

UNIVERSIDADE FEDERAL DO ESPÍRITO SANTO
CENTRO TECNOLÓGICO
PROGRAMA DE PÓS-GRADUAÇÃO EM INFORMÁTICA

SUZI LARA WERNER

MÉTODO DE ESTABILIZAÇÃO SUBMALHA DIFUSÃO
DINÂMICA APLICADO NA SIMULAÇÃO DE ESCOAMENTOS
MISCÍVEIS EM MEIOS POROSOS

VITÓRIA

2011

SUZI LARA WERNER

**MÉTODO DE ESTABILIZAÇÃO SUBMALHA DIFUSÃO
DINÂMICA APLICADO NA SIMULAÇÃO DE ESCOAMENTOS
MISCÍVEIS EM MEIOS POROSOS**

Dissertação apresentada ao Programa de Pós-Graduação em Informática do Centro Tecnológico da Universidade Federal do Espírito Santo, como requisito parcial para obtenção do Grau de Mestre em Informática. Orientador: Prof. Dr. Isaac Pinheiro dos Santos. Co-orientadora: Profa. Dra. Lucia Catabriga.

VITÓRIA

2011

Método de Estabilização Submalha Difusão Dinâmica Aplicado na Simulação de
Escoamentos Miscíveis em Meios Porosos

Suzi Lara Werner

Dissertação submetida ao programa de Pós-Graduação em Informática do Centro Tecnológico da Universidade Federal do Espírito Santo, como requisito parcial para a obtenção do Grau de Mestre em Informática.

Prof. Isaac Pinheiro dos Santos, D.Sc.

Profa. Lucia Catabriga, D.Sc.

Profa. Maria Cristina Rangel, D.Sc.

Profa. Paula Rogéria Lima Couto, D.Sc.

Profa. Regina Célia Cerqueira de Almeida, D.Sc.

UNIVERSIDADE FEDERAL DO ESPÍRITO SANTO

Vitória, Fevereiro de 2011

Dados Internacionais de Catalogação-na-publicação (CIP)
(Biblioteca Central da Universidade Federal do Espírito Santo, ES, Brasil)

Werner, Suzi Lara, 1984 -

W494m

Método de Estabilização Submalha Difusão Dinâmica Aplicado na
Simulação de Escoamentos Miscíveis em Meios Porosos/ Suzi Lara

Werner. - 2011

109 f. :il.

Orientador: Isaac Pinheiro dos Santos

Co-Orientadora: Lucia Catabriga

Dissertação (mestrado) - Universidade Federal do Espírito Santo, Centro
Tecnológico

1. Método dos elementos finitos. 2. Materiais porosos. 3. Petróleo -
Reservas. 4. Simulação numérica. I. Santos, Isaac Pinheiro dos, 1974-
II. Catabriga, Lucia. III. Universidade Federal do Espírito Santo. Centro
Tecnológico. IV. Título. CDU:004

"A mente que se abre a uma nova idéia jamais voltará ao seu tamanho original."

Albert Einstein

Para minha querida família e meu amado Daniel.

AGRADECIMENTOS

Agradeço primeiramente a Deus pela oportunidade que me deu em estar no plano material conquistando esta vitória.

Aos meus pais, Leniuza Werner e Sinval Pedro Werner, pelo amor incondicional.

À minha irmã, Suzanne Porcina Werner, pela ajuda constante.

Ao meu namorado, Daniel Pereira Simões, por sempre estar ao meu lado, me respeitando e incentivando os meus estudos.

Aos meus avós, Edith Heringer de Andrade Werner e Jaime Werner, que são o alicerce de nossa família, exemplos de amor e de luta que busco seguir.

Aos meus tios e primos, pelo carinho e incentivo.

Aos meus orientadores, Isaac Pinheiro dos Santos e Lucia Catabriga, pela dedicação com que me acompanharam durante a trajetória de estudos.

Aos funcionários e alunos do Departamento de Pós-Graduação em Informática do Centro Tecnológico da Universidade Federal do Espírito Santo, que de forma direta ou indireta contribuíram para o meu aprendizado.

Aos colegas de trabalho da empresa Accenture do Brasil LTDA. que me apoiaram e me incentivaram na busca deste sonho.

À CAPES pelo auxílio financeiro, indispensável para realização deste trabalho.

Resumo da dissertação apresentada ao PPGI/UFES como parte dos requisitos necessários para a obtenção do grau de Mestre.

Método de Estabilização Submalha Difusão Dinâmica Aplicado na Simulação de
Escoamentos Miscíveis em Meios Porosos.

Suzi Lara Werner

Fevereiro/2011

Orientador: Isaac Pinheiro dos Santos

Co-orientadora: Lucia Catabriga

Programa: Informática

Este trabalho apresenta uma formulação do método dos elementos finitos para resