campo vasto de pesquisa para esse novo método. Isso representa um caminho para a evolução das abordagens estudadas no presente trabalho.

Por fim, a inserção de mais física ao modelo matemático resolvido no presente trabalho, incluindo capilaridade e a extensão para um modelo *Black Oil*, além de uma abordagem implícita da equação de saturação também configuram contribuições futuras relevantes.



Apêndices

Apêndice A

Conceitos Fundamentais sobre Equações Hiperbólicas

No presente apêndice, alguns conceitos fundamentais sobre equações hiperbólicas e linhas características são sucintamente introduzidos. Tomando a equação (25) como referência, alguns conceitos fundamentais sobre equações hiperbólicas podem ser introduzidos. Na hipótese de seus coeficientes não serem dependentes da variável primária, a equação (25) é dita linear (Helmig, 1997). Nesse caso, para cada ponto do domínio, linhas características, em um diagrama x, t (ver figura A.1b), são todas definidas em uma única direção, descrevendo também uma única solução para o problema de transporte.

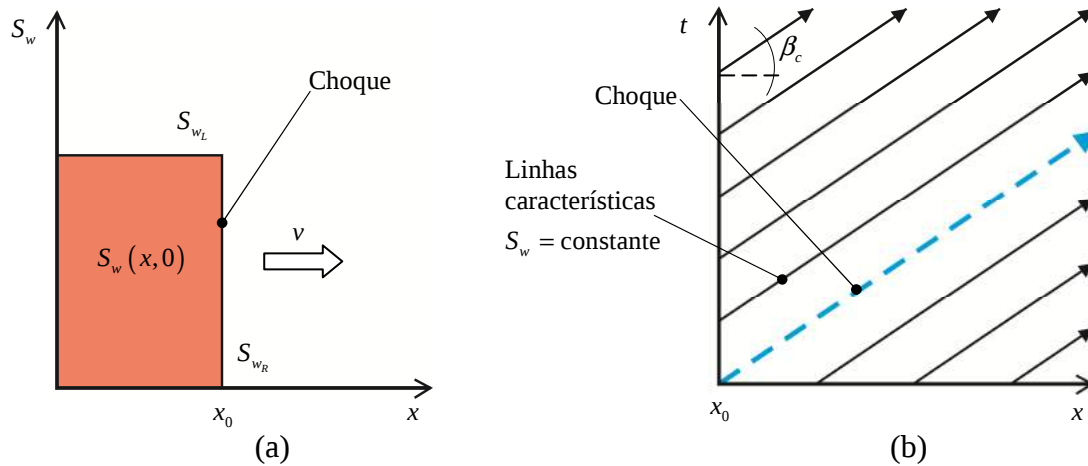


Figura A.1. Problema de transporte, hipoteticamente linear: (a) condição inicial com descontinuidade da varável transportada; (b) diagrama x, t com identificação de linhas características, onde a propriedade é constante, e uma linha (tracejada) correspondente à propagação da descontinuidade.

Nas equações ditas *quasi-lineares*, como, de fato, é o modelo de Buckley-Leverett, os coeficientes são funções não lineares de S_w . Diferentes direções características podem ser observadas no diagrama x, t , uma vez que a inclinação de cada linha característica é função de S_w , como ilustrado na figura A.2c. Isso diminui o ângulo de inclinação β_c que as linhas características fazem com o eixo das abscissas (figura A.1b).

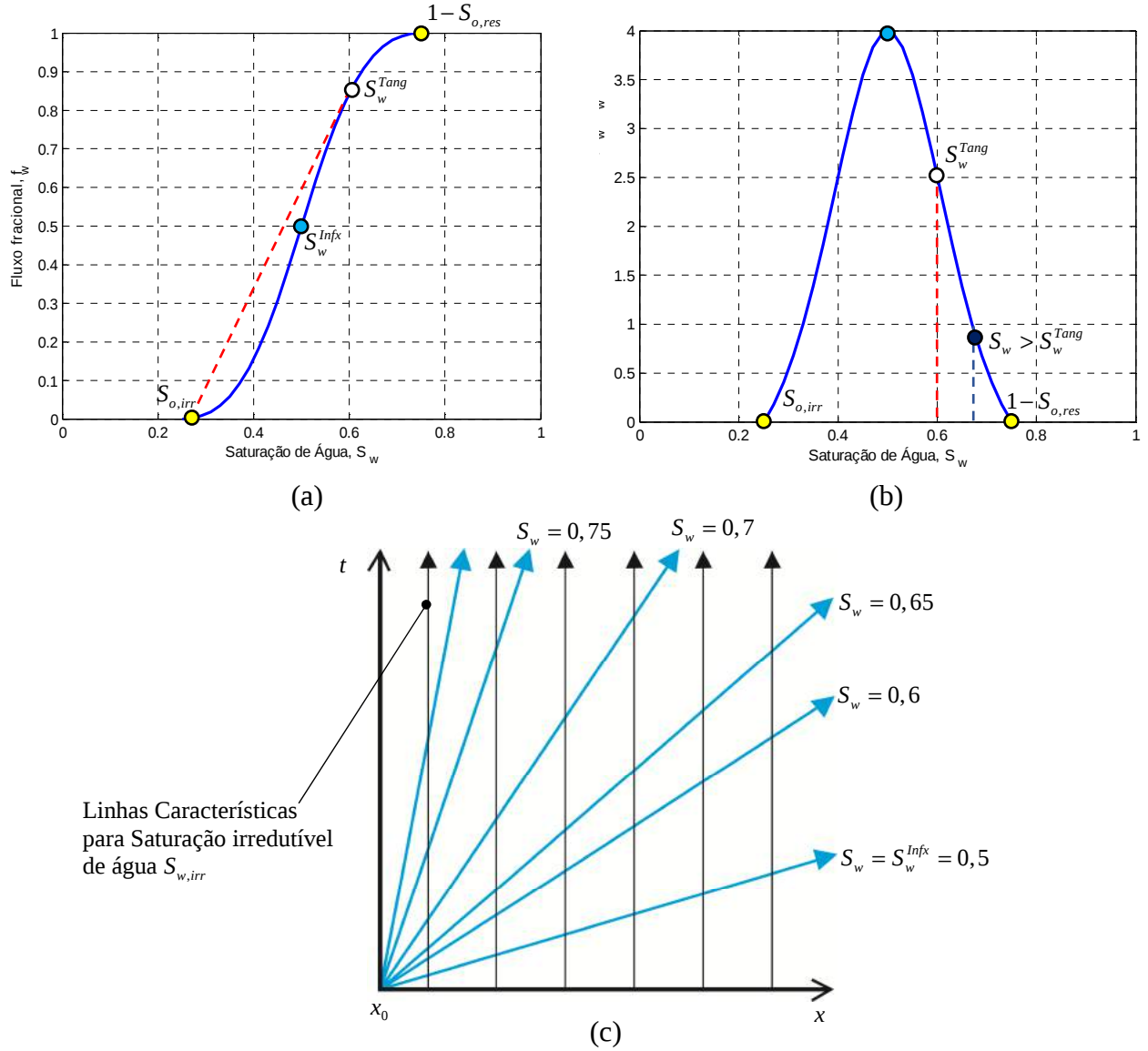


Figura A.2. Curvas do modelo de Buckley-Leverett: (a) Fluxo Fracional com indicação dos pontos de mudança de concavidade S_w^{Infx} e tangência S_w^{Tang} ; (b) derivada do Fluxo Fracional com indicação de dois valores de saturação onde se obtém o choque; (c) Linhas características para o problema não linear com onda de rarefação.

Analogamente, para baixas velocidades características, pouco se avança em x , mesmo para um grande avanço em t , aumentando o referido ângulo. A inclinação de cada linhas característica no diagrama x, t é definida como segue (Helmig, 1997):

$$\beta_c = \arctan \left[1/\alpha(S_w) \right] \quad (A.1)$$

Para relações constitutivas não lineares (no caso, relações de Brooks-Corey com expoentes quadráticos), a função fluxo fracional, cujo comportamento é ilustrado na figura A.2a, apresenta uma mudança de concavidade em um ponto de inflexão correspondente à saturação de água $S_w = S_w^{Infx}$. A velocidade característica, definida na equação (25) e utilizada na equação (A.1), se eleva com o aumento de S_w na faixa que compreende $S_{wi} < S_w \leq S_w^{Infx}$. Consequentemente, as linhas características reduzem sua inclinação, de acordo com a equação (A.1)

e se interceptam em x_0 onde a descontinuidade foi inicializada (figura A.2c). No gráfico da derivada do fluxo fracional, isso ocorre enquanto $\partial^2 f_w / \partial S_w^2 \geq 0$ (ver figura A.2b). Por outro lado, na faixa de valores definida por $S_w^{Inf} < S_w < 1 - S_{or}$, a velocidade característica diminui com o aumento de S_w . Isso leva a um aumento na inclinação das linhas características para $\partial^2 f_w / \partial S_w^2 < 0$. As várias linhas características partindo de x_0 formam uma onda de rarefação ou expansão (Helmig, 1997). Valores de saturação de água iguais ou menores (quando houver) do que S_{wi} , assim como os iguais ou maiores (quando houver) do que $1 - S_{or}$ tem derivada nula (ver figura A.2c). Consequentemente, as linhas características tem inclinação infinita (verticais) para qualquer valor de saturação de água na referida região (ver figura A.2c). Diante disso, é perceptível que para equações hiperbólicas não lineares várias soluções para a saturação de água podem ser obtidas em um mesmo ponto. O autor destaca que a condição de Rankine-Hugoniot e a satisfação da entropia são os critérios necessários à obtenção de uma única solução para representação da frente de saturação.

A condição de Rankine-Hugoniot determina a velocidade de propagação da descontinuidade na saturação de água. Essa relação, que na verdade é uma representação da velocidade de propagação do choque, α_{RH} , é obtida fazendo um balanço em um volume de controle infinitesimal onde ocorre a descontinuidade da variável (região do “choque”). Ainda tomando o modelo de Buckley-Leverett como referência, se define S_{wL} e S_{wR} como as saturações de água à montante (*upstream*) e à jusante (*downstream*) do “choque”, respectivamente (ver figura A.1a). Para simplificar o raciocínio e sem que se perca generalidade, a velocidade total v é tida como unitária e a influência da porosidade é desconsiderada. Assim, $\alpha \equiv \partial f_w / \partial S_w$ (Helmig, 1997). Os fluxos fracionais, $f_{wL}(S_{wL})$ e $f_{wR}(S_{wR})$, são dependentes de S_{wL} e S_{wR} , respectivamente. A velocidade de propagação do “choque” pode ser obtida com manipulações algébricas simples (Leveque, 1992 e Helmig, 1997) na forma que segue:

$$\alpha_{RH} = \frac{f_{wR}(S_{wR}) - f_{wL}(S_{wL})}{S_{wR} - S_{wL}} = \frac{\Delta f_w(S_w)}{\Delta S_w} \quad (A.2)$$

Deve-se notar que para o caso em que $S_{wL} \approx S_{wR}$, a velocidade de propagação do “choque” é a própria velocidade característica $\alpha_{RH} \equiv \alpha = \partial f_w(S_w) / \partial S_w$ (Leveque, 1992). A relação entre o “salto” na saturação de água e a velocidade de propagação do “choque” é dependente do fluxo fracional. Isso caracteriza um processo físico real (Helmig, 1997). No entanto, a condição de Rankine-Hugoniot não é suficiente para determinar a unicidade da solução obtida e se essa é fisicamente correta. Para assegurar uma solução única que satisfaça a física do problema, uma condição adicional deve ser imposta. A condição admissível ou, mais comumente chamada, condição de entropia, assegura que a solução obtida satisfaz à física do problema (Leveque, 1992). Assim, dados dois estados à esquerda S_{wL} e à direita S_{wR} da descontinuidade em S_w , a condição de entropia, grosseiramente falando, avalia se a velocidade obtida pela condição de Rankine-Hugoniot é menor ou igual do que a velocidade característica avaliada à montante do choque e, ao mesmo tempo, é maior ou igual à velocidade característica à jusante do choque para todo S_w entre S_{wL} e S_{wR} , como ilustrado na figura A.3c e estabelecido como segue (Leveque, 1992):

$$\frac{f_w(S_w) - f_{w_L}(S_{w_L})}{S_w - S_{w_L}} \geq \alpha_{RH} \geq \frac{f_w(S_w) - f_{w_R}(S_{w_R})}{S_w - S_{w_R}} \quad (\text{A.3})$$

Na figura A.3, duas situações são ilustradas com os respectivos diagramas x, t , para o modelo de Buckley-Leverett com relação constitutiva do tipo pistão, mostrada na equação (11).

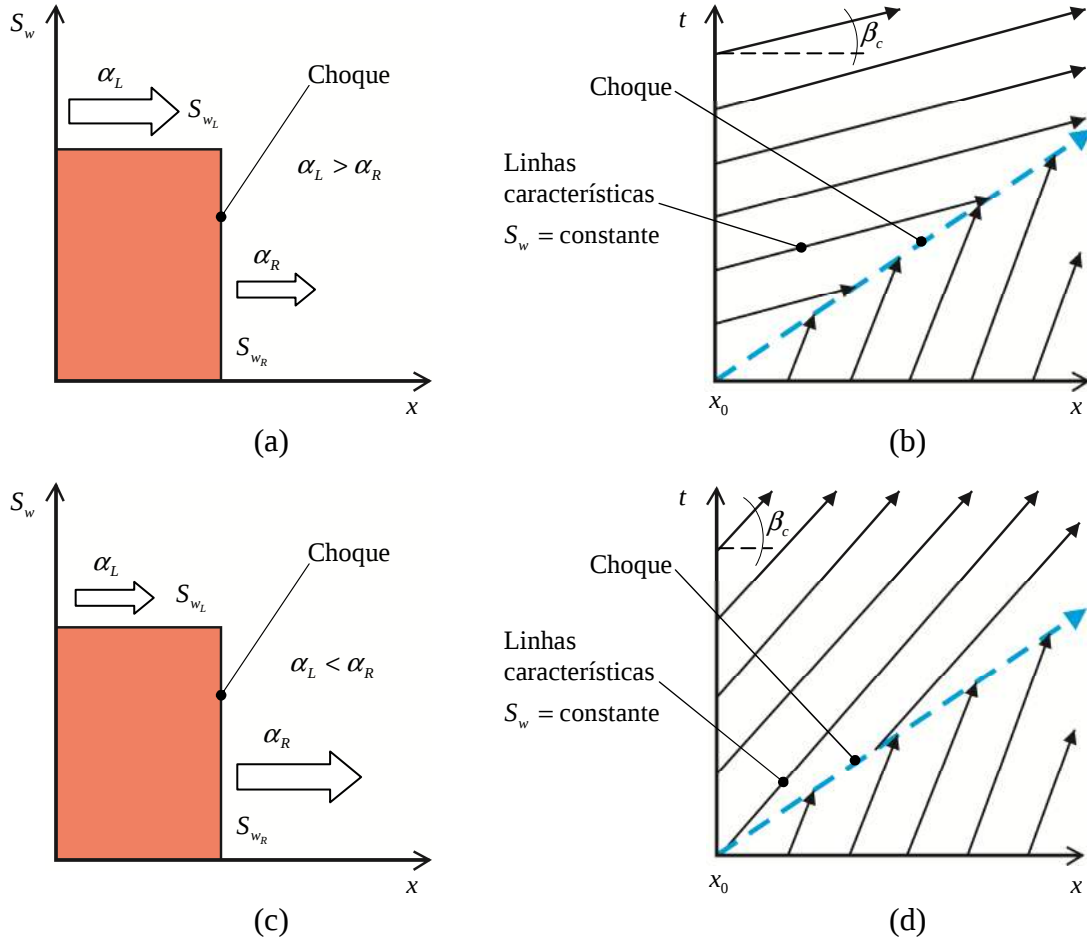


Figura A.3. Problema de transporte não linear do tipo Pistão: (a) condição de entropia satisfeita com $\alpha_L > \alpha_R$; (b) diagrama x, t correspondente à satisfação da entropia; (c) a condição de entropia não é satisfeita, $\alpha_L < \alpha_R$; (d) diagrama x, t correspondente à não satisfação da entropia.

No primeiro caso (figura A.3a), a velocidade característica à montante é maior do que a velocidade característica à jusante do “choque”. Isso caracteriza satisfação da entropia e correta formação do “choque”. No diagrama x, t (figura A.3b), se vê as linhas características, referentes às regiões à montante e à jusante, fluindo para a linha que representa o “choque”. Por outro lado, na figura A.3c, a velocidade característica à montante é menor do que a velocidade característica à jusante do choque. Nesse caso, uma solução que não satisfaz à física do problema é obtida. No diagrama x, t (figura A.3d), as linhas características associadas à região à montante do “choque” se afastam da linha que representa a descontinuidade em S_w . Na região após a descontinuidade, as linhas características seguem o mesmo comportamento vis-

to no caso anterior (comparar com a figura A.3b). O choque estabelecido na condição inicial se desfaz com o tempo (Helmig, 1997).

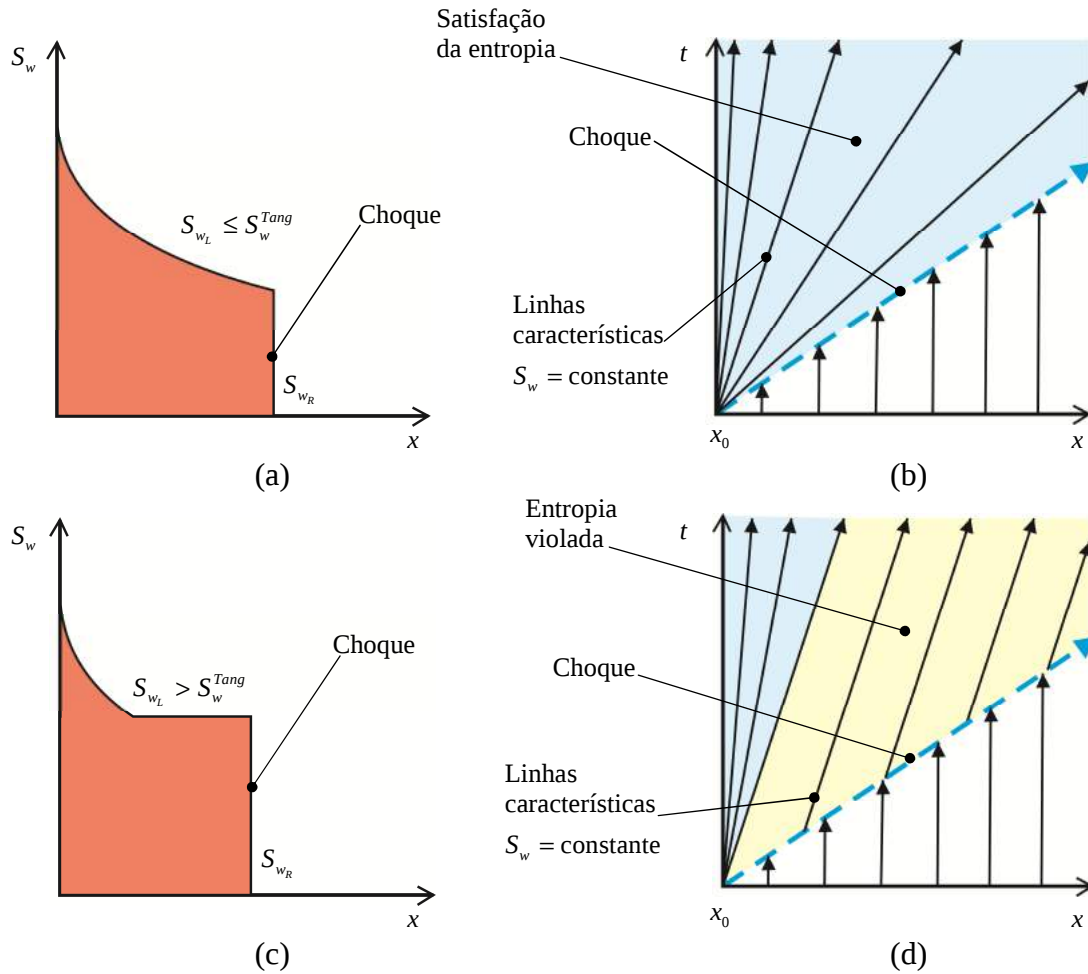


Figura A.4. Problema de transporte não linear com relações constitutivas de Brooks-Corey: (a) condição de entropia satisfeita com $S_{w_L} \leq S_w^{Tang}$; (b) diagrama x,t correspondente à satisfação da entropia; (c) a condição de entropia não é satisfeita, $S_{w_L} > S_w^{Tang}$; (d) diagrama x,t correspondente à não satisfação da entropia.

No caso onde as relações constitutivas são do tipo Brooks-Corey ou van Genushten, apresentadas nas equações (9) e (10), respectivamente, há uma região de expansão ou rarefação, seguido de um choque. Na figura A.4 dois casos, comparando a satisfação da entropia, são novamente ilustrados com seus respectivos diagramas x,t . As figuras A.2a e A.2b também auxiliam no entendimento da comparação entre os dois casos.

No primeiro caso, a entropia é satisfeita uma vez que o valor da saturação imediatamente à montante do choque coincide com o ponto de tangência mostrado na figura A.2a. Esse ponto estabelece o limite entre a região onde ocorre a expansão e a região correspondente à saturação irreduzível de água. A descontinuidade em S_w separa as duas regiões. Na figura A.4b, se vê a distribuição de linhas características com o “leque” de rarefação definido entre $1 - S_{o,res}$ e o valor correto de S_w .

Na figura A.4c, o patamar que surge próximo ao choque (comparar com a figura A.4a) é típico de uma solução com violação da entropia (Leveque, 1992). Nesse caso, o valor da saturação de água imediatamente à montante do choque S_{w_L} é maior do que o único valor

(S_w^{Tang}) que produz a solução compatível com a física do problema (Helmig, 1997). Na figura A.4d, a região onde a entropia é violada é caracterizada por linhas características constantes que vão do ponto onde a saturação à montante intercepta a curva $\partial f_w / \partial S_w \times S_w$, ilustrada na figura A.2b, até onde o choque ocorre.

Apêndice B

Gradientes de Pressão nos Esquemas Numéricos MPFA

Tomando a malha ilustrada na figura B.1 como referência, regiões de interação são associadas aos vértices que definem o volume de controle $\hat{R}$. Em cada região de interação, vazões são calculadas nas meias faces envolvidas. As regiões de interação ilustradas contribuem para que a equação de pressão na forma discreta seja satisfeita para o referido volume de controle e outros de sua adjacência.

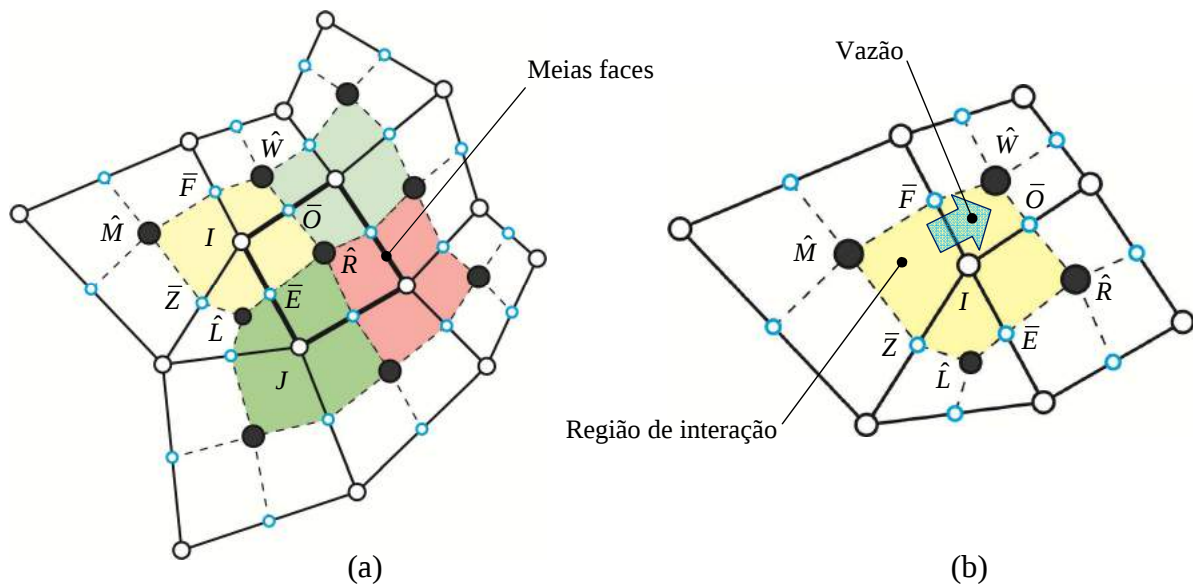


Figura B.1. Fragmento de malha com regiões de interação: (a) quatro regiões de interação que envolvem o volume de controle $\hat{R}$; (b) uma das regiões de interação com indicação de pontos auxiliares e uma das meias faces onde as vazões são calculados.

Nos esquemas numéricos do tipo MPFA, detalhados na seção 3.3.3, a aproximação do gradiente de pressão constitui uma parte relevante no procedimento de discretização e, praticamente, faz a distinção entre cada um dos métodos abordados. No presente Apêndice, o procedimento de aproximação desses gradientes, empregados nos métodos MPFA-O, MPFA-FPS e MPFA-*Enriched* são apresentados em detalhes. No caso do MPFA-O, o referido termo é obtido de duas formas distintas, fundamentado no Teorema da Divergência e na transformação do gradiente, definido em um espaço de referência para um espaço físico, em concordância, respectivamente, com as abordagens de Aavatsmark *et al.* (1998) e Edwards e Rogers (1998). A aproximação do gradiente de pressão nos métodos MPFA-FPS e MPFA-*Enriched* são deduzidos apenas com base na transformação de coordenadas, seguindo a metodologia adotada por Edwards e Zheng (2008) e Chen *et al.* (2008), respectivamente.

Gradiente de Pressão para o MPFA-O

No MPFA-O, a pressão é aproximada por uma função linear (Aavatsmark *et al.*, 1998; Edwards e Rogers, 1998), cujo suporte é ilustrado na figura B.2 para uma dada subregião de interação. Essa aproximação envolve a pressão em um ponto de colocação ($\hat{M}$, por exemplo)

e pressões em pontos auxiliares, estabelecidos no ponto médio de duas faces adjacentes que constituem o volume de controle avaliado ($\bar{Z}$ e $\bar{F}$, por exemplo).

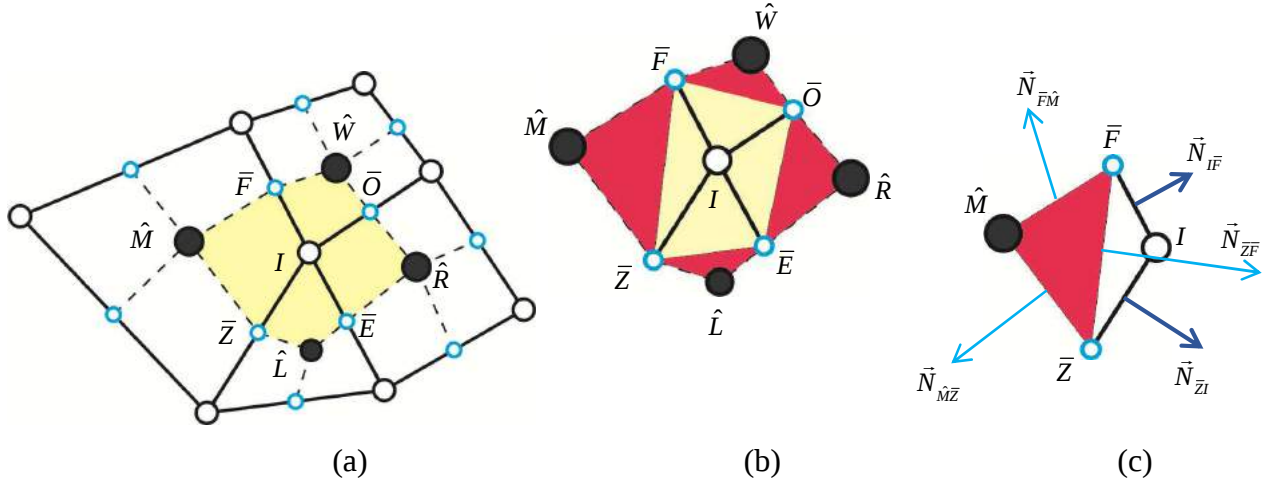


Figura B.2. Região de interação e suporte triangular: (a) limites da região de interação (em amarelo) associada ao vértice I ; (b) delimitação do suporte triangular de pressão (em vermelho); (c) suporte triangular com indicação de vetores normais.

Conforme já mencionado, duas formas de abordagem do gradiente de pressão são aqui apresentadas para o MPFA-O. Na primeira abordagem, adotada nos trabalhos de Aavatsmark *et al.* (1998), o Teorema da Divergência é utilizado como base para discretização do gradiente. Dessa forma, integrando o gradiente de pressão no suporte triangular ilustrado na figura B.2c e usando o Teorema da Divergência, tem-se:

$$\int_{\Omega_{\bar{Z}\hat{F}\hat{M}}} \vec{\nabla} p \partial \Omega_{\bar{Z}\hat{F}\hat{M}} = \int_{\Gamma_{\bar{Z}\hat{F}\hat{M}}} p \vec{n} \partial \Gamma_{\bar{Z}\hat{F}\hat{M}} \quad (\text{B.1})$$

Considerando que a distribuição de pressão na sub-região de interação tomada como exemplo é linear (figura B.2b), o gradiente de pressão é, portanto, constante e pode sair da integral de volume na equação (B.1). Adicionalmente, se o Teorema do Valor Médio for utilizado no lado direito da mesma equação, o gradiente de pressão pode ser escrito como segue:

$$\vec{\nabla} p = \frac{1}{\Omega_{\bar{Z}\hat{F}\hat{M}}} \sum_{i=1}^3 p_i \vec{N}_i \quad (\text{B.2})$$

onde $\Omega_{\bar{Z}\hat{F}\hat{M}}$ é o volume (área em 2-D) do suporte triangular ilustrado na figura B.2c. As pressões p_i e os vetores normais $\vec{N}_i$ são correspondentes aos pontos médios de cada face do suporte triangular já mencionado. Dada a distribuição linear de pressão, os valores de p_i podem ser escritos como uma média dos valores de pressão estabelecidos nos extremos de cada face do triângulo ilustrado na figura B.2c. Assim, a equação (B.2) pode ser escrita como segue:

$$\vec{\nabla} p = \frac{1}{2\Omega_{\bar{Z}\hat{F}\hat{M}}} \left[(p_{\hat{M}} + p_{\bar{Z}}) \vec{N}_{\bar{M}\hat{Z}} + (p_{\bar{Z}} + p_{\bar{F}}) \vec{N}_{\bar{Z}\hat{F}} + (p_{\bar{F}} + p_{\hat{M}}) \vec{N}_{\bar{F}\hat{M}} \right] \quad (\text{B.3})$$

Utilizando a identidade $\vec{N}_{\hat{M}\hat{Z}} + \vec{N}_{\hat{Z}\hat{F}} + \vec{N}_{\hat{F}\hat{M}} = \vec{0}$, os vetores $\vec{N}_{\hat{F}\hat{M}}$ e $\vec{N}_{\hat{M}\hat{Z}}$ podem ser isolados e substituído na equação (B.3). Após manipulações algébricas, os vetores que multiplicam $p_{\hat{M}}$, $(-\vec{N}_{\hat{F}\hat{M}} - \vec{N}_{\hat{Z}\hat{F}})$, são substituídos por $\vec{N}_{\hat{M}\hat{Z}}$, cancelando com o termo $p_{\hat{M}}\vec{N}_{\hat{M}\hat{Z}}$, obtido com as primeiras substituições. O gradiente de pressão, em uma forma mais simplificada, é então obtido tal como em Aavatsmark *et al.* (1998) e Aavatsmark (2002).

$$\vec{\nabla}p = -\frac{1}{2\Omega_{\hat{Z}\hat{F}\hat{M}}} \left(p_{\hat{M}}\vec{N}_{\hat{Z}\hat{F}} + p_{\hat{Z}}\vec{N}_{\hat{F}\hat{M}} + p_{\hat{F}}\vec{N}_{\hat{M}\hat{Z}} \right) \quad (\text{B.4})$$

Em uma abordagem alternativa, adotada por Edwards e Rogers (1998) e Edwards e Zheng (2008), o gradiente de pressão é escrito como uma diferença de potenciais. Além disso, o triângulo que dá suporte à pressão na sub-região de interação é mapeado em um espaço de referência, como ilustrado na figura B.3.

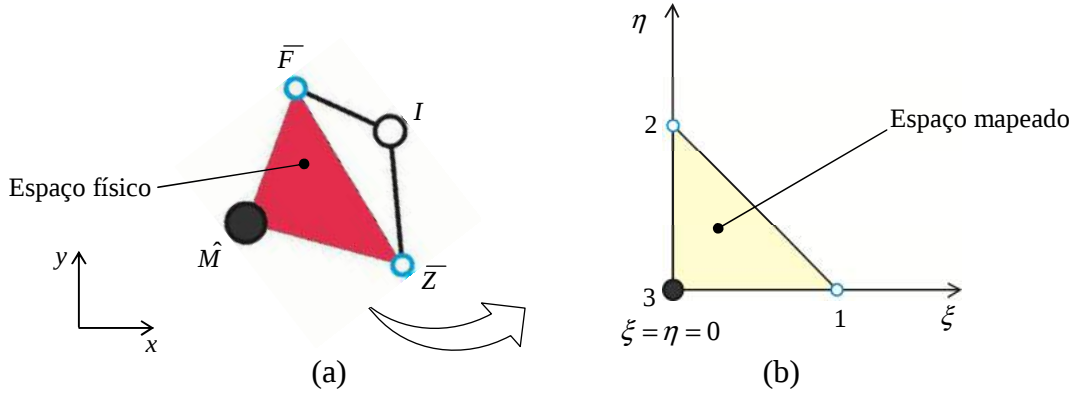


Figura B.3. Região de suporte triangular para o MPFA-O: (a) espaço físico; (b) espaço mapeado.

Dessa forma, relacionando os pontos do espaço físico no suporte triangular ilustrado na figura B.3a com os pontos do triângulo de lados unitários ilustrado na figura B.3b, com $\triangle \hat{Z}\hat{F}\hat{M} \leftrightarrow \triangle 123$, a distribuição linear de pressão pode ser escrita, para o espaço de referência como segue:

$$p(\xi, \eta) = p_1\xi + p_2\eta + p_3(1 - \xi - \eta) \quad (\text{B.5})$$

Deve-se notar que a pressão na equação (B.5) assume o valor previamente atribuído a um dado vértice do triângulo $\triangle 123$ quando o par ordenado de coordenadas naturais ξ e η coincide com esse vértice. Em qualquer outro ponto, dentro do triângulo, o referido valor é uma combinação linear entre os três valores de pressão previamente atribuídos aos vértices. A equação (B.5) pode ser manipulada de modo que a distribuição de pressão seja escrita em função de diferenças entre seus valores, produzindo:

$$p(\xi, \eta) = (p_1 - p_3)\xi + (p_2 - p_3)\eta + p_3 \quad (\text{B.6})$$

Consequentemente, o gradiente de pressão no espaço de referência é definido como um vetor de termos constantes (diferenças de pressão), na forma que segue:

$$\vec{\nabla} p_{\xi,\eta} = \begin{bmatrix} \frac{\partial p}{\partial \xi} & \frac{\partial p}{\partial \eta} \end{bmatrix}^T = \begin{bmatrix} (p_1 - p_3) & (p_2 - p_3) \end{bmatrix}^T \quad (\text{B.7})$$

Dado que o gradiente de pressão da equação (B.7) está escrito no espaço de referência, é necessário mudar a base para uma representação no espaço físico no qual a equação de pressão é definida. Para isso, deve-se ter que as coordenadas no espaço físico também podem ser escritas como função de ξ e η , i.e., o mapeamento é biunívoco, de modo que se tem:

$$x(\xi, \eta) = x_1 \xi + x_2 \eta + x_3 (1 - \xi - \eta) \quad (\text{B.8})$$

$$y(\xi, \eta) = y_1 \xi + y_2 \eta + y_3 (1 - \xi - \eta) \quad (\text{B.9})$$

Considerando a dependência estabelecida nas equações (B.8) e (B.9) e a Regra da Cadeia aplicada sobre a equação (B.7), consequente dessa dependência, o gradiente de pressão no espaço de referência pode ser relacionado com a mesma variável no espaço físico na forma que segue:

$$\frac{\partial p}{\partial \xi} = \frac{\partial p}{\partial x} \frac{\partial x}{\partial \xi} + \frac{\partial p}{\partial y} \frac{\partial y}{\partial \xi} \quad (\text{B.10})$$

$$\frac{\partial p}{\partial \eta} = \frac{\partial p}{\partial x} \frac{\partial x}{\partial \eta} + \frac{\partial p}{\partial y} \frac{\partial y}{\partial \eta} \quad (\text{B.11})$$

Escrevendo as equações (B.10) e (B.11) na forma matricial, se obtém:

$$\begin{bmatrix} \frac{\partial p}{\partial \xi} \\ \frac{\partial p}{\partial \eta} \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} \frac{\partial x}{\partial \xi} & \frac{\partial y}{\partial \xi} \\ \frac{\partial x}{\partial \eta} & \frac{\partial y}{\partial \eta} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \frac{\partial p}{\partial x} \\ \frac{\partial p}{\partial y} \end{bmatrix} \rightarrow \vec{\nabla} p_{\xi,\eta} = \mathbf{J} \vec{\nabla} p_{x,y} \quad (\text{B.12})$$

onde $\mathbf{J}$ é uma matriz Jacobiana que proporciona a mudança de base para o gradiente de pressão. É fácil notar que o gradiente de pressão no espaço físico é obtido multiplicando a matriz inversa de $\mathbf{J}$ pela equação (B.12), de modo que se tem:

$$\vec{\nabla} p_{x,y} = \mathbf{J}^{-1} \vec{\nabla} p_{\xi,\eta} \quad (\text{B.13})$$

A inversa da matriz Jacobiana, obtida com a matriz de cofatores dividida pelo determinante de $\mathbf{J}$, é dada como segue:

$$\mathbf{J}^{-1} = \frac{1}{\det(\mathbf{J})} \begin{bmatrix} \frac{\partial y}{\partial \eta} & -\frac{\partial y}{\partial \xi} \\ -\frac{\partial x}{\partial \eta} & \frac{\partial x}{\partial \xi} \end{bmatrix} = \frac{1}{\det(\mathbf{J})} \begin{bmatrix} (y_2 - y_3) & (y_3 - y_1) \\ (x_3 - x_2) & (x_1 - x_3) \end{bmatrix} \quad (\text{B.14})$$

Para o suporte triangular $\Delta \bar{Z}\bar{F}\hat{M}$, o determinante da matriz jacobiana, $\det(\mathbf{J})$, equivale ao dobro da área de suporte, $2\Omega_{\bar{Z}\bar{F}\hat{M}}$. Adicionalmente, a inversa da matriz Jacobiana para o referido suporte, $\mathbf{J}_{\bar{Z}\bar{F}\hat{M}}^{-1}$, pode ser escrita em função de vetores normais às faces do triângulo $\Delta \bar{Z}\bar{F}\hat{M}$ (ver figura B.2c), onde se obtém:

$$\mathbf{J}_{\bar{Z}\bar{F}\hat{M}}^{-1} = \frac{1}{2\Omega_{\bar{Z}\bar{F}\hat{M}}} \begin{bmatrix} \vec{N}_{\hat{M}\bar{Z}} & \vec{N}_{\bar{F}\hat{M}} \end{bmatrix} \quad (\text{B.15})$$

Por fim, utilizando a equação (B.15) e escrevendo as diferenças de pressão da equação (B.7), fazendo as devidas relações ($\hat{M} = 3$, $\bar{Z} = 1$, $\bar{F} = 2$), o gradiente de pressão, para o suporte $\Delta \bar{Z}\bar{F}\hat{M}$, é escrito na forma que segue:

$$\begin{aligned} \vec{\nabla} p_{x,y} &= \frac{1}{2\Omega_{\bar{Z}\bar{F}\hat{M}}} \begin{bmatrix} \vec{N}_{\hat{M}\bar{Z}} & \vec{N}_{\bar{F}\hat{M}} \end{bmatrix} \begin{Bmatrix} (p_{\bar{Z}} - p_{\hat{M}}) \\ (p_{\bar{F}} - p_{\hat{M}}) \end{Bmatrix} = \\ &= \frac{1}{2\Omega_{\bar{Z}\bar{F}\hat{M}}} \left[(p_{\bar{Z}} - p_{\hat{M}}) \vec{N}_{\hat{M}\bar{Z}} + (p_{\bar{F}} - p_{\hat{M}}) \vec{N}_{\bar{F}\hat{M}} \right] \end{aligned} \quad (\text{B.16})$$

É fácil verificar que a equação (B.4) recai na equação (B.16) apenas pela substituição da identidade $\vec{N}_{\bar{Z}\bar{F}} = -\vec{N}_{\bar{F}\hat{M}} - \vec{N}_{\hat{M}\bar{Z}}$. O gradiente de pressão para qualquer suporte definido na região de interação ilustrada na figura B.2b, ou mesmo outras regiões de interação, é obtido da mesma forma. No entanto, a correspondência entre as pressões nos pontos de colocação e auxiliares com os pontos no triângulo de referência ilustrado na figura B.3b, deve ser observada.

Embora o suporte para o MPFA-FPS e MPFA-*Enriched* sejam diferentes do abordado na presente seção, muitos passos do procedimento de mudança de base aqui descritos se mantêm, com as devidas adaptações como se pode ver nas seções seguintes.

Gradiente de Pressão para o MPFA-FPS e MPFA-*Enriched*

Nos esquemas numéricos com suporte completo de pressão adotados no presente texto, uma função bilinear é utilizada em cada sub-região de interação como se vê na figura B.4a. De modo análogo ao feito para o MPFA-O, há uma representação da região de suporte em um espaço de referência. No presente caso, um quadrado de lado unitário é utilizado como ilustrado na figura B.4b com $\square \hat{L}\bar{E}\bar{I}\bar{Z} \leftrightarrow \square 1234$.

É importante destacar que há outras formas de se obter o suporte completo para a pressão, inclusive com funções lineares. É o caso da proposta pioneira de Crumpton *et al.* (1995), dos esquemas numéricos MPFA-D (Gao e Wu, 2010), ou mesmo de uma variante do MPFA-*Enriched* (Chen *et al.*, 2008). Uma vez que a ausência de regiões de extrapolação caracteriza o suporte completo da pressão, funções de base triangulares podem ser estabelecidas sem sobreposição, de modo que nenhuma parte da sub-região de interação fique sem a representação da variável.

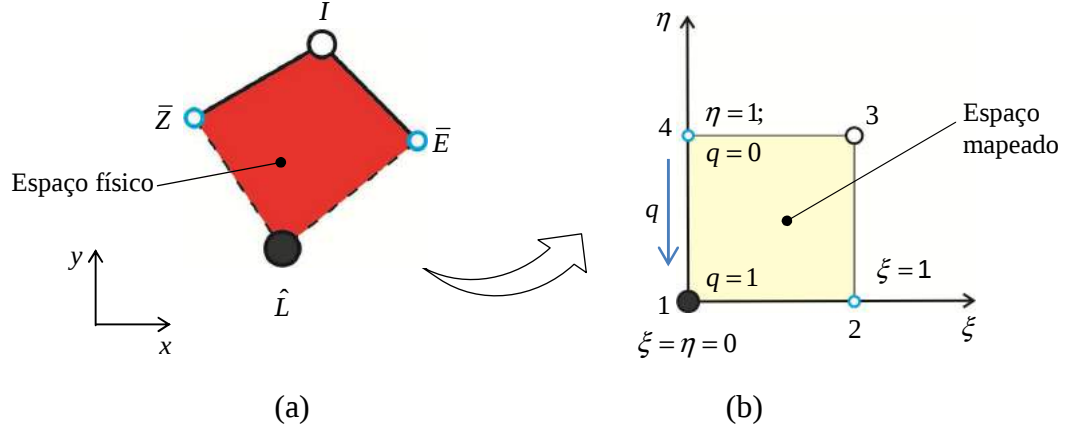


Figura B.4. Região de suporte completo para o MPFA-FPS e MPFA-*Enriched*: (a) espaço físico; (b) espaço mapeado com indicação do ponto de quadratura q em relação a coordenada natural η .

No caso das funções bilineares, a distribuição de pressão no espaço de referência se dá como segue:

$$p(\xi, \eta) = (1-\xi)(1-\eta)p_1 + \xi(1-\eta)p_2 + (\xi\eta)p_3 + \eta(1-\xi)p_4 \quad (\text{B.17})$$

Analogamente, as coordenadas x e y também são escritos em função de ξ e η .

$$x(\xi, \eta) = (1-\xi)(1-\eta)x_1 + \xi(1-\eta)x_2 + (\xi\eta)x_3 + \eta(1-\xi)x_4 \quad (\text{B.18})$$

$$y(\xi, \eta) = (1-\xi)(1-\eta)y_1 + \xi(1-\eta)y_2 + (\xi\eta)y_3 + \eta(1-\xi)y_4 \quad (\text{B.19})$$

Diferente do que se viu para o MPFA-O, onde a distribuição de pressão é linear com gradiente constante, na distribuição bilinear de pressão, o gradiente muda de acordo com o ponto onde ele é avaliado. Isso se deve aos termos cruzados da equação (B.17). Dessa forma, para cada sub-região de interação, o gradiente de pressão no espaço de referência é dado como segue:

$$\frac{\partial p}{\partial \xi} = (1-\eta)(p_2 - p_1) + \eta(p_3 - p_4) \quad (\text{B.20})$$

$$\frac{\partial p}{\partial \eta} = (1-\xi)(p_4 - p_1) + \xi(p_3 - p_2) \quad (\text{B.21})$$

Mais uma vez, o gradiente de pressão no espaço físico é obtido utilizando a equação (B.13). No entanto, a inversa da matriz Jacobiana, obtida com um raciocínio análogo ao usado na equação (B.14), é dada como segue:

$$\mathbf{J}^{-1} = \frac{1}{\det(\mathbf{J})} \begin{bmatrix} \frac{\partial y}{\partial \eta} & -\frac{\partial y}{\partial \xi} \\ -\frac{\partial x}{\partial \eta} & \frac{\partial x}{\partial \xi} \end{bmatrix} = \frac{1}{\det(\mathbf{J})} \begin{bmatrix} (1-\xi)(y_4 - y_1) + \xi(y_3 - y_2) & (1-\eta)(y_1 - y_2) + \eta(y_4 - y_3) \\ (1-\xi)(x_1 - x_4) + \xi(x_2 - x_3) & (1-\eta)(x_2 - x_1) + \eta(x_3 - x_4) \end{bmatrix} \quad (\text{B.22})$$

Assim, tomando a figura B.4a, a vazão na meia face $\bar{EI}$, avaliada em um ponto de quadratura, definido entre os pontos $\bar{E}$ e I , com $[\bar{E}, I]$, e com contribuição do volume de controle $\hat{L}$ é definida como:

$$\vec{v}_{\bar{EI}} \cdot \vec{N}_{\bar{EI}} = -\lambda_{\bar{EI}} K_{\hat{L}} \mathbf{J}_{\hat{L}\bar{EI}\bar{Z}}^{-1} \vec{\nabla} p_{\xi, \eta} \cdot \vec{N}_{\bar{EI}} \quad (\text{B.23})$$

onde o par ordenado no espaço de referência, utilizado nas equações (B.20), (B.21) e (B.22), é dado como segue (ver figura B.4b):

$$\xi = 1; \quad \eta = 1 - q \quad (\text{B.24})$$

Da mesma forma, a vazão calculada sobre a meia face $\bar{IZ}$ (ver figura B.4a), ainda com contribuição do volume de controle $\hat{L}$, é obtida na forma que segue:

$$\vec{v}_{\bar{IZ}} \cdot \vec{N}_{\bar{IZ}} = -\lambda_{\bar{IZ}} K_{\hat{L}} \mathbf{J}_{\hat{L}\bar{EI}\bar{Z}}^{-1} \vec{\nabla} p_{\xi, \eta} \cdot \vec{N}_{\bar{IZ}} \quad (\text{B.25})$$

Nesse caso, as variáveis paramétricas ξ e η assumem os seguintes valores:

$$\xi = 1 - q; \quad \eta = 1 \quad (\text{B.26})$$

Seguindo o procedimento utilizado por Edwards e Zheng (2008), as equações (B.23) e (B.25) são escritas de uma forma mais simples pelo uso do chamado Tensor de Piola. As componentes desse tensor são obtidas pela relação entre o tensor de permeabilidade $K_{\hat{L}}$ (no qual se assume simetria), a inversa da matriz Jacobiana $\mathbf{J}_{\hat{L}\bar{EI}\bar{Z}}^{-1}$ e o vetor normal à área onde o fluxo é integrado $\vec{N}_{\bar{EI}}$ e $\vec{N}_{\bar{IZ}}$, respectivamente. Esses últimos são escritos como segue a fim de simplificar o procedimento (Edwards e Zheng, 2008):

$$\vec{N}_{\bar{EI}} = \begin{Bmatrix} \frac{\partial y}{\partial \eta} \\ -\frac{\partial x}{\partial \eta} \end{Bmatrix}; \quad \vec{N}_{\bar{IZ}} = \begin{Bmatrix} -\frac{\partial y}{\partial \xi} \\ \frac{\partial x}{\partial \xi} \end{Bmatrix} \quad (\text{B.27})$$

Dessa forma, reescrevendo as equações (B.23) e (B.25) na forma matricial, utilizando as coordenadas paramétricas apresentadas nas equações (B.24) e (B.26), respectivamente e assumindo as relações da equação (B.27) para representar os respectivos vetores normais às meias faces $\bar{EI}$ e $\bar{IZ}$, se obtém:

$$\vec{v}_{\bar{EI}} \cdot \vec{N}_{\bar{EI}} = -\frac{\lambda_{\bar{EI}}}{\det(\mathbf{J}_{\hat{L}\bar{EI}\bar{I}\bar{Z}})} \begin{bmatrix} k_{xx}^{\hat{L}} & k_{xy}^{\hat{L}} \\ k_{xy}^{\hat{L}} & k_{yy}^{\hat{L}} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \frac{\partial y}{\partial \eta} & -\frac{\partial y}{\partial \xi} \\ -\frac{\partial x}{\partial \eta} & \frac{\partial x}{\partial \xi} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \frac{\partial p}{\partial \xi} \\ \frac{\partial p}{\partial \eta} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \frac{\partial y}{\partial \eta} \\ -\frac{\partial x}{\partial \eta} \end{bmatrix} \quad (\text{B.28})$$

$$\vec{v}_{\bar{I}\bar{Z}} \cdot \vec{N}_{\bar{I}\bar{Z}} = -\frac{\lambda_{\bar{I}\bar{Z}}}{\det(\mathbf{J}_{\hat{L}\bar{EI}\bar{I}\bar{Z}})} \begin{bmatrix} k_{xx}^{\hat{L}} & k_{xy}^{\hat{L}} \\ k_{xy}^{\hat{L}} & k_{yy}^{\hat{L}} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \frac{\partial y}{\partial \eta} & -\frac{\partial y}{\partial \xi} \\ -\frac{\partial x}{\partial \eta} & \frac{\partial x}{\partial \xi} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \frac{\partial p}{\partial \xi} \\ \frac{\partial p}{\partial \eta} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} -\frac{\partial y}{\partial \xi} \\ \frac{\partial x}{\partial \xi} \end{bmatrix} \quad (\text{B.29})$$

onde $k_{xx}^{\hat{L}}$, $k_{xy}^{\hat{L}}$ e $k_{yy}^{\hat{L}}$ são os componentes do tensor de permeabilidade associado ao volume de controle $\hat{L}$. Após manipulações algébricas nas equações (B.28) e (B.29) e segregando todos os termos que multiplicam apenas $\partial p / \partial \xi$, dos termos que multiplicam apenas $\partial p / \partial \eta$ e os termos que multiplicam ambos, chega-se à relação que segue:

$$\begin{Bmatrix} \vec{v}_{\bar{EI}} \cdot \vec{N}_{\bar{EI}} \\ \vec{v}_{\bar{I}\bar{Z}} \cdot \vec{N}_{\bar{I}\bar{Z}} \end{Bmatrix} = \begin{bmatrix} -\lambda_{\bar{EI}} & 0 \\ 0 & -\lambda_{\bar{I}\bar{Z}} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \mathcal{T}_{11}^{\hat{L}} & \mathcal{T}_{12}^{\hat{L}} \\ \mathcal{T}_{12}^{\hat{L}} & \mathcal{T}_{22}^{\hat{L}} \end{bmatrix} \begin{Bmatrix} \frac{\partial p}{\partial \xi} \\ \frac{\partial p}{\partial \eta} \end{Bmatrix} \quad (\text{B.30})$$

onde os componentes do Tensor de Piola são dados como segue (Edwards e Roger, 1998; Edwards e Zheng, 2008):

$$\mathcal{T}_{11}^{\hat{L}} = \frac{1}{\det(\mathbf{J}_{\hat{L}\bar{EI}\bar{I}\bar{Z}})} \left[k_{xx}^{\hat{L}} \left(\frac{\partial y}{\partial \eta} \right)^2 + k_{yy}^{\hat{L}} \left(\frac{\partial x}{\partial \eta} \right)^2 - 2k_{xy}^{\hat{L}} \frac{\partial x}{\partial \eta} \frac{\partial y}{\partial \eta} \right] \quad (\text{B.31})$$

$$\mathcal{T}_{22}^{\hat{L}} = \frac{1}{\det(\mathbf{J}_{\hat{L}\bar{EI}\bar{I}\bar{Z}})} \left[k_{xx}^{\hat{L}} \left(\frac{\partial y}{\partial \xi} \right)^2 + k_{yy}^{\hat{L}} \left(\frac{\partial x}{\partial \xi} \right)^2 - 2k_{xy}^{\hat{L}} \frac{\partial x}{\partial \xi} \frac{\partial y}{\partial \xi} \right] \quad (\text{B.32})$$

$$\mathcal{T}_{12}^{\hat{L}} = \frac{1}{\det(\mathbf{J}_{\hat{L}\bar{EI}\bar{I}\bar{Z}})} \left[k_{xy}^{\hat{L}} \left(\frac{\partial x}{\partial \xi} \frac{\partial y}{\partial \eta} + \frac{\partial x}{\partial \eta} \frac{\partial y}{\partial \xi} \right) - \left(k_{xx}^{\hat{L}} \frac{\partial y}{\partial \xi} \frac{\partial y}{\partial \eta} + k_{yy}^{\hat{L}} \frac{\partial x}{\partial \xi} \frac{\partial x}{\partial \eta} \right) \right] \quad (\text{B.33})$$

As vazões no volume de controle auxiliar (ver seção 3.3.3) seguem o mesmo raciocínio desenvolvido até aqui. Deve-se apenas ressaltar que as faces onde as vazões são integradas tem um fator multiplicador c , tal como ilustrado na figura B.5. Esse fator reduz o tamanho da face de integração em relação às meias faces $\bar{EI}$ e $\bar{I}\bar{Z}$, por exemplo, como se vê na equação. Além disso, as coordenadas paramétricas ξ e η recebem outros valores que correspondem ao ponto de quadratura na face do volume de controle auxiliar $\bar{g}$ ou $\bar{b}$, por exemplo (ver figura B.5b), tal como segue para a face $\bar{g}h$. A posição do ponto de quadratura no volume de controle auxiliar τ tem a mesma função da variável q na figura B.4. O mesmo raciocínio se aplica à face $h\bar{b}$ e demais faces do volume de controle auxiliar.

$$\xi = 1 - c; \quad \eta = 1 - c(1 - \tau) \quad (\text{B.34})$$

$$\bar{N}_{\bar{g}h} = \begin{Bmatrix} c \frac{\partial y}{\partial \eta} \\ -c \frac{\partial x}{\partial \eta} \end{Bmatrix} \quad (\text{B.35})$$

Como já mencionado na seção 3.3.3, a diferença do MPFA-*Enriched* em relação ao MPFA-FPS, está na definição do volume de controle auxiliar usado para a equação de balanço adicional, necessária aos esquemas com suporte completo aqui abordados. Dessa forma, o Tensor de Piola para as vazões no volume de controle auxiliar (figura B.5c) recebe algumas modificações provenientes da geometria desse volume de controle e posição do ponto de quadratura (ponto médio da face $\bar{g}\bar{b}$ na figura B.5c).

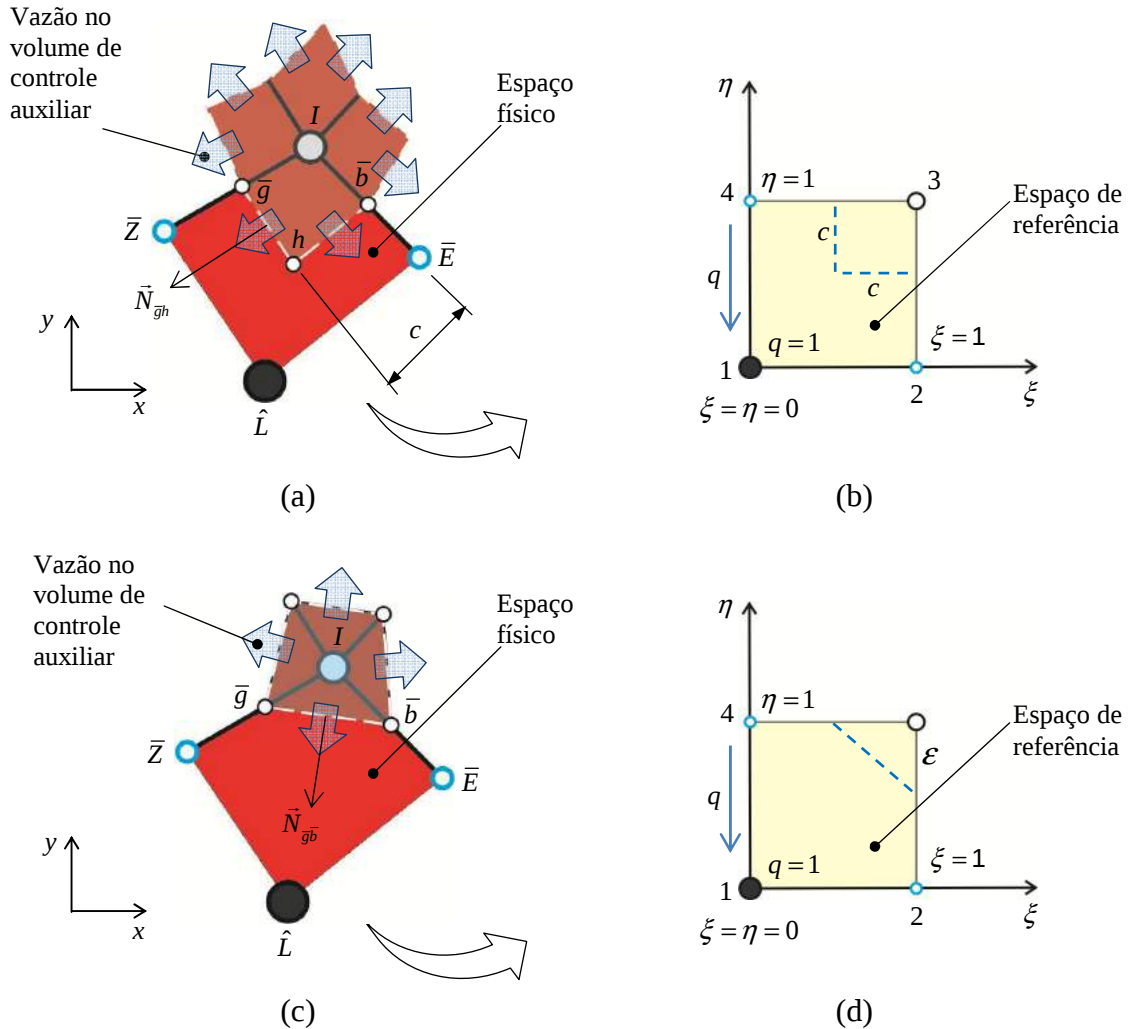


Figura B.5. Região de suporte completo para o MPFA-FPS e MPFA-*Enriched*: (a) espaço físico com indicação do volume de controle auxiliar para o MPFA-FPS; (b) espaço mapeado com indicação do volume de controle auxiliar para o MPFA-FPS; (c) espaço físico com indicação do volume de controle auxiliar para o MPFA-*Enriched*; (d) espaço mapeado com indicação do volume de controle auxiliar para o MPFA-*Enriched*.

O cálculo da vazão auxiliar na face $\bar{g}\bar{b}$ tem coordenadas paramétricas, no espaço de referência, dadas como segue:

$$\xi = 1 - \frac{\varepsilon}{2}; \quad \eta = 1 - \frac{\varepsilon}{2} \quad (\text{B.36})$$

Adicionalmente, o vetor normal a essa face pode ser facilmente deduzido como segue:

$$\vec{N}_{\bar{g}\bar{b}} = -\varepsilon (\vec{N}_{\bar{E}\bar{I}} + \vec{N}_{\bar{I}\bar{Z}}) = - \left\{ \begin{array}{c} \varepsilon \frac{\partial y}{\partial \eta} \\ -\varepsilon \frac{\partial x}{\partial \eta} \end{array} \right\} - \left\{ \begin{array}{c} -\varepsilon \frac{\partial y}{\partial \xi} \\ \varepsilon \frac{\partial x}{\partial \xi} \end{array} \right\} = \left\{ \begin{array}{c} \varepsilon \left(\frac{\partial y}{\partial \xi} - \frac{\partial y}{\partial \eta} \right) \\ \varepsilon \left(\frac{\partial x}{\partial \eta} - \frac{\partial x}{\partial \xi} \right) \end{array} \right\} \quad (\text{B.37})$$

Assim, escrevendo a vazão na face $\bar{g}\bar{b}$ na forma matricial, tal como feito na equação (B.28), produz:

$$\vec{v}_{\bar{g}\bar{b}} \cdot \vec{N}_{\bar{g}\bar{b}} = - \frac{\lambda_{\bar{g}\bar{b}}}{\det(\mathbf{J}_{\hat{L}\bar{E}\bar{I}\bar{Z}})} \begin{bmatrix} k_{xx}^{\hat{L}} & k_{xy}^{\hat{L}} \\ k_{xy}^{\hat{L}} & k_{yy}^{\hat{L}} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \frac{\partial y}{\partial \eta} & -\frac{\partial y}{\partial \xi} \\ -\frac{\partial x}{\partial \eta} & \frac{\partial x}{\partial \xi} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \frac{\partial p}{\partial \xi} \\ \frac{\partial p}{\partial \eta} \end{bmatrix} \cdot \left\{ \begin{array}{c} \varepsilon \left(\frac{\partial y}{\partial \xi} - \frac{\partial y}{\partial \eta} \right) \\ \varepsilon \left(\frac{\partial x}{\partial \eta} - \frac{\partial x}{\partial \xi} \right) \end{array} \right\} \quad (\text{B.38})$$

Mais uma vez, após alguma manipulação algébrica, e separando os termos associado apenas a $\partial p / \partial \xi$, $\partial p / \partial \eta$ e ambos, chega-se às componentes do Tensor de Piola para o MPFA-Enriched.

$$\mathcal{R}_{11}^{\hat{L}} = - \frac{1}{\det(\mathbf{J}_{\hat{L}\bar{E}\bar{I}\bar{Z}})} \left[k_{xx}^{\hat{L}} \left(\frac{\partial y}{\partial \eta} \right)^2 + k_{yy}^{\hat{L}} \left(\frac{\partial x}{\partial \eta} \right)^2 + k_{xx}^{\hat{L}} \frac{\partial y}{\partial \xi} \frac{\partial y}{\partial \eta} + k_{yy}^{\hat{L}} \frac{\partial x}{\partial \xi} \frac{\partial x}{\partial \eta} + k_{xy}^{\hat{L}} \left(2 \frac{\partial x}{\partial \eta} \frac{\partial y}{\partial \eta} - \frac{\partial x}{\partial \xi} \frac{\partial y}{\partial \eta} - \frac{\partial x}{\partial \eta} \frac{\partial y}{\partial \xi} \right) \right] \quad (\text{B.39})$$

$$\mathcal{R}_{22}^{\hat{L}} = - \frac{1}{\det(\mathbf{J}_{\hat{L}\bar{E}\bar{I}\bar{Z}})} \left[k_{xx}^{\hat{L}} \left(\frac{\partial y}{\partial \xi} \right)^2 + k_{yy}^{\hat{L}} \left(\frac{\partial x}{\partial \xi} \right)^2 + k_{xx}^{\hat{L}} \frac{\partial y}{\partial \xi} \frac{\partial y}{\partial \eta} + k_{yy}^{\hat{L}} \frac{\partial x}{\partial \xi} \frac{\partial x}{\partial \eta} + k_{xy}^{\hat{L}} \left(2 \frac{\partial x}{\partial \xi} \frac{\partial y}{\partial \xi} - \frac{\partial x}{\partial \xi} \frac{\partial y}{\partial \eta} - \frac{\partial x}{\partial \eta} \frac{\partial y}{\partial \xi} \right) \right] \quad (\text{B.40})$$

$$\mathcal{R}_{12}^{\hat{L}} = \frac{1}{\det(\mathbf{J}_{\hat{L}\bar{E}\bar{I}\bar{Z}})} \left[\left(k_{xx}^{\hat{L}} \frac{\partial y}{\partial \xi} \frac{\partial y}{\partial \eta} + k_{yy}^{\hat{L}} \frac{\partial x}{\partial \xi} \frac{\partial x}{\partial \eta} \right) - k_{xy}^{\hat{L}} \left(\frac{\partial x}{\partial \xi} \frac{\partial y}{\partial \eta} + \frac{\partial x}{\partial \eta} \frac{\partial y}{\partial \xi} \right) \right] \quad (\text{B.41})$$

Apêndice C

Estratégia de Reconstrução para Aproximações de Alta Ordem

A aproximação acurada da saturação de água S_w , consequentemente dos fluxos numéricos calculados em cada superfície de controle IJ (ver figura C.1), se dá, com frequência, para formulações conservativas, por meio de reconstruções polinomiais locais (Clain *et al.*, 2013). Na presente seção, a estratégia inicialmente proposta por Barth e Frederickson (1990), para solução de equações hiperbólicas, é descrita em detalhes. Extensões desse procedimento, para aplicações em formulações centradas na célula e fenômenos físicos mais complexos (advecção-difusão) podem ser encontradas nos trabalhos de Goosh e van Altena (2002); Goosh *et al.* (2007); Goosh e Michalak (2009); Ivan e Groth (2011); e Clain *et al.* (2013).

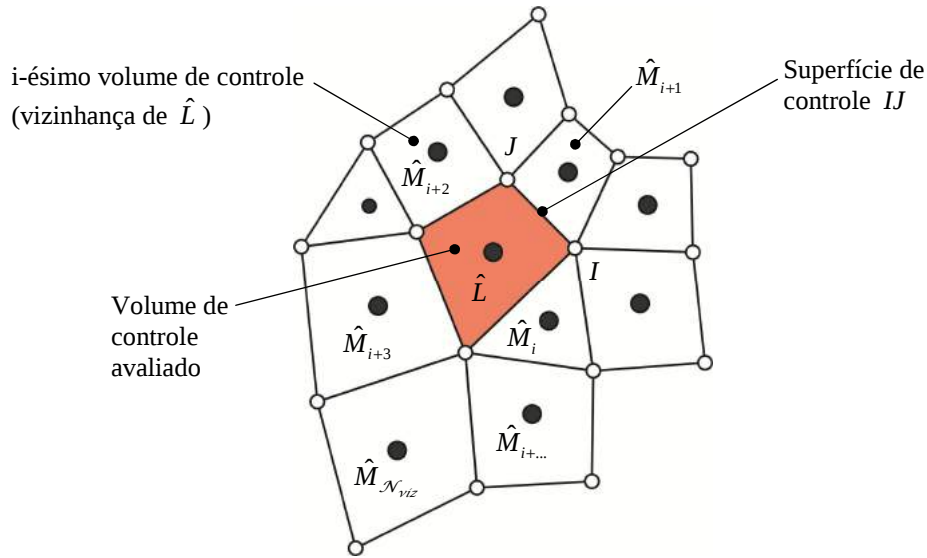


Figura C.1. Fragmento de malha com indicação do volume de controle avaliado $\hat{L}$ e sua vizinhança $\hat{M}_i$. O índice i varia de 1 até o número de volumes de controles considerados para cada ordem de aproximação.

Tomando, para auxílio à nomenclatura, o fragmento de malha ilustrado na figura C.1, a definição da Função Polinomial Reconstructora (FPR), para cada volume de controle avaliado $\hat{L}$, com correspondente vizinhança $\hat{M}_i$, onde $i=1,2,\dots,\mathcal{N}_{viz}$ (número de vizinhos considerados), é fundamentada em três princípios básicos (Ivan e Groth, 2011). Inicialmente, uma FPR deve representar exatamente funções com grau $\leq \kappa$, sendo κ o grau da FPR obtida. Reconstruções “ k -exata”, como são referenciadas na literatura (Barth e Frederickson, 1990; Barth, 1993; Goosh e van Altena, 2002), produzem aproximações numéricas com erro de truncamento de ordem $O(\Delta \bar{x}^{\kappa+1})$. Um segundo critério requer que o valor integral médio da FPR seja igual ao valor integral médio da variável reconstruída em cada volume de controle $\hat{L}$. A preservação do valor integral médio ou conservação da média (Goosh, 1997; Goosh e van Altena, 2002) é estabelecida como segue:

$$\frac{1}{\Omega_{\hat{L}}} \int_{\Omega_{\hat{L}}} S_w(\bar{x}) d\Omega_{\hat{L}} = \frac{1}{\Omega_{\hat{L}}} \int_{\Omega_{\hat{L}}} \mathcal{R}(\bar{x} - \bar{x}_{\hat{L}}) d\Omega_{\hat{L}} = \bar{S}_{w_{\hat{L}}} \quad (C.1)$$

onde, o polinômio reconstrutor $\mathcal{R}$, de grau κ , é definido como uma função dos vetores posição $\vec{x}_{\hat{L}}$ e $\vec{x}$, que correspondem, respectivamente, às coordenadas do centroide do volume de controle $\hat{L}$ (ver figura C.1) e de algum ponto em sua vizinhança próxima. O valor integral médio de saturação de água, calculado no volume de controle $\hat{L}$, é representado por $\bar{S}_{w_{\hat{L}}}$ e o volume (área em domínios 2-D) do volume de controle avaliado é representado por $\Omega_{\hat{L}}$. Por fim, o terceiro critério envolve o número de volumes de controle vizinhos (estêncil da reconstrução) e a localidade da aproximação polinomial. Em princípio, são necessários tantos volumes de controle $\hat{M}_i$, quantos forem os coeficientes desconhecidos na concepção de $\mathcal{R}$. No entanto, na prática, volumes de controle adicionais são utilizados para definir o suporte da FPR, o que torna a reconstrução mais robusta, especialmente quando malhas distorcidas ou desalinhadas com os gradientes envolvidos na simulação são consideradas (Ivan e Groth, 2011).

Clain *et al.* (2013) recomendam, por garantia de robustez, um suporte dentro do intervalo que segue:

$$\mathcal{N}_{viz} \in \left[(\kappa+1)(\kappa+2)/2, (\kappa+1)(\kappa+2) \right] \quad (C.2)$$

Os autores, no entanto, não fazem qualquer distinção entre o número de volumes de controle vizinhos ideal à reconstrução em malhas triangulares e quadrangulares. Breviglieri (2010) recomenda, para aplicações em Volume de Controle Espectral, diferentes relações para a obtenção do estêncil de reconstrução nos chamados volumes de controle simplex (triângulos e tetraedros) e aqueles obtidos por produtos tensoriais (quadrângulos e hexaedros). Essas relações são dadas, respectivamente, por:

$$\mathcal{N}_{Estêncil_{Triang}} = \frac{(\kappa+d)!}{\kappa!d!}; \quad \mathcal{N}_{Estêncil_{Quadr}} = (\kappa+1)^d \quad (C.3)$$

onde d representa o número de dimensões do domínio (1, 2 e 3 para 1-D, 2-D e 3-D, respectivamente). Deve-se notar que no contexto de Volume de Controle Espectral, o estêncil da reconstrução é o mesmo para malhas estruturadas e não estruturadas, uma vez que a reconstrução polinomial se dá apenas com o volume de controle avaliado, por meio de $\mathcal{N}_{Estêncil_{Triang}}$

ou $\mathcal{N}_{Estêncil_{Quadr}}$ subdivisões em volumes de controle menores (Wang, 2002; Wang e Liu, 2002; Sun *et al.*, 2006). Goosh e van Altena (2002) recomendam, apenas para malhas triangulares, a adoção de três volumes de controle vizinhos para dar suporte a aproximações de segunda ordem; nove, para terceira ordem e quatorze para quarta ordem. Nos três casos, o número de volumes de controle considerados está dentro do intervalo estabelecido por Clain *et al.* (2013), apresentado na equação (C.2). Diante disso, no presente texto, a equação (C.2) é adotada para definir o estêncil da reconstrução ($\mathcal{N}_{viz} + 1$), dada sua aplicação mais geral, especialmente quando malhas estruturadas e não estruturadas são usadas. Isto é, nem sempre o estêncil estabelecido para uma dada ordem de aproximação com uma malha estruturada se mantém em uma malha não estruturada. Nas tabelas C.2, há uma estimativa do número de volumes de controle utilizados nas simulações envolvendo triângulos e quadrângulos, malhas estruturadas e não estruturadas e aproximações de segunda ordem (FPR lineares) até quarta ordem (FPR cúbicas). Tendo em vista os critérios estabelecidos acima, em especial o representado pela equação (C.1), os coeficientes da FPR são obtidos fazendo uma expansão em

série de Taylor de $S_w(\vec{x})$, tendo como referência o valor de saturação de água $S_{w_{\hat{L}}}$ no centroide do volume de controle $\hat{L}$ (Goosh, 1997; Goosh e van Altena, 2002).

$$\begin{aligned} \frac{1}{\Omega_{\hat{L}}} \int_{\Omega_{\hat{L}}} \mathcal{R}(\vec{x} - \vec{x}_{\hat{L}}) d\Omega_{\hat{L}} &= \frac{1}{\Omega_{\hat{L}}} \int_{\Omega_{\hat{L}}} S_w(\vec{x}) d\Omega_{\hat{L}} = \frac{1}{\Omega_{\hat{L}}} \int_{\Omega_{\hat{L}}} \left[S_{w_{\hat{L}}} + \frac{\partial S_w}{\partial x} \Big|_{\hat{L}} (x - x_{\hat{L}}) + \right. \\ &\quad \left. \frac{\partial S_w}{\partial y} \Big|_{\hat{L}} (y - y_{\hat{L}}) + \frac{1}{2} \frac{\partial^2 S_w}{\partial x^2} \Big|_{\hat{L}} (x - x_{\hat{L}})^2 + \frac{\partial^2 S_w}{\partial x \partial y} \Big|_{\hat{L}} (x - x_{\hat{L}})(y - y_{\hat{L}}) + \right. \\ &\quad \left. \frac{1}{2} \frac{\partial^2 S_w}{\partial y^2} \Big|_{\hat{L}} (y - y_{\hat{L}})^2 + \frac{1}{3!} \frac{\partial^3 S_w}{\partial x^3} \Big|_{\hat{L}} (x - x_{\hat{L}})^3 + \frac{3}{3!} \frac{\partial^3 S_w}{\partial x^2 \partial y} \Big|_{\hat{L}} (x - x_{\hat{L}})^2 (y - y_{\hat{L}}) + \right. \\ &\quad \left. \frac{3}{3!} \frac{\partial^3 S_w}{\partial x \partial y^2} \Big|_{\hat{L}} (x - x_{\hat{L}})(y - y_{\hat{L}})^2 + \frac{1}{3!} \frac{\partial^3 S_w}{\partial y^3} \Big|_{\hat{L}} (y - y_{\hat{L}})^3 + \dots \right] d\Omega_{\hat{L}} \end{aligned} \quad (C.4)$$

O valor da saturação de água no centroide do volume de controle avaliado, bem como suas derivadas são os coeficientes da FPR a se determinar. Considerando que a FPR deve ser tal que $\mathcal{R}(\vec{x} - \vec{x}_{\hat{L}}) - S_w(\vec{x}) = O(\Delta \vec{x}^{k+1})$, o número de termos considerado na expansão da equação (C.4) deve satisfazer o número de graus de liberdade requerido pela ordem de aproximação desejada e sugerido na equação (C.2). Assumindo que $S_{w_{\hat{L}}}$ e os termos diferenciais, avaliados no centroide do volume de controle $\hat{L}$ (ponto de referência), são constantes, a equação (C.4) pode ser escrita em uma forma mais compacta, onde se obtém:

$$\begin{aligned} \frac{1}{\Omega_{\hat{L}}} \int_{\Omega_{\hat{L}}} \mathcal{R}(\vec{x} - \vec{x}_{\hat{L}}) d\Omega_{\hat{L}} &= S_{w_{\hat{L}}} + \frac{\partial S_w}{\partial x} \Big|_{\hat{L}} \bar{x}_{\hat{L}} + \frac{\partial S_w}{\partial y} \Big|_{\hat{L}} \bar{y}_{\hat{L}} + \frac{1}{2} \frac{\partial^2 S_w}{\partial x^2} \Big|_{\hat{L}} \bar{x}_{\hat{L}}^2 + \frac{\partial^2 S_w}{\partial x \partial y} \Big|_{\hat{L}} \bar{xy}_{\hat{L}} + \\ &\quad \frac{1}{2} \frac{\partial^2 S_w}{\partial y^2} \Big|_{\hat{L}} \bar{y}_{\hat{L}}^2 + \frac{1}{6} \frac{\partial^3 S_w}{\partial x^3} \Big|_{\hat{L}} \bar{x}_{\hat{L}}^3 + \frac{1}{2} \frac{\partial^3 S_w}{\partial x^2 \partial y} \Big|_{\hat{L}} \bar{x}_{\hat{L}}^2 \bar{y}_{\hat{L}} + \frac{1}{2} \frac{\partial^3 S_w}{\partial x \partial y^2} \Big|_{\hat{L}} \bar{xy}_{\hat{L}}^2 + \frac{1}{6} \frac{\partial^3 S_w}{\partial y^3} \Big|_{\hat{L}} \bar{y}_{\hat{L}}^3 + \dots \end{aligned} \quad (C.5)$$

Os chamados momentos de área $\overline{x^n y^m}_{\hat{L}}$ (Goosh e van Altena, 2002), apresentados na equação (C.5), são, portanto, definidos como um valor integral médio dos monômios $(x - x_{\hat{L}})^n (y - y_{\hat{L}})^m$ no volume de controle $\hat{L}$:

$$\overline{x^n y^m}_{\hat{L}} = \frac{1}{\Omega_{\hat{L}}} \int_{\Omega_{\hat{L}}} (x - x_{\hat{L}})^n (y - y_{\hat{L}})^m d\Omega_{\hat{L}} \quad (C.6)$$

Tomando, ainda, a equação (C.1) como referência, é possível reescrever a equação (C.5) na forma que segue:

$$\begin{aligned} \bar{S}_{w_{\hat{L}}} &= S_{w_{\hat{L}}} + \frac{\partial S_w}{\partial x} \Big|_{\hat{L}} \bar{x}_{\hat{L}} + \frac{\partial S_w}{\partial y} \Big|_{\hat{L}} \bar{y}_{\hat{L}} + \frac{1}{2} \frac{\partial^2 S_w}{\partial x^2} \Big|_{\hat{L}} \bar{x}_{\hat{L}}^2 + \frac{\partial^2 S_w}{\partial x \partial y} \Big|_{\hat{L}} \bar{xy}_{\hat{L}} + \frac{1}{2} \frac{\partial^2 S_w}{\partial y^2} \Big|_{\hat{L}} \bar{y}_{\hat{L}}^2 + \\ &\quad \frac{1}{6} \frac{\partial^3 S_w}{\partial x^3} \Big|_{\hat{L}} \bar{x}_{\hat{L}}^3 + \frac{1}{2} \frac{\partial^3 S_w}{\partial x^2 \partial y} \Big|_{\hat{L}} \bar{x}_{\hat{L}}^2 \bar{y}_{\hat{L}} + \frac{1}{2} \frac{\partial^3 S_w}{\partial x \partial y^2} \Big|_{\hat{L}} \bar{xy}_{\hat{L}}^2 + \frac{1}{6} \frac{\partial^3 S_w}{\partial y^3} \Big|_{\hat{L}} \bar{y}_{\hat{L}}^3 + \dots \end{aligned} \quad (C.7)$$

É importante destacar a diferença entre os parâmetros $\bar{S}_{w_{\hat{L}}}$ e $S_{w_{\hat{L}}}$. Enquanto $\bar{S}_{w_{\hat{L}}}$ representa um valor médio da saturação de água, definido no volume de controle avaliado, $S_{w_{\hat{L}}}$ é o valor pontual (calculado em $\bar{x}_{\hat{L}}$) da variável em questão. É fácil perceber que os dois parâmetros só serão iguais no caso da FPR ter grau zero.

Para cada volume de controle $\hat{M}_i$, pertencente ao estêncil compatível com a ordem de aproximação $\kappa+1$, tem-se uma equação adicional. Essas equações são obtidas tal como a equação (C.4) e, novamente, tomando como referência o centroide do volume de controle avaliado, $\bar{x}_{\hat{L}}$. Isso produz:

$$\begin{aligned} \frac{1}{\Omega_{\hat{M}_i}} \int_{\Omega_{\hat{M}_i}} \mathcal{R}(\bar{x} - \bar{x}_{\hat{L}}) d\Omega_{\hat{M}_i} &= \frac{1}{\Omega_{\hat{M}_i}} \int_{\Omega_{\hat{M}_i}} S_w(\bar{x}) d\Omega_{\hat{M}_i} = \frac{1}{\Omega_{\hat{M}_i}} \int_{\Omega_{\hat{M}_i}} \left[S_{w_{\hat{L}}} + \frac{\partial S_w}{\partial x} \Big|_{\hat{L}} (x - x_{\hat{L}}) + \right. \\ &\quad \left. \frac{\partial S_w}{\partial y} \Big|_{\hat{L}} (y - y_{\hat{L}}) + \frac{1}{2} \frac{\partial^2 S_w}{\partial x^2} \Big|_{\hat{L}} (x - x_{\hat{L}})^2 + \frac{\partial^2 S_w}{\partial x \partial y} \Big|_{\hat{L}} (x - x_{\hat{L}})(y - y_{\hat{L}}) + \right. \\ &\quad \left. \frac{1}{2} \frac{\partial^2 S_w}{\partial y^2} \Big|_{\hat{L}} (y - y_{\hat{L}})^2 + \frac{1}{3!} \frac{\partial^3 S_w}{\partial x^3} \Big|_{\hat{L}} (x - x_{\hat{L}})^3 + \frac{3}{3!} \frac{\partial^3 S_w}{\partial x^2 \partial y} \Big|_{\hat{L}} (x - x_{\hat{L}})^2 (y - y_{\hat{L}}) + \right. \\ &\quad \left. \frac{3}{3!} \frac{\partial^3 S_w}{\partial x \partial y^2} \Big|_{\hat{L}} (x - x_{\hat{L}})(y - y_{\hat{L}})^2 + \frac{1}{3!} \frac{\partial^3 S_w}{\partial y^3} \Big|_{\hat{L}} (y - y_{\hat{L}})^3 + \dots \right] d\Omega_{\hat{M}_i} \end{aligned} \quad (C.8)$$

Seguindo o procedimento usado por Goosh (1997), os termos $(x - x_{\hat{L}})$ e $(y - y_{\hat{L}})$ são substituídos, respectivamente, por $(x - x_{\hat{M}_i}) + (x_{\hat{M}_i} - x_{\hat{L}})$ e $(y - y_{\hat{M}_i}) + (y_{\hat{M}_i} - y_{\hat{L}})$. Isso evita que os momentos de área de cada volume de controle $\hat{M}_i$ sejam calculados em relação ao volume de controle $\hat{L}$.

Feitas as devidas substituições e manipulações algébricas e considerando novamente a equação (C.1), porém no contexto do volume de controle $\hat{M}_i$, tem-se:

$$\begin{aligned} \bar{S}_{w_{\hat{M}_i}} &= S_{w_{\hat{L}}} + \frac{\partial S_w}{\partial x} \Big|_{\hat{L}} \left[\bar{x}_{\hat{M}_i} + (x_{\hat{M}_i} - x_{\hat{L}}) \right] + \frac{\partial S_w}{\partial y} \Big|_{\hat{L}} \left[\bar{y}_{\hat{M}_i} + (y_{\hat{M}_i} - y_{\hat{L}}) \right] + \\ &\quad \frac{1}{2} \frac{\partial^2 S_w}{\partial x^2} \Big|_{\hat{L}} \left[\bar{x}_{\hat{M}_i}^2 + 2\bar{x}_{\hat{M}_i} (x_{\hat{M}_i} - x_{\hat{L}}) + (x_{\hat{M}_i} - x_{\hat{L}})^2 \right] + \\ &\quad \frac{\partial^2 S_w}{\partial x \partial y} \Big|_{\hat{L}} \left[\bar{x}_{\hat{M}_i} \bar{y}_{\hat{M}_i} + \bar{x}_{\hat{M}_i} (y_{\hat{M}_i} - y_{\hat{L}}) + \bar{y}_{\hat{M}_i} (x_{\hat{M}_i} - x_{\hat{L}}) + (x_{\hat{M}_i} - x_{\hat{L}})(y_{\hat{M}_i} - y_{\hat{L}}) \right] + \\ &\quad \frac{1}{2} \frac{\partial^2 S_w}{\partial y^2} \Big|_{\hat{L}} \left[\bar{y}_{\hat{M}_i}^2 + 2\bar{y}_{\hat{M}_i} (y_{\hat{M}_i} - y_{\hat{L}}) + (y_{\hat{M}_i} - y_{\hat{L}})^2 \right] + \dots \end{aligned} \quad (C.9)$$

Assim como na equação (C.7), os termos $\overline{x^n y^m}_{\hat{M}_i}$ são valores integrais médios, calculados em cada volume de controle $\hat{M}_i$ seguindo a forma apresentada na equação (C.6). Os

termos $(x_{\hat{M}_i} - x_{\hat{L}})$ e $(y_{\hat{M}_i} - y_{\hat{L}})$ são constantes e podem ser avaliados fora da integral definida sobre o volume de controle $\hat{M}_i$. Adotando uma forma mais compacta de escrever os termos geométricos da equação (C.9) em um único parâmetro com a forma $\widehat{x^n y^m}_{\hat{L}, \hat{M}_i}$, a equação para cada volume de controle $\hat{M}_i$ é reescrita como segue:

$$\begin{aligned} \bar{S}_{w_{\hat{M}_i}} = & S_{w_{\hat{L}}} + \frac{\partial S_w}{\partial x} \bigg|_{\hat{L}} \hat{x}_{\hat{L}, \hat{M}_i} + \frac{\partial S_w}{\partial y} \bigg|_{\hat{L}} \hat{y}_{\hat{L}, \hat{M}_i} + \frac{1}{2} \frac{\partial^2 S_w}{\partial x^2} \bigg|_{\hat{L}} \widehat{x^2}_{\hat{L}, \hat{M}_i} + \frac{\partial^2 S_w}{\partial x \partial y} \bigg|_{\hat{L}} \widehat{xy}_{\hat{L}, \hat{M}_i} + \\ & \frac{1}{2} \frac{\partial^2 S_w}{\partial y^2} \bigg|_{\hat{L}} \widehat{y^2}_{\hat{L}, \hat{M}_i} + \frac{1}{6} \frac{\partial^3 S_w}{\partial x^3} \bigg|_{\hat{L}} \widehat{x^3}_{\hat{L}, \hat{M}_i} + \frac{1}{2} \frac{\partial^3 S_w}{\partial x^2 \partial y} \bigg|_{\hat{L}} \widehat{x^2 y}_{\hat{L}, \hat{M}_i} + \\ & \frac{1}{2} \frac{\partial^3 S_w}{\partial x \partial y^2} \bigg|_{\hat{L}} \widehat{xy^2}_{\hat{L}, \hat{M}_i} + \frac{1}{6} \frac{\partial^3 S_w}{\partial y^3} \bigg|_{\hat{L}} \widehat{y^3}_{\hat{L}, \hat{M}_i} + \dots \end{aligned} \quad (C.10)$$

onde os termos $\widehat{x^n y^m}_{\hat{L}, \hat{M}_i}$ são dados por:

$$\hat{x}_{\hat{L}, \hat{M}_i} = \bar{x}_{\hat{M}_i} + (x_{\hat{M}_i} - x_{\hat{L}}) \quad (C.11)$$

$$\hat{y}_{\hat{L}, \hat{M}_i} = \bar{y}_{\hat{M}_i} + (y_{\hat{M}_i} - y_{\hat{L}}) \quad (C.12)$$

$$\widehat{x^2}_{\hat{L}, \hat{M}_i} = \bar{x}_{\hat{M}_i}^2 + 2\bar{x}_{\hat{M}_i} (x_{\hat{M}_i} - x_{\hat{L}}) + (x_{\hat{M}_i} - x_{\hat{L}})^2 \quad (C.13)$$

$$\widehat{xy}_{\hat{L}, \hat{M}_i} = \bar{xy}_{\hat{M}_i} + \bar{x}_{\hat{M}_i} (y_{\hat{M}_i} - y_{\hat{L}}) + \bar{y}_{\hat{M}_i} (x_{\hat{M}_i} - x_{\hat{L}}) + (x_{\hat{M}_i} - x_{\hat{L}})(y_{\hat{M}_i} - y_{\hat{L}}) \quad (C.14)$$

$$\widehat{y^2}_{\hat{L}, \hat{M}_i} = \bar{y}_{\hat{M}_i}^2 + 2\bar{y}_{\hat{M}_i} (y_{\hat{M}_i} - y_{\hat{L}}) + (y_{\hat{M}_i} - y_{\hat{L}})^2 \quad (C.15)$$

$$\widehat{x^3}_{\hat{L}, \hat{M}_i} = \bar{x}_{\hat{M}_i}^3 + 3\bar{x}_{\hat{M}_i}^2 (x_{\hat{M}_i} - x_{\hat{L}}) + 3\bar{x}_{\hat{M}_i} (x_{\hat{M}_i} - x_{\hat{L}})^2 + (x_{\hat{M}_i} - x_{\hat{L}})^3 \quad (C.16)$$

$$\begin{aligned} \widehat{x^2 y}_{\hat{L}, \hat{M}_i} = & \bar{x}_{\hat{M}_i}^2 \bar{y}_{\hat{M}_i} + 2\bar{x}_{\hat{M}_i} \bar{y}_{\hat{M}_i} (x_{\hat{M}_i} - x_{\hat{L}}) + \bar{y}_{\hat{M}_i} (x_{\hat{M}_i} - x_{\hat{L}})^2 + \\ & \left[\bar{x}_{\hat{M}_i}^2 + 2\bar{x}_{\hat{M}_i} (x_{\hat{M}_i} - x_{\hat{L}}) + (x_{\hat{M}_i} - x_{\hat{L}})^2 \right] (y_{\hat{M}_i} - y_{\hat{L}}) \end{aligned} \quad (C.17)$$

$$\begin{aligned} \widehat{xy^2}_{\hat{L}, \hat{M}_i} = & \bar{xy}_{\hat{M}_i}^2 + 2\bar{xy}_{\hat{M}_i} (y_{\hat{M}_i} - y_{\hat{L}}) + \bar{x}_{\hat{M}_i} (y_{\hat{M}_i} - y_{\hat{L}})^2 + \\ & \left[\bar{y}_{\hat{M}_i}^2 + 2\bar{y}_{\hat{M}_i} (y_{\hat{M}_i} - y_{\hat{L}}) + (y_{\hat{M}_i} - y_{\hat{L}})^2 \right] (x_{\hat{M}_i} - x_{\hat{L}}) \end{aligned} \quad (C.18)$$

$$\widehat{y^3}_{\hat{L}, \hat{M}_i} = \bar{y}_{\hat{M}_i}^3 + 3\bar{y}_{\hat{M}_i}^2 (y_{\hat{M}_i} - y_{\hat{L}}) + 3\bar{y}_{\hat{M}_i} (y_{\hat{M}_i} - y_{\hat{L}})^2 + (y_{\hat{M}_i} - y_{\hat{L}})^3 \quad (C.19)$$

Uma forma mais geral de determinar os termos geométricos $\widehat{x^n y^m}_{\hat{L}, \hat{M}_i}$, válida para quaisquer pares de expoentes n, m , é apresentada por Goosh *et al.* (2007) como:

$$\widehat{x^n y^m}_{\hat{L}, \hat{M}_i} = \sum_{c=0}^m \left\{ \frac{m!}{c!(m-c)!} (y_{\hat{M}_i} - y_{\hat{L}})^c \sum_{k=0}^n \left[\frac{n!}{k!(n-k)!} (x_{\hat{M}_i} - x_{\hat{L}})^k \left(\overline{x^{n-k} y^{m-c}} \right)_{\hat{M}_i} \right] \right\} \quad (C.20)$$

O valor integral médio $\left(\overline{x^{n-k} y^{m-c}} \right)_{\hat{M}_i}$ na equação (C.20) também pode ser definido de uma forma generalizada, como:

$$\overline{x^g y^h}_{\hat{M}_i} = \sum_{l=0}^h \left\{ \frac{h!}{l!(h-l)!} (-y_{\hat{M}_i})^l \sum_{j=0}^g \left[\frac{g!}{j!(g-j)!} (-x_{\hat{M}_i})^j \frac{1}{\Omega_{\hat{M}_i}} \int_{\Omega_{\hat{M}_i}} x^{g-j} y^{h-l} d\Omega_{\hat{M}_i} \right] \right\} \quad (C.21)$$

Por fim, para escrever as equações de restrição que definem a FPR sem o termo pontual $S_{w_{\hat{L}}}$, com dependência apenas nos termos diferenciais e valores médios atribuídos aos volumes de controle do estêncil em $\hat{L}$, a subtração $\bar{S}_{w_{\hat{M}_i}} - \bar{S}_{w_{\hat{L}}}$ é feita para cada volume de controle $\hat{M}_i$ (Goosh, 1997). Os termos dessa subtração são dados pelas equações (C.10) e (C.7), respectivamente. Adicionalmente, um termo de ponderação $w_{\hat{L}, \hat{M}_i}$, proposto por Barth (1992) para aplicação em malhas não estruturadas, é considerado nas equações de restrição resultantes. Esse parâmetro reduz a influência de dados relacionados a volumes de controle distantes do volume de controle avaliado, mantendo a localidade da reconstrução, especialmente em malhas muito distorcidas (Ivan e Groth, 2011). O termo de ponderação para cada volume de controle da vizinhança de $\hat{L}$ é dado como:

$$w_{\hat{L}, \hat{M}_i} = \frac{1}{\left| \vec{X}_{\hat{M}_i} - \vec{X}_{\hat{L}} \right|^a} \quad (C.22)$$

Na equação (C.22), o expoente a pode elevar a influência do termo de ponderação $w_{\hat{L}, \hat{M}_i}$. Na literatura, esse parâmetro admite valores entre 0 e 2, sendo 0 a ausência da ponderação. Segundo Goosh *et al.* (2007), o valor ideal para se obter rapidamente a taxa de convergência do método é $a = 1$. Goosh e van Altena (2002) e Clain *et al.* (2011) usam $a = 2$.

Uma forma mais geral de apresentar a equação de restrição para cada volume de controle $\hat{M}_i$, que define a FPR do volume de controle $\hat{L}$ pode ser escrita na forma que segue (Ivan e Groth, 2011; Clain *et al.*, 2013):

$$w_{\hat{L}, \hat{M}_i} \left(\bar{S}_{w_{\hat{M}_i}} - \bar{S}_{w_{\hat{L}}} \right) = w_{\hat{L}, \hat{M}_i} \sum_{\alpha=1}^{\kappa} \sum_{\beta=1}^{\kappa} \frac{\partial^{\alpha+\beta} S_w}{\partial x^{\alpha} \partial y^{\beta}} \bigg|_{\hat{L}} \left(\widehat{x^{\alpha}}_{\hat{L}, \hat{M}_i} \widehat{y^{\beta}}_{\hat{L}, \hat{M}_i} - \overline{x^{\alpha}}_{\hat{L}} \overline{y^{\beta}}_{\hat{L}} \right) \quad (C.23)$$

onde κ é o grau do polinômio reconstrutor. Escrevendo a equação (C.23) para cada volume de controle $\hat{M}_i$, um sistema de equações algébricas local é produzido:

$$\mathbf{Y}\mathbf{U}\mathbf{d}=\mathbf{Y}\mathbf{b} \quad (\text{C.24})$$

onde $\mathbf{d}$ é o vetor de incógnitas a se determinar. Como já mencionado, essas são as derivadas de S_w até a ordem compatível com a aproximação desejada. Os valores médios $\bar{S}_{w_{\hat{M}_i}}$ e $\bar{S}_{w_{\hat{L}}}$ são conhecidos da condição inicial ou do passo de tempo vigente. Sua diferença, como estabelecido na equação (C.23), constitui o vetor de termos conhecidos $\mathbf{b}$. Os termos que compõem a matriz $\mathbf{U}$ são de natureza geométrica e, portanto, também conhecidos. A matriz quadrada diagonal $\mathbf{Y}$ contém os parâmetros $w_{\hat{L},\hat{M}_i}$ referentes a cada volume de controle da vizinhança considerada.

Tomando como exemplo uma FPR de terceiro grau, que produz uma aproximação de quarta ordem nos fluxos numéricos, o sistema algébrico local apresentado na equação (C.24), para um estêncil de $\mathcal{N}_{viz} + 1$ volumes de controle (o avaliado e seus vizinhos) é dado como:

$$\mathbf{U} = \begin{bmatrix} \mathbf{U}_1^{[\mathcal{N}_{viz},2]} & \mathbf{U}_2^{[\mathcal{N}_{viz},3]} & \mathbf{U}_3^{[\mathcal{N}_{viz},4]} \end{bmatrix} \quad (\text{C.25})$$

$$\mathbf{d} = \left\{ \frac{\partial S_w}{\partial x}, \frac{\partial S_w}{\partial y}, \frac{1}{2} \frac{\partial^2 S_w}{\partial x^2}, \frac{\partial^2 S_w}{\partial x \partial y}, \frac{1}{2} \frac{\partial^2 S_w}{\partial y^2}, \frac{1}{6} \frac{\partial^3 S_w}{\partial x^3}, \frac{1}{2} \frac{\partial^3 S_w}{\partial x^2 \partial y}, \frac{1}{2} \frac{\partial^3 S_w}{\partial x \partial y^2}, \frac{1}{6} \frac{\partial^3 S_w}{\partial y^3} \right\}_{\hat{L}}^T \quad (\text{C.26})$$

$$\mathbf{b} = \left\{ \left(\bar{S}_{w_{\hat{M}_1}} - \bar{S}_{w_{\hat{L}}} \right), \left(\bar{S}_{w_{\hat{M}_2}} - \bar{S}_{w_{\hat{L}}} \right), \left(\bar{S}_{w_{\hat{M}_3}} - \bar{S}_{w_{\hat{L}}} \right), \dots, \left(\bar{S}_{w_{\hat{M}_{\mathcal{N}_{viz}}}} - \bar{S}_{w_{\hat{L}}} \right) \right\}^T \quad (\text{C.27})$$

$$\mathbf{Y} = \begin{bmatrix} w_{\hat{L},\hat{M}_1} & 0 & \dots & 0 \\ 0 & w_{\hat{L},\hat{M}_2} & \dots & 0 \\ & & \ddots & \\ 0 & \dots & 0 & w_{\hat{L},\hat{M}_{\mathcal{N}_{viz}}} \end{bmatrix} \quad (\text{C.28})$$

As matrizes $\mathbf{U}_1^{[\mathcal{N}_{viz},2]}$, $\mathbf{U}_2^{[\mathcal{N}_{viz},3]}$ e $\mathbf{U}_3^{[\mathcal{N}_{viz},4]}$ da equação (C.25), com tamanhos $\mathcal{N}_{viz}$ linhas por 2, 3 e 4 colunas, respectivamente, têm suas entradas dispostas na forma que segue:

$$\mathbf{U}_1^{[\mathcal{N}_{viz},2]} = \begin{bmatrix} \left(\hat{x}_{\hat{L},\hat{M}_1} - \bar{x}_{\hat{L}} \right) & \left(\hat{y}_{\hat{L},\hat{M}_1} - \bar{y}_{\hat{L}} \right) \\ \left(\hat{x}_{\hat{L},\hat{M}_2} - \bar{x}_{\hat{L}} \right) & \left(\hat{y}_{\hat{L},\hat{M}_2} - \bar{y}_{\hat{L}} \right) \\ \left(\hat{x}_{\hat{L},\hat{M}_3} - \bar{x}_{\hat{L}} \right) & \left(\hat{y}_{\hat{L},\hat{M}_3} - \bar{y}_{\hat{L}} \right) \\ \vdots & \vdots \\ \left(\hat{x}_{\hat{L},\hat{M}_{\mathcal{N}_{viz}}} - \bar{x}_{\hat{L}} \right) & \left(\hat{y}_{\hat{L},\hat{M}_{\mathcal{N}_{viz}}} - \bar{y}_{\hat{L}} \right) \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} \left(x_{\hat{M}_1} - x_{\hat{L}} \right) & \left(y_{\hat{M}_1} - y_{\hat{L}} \right) \\ \left(x_{\hat{M}_2} - x_{\hat{L}} \right) & \left(y_{\hat{M}_2} - y_{\hat{L}} \right) \\ \left(x_{\hat{M}_3} - x_{\hat{L}} \right) & \left(y_{\hat{M}_3} - y_{\hat{L}} \right) \\ \vdots & \vdots \\ \left(x_{\hat{M}_{\mathcal{N}_{viz}}} - x_{\hat{L}} \right) & \left(y_{\hat{M}_{\mathcal{N}_{viz}}} - y_{\hat{L}} \right) \end{bmatrix} \quad (\text{C.29})$$

$$\mathbf{U}_2^{[\mathcal{N}_{viz}, 3]} = \begin{bmatrix} \left(\widehat{x^2}_{\hat{L}, \hat{M}_1} - \overline{x^2_{\hat{L}}} \right) & \left(\widehat{xy}_{\hat{L}, \hat{M}_1} - \overline{xy_{\hat{L}}} \right) & \left(\widehat{y^2}_{\hat{L}, \hat{M}_1} - \overline{y^2_{\hat{L}}} \right) \\ \left(\widehat{x^2}_{\hat{L}, \hat{M}_2} - \overline{x^2_{\hat{L}}} \right) & \left(\widehat{xy}_{\hat{L}, \hat{M}_2} - \overline{xy_{\hat{L}}} \right) & \left(\widehat{y^2}_{\hat{L}, \hat{M}_2} - \overline{y^2_{\hat{L}}} \right) \\ \left(\widehat{x^2}_{\hat{L}, \hat{M}_3} - \overline{x^2_{\hat{L}}} \right) & \left(\widehat{xy}_{\hat{L}, \hat{M}_3} - \overline{xy_{\hat{L}}} \right) & \left(\widehat{y^2}_{\hat{L}, \hat{M}_3} - \overline{y^2_{\hat{L}}} \right) \\ \vdots & \vdots & \vdots \\ \left(\widehat{x^2}_{\hat{L}, \hat{M}_{\mathcal{N}_{viz}}} - \overline{x^2_{\hat{L}}} \right) & \left(\widehat{xy}_{\hat{L}, \hat{M}_{\mathcal{N}_{viz}}} - \overline{xy_{\hat{L}}} \right) & \left(\widehat{y^2}_{\hat{L}, \hat{M}_{\mathcal{N}_{viz}}} - \overline{y^2_{\hat{L}}} \right) \end{bmatrix} \quad (\text{C.30})$$

$$\mathbf{U}_3^{[\mathcal{N}_{viz}, 4]} = \begin{bmatrix} \left(\widehat{x^3}_{\hat{L}, \hat{M}_1} - \overline{x^3_{\hat{L}}} \right) & \left(\widehat{x^2 y}_{\hat{L}, \hat{M}_1} - \overline{x^2 y_{\hat{L}}} \right) & \left(\widehat{xy^2}_{\hat{L}, \hat{M}_1} - \overline{xy^2_{\hat{L}}} \right) & \left(\widehat{y^3}_{\hat{L}, \hat{M}_1} - \overline{y^3_{\hat{L}}} \right) \\ \left(\widehat{x^3}_{\hat{L}, \hat{M}_2} - \overline{x^3_{\hat{L}}} \right) & \left(\widehat{x^2 y}_{\hat{L}, \hat{M}_2} - \overline{x^2 y_{\hat{L}}} \right) & \left(\widehat{xy^2}_{\hat{L}, \hat{M}_2} - \overline{xy^2_{\hat{L}}} \right) & \left(\widehat{y^3}_{\hat{L}, \hat{M}_2} - \overline{y^3_{\hat{L}}} \right) \\ \left(\widehat{x^3}_{\hat{L}, \hat{M}_3} - \overline{x^3_{\hat{L}}} \right) & \left(\widehat{x^2 y}_{\hat{L}, \hat{M}_3} - \overline{x^2 y_{\hat{L}}} \right) & \left(\widehat{xy^2}_{\hat{L}, \hat{M}_3} - \overline{xy^2_{\hat{L}}} \right) & \left(\widehat{y^3}_{\hat{L}, \hat{M}_3} - \overline{y^3_{\hat{L}}} \right) \\ \vdots & \vdots & \vdots & \vdots \\ \left(\widehat{x^3}_{\hat{L}, \hat{M}_{\mathcal{N}_{viz}}} - \overline{x^3_{\hat{L}}} \right) & \dots & \dots & \left(\widehat{y^3}_{\hat{L}, \hat{M}_{\mathcal{N}_{viz}}} - \overline{y^3_{\hat{L}}} \right) \end{bmatrix} \quad (\text{C.31})$$

Na equação (C.29), a matriz apresentada no lado direito, expressando apenas diferenças entre coordenadas, é consequência do primeiro momento de área nas duas coordenadas consideradas ser nulo, ou seja, $\bar{x}_{\hat{L}} = \bar{y}_{\hat{L}} = \bar{x}_{M_i} = \bar{y}_{M_i} = 0$ (Goosh, 1997). Isso ocorre quando o ponto de colocação $\bar{x}_{\hat{L}}$ é definido no baricentro do volume de controle. Essa forma de apresentar as entradas do sistema algébrico local é comum em procedimentos de reconstrução com acurácia apenas de segunda ordem (Blazek, 2001; Long *et al.*, 2009; Caraeni e Hill, 2010; Diaz *et al.*, 2009; Mandal e Rao, 2011).

Tratamento de Volumes de Controle Adjacentes ao Contorno

Nos casos em que o volume de controle avaliado recebe influência do contorno, há duas formas (contorno de Dirichlet e de Neumann) dessa restrição ser incorporada ao sistema algébrico local correspondente (Goosh e Van Altena, 2002). Seguindo o procedimento descrito em (Goosh e van Altena, 2002), nos contornos de Dirichlet, a equação (C.10) é reescrita para cada ponto de quadratura estabelecido sobre a superfície de controle avaliada (ver figura C.2a).

A quantidade de pontos de quadratura em cada superfície IJ depende da ordem de aproximação pretendida para a FPR (Goosh *et al.*, 2007). Em cada uma dessas equações, o valor médio $\bar{S}_{w_{M_i}}$, apresentado na equação (C.10), é substituído pelo valor prescrito de saturação de água $\bar{S}_{w_{\bar{C}_j}}$, atribuído ao j -ésimo ponto de quadratura sobre a superfície avaliada, com

$j=1, \dots, \mathcal{N}_q$ (número de pontos de quadratura). Os termos $\widehat{x^n y^m}_{\hat{L}, \hat{M}_i}$, também presentes na equação (C.10), são substituídos pela diferença $\left(x_{\bar{C}_j} - x_{\hat{L}} \right)^n \left(y_{\bar{C}_j} - y_{\hat{L}} \right)^m$, uma vez que essa é constante nas integrais apresentadas na equação (C.8). Vale ressaltar que n e m variam de 0 até o grau κ da derivada considerada, como se vê na equação (C.20). Tendo como referência

a superfície de controle IJ , ilustrada na figura C.2a, suas equações de restrição são obtidas como segue:

$$\begin{aligned}
 w_{\hat{L}, \bar{C}_j} (S_{w_{\bar{C}_j}} - \bar{S}_{w_{\hat{L}}}) = w_{\hat{L}, \bar{C}_j} \left\{ \frac{\partial S_w}{\partial x} \bigg|_{\hat{L}} (x_{\bar{C}_j} - x_{\hat{L}}) + \frac{\partial S_w}{\partial y} \bigg|_{\hat{L}} (y_{\bar{C}_j} - y_{\hat{L}}) + \frac{1}{2} \frac{\partial^2 S_w}{\partial x^2} \bigg|_{\hat{L}} \left[(x_{\bar{C}_j} - x_{\hat{L}})^2 - \overline{x_{\hat{L}}^2} \right] + \right. \\
 \left. \frac{\partial^2 S_w}{\partial x \partial y} \bigg|_{\hat{L}} \left[(x_{\bar{C}_j} - x_{\hat{L}})(y_{\bar{C}_j} - y_{\hat{L}}) - \overline{xy_{\hat{L}}} \right] + \frac{1}{2} \frac{\partial^2 S_w}{\partial y^2} \bigg|_{\hat{L}} \left[(y_{\bar{C}_j} - y_{\hat{L}})^2 - \overline{y_{\hat{L}}^2} \right] + \right. \\
 \left. \frac{1}{6} \frac{\partial^3 S_w}{\partial x^3} \bigg|_{\hat{L}} \left[(x_{\bar{C}_j} - x_{\hat{L}})^3 - \overline{x_{\hat{L}}^3} \right] + \frac{1}{2} \frac{\partial^3 S_w}{\partial x^2 \partial y} \bigg|_{\hat{L}} \left[(x_{\bar{C}_j} - x_{\hat{L}})^2 (y_{\bar{C}_j} - y_{\hat{L}}) - \overline{x^2 y_{\hat{L}}} \right] + \right. \\
 \left. \frac{1}{2} \frac{\partial^3 S_w}{\partial x \partial y^2} \bigg|_{\hat{L}} \left[(x_{\bar{C}_j} - x_{\hat{L}})(y_{\bar{C}_j} - y_{\hat{L}})^2 - \overline{xy_{\hat{L}}^2} \right] + \frac{1}{6} \frac{\partial^3 S_w}{\partial y^3} \bigg|_{\hat{L}} \left[(y_{\bar{C}_j} - y_{\hat{L}})^3 - \overline{y_{\hat{L}}^3} \right] \right\}
 \end{aligned} \quad (C.32)$$

Assim como feito na equação (C.23), o valor de saturação no ponto $\bar{x}_{\hat{L}}$ ($S_{w_{\hat{L}}}$) é eliminado pela subtração da equação (C.7).

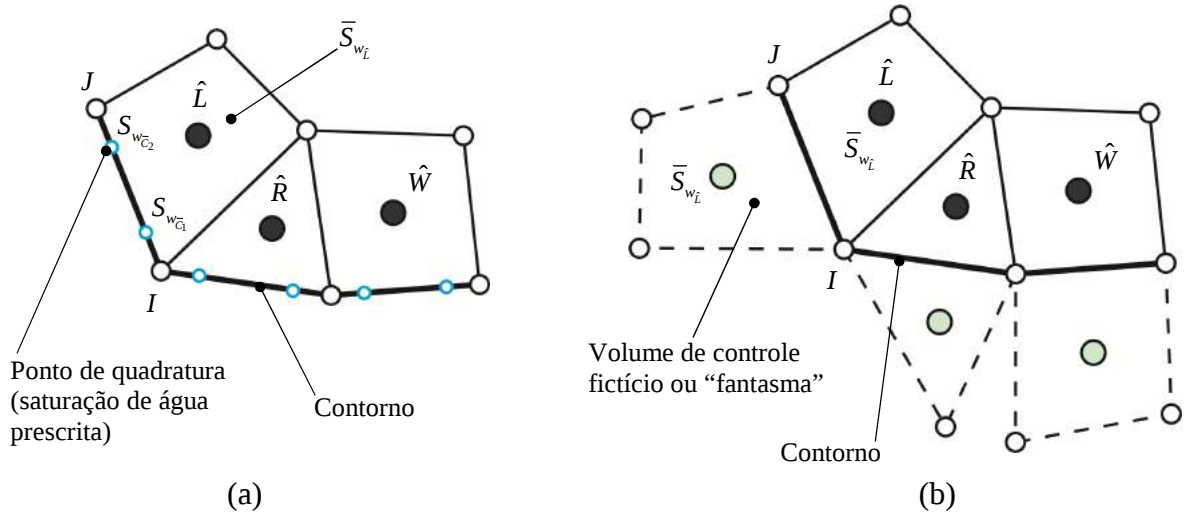


Figura C.2. Fragmento de malha adjacente ao contorno com indicação da aresta avaliada IJ : (a) para saturação prescrita nos pontos de quadratura; (b) para o uso de volumes de controle fictícios em contornos onde um fluxo nulo ou simetria é prescrito.

Nas faces onde uma condição de fluxo nulo é prescrita (rocha selante ou simetria de domínio), volumes de controle fictícios ou “fantasma” são utilizados (LeVeque, 2002), tal como ilustrado na figura C.2b. Devido à simetria ou variação nula da variável, imposta sobre a face IJ , as saturações de água nos volumes de controle $\hat{L}$ e $\hat{M}_i$ são iguais, logo $\bar{S}_{w_{\hat{M}_i}} - \bar{S}_{w_{\hat{L}}} = 0$. A equação (C.23) é então reescrita como segue:

$$w_{\hat{L}, \hat{M}_i} \sum_{\alpha=1}^{\kappa} \sum_{\beta=1}^{\kappa} \frac{\partial^{\alpha+\beta} S_w}{\partial x^{\alpha} \partial y^{\beta}} \bigg|_{\hat{L}} \left(\widehat{x_{\hat{L}, \hat{M}_i}^{\alpha}} \widehat{y_{\hat{L}, \hat{M}_i}^{\beta}} - \overline{x_{\hat{L}}^{\alpha} y_{\hat{L}}^{\beta}} \right) = 0 \quad (C.33)$$

Goosh e van Altena (2002) também discutem a imposição de condições de contorno com fluxo não nulo prescrito. No entanto, essa restrição não é aplicável à física aqui simulada (no que se refere à equação hiperbólica de saturação, obviamente).

Técnica de Mínimos Quadrados Aplicada à Reconstrução Polinomial

Uma vez definido o sistema algébrico local, apresentado na equação (C.24), é frequente que o número de equações de restrição seja superior ao número de incógnitas (coeficientes da FPR). O sistema algébrico torna-se, portanto, sobre determinado. A técnica de Mínimos Quadrados tem sido usada para resolver o sistema algébrico apresentado na equação (C.24) (Barth, 1991; Barth, 1992; Goosh, 1997; Goosh e van Altena, 2002; Mavriplis, 2003; Bertolazzi e Manzini, 2004; Diaz *et al.*, 2009; Caraeni e Hill, 2010; Mandal e Rao, 2011).

Procedimentos como decomposição ortogonal de Gram-Schmidt (Anderson e Bohnhaus, 1994 *apud* Blazek, 2001) e o algoritmo de fatoração Householder (Lawson e Hanson, 1974) minimizam o erro entre a matriz $\mathbf{X} = \mathbf{YU}$ e o vetor de termos conhecidos $\mathbf{a} = \mathbf{Yb}$, por meio da decomposição da matriz $\mathbf{X}$ em uma matriz ortogonal $\mathbf{Q}$ e uma matriz triangular $\mathbf{R}$, sendo $\mathbf{X} = \mathbf{QR}$. Dessa forma, o vetor de incógnitas que define a FPR pode ser calculado da seguinte forma:

$$\mathbf{d} = \mathbf{R}^{-1}\mathbf{Q}^T \mathbf{a} \quad \text{ou} \quad \mathbf{d} = \mathbf{R}^{-1}\mathbf{Q}^T (\mathbf{Yb}) \quad (\text{C.34})$$

Seguindo o algoritmo obtido em (<http://ocw.mit.edu>, 2010), a decomposição ortogonal de Gram-Schmidt (adotada no presente trabalho) é feita como descrito na figura C.3:

Descrição do algoritmo em linguagem Matlab®	
$[\mathcal{N}_{Row}, \mathcal{N}_{Col}] = \text{size}(\underline{\mathbf{A}});$	Obtém o número de linhas e colunas de $\underline{\mathbf{A}}$
$\underline{\mathbf{Q}} = \text{zeros}(\mathcal{N}_{Row}, \mathcal{N}_{Col});$	Inicializa a matriz $\underline{\mathbf{Q}}$
$\underline{\mathbf{R}} = \text{zeros}(\mathcal{N}_{Col}, \mathcal{N}_{Col});$	Inicializa a matriz $\underline{\mathbf{R}}$
for $i_{cont} = 1 : \mathcal{N}_{Col}$	Varre as $\mathcal{N}_{Col}$ colunas da matriz $\underline{\mathbf{A}}$
$\chi = \underline{\mathbf{A}}(:, i);$	Obtém o valor de χ para cada coluna de $\underline{\mathbf{A}}$
for $j_{cont} = 1 : \mathcal{N}_{Col} - 1$	Faz χ perpendicular a $\underline{\mathbf{Q}}(:, 1 : \mathcal{N}_{Col} - 1)$
$\underline{\mathbf{R}}(j_{cont}, i_{cont}) = \underline{\mathbf{Q}}(:, j_{cont})' * \chi;$	
$\chi = \chi - \underline{\mathbf{R}}(j_{cont}, i_{cont}) * \underline{\mathbf{Q}}(:, j_{cont});$	
End	
$\underline{\mathbf{R}}(i_{cont}, i_{cont}) = \text{norm}(\chi);$	
$\underline{\mathbf{Q}}(:, i_{cont}) = \chi / \underline{\mathbf{R}}(i_{cont}, i_{cont});$	Normaliza χ
End	

Figura C.3. Descrição do algoritmo para decomposição ortogonal de Gram-Schmidt. O texto em negrito, azul, é uma referência a comandos do Matlab® (<http://ocw.mit.edu>, 2010).

Maiores detalhes sobre as expressões que definem as entradas das matrizes $\mathbf{Q}$ e $\mathbf{R}$, inclusive para aplicações em três dimensões, pode ser encontrado em (Blazek, 2001).

Uma vez que os coeficientes da FPR são conhecidos, o valor da variável primária, bem como de suas derivadas, podem ser facilmente obtidos, por meio de extrapolação, em qualquer ponto do volume de controle avaliado (Goosh e van Altena, 2002).

Apêndice D

Dados Complementares aos Exemplos Numéricos

No presente apêndice, tabelas e gráficos complementam alguns resultados apresentados no capítulo 4.

Erros e Taxas de Convergência para a Solução do Modelo de Buckley-Leverett

As 12 tabelas apresentadas nessa seção são referentes ao exemplo numérico apresentado na seção 4.3.1. Nessas tabelas, erros, calculados segundo a norma L_1 , e taxas de convergência são obtidos para a solução numérica do modelo de Buckley-Leverett. Aproximações de 1ª a 4ª ordem são avaliadas. Nas aproximações de alta ordem (2ª a 4ª no espaço), os resultados obtidos com a extrapolação das variáveis S_w e f_w são comparados. Diferentes estratégias de limitação para essas extrapolações também são investigadas. Por fim, os resultados obtidos com a aproximação de alta ordem no tempo, utilizando o método de Runge-Kutta, são comparados àqueles obtidos com a tradicional aproximação de primeira ordem do tipo Euler Progressivo.

Tabela D.1. Aproximação de 1ª ordem no espaço e Euler progressivo no tempo para o modelo de Buckley-Leverett.

Número de Subdivisões	$E_{L_1}^{S_w}$	$R_{L_1}^{S_w}$
16	$5,42 \times 10^{-2}$	----
32	$3,29 \times 10^{-2}$	$7,20 \times 10^{-1}$
64	$2,78 \times 10^{-2}$	$2,43 \times 10^{-1}$
128	$1,23 \times 10^{-2}$	1,17
256	$9,33 \times 10^{-3}$	$3,98 \times 10^{-1}$

Tabela D.2. Aproximação de 2ª ordem no espaço e Euler progressivo no tempo para o modelo de Buckley-Leverett. Os resultados obtidos com extrapolação do tipo MUSCL em S_w e f_w são, respectivamente, apresentados à esquerda e à direita da tabela. Ambos limitados com a estratégia van Albada.

Número de Subdivisões	Reconstrução em S_w		Reconstrução em f_w	
	$E_{L_1}^{S_w}$	$R_{L_1}^{S_w}$	$E_{L_1}^{S_w}$	$R_{L_1}^{S_w}$
16	$2,79 \times 10^{-2}$	----	$3,11 \times 10^{-2}$	----
32	$2,04 \times 10^{-2}$	$4,51 \times 10^{-1}$	$1,81 \times 10^{-2}$	$2,35 \times 10^{-1}$
64	$9,50 \times 10^{-3}$	1,10	$1,10 \times 10^{-2}$	$7,18 \times 10^{-1}$
128	$6,11 \times 10^{-3}$	$6,36 \times 10^{-1}$	$4,81 \times 10^{-3}$	1,19
256	$2,47 \times 10^{-3}$	1,30	$2,55 \times 10^{-3}$	$9,15 \times 10^{-1}$

Tabela D.3. Aproximação de 2ª ordem no espaço e Euler progressivo no tempo para o modelo de Buckley-Leverett. Os resultados obtidos com extrapolação do tipo MUSCL em S_w e f_w são, respectivamente, apresentados à esquerda e à direita da tabela. Ambos limitados com a estratégia MLP.

Número de Subdivisões	Reconstrução em S_w		Reconstrução em f_w	
	$E_{L_1}^{S_w}$	$R_{L_1}^{S_w}$	$E_{L_1}^{S_w}$	$R_{L_1}^{S_w}$
16	$4,25 \times 10^{-2}$	----	$2,96 \times 10^{-2}$	----
32	$3,20 \times 10^{-2}$	$4,09 \times 10^{-1}$	$2,27 \times 10^{-2}$	$3,82 \times 10^{-1}$
64	$1,04 \times 10^{-2}$	1,62	$9,40 \times 10^{-3}$	1,27
128	$1,15 \times 10^{-2}$	$-1,45 \times 10^{-1}$	$8,69 \times 10^{-3}$	$1,13 \times 10^{-1}$
256	$4,15 \times 10^{-3}$	1,47	$3,06 \times 10^{-3}$	1,50

Tabela D.4. Aproximação de 3ª ordem no espaço e Euler progressivo no tempo para o modelo de Buckley-Leverett. Os resultados obtidos com extrapolação do tipo MUSCL em S_w e f_w são, respectivamente, apresentados à esquerda e à direita da tabela. Ambos limitados com a estratégia MLP.

Número de Subdivisões	Reconstrução em S_w		Reconstrução em f_w	
	$E_{L_1}^{S_w}$	$R_{L_1}^{S_w}$	$E_{L_1}^{S_w}$	$R_{L_1}^{S_w}$
16	$4,43 \times 10^{-2}$	----	$2,69 \times 10^{-2}$	----
32	$3,35 \times 10^{-2}$	$4,03 \times 10^{-1}$	$1,87 \times 10^{-2}$	$5,24 \times 10^{-1}$
64	$1,07 \times 10^{-2}$	1,64	$9,30 \times 10^{-3}$	1,00
128	$1,14 \times 10^{-2}$	$-9,14 \times 10^{-2}$	$6,34 \times 10^{-3}$	$5,52 \times 10^{-1}$
256	$4,06 \times 10^{-3}$	1,48	$2,57 \times 10^{-3}$	1,30

Tabela D.5. Aproximação de 4ª ordem no espaço e Euler progressivo no tempo para o modelo de Buckley-Leverett. Os resultados obtidos com extrapolação do tipo MUSCL em S_w e f_w são, respectivamente, apresentados à esquerda e à direita da tabela. A estratégia MLP e um estêncil com viés à montante são utilizados.

Número de Subdivisões	Reconstrução em S_w		Reconstrução em f_w	
	$E_{L_1}^{S_w}$	$R_{L_1}^{S_w}$	$E_{L_1}^{S_w}$	$R_{L_1}^{S_w}$
16	$6,13 \times 10^{-2}$	----	$2,42 \times 10^{-2}$	----
32	$5,29 \times 10^{-2}$	$2,12 \times 10^{-1}$	$1,61 \times 10^{-2}$	$5,87 \times 10^{-1}$
64	$2,95 \times 10^{-2}$	$8,42 \times 10^{-1}$	$9,20 \times 10^{-3}$	$8,07 \times 10^{-1}$
128	$2,81 \times 10^{-2}$	$7,01 \times 10^{-2}$	$4,68 \times 10^{-3}$	$9,75 \times 10^{-1}$
256	$4,59 \times 10^{-3}$	2,61	$2,12 \times 10^{-3}$	1,14

Tabela D.6. Aproximação de 4ª ordem no espaço e Euler progressivo no tempo para o modelo de Buckley-Leverett. Os resultados obtidos com extrapolação do tipo MUSCL em S_w e f_w são, respectivamente, apresentados à esquerda e à direita da tabela. A estratégia MLP e um estêncil convencional são utilizados.

Número de Subdivisões	Reconstrução em S_w		Reconstrução em f_w	
	$E_{L_1}^{S_w}$	$R_{L_1}^{S_w}$	$E_{L_1}^{S_w}$	$R_{L_1}^{S_w}$
16	$4,71 \times 10^{-2}$	----	$2,48 \times 10^{-2}$	----
32	$2,97 \times 10^{-2}$	$6,65 \times 10^{-1}$	$1,42 \times 10^{-2}$	$8,04 \times 10^{-1}$
64	$2,79 \times 10^{-2}$	$9,01 \times 10^{-2}$	$1,14 \times 10^{-2}$	$3,16 \times 10^{-1}$
128	$7,74 \times 10^{-3}$	1,84	$4,53 \times 10^{-3}$	1,33
256	$3,46 \times 10^{-3}$	1,16	$3,34 \times 10^{-3}$	$4,39 \times 10^{-1}$

Tabela D.7. Aproximação de 2ª ordem no espaço e Euler progressivo no tempo para o modelo de Buckley-Leverett. Os resultados obtidos com extrapolação do tipo MUSCL em S_w e f_w são, respectivamente, apresentados à esquerda e à direita da tabela. Ambos limitados com a estratégia MLP-vk.

Número de Subdivisões	Reconstrução em S_w		Reconstrução em f_w	
	$E_{L_1}^{S_w}$	$R_{L_1}^{S_w}$	$E_{L_1}^{S_w}$	$R_{L_1}^{S_w}$
16	$2,61 \times 10^{-2}$	----	$2,43 \times 10^{-2}$	----
32	$2,00 \times 10^{-2}$	$3,84 \times 10^{-1}$	$1,46 \times 10^{-2}$	$7,34 \times 10^{-1}$
64	$8,36 \times 10^{-3}$	1,25	$9,24 \times 10^{-3}$	$6,60 \times 10^{-1}$
128	$6,19 \times 10^{-3}$	$4,33 \times 10^{-1}$	$4,29 \times 10^{-3}$	1,10
256	$2,24 \times 10^{-3}$	1,46	$2,27 \times 10^{-3}$	$9,18 \times 10^{-1}$

Tabela D.8. Aproximação de 3ª ordem no espaço e Euler progressivo no tempo para o modelo de Buckley-Leverett. Os resultados obtidos com extrapolação do tipo MUSCL em S_w e f_w são, respectivamente, apresentados à esquerda e à direita da tabela. Ambos limitados com a estratégia MLP-vk.

Número de Subdivisões	Reconstrução em S_w		Reconstrução em f_w	
	$E_{L_1}^{S_w}$	$R_{L_1}^{S_w}$	$E_{L_1}^{S_w}$	$R_{L_1}^{S_w}$
16	$2,92 \times 10^{-2}$	----	$3,10 \times 10^{-2}$	----
32	$2,20 \times 10^{-2}$	$4,08 \times 10^{-1}$	$1,68 \times 10^{-2}$	$8,83 \times 10^{-1}$
64	$8,93 \times 10^{-3}$	1,30	$1,19 \times 10^{-2}$	$4,97 \times 10^{-1}$
128	$6,55 \times 10^{-3}$	$4,47 \times 10^{-1}$	$4,36 \times 10^{-3}$	1,44
256	$2,35 \times 10^{-3}$	1,497	$2,79 \times 10^{-3}$	$6,44 \times 10^{-1}$

Tabela D.9. Aproximação de 4ª ordem no espaço e Euler progressivo no tempo para o modelo de Buckley-Leverett. Os resultados obtidos com extrapolação do tipo MUSCL em S_w e f_w são, respectivamente, apresentados à esquerda e à direita da tabela. A estratégia MLP-vk e um estêncil com viés à montante são utilizados.

Número de Subdivisões	Reconstrução em S_w		Reconstrução em f_w	
	$E_{L_1}^{S_w}$	$R_{L_1}^{S_w}$	$E_{L_1}^{S_w}$	$R_{L_1}^{S_w}$
16	$5,38 \times 10^{-2}$	----	$2,66 \times 10^{-2}$	----
32	$4,85 \times 10^{-2}$	$1,49 \times 10^{-1}$	$1,50 \times 10^{-2}$	$8,26 \times 10^{-1}$
64	$2,76 \times 10^{-2}$	$8,13 \times 10^{-1}$	$1,06 \times 10^{-2}$	$5,00 \times 10^{-1}$
128	$2,62 \times 10^{-2}$	$7,51 \times 10^{-1}$	$4,30 \times 10^{-3}$	1,30
256	$3,62 \times 10^{-3}$	2,85	$2,75 \times 10^{-3}$	$6,44 \times 10^{-1}$

Tabela D.10. Aproximação de 4ª ordem no espaço e Euler progressivo no tempo para o modelo de Buckley-Leverett. Os resultados obtidos com extrapolação do tipo MUSCL em S_w e f_w são, respectivamente, apresentados à esquerda e à direita da tabela. A estratégia MLP-vk e um estêncil convencional são utilizados.

Número de Subdivisões	Reconstrução em S_w		Reconstrução em f_w	
	$E_{L_1}^{S_w}$	$R_{L_1}^{S_w}$	$E_{L_1}^{S_w}$	$R_{L_1}^{S_w}$
16	$3,64 \times 10^{-2}$	----	$2,47 \times 10^{-2}$	----
32	$2,33 \times 10^{-2}$	$6,43 \times 10^{-1}$	$1,51 \times 10^{-2}$	$7,09 \times 10^{-1}$
64	$1,17 \times 10^{-2}$	$9,93 \times 10^{-1}$	$1,41 \times 10^{-2}$	$9,88 \times 10^{-2}$
128	$6,46 \times 10^{-3}$	$8,56 \times 10^{-1}$	$5,24 \times 10^{-3}$	1,42
256	$3,42 \times 10^{-3}$	$9,17 \times 10^{-1}$	$3,79 \times 10^{-3}$	$4,67 \times 10^{-1}$

Tabela D.11. Aproximação de 2ª ordem no espaço e Runge-Kutta (2ª ordem) no tempo para o modelo de Buckley-Leverett. Os resultados obtidos com extrapolação do tipo MUSCL em S_w (limitada com van Albada) e em f_w (limitada com MLP-vk) são, respectivamente, apresentados à esquerda e à direita da tabela.

Número de Subdivisões	2ª Ordem (RK 2ª Ordem) Reconstrução em S_w (van Albada)		2ª Ordem (RK 2ª Ordem) Reconstrução em f_w (MLP-vk)	
	$E_{L_1}^{S_w}$	$R_{L_1}^{S_w}$	$E_{L_1}^{S_w}$	$R_{L_1}^{S_w}$
16	$2,81 \times 10^{-2}$	----	$3,56 \times 10^{-2}$	----
32	$1,75 \times 10^{-2}$	$6,83 \times 10^{-1}$	$1,92 \times 10^{-2}$	$8,90 \times 10^{-1}$
64	$1,17 \times 10^{-2}$	$5,80 \times 10^{-1}$	$1,45 \times 10^{-2}$	$4,05 \times 10^{-1}$
128	$4,92 \times 10^{-3}$	1,24	$5,41 \times 10^{-3}$	1,42
256	$3,20 \times 10^{-3}$	$6,20 \times 10^{-1}$	$3,93 \times 10^{-3}$	$4,61 \times 10^{-1}$

Tabela D.12. Aproximações de 3ª e 4ª ordem no espaço e Runge-Kutta de 2ª ordem no tempo para o modelo de Buckley-Leverett. Os resultados são obtidos com extrapolação do tipo MUSCL em f_w e estratégia MLP.

Número de Sub-divisões	3ª Ordem (RK 2ª Ordem) Reconstrução em f_w (MLP)		4ª Ordem com estêncil à montante (RK 2ª Ordem) Reconstrução em f_w (MLP)	
	$E_{L_1}^{S_w}$	$R_{L_1}^{S_w}$	$E_{L_1}^{S_w}$	$R_{L_1}^{S_w}$
16	$2,72 \times 10^{-2}$	----	$2,69 \times 10^{-2}$	----
32	$1,68 \times 10^{-2}$	$6,95 \times 10^{-1}$	$1,54 \times 10^{-2}$	$8,04 \times 10^{-1}$
64	$9,95 \times 10^{-3}$	$7,55 \times 10^{-1}$	$1,05 \times 10^{-2}$	$5,52 \times 10^{-1}$
128	$4,84 \times 10^{-3}$	1,03	$4,10 \times 10^{-3}$	1,35
256	$2,51 \times 10^{-3}$	$9,47 \times 10^{-1}$	$2,77 \times 10^{-3}$	$5,65 \times 10^{-1}$

Valores Randômicos Empregados na Definição de um Campo de Permeabilidade Altamente Heterogêneo

A tabela D.13 é referente ao problema da seção 4.3.3, obtido de Chueh *et al.*, 2010. Coordenadas de 40 pontos são obtidas randomicamente para a variável $\bar{x}_{rand}$ na equação (297).

Tabela D.13. Coordenadas dos números aleatórios utilizados para definir o campo de permeabilidade.

Número do ponto aleatório	Coord. X	Coord. Y	Número do ponto aleatório	Coord. X	Coord. Y
1	0.06018	0.03962	21	0.67025	0.92613
2	0.33745	0.02573	22	0.51256	0.92821
3	0.29532	0.09682	23	0.81006	0.92724
4	0.51338	0.03944	24	0.97193	0.93648
5	0.98229	0.00573	25	0.99667	0.96861
6	0.01467	0.22609	26	0.45101	0.81827
7	0.13862	0.23962	27	0.72480	0.54037
8	0.00517	0.46858	28	0.73380	0.58614
9	0.13844	0.50653	29	0.75604	0.51306
10	0.06018	0.03962	30	0.95022	0.40503
11	0.27925	0.42609	31	0.89267	0.42674
12	0.27943	0.30335	32	0.92285	0.38729
13	0.57375	0.15583	33	0.92842	0.44185
14	0.47727	0.35446	34	0.88750	0.24644
15	0.46690	0.33195	35	0.88950	0.20167
16	0.56287	0.23862	36	0.33980	0.65287
17	0.58190	0.21840	37	0.33012	0.72934
18	0.09196	0.86258	38	0.27307	0.72277
19	0.88750	0.72277	39	0.65754	0.47811
20	0.49867	0.67829	40	0.60988	0.58296

Gráficos de produção de óleo para duas malhas distorcidas empregadas na solução de escoamento bifásico em meio homogêneo e anisotrópico

Os gráficos apresentados nessa seção são referentes ao problema descrito na seção 4.3.6, adaptado de Lamine e Edwards (2010). Duas malhas com 16x16 subdivisões, ilustradas na figura D.1, são empregadas para a produção dos resultados abaixo. O desempenho das formulações e suas variantes, observados nesses gráficos, definem, preliminarmente, qual dentre as várias abordagens avaliadas, propicia a solução mais próxima da solução de referência (ver dados dessa na seção 4.3.6). Dessa forma, apenas as soluções obtidas com as melhores abordagens são apresentadas e discutidas na seção 4.3.6. Nesse caso, uma malha mais refinada é empregada.

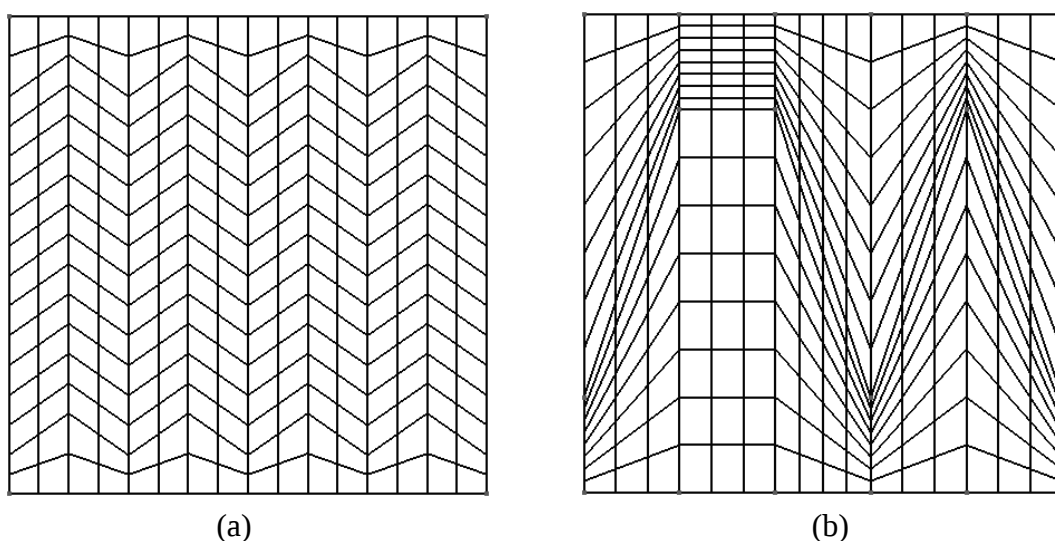
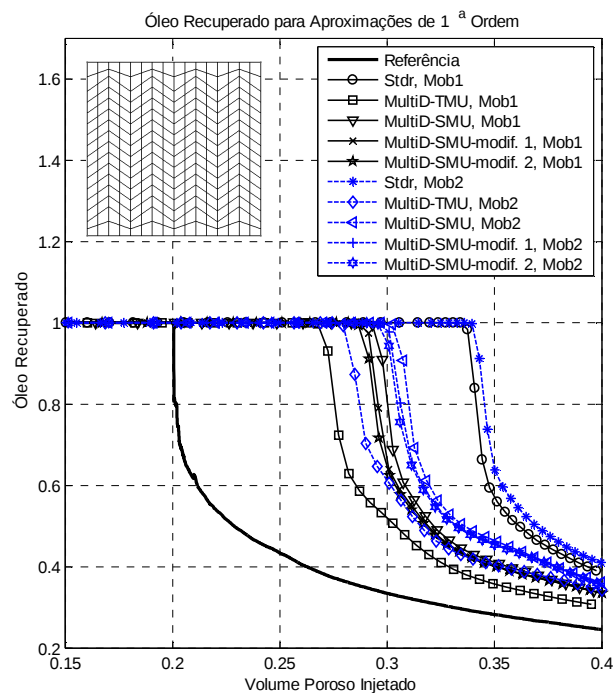


Figura D.1. Malhas com 16x16 subdivisões empregadas para simulação de escoamento bifásico de água e óleo em reservatório homogêneo e anisotrópico para problema de ¼ de cinco poços: (a) malha Chevron (Eigestad e Klausen, 2005) (b) malha adaptada de Hermeline (2007).

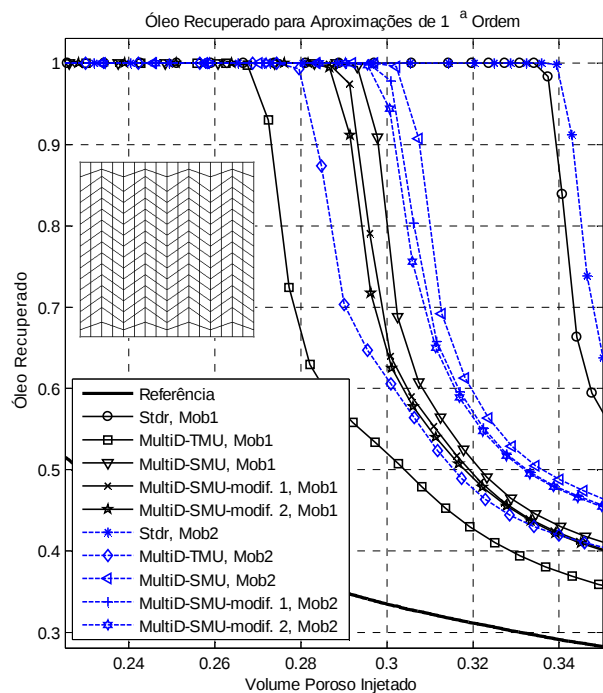
Dentre as configurações adotadas para produzir esses resultados preliminares, estão:

- Comparação entre os resultados obtidos com a formulação *standard* (*stdr*) e os obtidos com as formulações TM;
- Comparação entre os resultados obtidos com as variantes da formulação TMSEC-2. Dentre essas, estão as abordagens TMU, dada pela equação (217), SMU, dada pela equação (218), SMU-modif1, dada pelas equações (281) e (282) e SMU-modif2, dada pelas equações (281) e (283);
- Comparação entre as estratégias para aproximação da mobilidade total “*mob1*” (equação (37)) e “*mob2*” (equações (38) e (39));
- Nas aproximações de 2ª ordem, comparação entre os resultados obtidos com a extração da saturação de água S_w e os obtidos com fluxo fracionário f_w ;
- Nas aproximações TM, comparação entre os resultados obtidos com a combinação linear convexa feita na saturação de água S_w e no fluxo fracionário f_w .

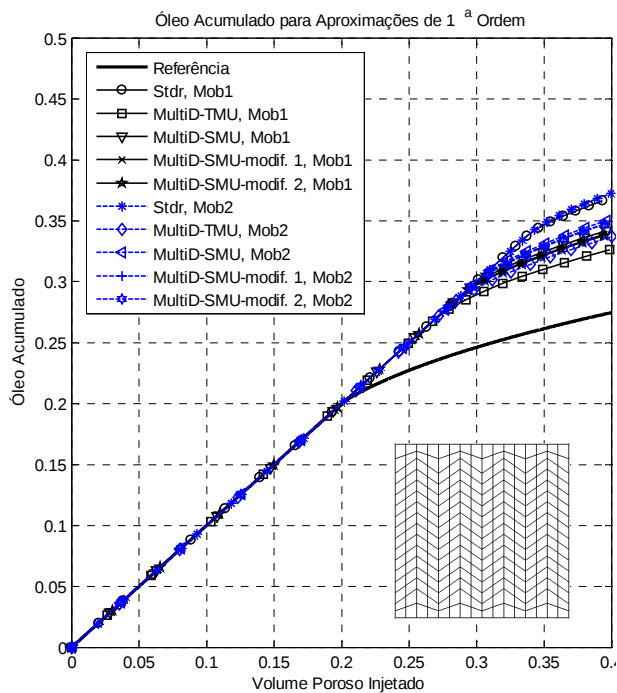
Nas figuras D.2 a D.11, as curvas de produção de óleo e óleo acumulado são apresentadas juntamente com a solução de referência.



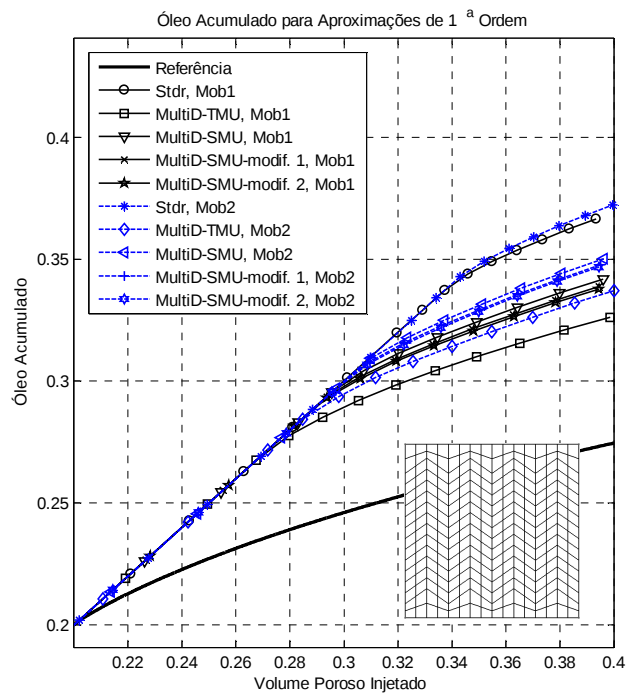
(a)



(b)



(c)



(d)

Figura D.2. Escoamento bifásico de água e óleo em reservatório homogêneo e anisotrópico para problema de $\frac{1}{4}$ de cinco poços. Curvas de produção para aproximações de 1ª ordem obtidas com a malha Chevron e combinação convexa em f_w nas abordagens TM. Para todos os casos, as duas estratégias de aproximação para a mobilidade (“mob1” e “mob2”) são verificadas: (a) produção de óleo; (b) detalhe da curva de produção de óleo; (c) óleo acumulado; (d) detalhe da curva de óleo acumulado.

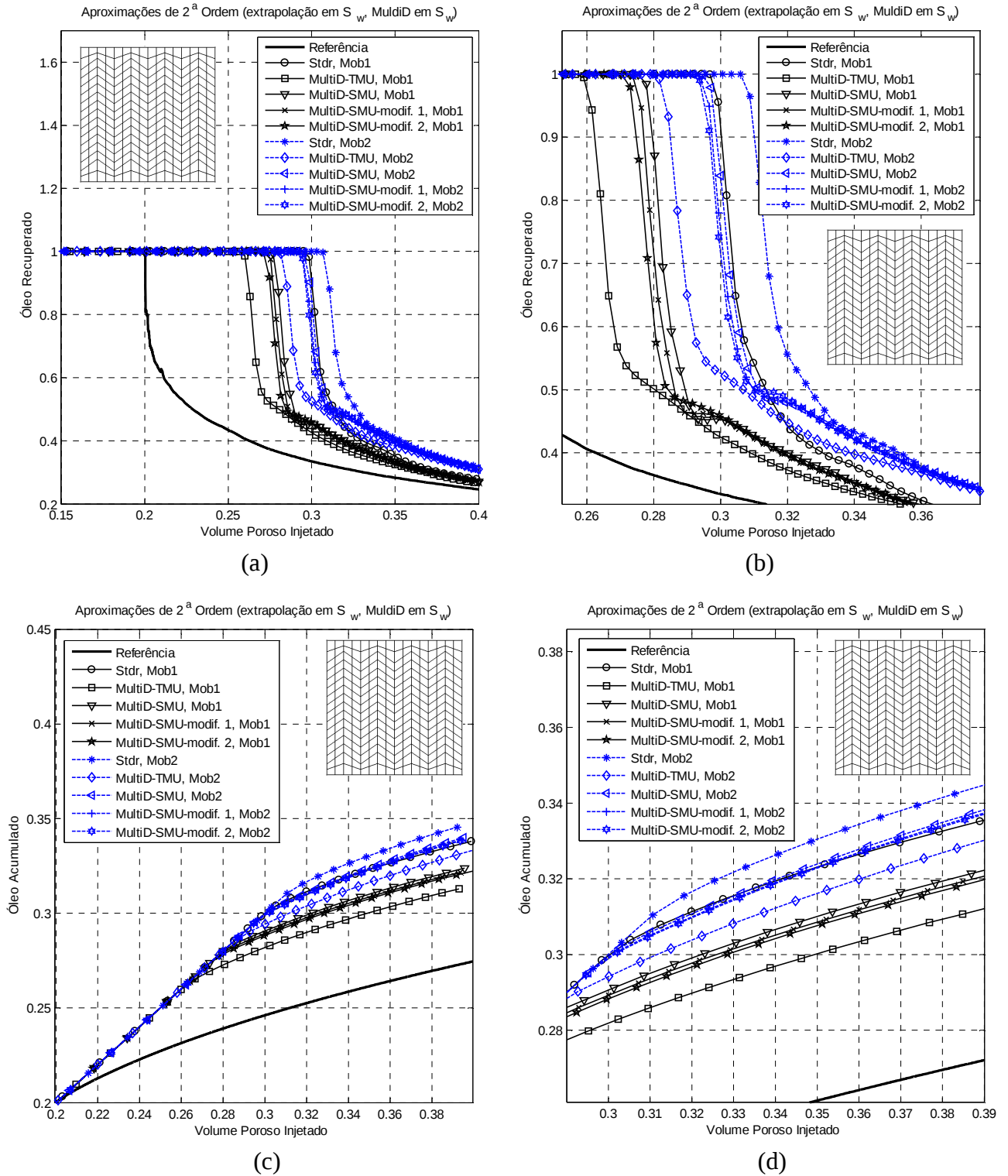
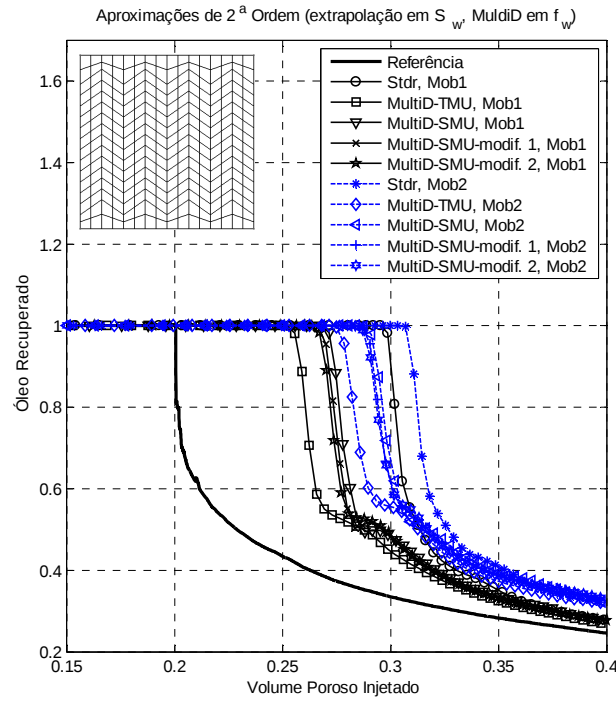
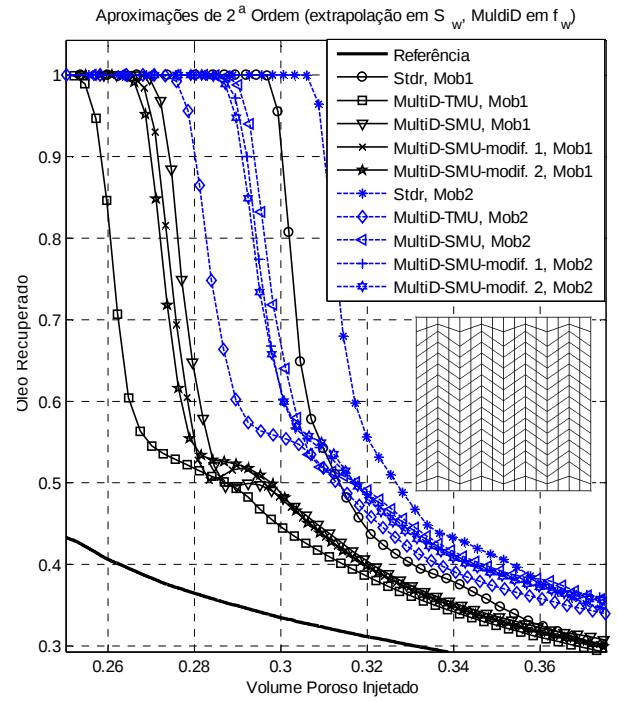


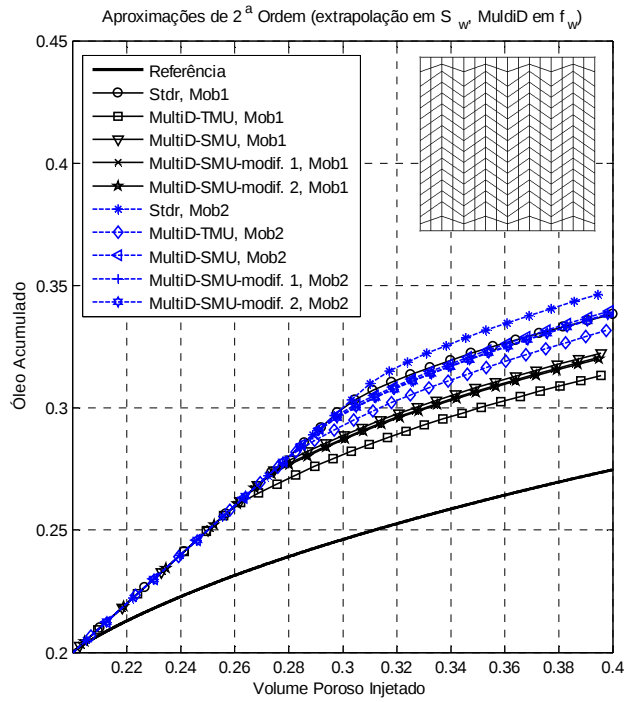
Figura D.3. Escoamento bifásico de água e óleo em reservatório homogêneo e anisotrópico para problema de 1/4 de cinco poços: Curvas de produção para aproximações de 2ª ordem obtidas com a malha Chevron. Extrapolação de S_w nas abordagens, convencional (*stdr*) e TM e combinação convexa em S_w . Para todos os casos, as duas estratégias de aproximação para a mobilidade (“*mob1*” e “*mob2*”) são verificadas: (a) produção de óleo; (b) detalhe da curva de produção de óleo; (c) óleo acumulado; (d) detalhe da curva de óleo acumulado.



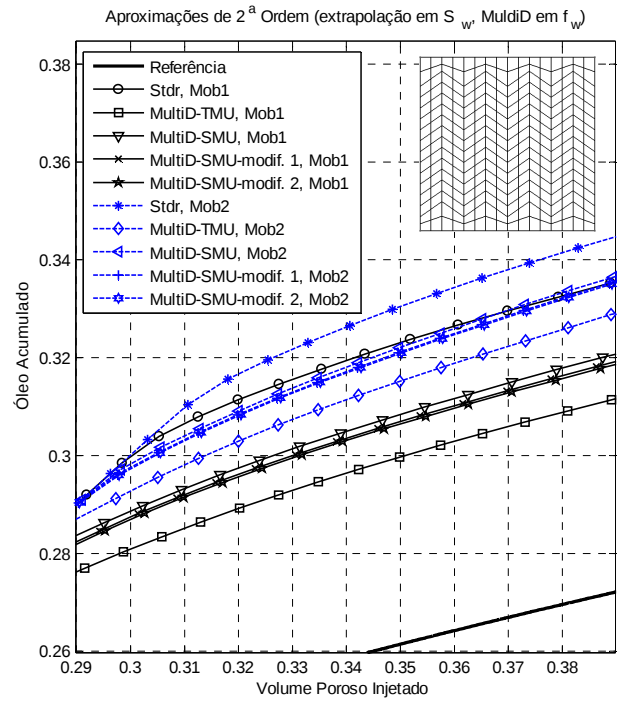
(a)



(b)



(c)



(d)

Figura D.4. Curvas de produção para aproximações de 2^a ordem obtidas com malha Chevron. Extrapolação de S_w nas abordagens, convencional (*std*) e TM e combinação convexa em f_w . Para todos os casos, as duas estratégias de aproximação para a mobilidade (“*mob1*” e “*mob2*”) são verificadas: (a) produção de óleo; (b) detalhe da curva de produção de óleo; (c) óleo acumulado; (d) detalhe da curva de óleo acumulado.

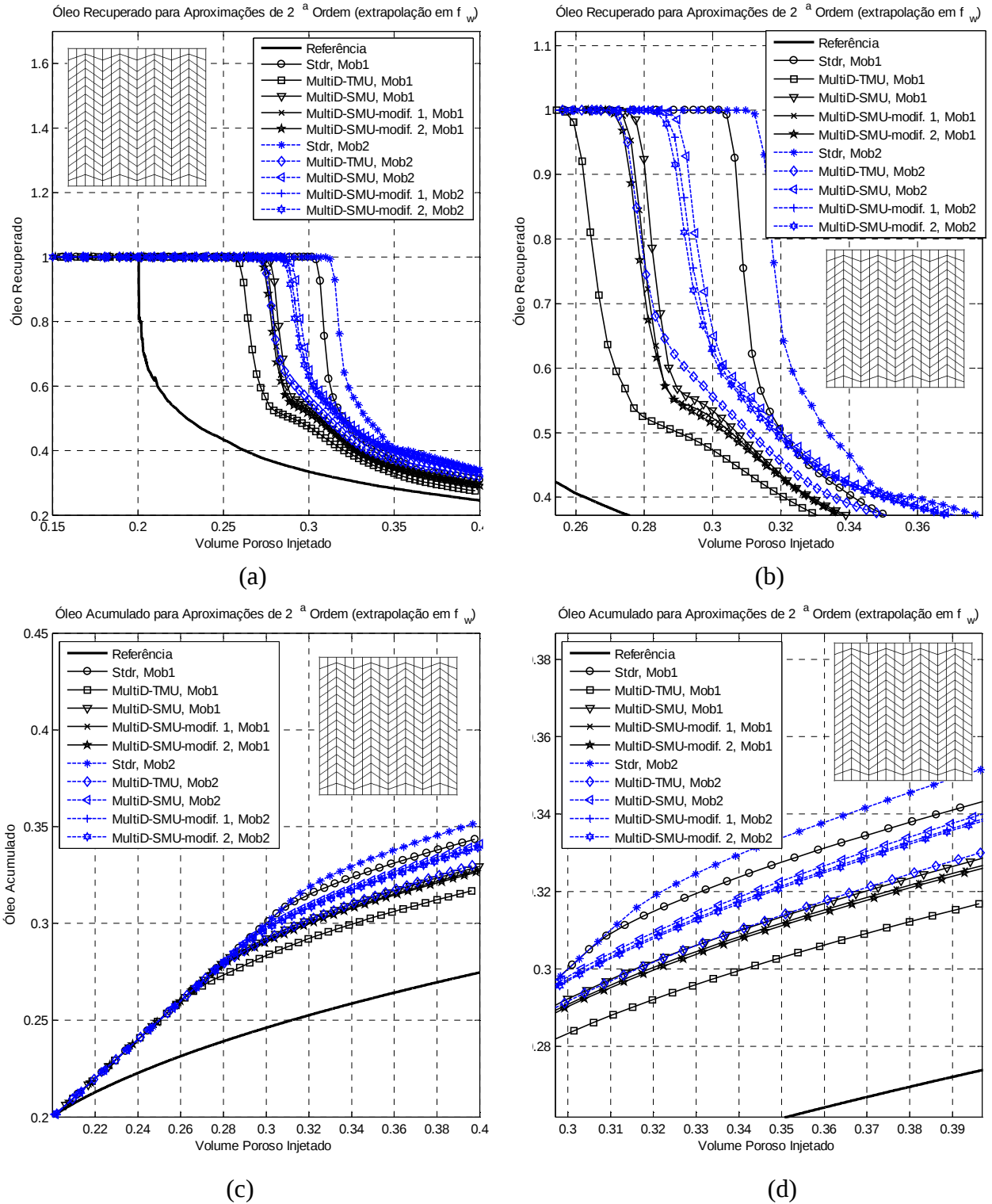
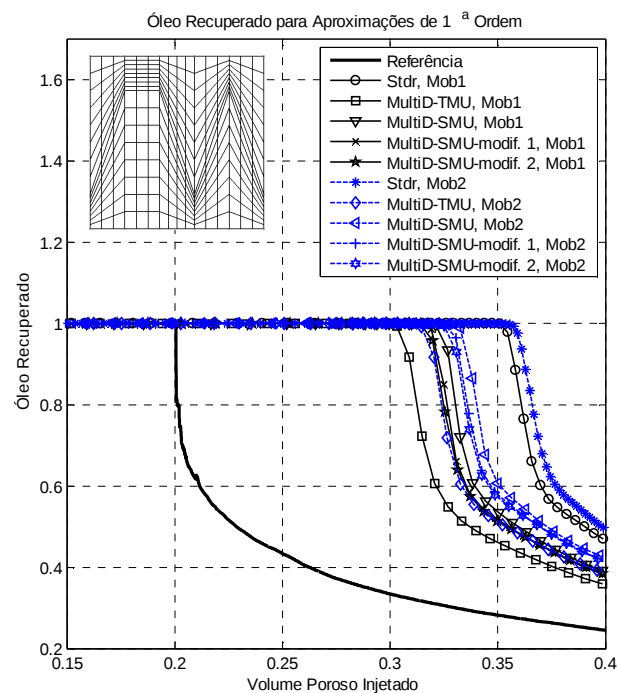
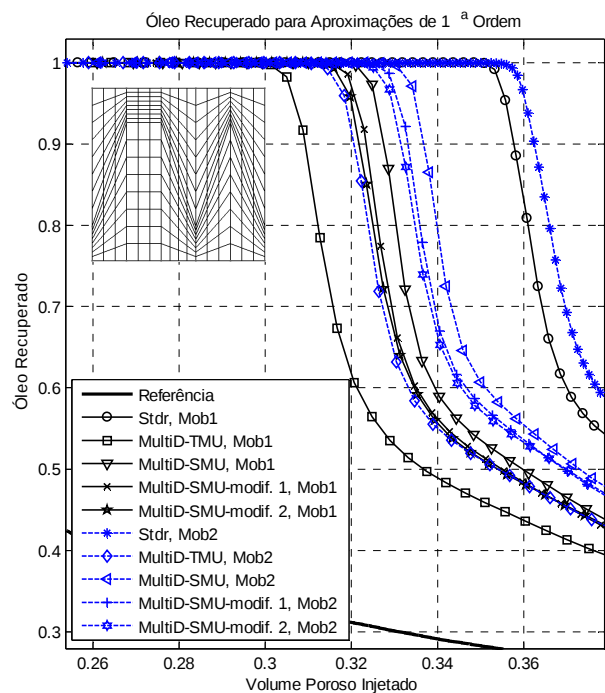


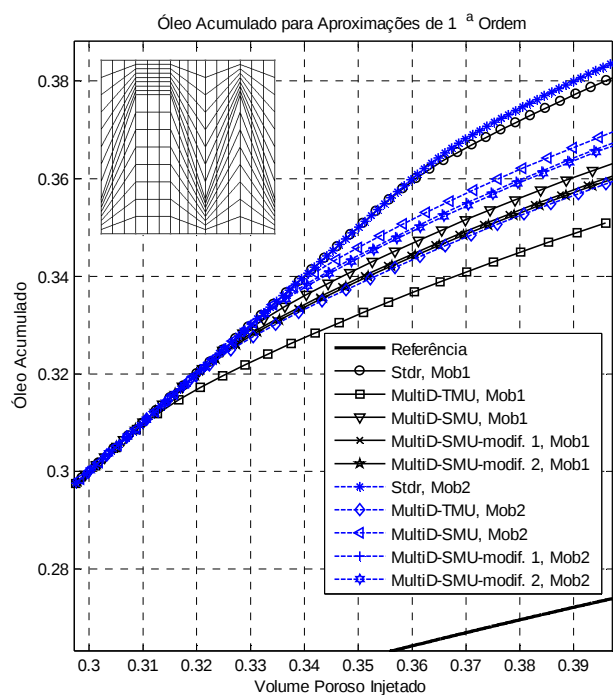
Figura D.5. Escoamento bifásico de água e óleo em reservatório homogêneo e anisotrópico para problema de ¼ de cinco poços. Curvas de produção para aproximações de 2^a ordem obtidas com a malha Chevron. Extrapolação de f_w nas abordagens, convencional (*stdr*) e TM e combinação convexa em f_w . Para todos os casos, as duas estratégias de aproximação para a mobilidade (“*mob1*” e “*mob2*”) são verificadas: (a) produção de óleo; (b) detalhe da curva de produção de óleo; (c) óleo acumulado; (d) detalhe da curva de óleo acumulado.



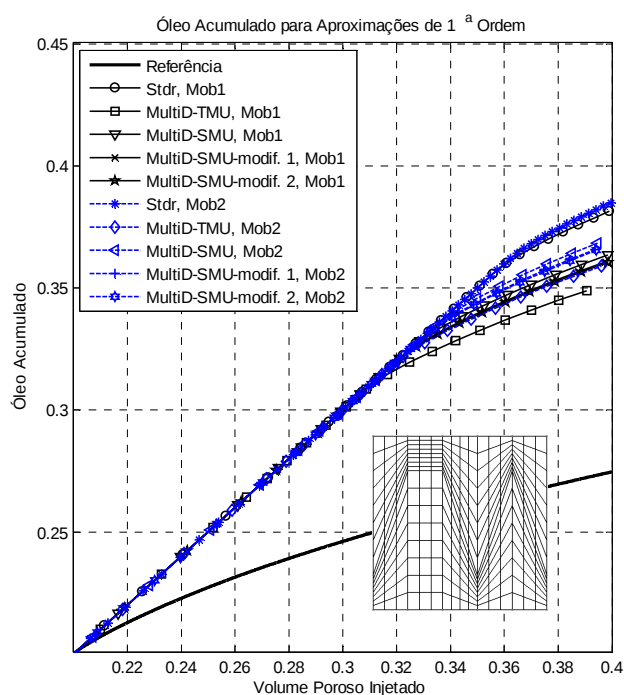
(a)



(b)

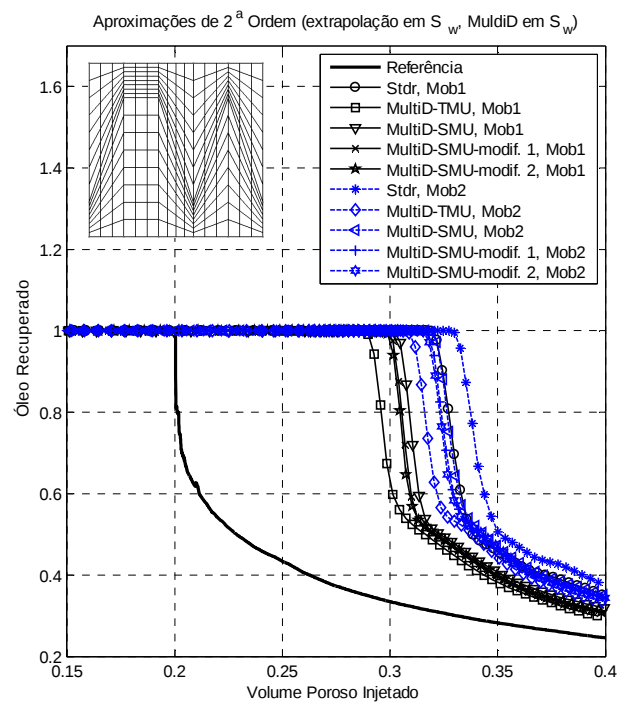


(c)

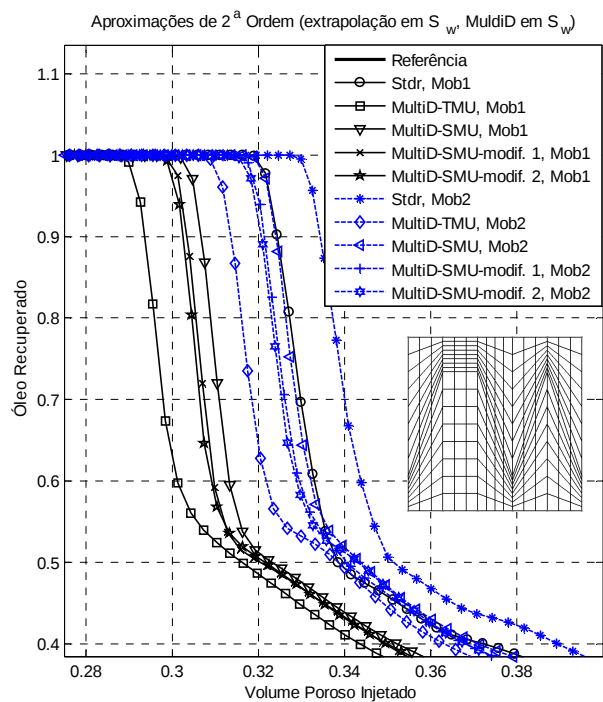


(d)

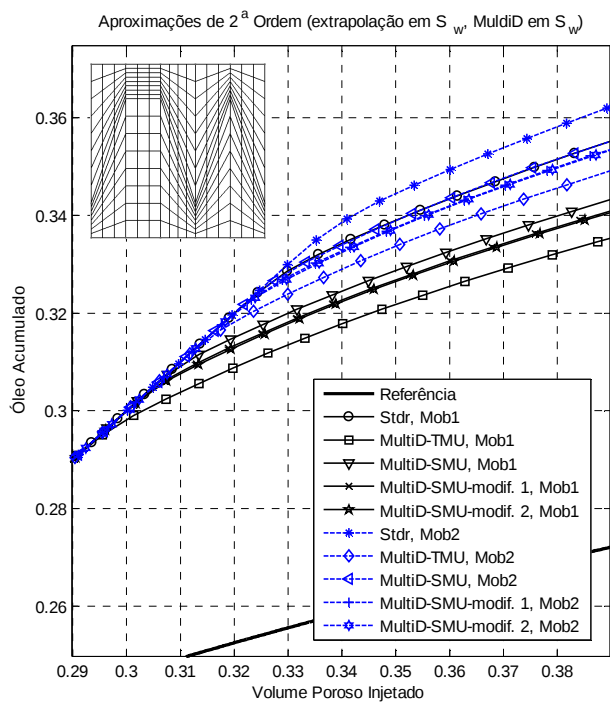
Figura D.6. Escoamento bifásico de água e óleo em reservatório homogêneo e anisotrópico para problema de $\frac{1}{4}$ de cinco poços. Curvas de produção para aproximações de 1ª ordem obtidas com a malha Hermeline e combinação convexa em f_w nas abordagens TM. Para todos os casos, as duas estratégias de aproximação para a mobilidade (“mob1” e “mob2”) são verificadas: (a) produção de óleo; (b) detalhe da curva de produção de óleo; (c) óleo acumulado; (d) detalhe da curva de óleo acumulado.



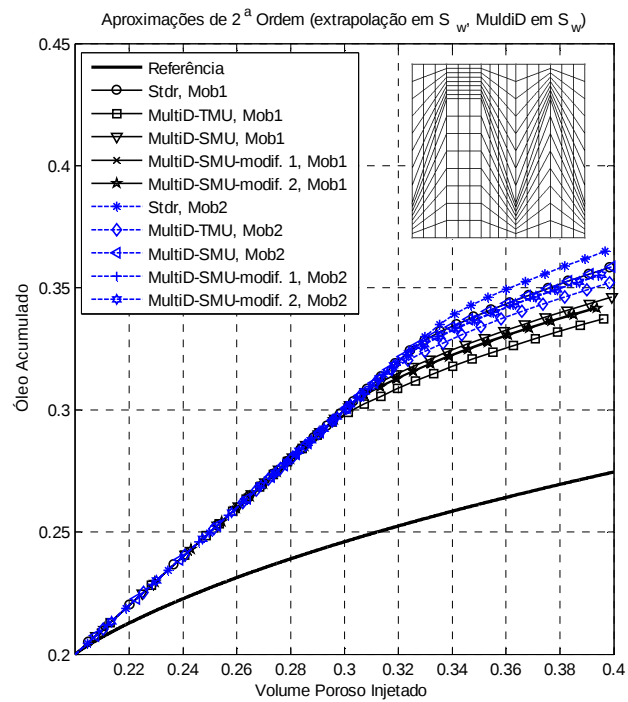
(a)



(b)

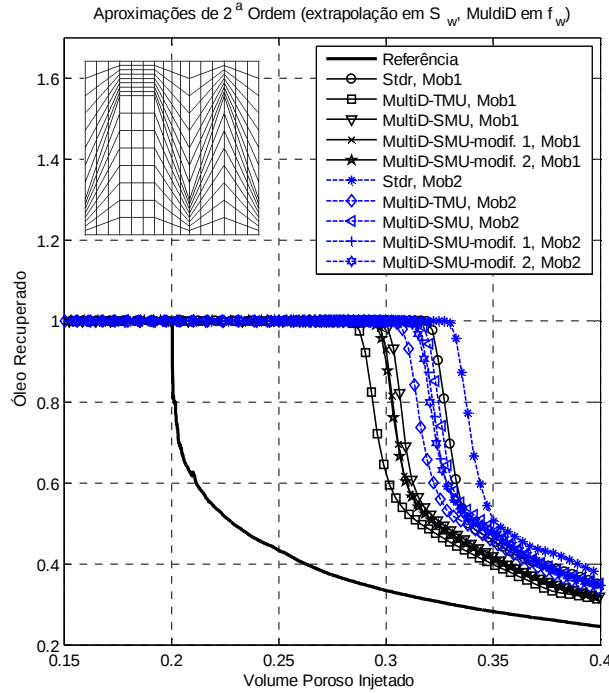


(c)

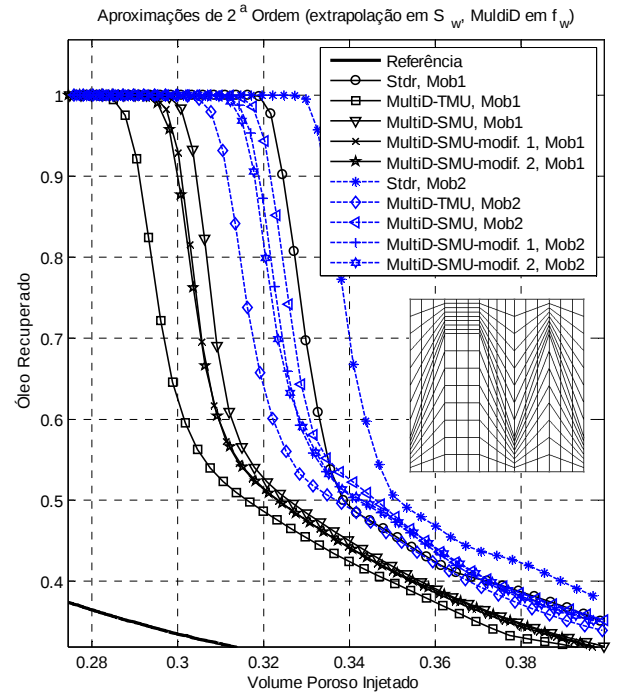


(d)

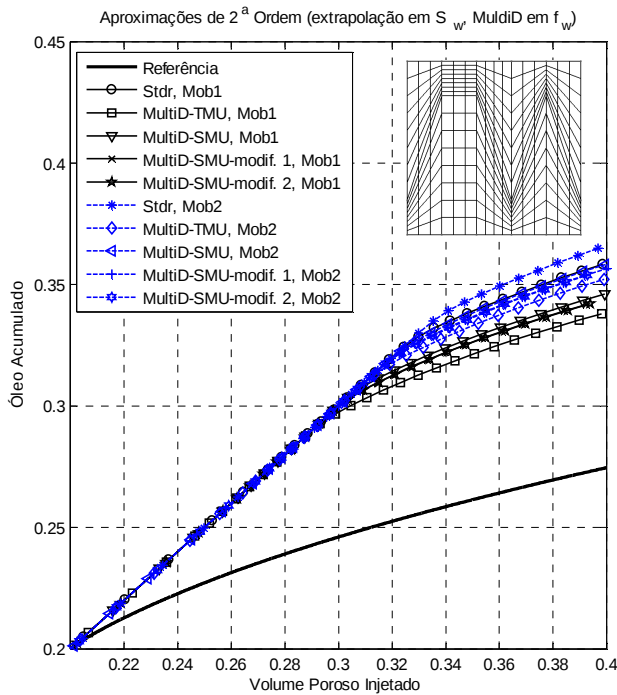
Figura D.7. Curvas de produção para aproximações de 2ª ordem obtidas com malha Hermeline. Extrapolação de S_w nas abordagens convencional (*stdr*) e TM e combinação convexa em S_w . Para todos os casos, as duas estratégia de aproximação para a mobilidade (“*mob1*” e “*mob2*”) são verificadas: (a) produção de óleo; (b) detalhe da curva de produção de óleo; (c) óleo acumulado; (d) detalhe da curva de óleo acumulado.



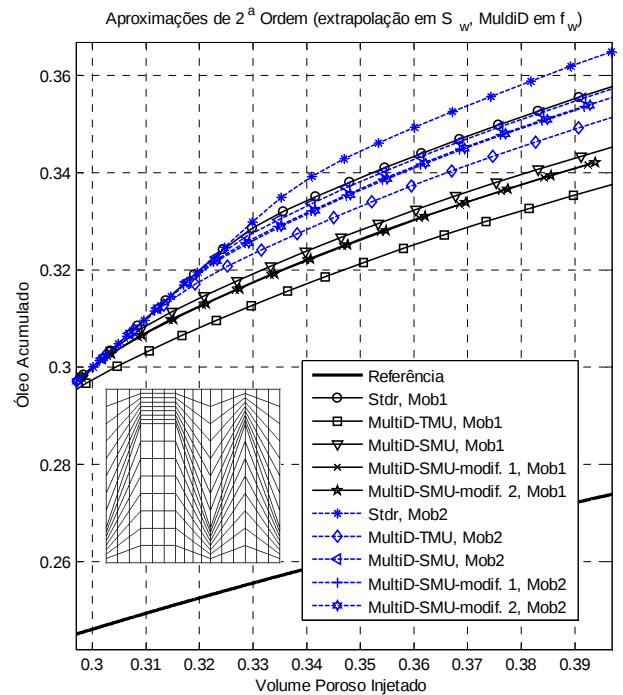
(a)



(b)

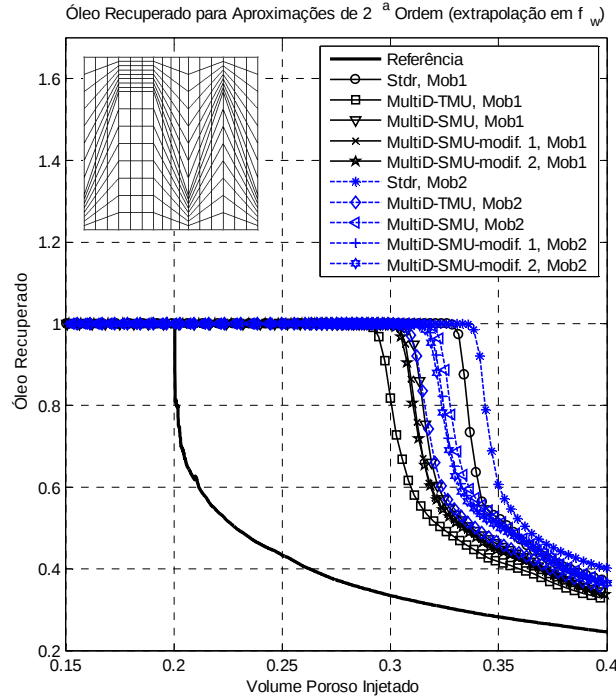


(c)

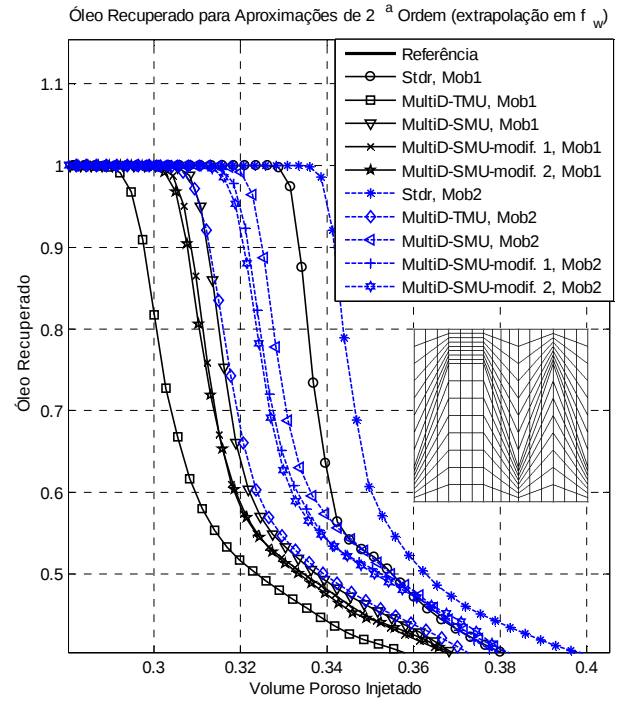


(d)

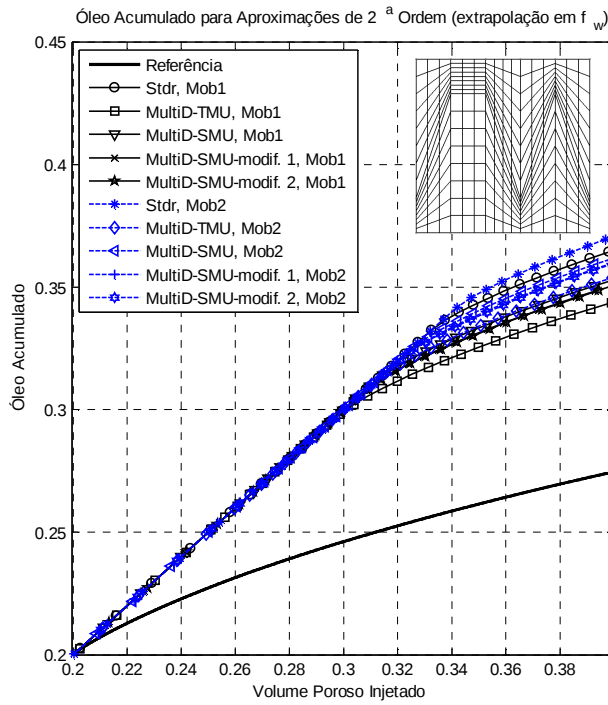
Figura D.8. Escoamento bifásico de água e óleo em reservatório homogêneo e anisotrópico para problema de $\frac{1}{4}$ de cinco poços: Curvas de produção para aproximações de 2ª ordem obtidas com a malha Hermeline. Extrapolação de S_w nas abordagens, convencional (*stdr*) e TM e combinação convexa em f_w . Para todos os casos, as duas estratégias de aproximação para a mobilidade (“mob1” e “mob2”) são verificadas: (a) produção de óleo; (b) detalhe da curva de produção de óleo; (c) óleo acumulado; (d) detalhe da curva de óleo acumulado.



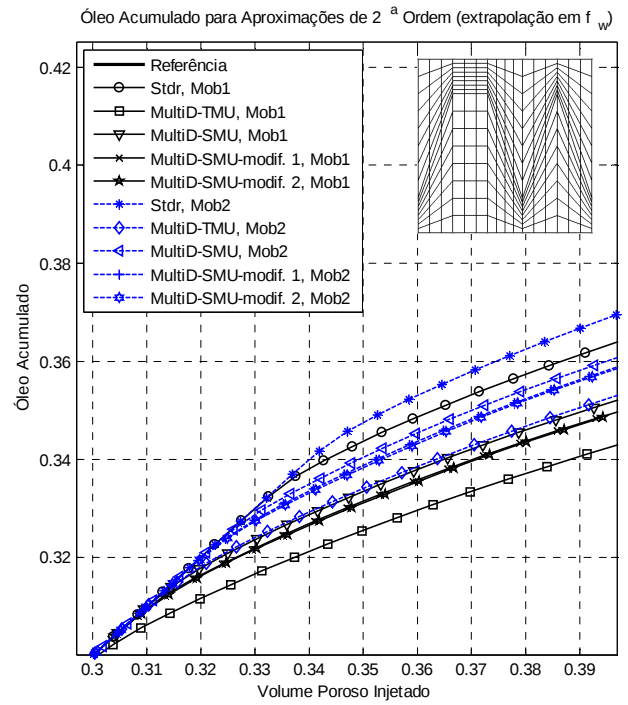
(a)



(b)

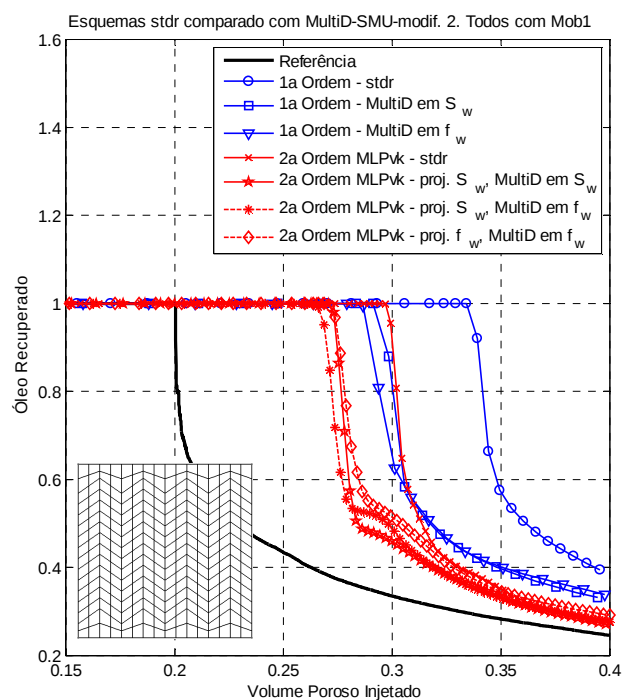


(c)

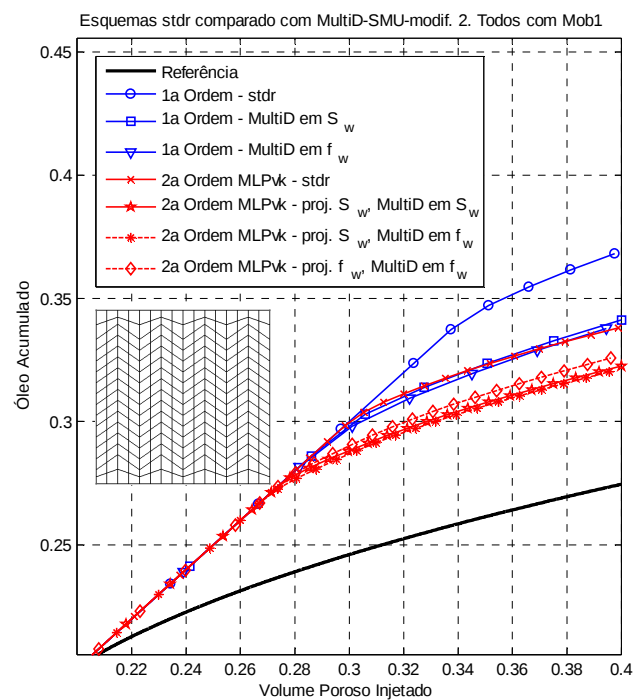


(d)

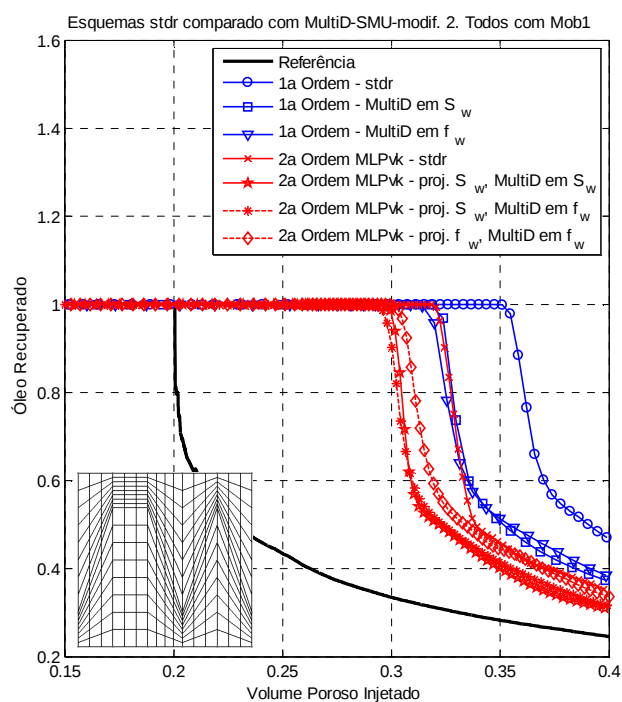
Figura D.9. Escoamento bifásico de água e óleo em reservatório homogêneo e anisotrópico para problema de $\frac{1}{4}$ de cinco poços: Curvas de produção para aproximações de 2ª ordem obtidas com a malha Hermeline. Extrapolação de f_w nas abordagens, convencional (*stdr*) e TM e combinação convexa em f_w . Para todos os casos, as duas estratégias de aproximação para a mobilidade (“*mob1*” e “*mob2*”) são verificadas: (a) produção de óleo; (b) detalhe da curva de produção de óleo; (c) óleo acumulado; (d) detalhe da curva de óleo acumulado.



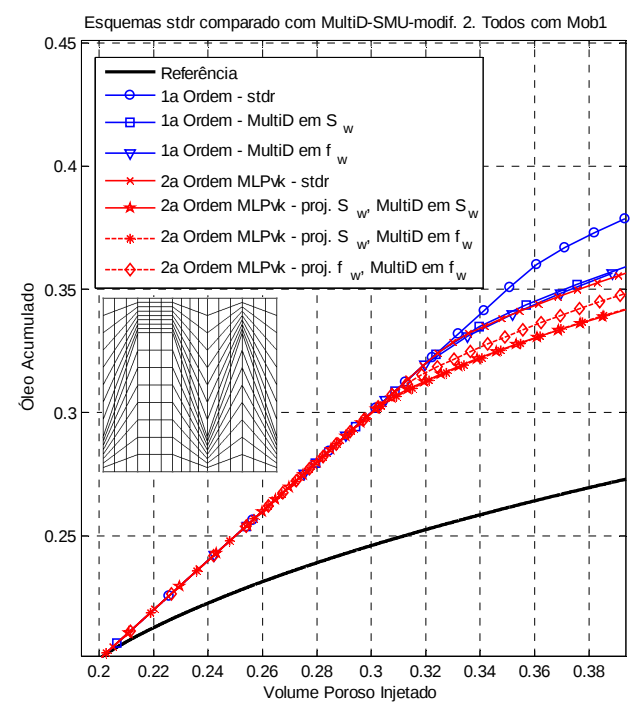
(a)



(b)

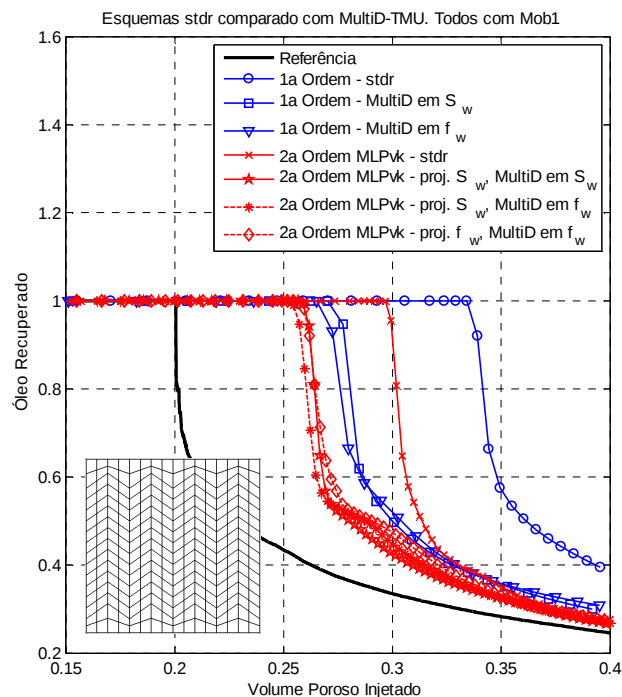


(c)

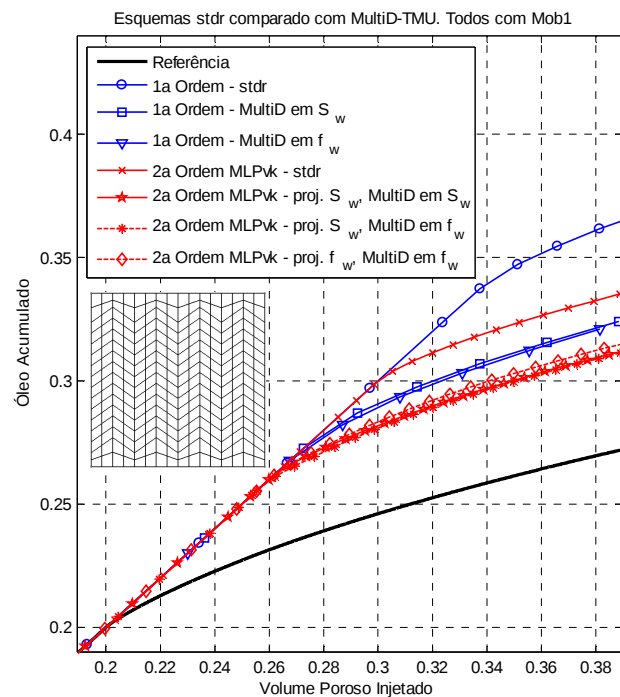


(d)

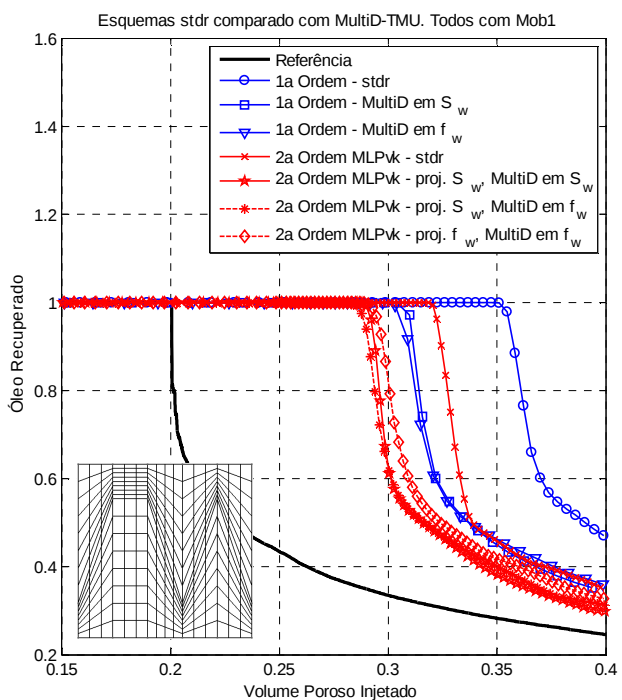
Figura D.10. Escoamento bifásico de água e óleo em reservatório homogêneo e anisotrópico para problema de $\frac{1}{4}$ de cinco poços: Curvas de produção para aproximações de 1ª e 2ª ordem com abordagem convencional (*stdr*) e abordagem TM (SMU-modif. 2) com estratégia de aproximação da mobilidade “*mob1*”: (a) produção de óleo para a malha Chevron; (b) Óleo acumulado para a malha Chevron; (c) produção de óleo para a malha Hermeline; (d) Óleo acumulado para a malha Hermeline.



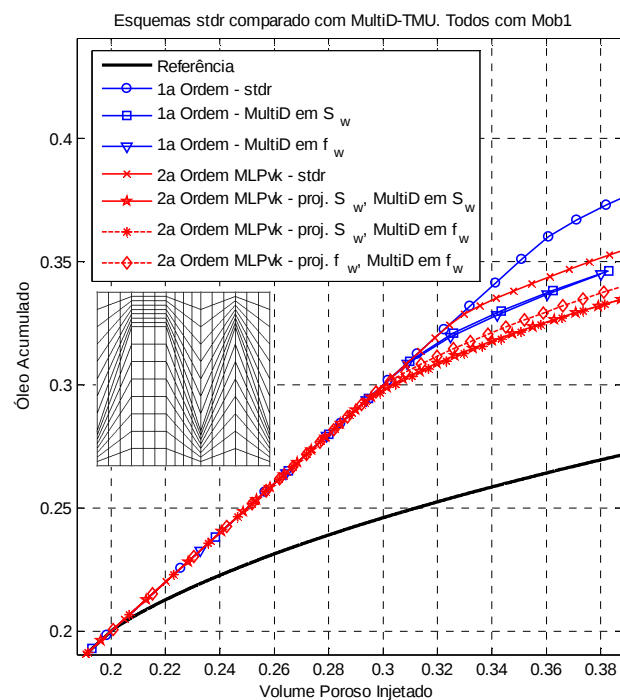
(a)



(b)



(c)



(d)

Figura D.11. Escoamento bifásico de água e óleo em reservatório homogêneo e anisotrópico para problema de $\frac{1}{4}$ de cinco poços: Curvas de produção para aproximações de 1ª e 2ª ordem com abordagem convencional (*stdr*) e abordagem TM (TMU) com estratégia de aproximação da mobilidade “*mob1*”: (a) produção de óleo para a malha Chevron; (b) Óleo acumulado para a malha Chevron; (c) produção de óleo para malha Hermeline; (d) Óleo acumulado para a malha Hermeline.

Referências

- AAVATSMARK, I; BARKVE, T; BØE Ø; MANNSETH, T. Discretization on unstructured grids for inhomogeneous, anisotropic media. Part I. Derivation of the methods. *SIAM Journal on Scientific Computing* 1998; **19**: 765–781.
- AAVATSMARK, I. An Introduction to Multipoint Flux Approximations for Quadrilateral Grids. *Computational Geosciences*. 2002; **6**: 405-432.
- AAVATSMARK, I. Multipoint Flux Approximation Methods for Quadrilateral Grids. In *9th International forum on reservoir simulation, Abu Dhabi*. 2007, December.
- AAVATSMARK, I.; EIGESTAD, G. T. Numerical Convergence of the MPFA O-Method and U-Method for General Quadrilateral Grids. *International journal for numerical methods in fluids*. 2006; **51**: 939-961.
- AAVATSMARK, I.; EIGESTAD, G. T.; MALLISON, B. T.; NORDBOTTEN, J. M. A Compact Multipoint Flux Approximation Method with Improved Robustness. *Numerical Methods for Partial Differential Equations*. 2008; **24**: 1329-1360.
- ABGRALL, R. On Essentially Non-Oscillatory Schemes on Unstructured Meshes: Analysis and Implementation, *Journal of Computational Physics*. 1994; **114**: 45.
- AFONSO, S. M.; WILLMERDORF, R.; CARMO, A.; HOROWITZ, B.; LIRA JUNIOR, J. D. Surrogate Based Optimization Applied To History Matching In Petroleum Reservoir Engineering. Association for Structural and Multidisciplinary Optimization in the UK (ASMO-UK), 2010.
- AHMED, R.; EDWARDS, M. G.; LAMINE, S.; HUISMAN, B. A. H.; PAL, M. Mixed-dimensional Model-CVD-MPFA Coupled with a Lower-dimensional Fracture Model. In *ECMOR XIV-14th European conference on the mathematics of oil recovery*. 2014, September.
- ANDERSON, W.K.; BONHAUS, D.L.: An Implicit Upwind Algorithm for Computing Turbulent Flows on Unstructured Grids. *Computers & Fluids*, 1994. **23**: 1-21.
- ASCHER, U.; RUUTH, S. J.; WETTON, B. T. R. Implicit–Explicit Methods for Time-Dependent Partial Differential Equations. *SIAM J Numer Anal*. 1995; **32**: 797–823.
- AZIZ, K. e SETTARI, A. Petroleum Reservoir Simulation Applied. Science Publishers Ltd., London, England, 1979.
- BAJOR, O.; CORMACK, D. E. A new method for characterizing the grid orientation phenomenon. Society of Petroleum Engineers, SPE 19353. 1989: 1-16.
- BALAN, A.; MAY, G.; SCHÖBERL, J.. A stable high-order Spectral Difference method for hyperbolic conservation laws on triangular elements. *Journal of Computational Physics*, 2012; **231** : 2359–2375.

BARTH, T.J. e JESPERSEN, D. C. The Design and Application of Upwind Schemes on Unstructured Meshes. AIAA Paper 1989:89-0366.

BARTH, T. J.; FREDERICKSON, P. O. Higher Order Solution of the Euler Equations on Unstructured Grids Using Quadratic Reconstruction, AIAA paper. 1990; 90-13.

BARTH, T.J.: *A 3-D Upwind Euler Solver for Unstructured Meshes*. AIAA. Paper, 1991: 91-1548.

BARTH, T. J.: Recent Developments in High Order k-Exact Reconstruction on Unstructured Meshes. AIAA Paper, 1993:93-0668.

BASTIAN, P.; HELMIG, R. Efficient Fully-Coupled Solution Techniques for Two-Phase Flow in Porous Media: Parallel multigrid solution and large scale computations. *Advances in Water Resources*. 1999; **23**: 199-216.

BASTIAN, P. Higher order discontinuous Galerkin methods for flow and transport in porous media. In E. Bänsch, editor, *Challenges in Scientific Computing – CISC 2002*, volume 35 of *Lecture Notes in Computational Science and Engineering*, pages 1–22.

BASTIAN, P. A Fully-Coupled Discontinuous Galerkin Method for Two-Phase Flow in Porous Media with Discontinuous Capillary Pressure. *Computational Geosciences*. 2013; **18**: 779-796.

BATTEN, P.; LAMBERT, C.; CAUSON, D. M. Positively Conservative High-resolution Convection Schemes for Unstructured Elements. *International Journal for Numerical Methods in Engineering*. 1996; **39**: 1821-1838.

BAXENDALE, D. Application of Reservoir Management and Reservoir Simulation to Monitor and Improve the Performance of the M4/7/N1 Reservoirs in the Samarang Field, Offshore Sabah, East Malaysia. In: M.S. Publisher Society of Petroleum Engineers Source SPE Asia Pacific Oil and Gas Conference, 20-22 March, Kuala Lumpur, Malaysia. 1995

BEAR, J. *Dynamics of Fluids in Porous Media*. Courier Corporation. 1988.

BECKNER, B. Next Generation Reservoir Simulation - New Capabilities for New Challenges. In *Petroleum Technology Forum*, February 8, 2011

BALIGA, B. R.; PATANKAR, S. V. A Control Volume Finite-Element Method for Two-Dimensional Fluid Flow And Heat Transfer. *Numerical Heat Transfer*. 1983; **6**: 245-261.

BERGER, M.; AFTOSMIS, M.; MURMAN, S. Analysis of Slope Limiters on Irregular Grids. AIAA Science Meeting, NAS, 2005: 05-007.

BERTHON, C.; DESVEAUX, V. An entropy preserving MOOD scheme for the Euler equations. *International Journal on Finite Volumes*. 2014; 1-39.

BETCHEN, L. J.; STRAATMAN, A. G. An accurate gradient and Hessian reconstruction method for cell-centered finite volume discretizations on general unstructured grids. *International journal for numerical methods in fluids*. 2010; **62**: 945-962.

BLAZEK, J. Computational Fluid Dynamics: Principles and Applications. Elsevier Science. Oxford. 2001.

BORIS, J.; BOOK, D. *Flux-Corrected Transport: I SHASTA. A Fluid Corrected Transport Algorithm that Works*. *Journal of Computational Physics*. 1973; **11**: 38-69.

BOSCARINO S. Error Analysis of IMEX Runge-Kutta Methods Derived from Differential-Algebraic Systems. *SIAM J Numer Anal*. 2007; **45**:1600–21.

BRAND, C. W.; HEINEMANN, J. E.; AZIZ, K. The Grid Orientation Effect in Reservoir Simulation. *SPE Journal* 19353 in 11th Symposium on Reservoir Simulation, Anaheim, USA, 1991.

BREVIGLIERI, C. High-order unstructured spectral finite volume method for aerodynamic applications. Instituto de Tecnologia Aeroespacial (ITA), *Tese de Doutorado*, 2010.

BREVIGLIERI, C.; AZEVEDO, J. L.; BASSO, E.; F. SOUZA, M. A. Implicit High-Order Spectral Finite Volume Method for Inviscid Compressible Flows. *AIAA journal*. 2010; **48**, 2365-2376.

BREVIGLIERI, C.; AZEVEDO, J. L. F. Unsteady Aerodynamic Applications Using High-Order Unstructured Grid Methods. *AIAA Paper*: 2012-0701. 2012.

CARVALHO, D. K. E. Uma Formulação do Método dos Volumes Finitos com Estrutura de Dados por Aresta para a Simulação de Escoamentos em Meios Porosos. Tese de Doutorado. Universidade Federal de Pernambuco. Recife. 2005.

ČADA, M.; TORRILHON, M. Compact Third-Order Limiter Functions for Finite Volume Methods. *Journal of Computational Physics*. 2009; **228**: 4118-4145.

CARAENI, D.; HILL, D. C. Unstructured-Grid Third-Order Finite Volume Discretization Using a Multistep Quadratic Data-Reconstruction Method. *AIAA journal*. 2010; **48**: 808-817.

CHEN, Q; WAN, J; YANG, Y; MIFFLIN, R. T. Enriched Multi-Point Flux Approximation for General Grids. *Journal of Computational Physics*, 2008; **227**: 1701–1721.

CHEN Z, HUAN G, MA Y. Computational methods for multiphase flows in porous media. Philadelphia: SIAM Comp. Sci. Eng.; 2006.

CHERUVU, V.; NAIR, R. D.; TUFO, H. M. A Spectral Finite Volume Transport Scheme on the Cubed-Sphere. *Applied numerical mathematics*. 2007; **57**: 1021-1032.

CHONG, E.; SYIHAB, Z.; PUTRA, E.; SCHECHTER, D. A Unique Grid-Block System for Improved Grid Orientation. In *SPE Asia Pacific Oil and Gas Conference and Exhibition* (SPE 88617). 2004; Society of Petroleum Engineers.

CHUEH C.; SECANELL, M.; BANGERTH, W.; DJILALI, N. Multi-level adaptive simulation of transient two-phase flow in heterogeneous porous media. *Computers and Fluids*, 2010; **39**: 1585-1596.

CHRISTIE, M. A.; BLUNT, M. J. Tenth SPE Comparative Solution Project: A Comparison of Upscaling Techniques. *SPE Reservoir Eval. Eng.* 2001, **4**: 308–317.

CHRISTOV, I.; POPOV, B. New non-oscillatory central schemes on unstructured triangulations for hyperbolic systems of conservation laws. *Journal of Computational Physics*. 2008; **227**, 5736-5757.

CLAIN, S.; DIOT, S.; LOUBERE, R. A High-Order Finite Volume Method for Systems of Conservation Laws—Multi-Dimensional Optimal Order Detection (MOOD). *Journal of computational Physics*. 2011; **230**: 4028-4050.

CLAIN, S.; MACHADO, G. J.; NÓBREGA, J. M.; PEREIRA, R. M. S. A Sixth-Order Finite Volume Method for Multidomain Convection–Diffusion Problem with Discontinuous Coefficients. *Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering*. 2013; **267**: 43-64.

CMG/IMEX homepage. www.cmgl.ca. 2014.

CMG - COMPUTER MODELING GROUP Ltd. *IMEX, User's Guide*, 2006.

COCKBURN, B.; SHU, C. W. TVB Runge-Kutta Local Projection Discontinuous Galerkin Finite Element Method for Conservation Laws. II: General framework, *Math. Comput.* 1989; **52**: 411.

COCKBURN, B.; LIN, S. Y.; SHU, C. W. TVB Runge-Kutta Local Projection Discontinuous Galerkin Finite Element Method for Conservation Laws. III: One-dimensional systems. *Journal of Computational Physics*. 1989; **84**: 90.

COCKBURN, B.; SHU, C. W. The Runge–Kutta discontinuous Galerkin method for conservation laws V: multidimensional systems. *Journal of Computational Physics*. 1998; **141**: 199-224.

COLELLA, P. Multidimensional upwind methods for hyperbolic conservation laws *Journal of Computational Physics*, 1990; **87**: 171–200.

COLELLA, P.; WOODWARD, P. R. The piecewise parabolic method (PPM) for gas-dynamical simulations. *Journal of Computational Physics*. 1984; **54**: 174-201.

COLLINS, D. A.; NGHIEM, L. X.; LI, Y. K.; GRABENSTETTER, J. E. An Efficient Approach to Adaptive Implicit Compositional Simulation with an Equation of State. *SPE Reservoir Eng.* 1992; **7**: 259–64.

CONTRERAS, F. R. L.; LYRA, P. R. M.; SOUZA, M. R. A.; CARVALHO, D. K. E. A Higher Order Cell-Centered Finite Volume Method for the Simulation of Two-Phase Flows in Heterogeneous and Anisotropic Petroleum Reservoirs. *Submitted to Computers and Fluids*.

CRICHLOW, H. B. Modern Reservoir Engineering: A Simulation Approach. Prentice hall. 1977.

CRUMPTON, P. I.; SHAW, G. J.; WARE, A. F. Discretization and Multigrid Solution of Elliptic Equations with Mixed Derivative Terms and Strongly Discontinuous Coefficients. *Journal of Computational Physics*, 1995; **116**: 343-358.

COCKBURN, B.; SHU, W. TVB Runge–Kutta local projection discontinuous Galerkin finite element method for conservation laws II: General framework, *Math. Comput.* 1989; **52**: 411.

COREY, A.T. The Interrelation Between Gas and Oil Relative Permeabilities. *Prod. Mon.* 1954; **19**: 38–41.

DAKE, L. P. *The Practice of Reservoir Engineering (Revised Edition)*. Developments in Petroleum Science, Vol. 36. Elsevier. 2001.

DATE, A. W. Introduction to Computational Fluid Dynamics. Cambridge University Press. 2005.

DAWSON, C. N.; KLÍE, H. WHEELER, M. F.; WOODWARD, C. S. A Parallel, Implicit, Cell-Centered Method for Two-Phase Flow with a Preconditioned Newton–Krylov Solver. *Comput Geosci*. 1997; **1**: 215–249.

DELIS, A. I.; NIKOLOS, I. K. A Novel Multidimensional Solution Reconstruction and Edge-Based Limiting Procedure For Unstructured Cell-Centered Finite Volumes with Application to Shallow Water Dynamics. *International Journal for Numerical Methods in Fluids*. 2012; **71**: 584-633.

DELANAYE, M.; ESSERS, J.A. Finite Volume Scheme with Quadratic Reconstruction on Unstructured Adaptive Meshes Applied to Turbhomachinery Flows. ASME IGTI Gas Turbine Conference, Houston, USA, 1995.

DIAZ, M. C.; FERNÁNDEZ, E. D.; FERREIRO, A. M.; PARÉS, C. Two-Dimensional Sediment Transport Models in Shallow Water Equations. A Second Order Finite Volume Approach on Unstructured Meshes. *Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering*. 2009; **198**: 2520-2538.

DISKIN, B.; THOMAS, J. L.: Comparison of Node-Centered and Cell-Centered Unstructured Finite-Volume Discretizations: Inviscid Fluxes. AIAA. 2010.

DIOT, S.; CLAIN, S.; LOUBERE, R. Improved Detection Criteria for the Multi-dimensional Optimal Order Detection (MOOD) on Unstructured Meshes with Very High-Order Polynomials. *Computers & Fluids*. 2012; **64**: 43-63.

DUMBSER, M. Arbitrary High Order PNPM Schemes on Unstructured Meshes for the Compressible Navier-Stokes Equations. *Computers & Fluids*. 2010; **39**:60 – 76.

DUMBSER, M.; ZANOTTI, O.; LOUBÈRE, R.; DIOT, S. A Posteriori Subcell Limiting of the Discontinuous Galerkin Finite Element Method for Hyperbolic Conservation Laws. *Journal of Computational Physics*. 2014; **278**, 47-75.

DURLOFSKY, L. J.; ENGQUIST, B.; OSHER, S. Triangle Based Adaptive Stencils for the Solution of Hyperbolic Conservation laws. *Journal of Computational Physics*. 1992; **98**: 64-73.

DURLOFSKY, L. J. A Triangle Based Mixed Finite Element-Finite Volume Technique for Modeling Two Phase Flow Through Porous Media. *Journal of Computational Physics*. 1993; **105**: 252-266.

EDWARDS, M. G.; ZHENG, H. A quasi-positive family of continuous Darcy-flux finite-volume schemes with full pressure support. *Journal of Computational Physics*, 2008; **227**: 9333-9364.

EWING R. E. The mathematics of reservoir simulation. SIAM, 1983.

ERN, A.; MOZOLEVSKI, I.; SCHUH, L. Accurate Velocity Reconstruction For Discontinuous Galerkin Approximations of Two-Phase Porous Media Flows. *C.R. Acad. Sci. Paris, Ser.* 2009; **9**: 551-554.

ERTEKIN, T.; ABOU-KASSEM, J. H.; KING, G. R. *Basic Applied Reservoir Simulation* . Richardson, TX: Society of Petroleum Engineers. 2001.

FANCHI, J. R. In: *Principles of Applied Reservoir Simulation*. Boston, Gulf Professional Publishing, 2001.

EDWARDS M.G. Higher Dimensional Wave Oriented Upwind Schemes with Minimal Cross-Wind Diffusion, SPE 79689. In SPE Reservoir Simulation Symposium, Houston, texas, USA, 3-5 Feb. 2003

EDWARDS, M. G; ROGERS, C. F; Finite Volume Discretization with Imposed Flux Continuity for the General Tensor Pressure Equation. *Computational Geoscience*, 1998; **2**: 259-290.

EDWARDS, M. G. Higher-resolution hyperbolic-coupled-elliptic flux-continuous CVD schemes on structured and unstructured grids in 2-D. *International journal for numerical methods in fluids*; **51**: 1059-1077.

EIGESTAD, G. T.; KLAUSEN, R. A. On the convergence of the multi-point flux approximation O-method: Numerical experiments for discontinuous permeability. *Numerical methods for partial differential equations*. 2005; **21**: 1079-1098.

EYMARD, R; GUICHARD, C; MASSON, R. Grid orientation effect in coupled finite volume schemes. *IMA J. Numer. Anal.* 2012; **33**: 582-608.

FAINSTEIN, R.; MATOS, M. Tecnologia Sísmica Moderna: A Implementação dos levantamentos 4D. Publicação da Sociedade Brasileira de Geofísica, número. 2004; **3**.

FORSYTH, P. A. A Control Volume Finite Element Approach to NAPL Groundwater Contamination. *SIAM Journal on Scientific and Statistical Computing*. 1991; **12** 1029-1057.

FRIEDRICH, O. Weighted Essentially Non-Oscillatory Schemes for the Interpolation Of Mean Values on Unstructured Grids. *Journal of Computational Physics*. 1998; **144**: 194-212.

FRIIS, H. A.; EVJE, S. T. E. Numerical Treatment of Two-Phase Flow in Capillary Heterogeneous Porous Media by Finite-Volume Approximations. *International Journal of Numerical Analysis and Modeling*. 2011; **9**, 505-528.

FUČÍK, R.; ILLANGASEKARE, T. H.; MIKYŠKA, J. Evaluation of Saturation-Dependent Flux on Two-Phase Flow Using Generalized Semi-Analytic Solution. In *Proc. of the Czech Japanese Seminar in Applied Mathematics, Prague, Faculty of Nuclear Sciences and Physical Engineering, Czech Technical University in Prague*. 2004; 23-35.

FUČÍK, R.; MIKYŠKA, J. Discontinuous Galerkin and Mixed-Hybrid Finite Element Approach to Two-Phase Flow in Heterogeneous Porous Media with Different Capillary Pressures. *Procedia Computer Science*. 2011; **4**: 908-917.

GAO, Z. M.; WU, J. M. A Linearity-Preserving Cell-Centered Scheme for the Heterogeneous and Anisotropic Diffusion Equations on General Meshes. *International Journal for Numerical Methods in Fluids*, 2010; **67**: 2157-2183.

GAO, Z.; WU, J. A Second-Order Positivity-Preserving Finite Volume Scheme for Diffusion Equations on General Meshes. *SIAM Journal on Scientific Computing*. 2015; **37**: 420-438.

GAO, H.; WANG, Z. J. A Conservative Correction Procedure via Reconstruction Formulation with the Chain-Rule Divergence Evaluation. *Journal of Computational Physics*. 2013; **232**: 7-13.

GEUZAIN, C.; REMACLE, J. F. Gmsh: A 3-D finite element mesh generator with built-in pre-and post-processing facilities. *International Journal for Numerical Methods in Engineering*. 2009; **79**(11): 1309-1331.

CHOI, B. J.; ISKANDARANI, M.; LEVIN, J.; HAIDVOGEL, D. B. A spectral finite-volume method for the shallow water equations. *Monthly weather review*. 2004; **132**: 1777-1791.

GODUNOV, S.K. A finite difference method for numerical computation of discontinuous solution of the equation of fluid dynamics. *Math. Sb.* 1959; **47**: 271 – 290.

GOLUB, G. H.; VAN LOAN, C. F. Matrix Computations. JHU Press. 1983.

GOOCH, O. Quasi-ENO Schemes for Unstructured Meshes Based on Unlimited Data-Dependent Least-Squares Reconstruction, *Journal of Computational Physics*. 1997; **133**: 6–17.

GOOCH, O. C.; VAN ALTENA, M. A high-order-accurate unstructured mesh finite-volume scheme for the advection–diffusion equation. *Journal of Computational Physics*. 2002; **181**: 729-752.

GOOCH, O. C., NEJAT, A. e MICHALAK, K. On obtaining high-order finite-volume solutions to the Euler equations on unstructured meshes. *Proceedings of the Eighteenth AIAA Computational Fluid Dynamics Conference*. 2007; **2**: 1-16.

GOUMIRI, I. R.; PRÉVOST, J. H.; PREISIG, M. The Effect of Capillary Pressure on the Saturation Equation of Two-Phase Flow in Porous Media. *International Journal for Numerical and Analytical Methods in Geomechanics*. 2012; **36**, 352-361.

GOTTLIEB, S.; SHU, C. W. Total Variation Diminishing Runge-Kutta Schemes. *Mathematics of computation of the American Mathematical Society*. 1998; **67**: 73-85.

GOTTLIEB, S.; SHU, C. W.; TADMOR, E. Strong Stability-Preserving High-Order Time Discretization Methods. *SIAM review*. 2001; **43**: 89-112.

GREGOR J.; GASSNER.; FRIEDER, L.; CLAUS, D.; DIETER, M. A Discontinuous Galerkin Scheme Based on a Space-Time Expansion II. Viscous Flow Equations in Multi dimensions. *Journal of Scientific Computing*. 2008; **34**: 260-286.

GUIMARÃES, L. D. N.; COSTA, L. M.; SANTOS, E. A.; COSTA, A. P.; PONTES FILHO, I. D. S. Multiphase Flow of Water and Oil in Heterogeneous Reservoir. *MECOM 2002*. 2002: 670-682.

HARTEN, A. Higher Resolution Schemes for Hyperbolic Conservation Laws. *Journal of Computational Physics*, 1983; **49**: 357-393.

HARTEN, A.; Engquist, B.; Osher, S.; Chakravarthy, S. Uniformly High Order Essentially Nonoscillatory Schemes, III, *Journal of Computational Physics*. 1987; **71**: 231.

HELMIG, R. Multiphase flow and transport processes in the subsurface: a contribution to the modeling of hydrosystems. Springer-Verlag, Stuttgart, Germany, 1997.

HERMELINE, F. Approximation of 2-D and 3-D diffusion operators with variable full tensor coefficients on arbitrary meshes. *Computer methods in applied mechanics and engineering*. 2007; **196**: 2497-2526.

HIRSCH, C. In: Numerical Computation of Internal and External Flows: Volume I, Computational Methods for Inviscid and Viscous Flows. New York, Wiley & Sons, 1992.

HIRSCH, C. In: Numerical Computation of Internal and External Flows: Volume II, Computational Methods for Inviscid and Viscous Flows. New York, Wiley & Sons, 1992.

HOTEIT, H.; FIROOZABADI, A. Numerical Modeling of Two-Phase Flow in Heterogeneous Permeable Media with Different Capillarity Pressures. *Advances in Water Resources*. 2008; **31**: 56-73.

HU, C.; SHU, C. W. Weighted Essentially Non-Oscillatory Schemes on Triangular Meshes. *Journal of Computational Physics*. 1999; **150**: 97-127.

HUGHES, T. J. R. Recent progress in the development and understanding of SUPG methods with special reference to the compressible Euler and Navier-Stokes equations. *Intl. J. for Numer. Meth. in Fluids*. 1987; **7**: 1261-1275.

HUNGER, R. Floating Point Operations in Matrix-Vector Calculus. Munich: Munich University of Technology, Inst. for Circuit Theory and Signal Processing. 2007.

HYMAN, J.; SHASHKOV, M.; STEINBERG, S. The numerical solution of diffusion problems in strongly heterogeneous non-isotropic materials. *Journal of Computational Physics*. 1997; **132**: 130-148.

HURTADO, F. S. V. Uma Formulação de Volumes Finitos Baseada em Elementos para a Simulação do Deslocamento Bifásico Imiscível em Meio Poroso. Dissertação de Mestrado. Universidade Federal de Santa Catarina – Florianópolis. 2005.

HURTADO, F. S. V., MALISKA, A. F., da SILVA, A. F., CORDAZZO, J. A Quadrilateral Element-Based Finite-Volume Formulation for the Simulation of Complex Reservoir. In: SPE paper 107444-MS presented at the SPE Latin American and Caribbean Petroleum Engineering Conference held in Buenos Aires, Argentina, 2007: 15-18.

ISLAM, R.; MOUSSAVIZADEGAN, S. H.; MUSTAFIZ, S.; ABOU-KASSEM, J. H. Advanced petroleum reservoir simulation (Vol. 40). John Wiley & Sons. 2010.

IVAN, L.; GROTH, C. P. T. High-order Solution-Adaptive Central Essentially Nonoscillatory (CENO) Method for Viscous Flows. In *49th AIAA Aerospace Sciences Meeting including the New Horizons Forum and Aerospace Exposition AIAA*. 2011; **367**: 4-7).

KEILEGAVLEN, E.; KOZDON, J. E.; MALLISON, B. T. Multidimensional upstream weighting for multiphase transport on general grids. *Computational Geosciences*. 2012; **16**: 1021-1042.

KEILEGAVLEN, E.; KOZDON, J. E.; MALLISON, B.T. Monotone Multidimensional Upstream Weighting for Multiphase Transport on General Grids. *12th European Conference on the Mathematics of Oil Recovery*. 2010.

KHOOZAN, D.; FIROOZABADI, B.; RASHTCHIAN, D.; ASHJARI, M. A. Analytical Dual Mesh Method for Two-Phase Flow Through Highly Heterogeneous Porous Media. *Journal of hydrology*, 2011; **400**: 195-205.

KIM, D.; CHOI, H. A Second-Order Time-Accurate Finite Volume Method for Unsteady Incompressible Flow on Hybrid Unstructured Grids. *Journal of Computational Physics*. 2000; **162**, 411-428.

KLAUSEN, R. A.; EIGESTAD, G. T. Multi-Point Flux Approximations and Finite Element Methods; Practical Aspects of Discontinuous Media. In *9th European Conference on the Mathematics of Oil Recovery*. 2004.

KLAUSEN, R. A.; WINTHER, R. Convergence of Multipoint Flux Approximations on Quadrilateral Grids. *Numerical methods for partial differential equations*. 2006; **22**: 1438-1454.

KO, S. C. M.; AU, A. D. K. A Weighted Nine-Point Finite-Difference Scheme for Eliminating the Grid Orientation Effect in Numerical Reservoir Simulation, SPE paper 8248 presented

at the 54th Annual Fall Technical Conference and Exhibition, Las Vegas, Nevada, Sept., 1979.

KOU, J.; SUN, S. A New Treatment of Capillarity to Improve the Stability of IMPES Two-Phase Flow Formulation. *Computers & Fluids*. 2010; **39**: 1923-1931.

KOZDON, J. E; MALLISON, B. T.; GERITSEN, G. T. Multidimensional Upstream Weighting for Multiphase Transport in Porous Media. *Computational Geoscience*, 2011; **15**: 399–419.

KURGANOV, A. and TADMOR, E. New high-resolution central schemes for nonlinear conservation laws and convection-diffusion equations, *Journal of Computational Physics.*, 2000. **160**: 214 - 282.

KURGANOV, A.; NOELLE, S.; PETROVA, G. Semi-discrete central-upwind schemes for hyperbolic conservation laws and Hamilton-Jacobi equations, *SIAM J. Sci. Comput.* 2001; **23**: 707-740.

KUZMIN, D.; SHASHKOV, M. J.; SVYATSKIY, D. A constrained finite element method satisfying the discrete maximum principle for anisotropic diffusion problems. *Journal of Computational Physics*. 2009; **228**: 3448-3463.

LAMINE, M. S. Multi-dimensional Higher Resolution Methods for Flow in Porous Media. Swensea University, *Thesis*, 2009.

LAMINE, S.; EDWARDS, M. G. Multidimensional Convection Schemes for Flow in Porous Media on Structured and Unstructured Quadrilateral Grids. *Journal of Comput. and Applied Mathematics*, 2010; **234**: 2106-2117.

LAMINE, S. e EDWARDS, M. G. Higher Order Cell-Based Multidimensional Upwind Schemes for Flow in Porous Media on Unstructured Grids. *Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering*, 2013; **259**: 103-122.

LAWSON, C. L.; HANSON, R. J. Solving Least Squares Problems. Englewood Cliffs, NJ: Prentice-hall. 1974.

LE POTIER C. Schema Volumes Finis Monotone pour des Operateurs de Diffusion Fortement Anisotropies sur des Maillages de Triangle Nonstructures. C. C. Acad. Sci. 2005.

LEVEQUE, R.; YEE, H. C. A Study of Numerical Methods for Hyperbolic Conservation Laws with Stiff Source Terms. *Journal of Computational Physics*. 1988; **186**: 187-210.

LEVEQUE, R.J. Finite Volume Methods for Hyperbolic Problems. Cambridge University Press-London, 2002.

LEVY, D. W.; POWELL, K. G.; VAN LEER, B. An implementation of a grid-independent upwind scheme for the Euler equations. In *AIAA 9th Computational Fluid Dynamics Conference*. 1989: 8-15.

LIPNIKOV, K; SHASHKOV, M; SVYASTSKIY, D; VASSILEVSKI, Y. U. Monotone finite volume schemes for diffusion equations on unstructured triangular and shape-regular polygonal meshes. *Journal of Computational Physics*, 2007; **227**: 492-512.

LIPNIKOV, K.; SVYATSKIY, D.; VASSILEVSKI, Y. Interpolation-Free Monotone Finite Volume Method for Diffusion Equations on Polygonal Meshes. *Journal of Computational Physics*. 2009; **228**: 703-716.

LIU, Y.; VINOKUR, M.; WANG, Z. J. Spectral (finite) Volume Method for Conservation Laws on Unstructured Grids V: Extension to Three-Dimensional Systems. *Journal of Computational Physics*. 2006; **212**: 454-472.

LIU, Y.; VINOKUR, M.; WANG, Z. J. Spectral Difference Method for Unstructured Grids I: Basic Formulation, *Journal of Computational Physics*. 2006; **216**: 780-801.

LIANG, C.; COX, C.; PLESNIAK, N. A comparison of computational efficiencies of spectral difference method and correction procedure via reconstruction, *Journal of Computational Physics*. 2013; **239**: 138-146.

LLNS. VisIt User's Manual, Version 1.5. Department of Energy by Lawrence Livermore National Laboratory. 2005.

LÖHNER, R. In: *Applied DFD Techniques: An Introduction Based on Finite Element Methods*. New York, Wiley & Sons, 2001.

LONG, Z.; YAO, Q.; SONG, Q.; LI, S. A Second-Order Accurate Finite Volume Method for the Computation of Electrical Conditions Inside a Wire-Plate Electrostatic Precipitator on Unstructured Meshes. *Journal of Electrostatics*. 2009; **67**: 597-604.

LOUBERE, R.; DUMBSER, M.; DIOT, S. A New Family of High Order Unstructured MOOD and ADER Finite Volume Schemes for Multidimensional Systems of Hyperbolic Conservation Laws. 2014.

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.

MALISKA, C. R. Transferência de calor e mecânica dos fluidos computacional: fundamentos e coordenadas generalizadas. Livros Técnicos e Científicos. 2004.

MALISKA, C. R.; CZESNAT, A. O. High Resolution Schemes in Curvilinear Grids for Reducing the Grid Orientation Effects. *Mecánica Computacional Vol. XXII*. M. B. Rosales, V. H. Cortínez y D. V. Bambill (Editores). Bahía Blanca, Argentina, Noviembre 2003.

MALLISON, B.; SWORD, C.; VIARD, T.; MILLIKEN, W.; CHENG, A. Unstructured cut-cell grids for modeling complex reservoirs. In *SPE Reservoir Simulation Symposium*. Society of Petroleum Engineers. 2013, February.

MALTA, S. M. C.; LOULA, A. F. D.; GARCIA, E. L. M. A Post-Processing Technique to Approximate the Velocity Field in Miscible Displacement Simulations. *Matemática contemporânea*. 1995; **8**: 239-268.

MAVRIPIS, Dimitri J. Revisiting the Least-Squares Procedure for Gradient Reconstruction on Structured Meshes. *National Institute of Aerospace Report* 2003; number **06**: 1-21.

- MANDAL, J. C.; RAO, S.; SUBRAMANIAN, J. High-Resolution Finite Volume Computations Using a Novel Weighted Least-Squares Formulation. *International Journal for Numerical Methods in Fluids*. 2008; **56**: 1425–1431.
- MANDAL, J. C.; RAO, S. P. High Resolution Finite Volume Computations on Unstructured Grids Using Solution Dependent Weighted Least Squares Gradients. *Computers & fluids*. 2011; **44**: 23-31.
- MAY, G.; JAMESON, A. A Spectral Difference Method for the Euler and Navier-Stokes Equations on Unstructured Meshes. *AIAA paper*, **304**, 2006.
- MICHALAK, C.; GOOCH, O. C. Accuracy Preserving Limiter for the High-Order Accurate Solution of the Euler Equations. *Journal of Computational Physics*. 2009; **228**: 8693-8711.
- MONTEAGUDO, J. E. P.; FIROOZABADI, A. Comparison of fully implicit and IMPES formulations for simulation of water injection in fractured and unfractured media. *International journal for numerical methods in engineering*. 2007; **69**: 698-728.
- MOOG, G. J. E. A. Advanced Discretization Methods for Flow Simulation Using Unstructured Grids. *Ph. D. Thesis*. 2013.
- NIKITIN, K.; VASSILEVSKI, Y. A Monotone Non-Linear Finite Volume Method for Advection-Diffusion Equations and Multiphase Flows. *Computat Geoscience*. 2013; 1-14.
- NORDBOTTEN, J. M.; AAVATSMARK, I.; EIGESTAD, G. T. Monotonicity of Control Volume Methods. *Numerische Mathematik*. 2007; **106**: 255-288.
- OTTO, S.; DENIER, J. P. An introduction to programming and numerical methods in MATLAB. Springer Science & Business Media. 2005.
- PARK, J. S.; YOON, S. H.; KIM, C. Multi-Dimensional Limiting Process for Hyperbolic Conservation Laws on Unstructured Grids. *Journal of Computational Physics*, 2010; **229**: 788–812.
- PARK, J. S.; KIM, C. Higher-Order Discontinuous Galerkin-MLP Methods on Triangular and Tetrahedral Grids. In Computational Fluid Dynamics Conference (AIAA 2011-3059), Honolulu, Hawaii. 2011: 1-18.
- PARK, J. S.; KIM, C. Multi-dimensional Limiting Strategy for Arbitrary Higher-order Discontinuous Galerkin Methods in Inviscid and Viscous Flows. Seventh International Conference on Computational Fluid Dynamics (ICCFD7 - 4204), Big Island, Hawaii. 2012; 1–19, (a).
- PARK, J. S.; KIM, C. Multi-dimensional limiting process for finite volume methods on unstructured grids. *Computers and Fluids*, 2012; **65**: 8–24, (b).
- PARK, J. S.; KIM, C. Higher-order multi-dimensional limiting strategy for discontinuous Galerkin methods in compressible inviscid and viscous flows. *Computers and Fluids*, 2014; **96**: 377–396.

- PATANKAR, S. *Numerical heat transfer and fluid flow*. CRC Press. 1980.
- PEACEMAN, D. W. *Fundamentals of numerical reservoir simulation*. Elsevier, 1977.
- PINDER, G. F.; GRAY, W. G. *Essentials of Multiphase Flow In Porous Media*. John Wiley & Sons. 2008.
- PLETCHER, R. H.; TANNEHILL, J. C.; ANDERSON, D. *Computational fluid mechanics and heat transfer*. CRC Press.
- PONTING, D.K. Corner Point Geometry in Reservoir Simulation, in: *Proc. of the 1st European Conf. on the Mathematics of Oil Recovery*, Cambridge, 1989, ed. P.R. King Clarendon Press, Oxford. 1992: 45–65.
- POWELL, K. G.; BARTH, T. J.; PARPIA, I. H. A Solution Scheme for the Euler Equations Based on a Multi-Dimensional Wave Model. AIAA 93-0065, Aerospace Sciences Meeting & Exhibit. 1993; **4**: 1-11.
- QUEIROZ, L. E. S, SOUZA, M. R. A., CONTRERAS, F. R. L.; LYRA, P. R. M.; CARVALHO, D. K. E. On the accuracy of a nonlinear finite volume method for the solution of diffusion problems using different interpolations strategies. *Int Journal Numer Meth Fluids*. 2014; **74.4**: 270-291.
- RAMIREZ, G. G. Investigação da Estratégia de Alta-Ordem do Método dos Volumes Finitos Espectral na Simulação de Escoamentos Bifásicos em Reservatórios de Petróleo Heterogêneos e Anisotrópicos; 2014; *Dissertação* (Mestrado em Engenharia Mecânica) - Universidade Federal de Pernambuco.
- RAMSDEN, C.; BENNETT, G.; LONG, A. *High-resolution 3D seismic imaging in practice. The Leading Edge*. 2005; **24**: 423-428.
- 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*. 2004; **193**: 4741-4759.
- RIVIERE, B. Discontinuous Galerkin finite element methods for solving the miscible displacement problem in porous media. *Ph. D. thesis*, 2000. The University of Texas at Austin.
- RIVIERE, B.; WHEELER, M. F. Discontinuous Galerkin Methods for Flow and Transport Problems in Porous Media. *Communications in numerical methods in engineering*. 2002; **18**: 63-68.
- RIVIÈRE, B. Discontinuous Galerkin methods for solving elliptic and parabolic equations: theory and implementation. Society for Industrial and Applied Mathematics. 2008.
- ROE, P. L. Approximate Rieman Solvers, Parameters Vectors and Difference Schemes. *Journal of Computational Physics*, 1981; **43**: 357-372.

ROSLAND, F. A. Modelling of Water-Oil Flow in Reservoirs Including Effects From Gravity, Capillary Pressure and Water Rock Chemistry. Master Thesis. Universitet Stavanger. 2013.

SCHNEIDER, G. E. e RAW, M. J. A Skewed, Positive Influence Coefficient Upwinding Procedure for Control-Volume-Based Finite-Element Convection-Diffusion Computation. *Numerical Heat Transfer*, 1986; **9**: 1-26.

SCHLUMBERGER Geoquest. Eclipse 100 Technical Description, 1997.

SCHLUMBERGER, Eclipse Reference Manual, 2009.

SERNA, S. A Characteristic-Based Nonconvex Entropy-Fix Upwind Scheme for the Ideal Magnetohydrodynamic Equations. *Journal of Computational Physics*. 2009; **228**: 4232-4247.

SHENG, Z.; YUAN, G. The finite volume scheme preserving extremum principle for diffusion equations on polygonal meshes. *Journal of Computational Physics*. 2011; **230**: 2588-2604.

SHENG, Z.; YUAN, G. An improved monotone finite volume scheme for diffusion equation on polygonal meshes. *Journal of Computational Physics*. 2012; **231**: 3739-3754.

SHELDON, J. W.; ZONDEK, B.; Cardwell, W.T. One-Dimensional, Incompressible, Non-Capillary, Two-Phase Fluid Flow in a Porous Medium, *Trans. SPE AIME*. 1959; **216**: 290–296.

SHU, C. W.; OSHER, S. Efficient Implementation Of Essentially Non-Oscillatory Shock-Capturing Schemes 2, *Journal of Computational Physics*. 1989; **83**: 32–78.

SONAR, T. On the Construction of Essentially Non-Oscillatory Finite Volume Approximations to Hyperbolic Conservation Laws on General Triangulations: Polynomial Recovery, Accuracy and Stencil Selection. *Computer methods in applied mechanics and engineering*. 1998; **140**: 157-181.

SOUZA, M. R. A.; ANTUNES, A. R. E.; LYRA, P. R. M.; CARVALHO, D. K. E. A Very Higher Order Cell Centered Finite Volume Scheme for the Simulation of Oil-Water Displacements in Petroleum Reservoirs. In: *11th World Congress on Computational Mechanics (WCCM XI)*, 20 e 25 de Julho de 2012; Barcelona, Espanha.

SOUZA, M. R. A.; CONTRERAS, F. R. L.; LYRA, P. R. M.; CARVALHO, D. K. E. A MPFA-Diamond Method Coupled to a Very Higher Order Multidimensional Upstream Scheme for the Solution of Two-Phase Flows in Heterogeneous and Non-Isotropic Petroleum Reservoirs. In: *1st Pan-American Congress on Computational Mechanics*. 27 a 29 de Abril de 2015 – Buenos Aires, Argentina (a).

SOUZA, M. R. A.; CONTRERAS, F. R. L.; LYRA, P. R. M.; CARVALHO, D. K. E. Multi-Dimensional Limiting Process for Higher Order Finite Volume Method in Anisotropic and Heterogeneous Petroleum Reservoir Simulation. In: *Society for Industrial and Applied Mathematics – SIAM*. 29 de Junho a 02 de Julho de 2015 – Stanford, EUA (b).

SPEKREIJSE, S., Multigrid Discretization of Monotone Second-Order Discretizations of Hyperbolic Conservation Laws. *Math. Comp.*, 1987; **49**.

STONE, H. L.; GARDER, A. O. Analysis of Gas-Cap or Dissolved-Gas Reservoirs, *Trans. SPE AIME*. 1961; **222**: 92–104.

SUN, Y.; WANG, Z. J.; LIU, Y. Spectral (finite) Volume Method for Conservation Laws on Unstructured Grids VI: Extension to Viscous Flow. *Journal of Computational Physics*. 2006; **215**: 41-58.

SWEBY, P., “High Resolution Schemes Using Flux Limiters for Hyperbolic Conservation Laws,” *SIAM J. Num. Anal.*, 1984; **21**.

STEGER, J.L.; WARMING, R.F. Flux Vector Splitting of the Inviscid Gas dynamic Equations with Application to Finite-Difference Methods. *Journal of Computational Physics*, 1981. **40**: 263 - 293.

TODD, M. R.; O’DELL, P. M.; HIRASAKI, G. J. Methods for Increased Accuracy in Numerical Reservoir Simulations. *SPE Journal* 3516. 515–530.

TRAN, D.; MASSON, C.; SMAÏLI, A. A stable second-order mass-weighted upwind scheme for unstructured meshes. *International journal for numerical methods in fluids*. 2006; **51**: 749-771.

VAN ALBADA, G. D.; VAN LEER, B. ROBERTS Jr, W. W. A Comparative Study of Computational Methods in Cosmic gas Dynamics. *Astronomy and Astrophysics*. 1982; **32**: 76-84.

VAN LEER, B. Towards the Ultimate Conservative Difference Scheme. II. Monotonicity and Conservation Combined in a Second-Order Scheme. *Journal of Computational Physics*. 1974; **14**: 361-370.

VAN LEER, B. Towards the ultimate conservative difference scheme. V.A Second-order sequel to Godunov’s method, *Journal of Computational Physics*. 1979; **32**: 101.

VAN BORSELEN, R. G.; SCHONEWILLE, M.A.; HEGGE, R. F. 3D surface-related multiple elimination: Acquisition and processing solutions. *The Leading Edge*. 2005; **24**: 260-268.

VAN DEN ABEELE, K.; LACOR, C. An Accuracy and Stability Study of the 2D Spectral Volume Method. *Journal of Computational Physics*. 2006; **226**: 1007-1026.

VAN DEN ABEELE, K.; BROECKHOVEN, T.; LACOR, C. Dispersion and Dissipation Properties of the 1D Spectral Volume Method and Application to a p-Multigrid Algorithm. *Journal of Computational Physics*. 2007; **224**: 616-636.

VAN GENUCHTEN, M. T. A Closed-Form Equation for Predicting the Hydraulic Conductivity of Unsaturated Soils. *Soil science society of America journal*. 1980 **44**: 892-898.

VENKATAKRISHNAN, V. Convergence to Steady-State Solutions of the Euler Equations on Unstructured Grids with Limiters. *J. Computational Physics*, 1995. **118**: 120-130.

VERSTEEG, H. K.; MALALASEKERA, W. An Introduction to Computational Fluid Dynamics: The Finite Volume Method. 1995.

WANG, Z. J. Spectral (finite) volume method for conservation laws on unstructured grids: basic formulation. *Journal of Computational Physics*. 2002; **178**: 210–51.

WANG, Z. J. Adaptive High-Order Methods in Computational Fluid Dynamics. World Scientific. 2011; **2**:

WANG, Z. J. Spectral (Finite) Volume Method for Conservation Laws on Unstructured Grids: Basic Formulation. *Journal of Computational Physics*. 2002; **178**: 210-251.

WANG, Z. J.; LIU, Y. Spectral (finite) Volume Method for Conservation Laws on Unstructured Grids: II. Extension to Two-Dimensional Scalar Equation. *Journal of Computational Physics*. 2002; **179**: 665-697.

WANG, Z. J.; ZHANG, L.; LIU, Y. Spectral (finite) Volume Method For Conservation Laws on Unstructured Grids IV: Extension to Two-Dimensional Systems. *Journal of Computational Physics*. 2004; **194**: 716-741.

WANG, Z. J.; LIU, Y. Extension of the Spectral Volume Method to High-Order Boundary Representation. *Journal of Computational Physics*. 2006; **211**: 154-178.

WOLFRAM, S. Mathematica: a system for doing mathematics by computer. Addison Wesley Longman Publishing Co., Inc. 1991.

WOODFIELD, P. L.; SUZUKI, K.; NAKABE, K. A Simple Strategy for Constructing Bounded Convection Schemes for Unstructured Grids. *International Journal for Numerical methods in Fluids* 2004; **46**: 1007 – 1024.

YANOSIK, J. L. e MCCRACKEN, T. A. A Nine-Point Finite Difference Reservoir Simulator for Realistic Prediction of Adverse Mobility Ratio Displacements. *SPE Journal* 5734, 1979. 253-262.

YU, M.; WANG, Z. J.; LIU, Y. On the Accuracy and Efficiency of Discontinuous Galerkin, Spectral Difference and Correction Procedure via Reconstruction Methods. *Journal of Computational Physics*. 2014; **259**: 70-95.

YUAN, G.; SHENG, Z. Monotone finite volume schemes for diffusion equations on polygonal meshes. *Journal of computational physics*, 2008. **227**: 6288-6312.

ZALESAK, S. T., “Fully multidimensional flux-corrected transport algorithms for fluids,” *Journal of Computational Physics*. 1979; **31**: 335–362.

ZHENG, H. Quasi-Positive Families of Flux Continuous Finite Volume Schemes in Two and Three Dimensions. Swensea University, *Thesis*, 2010.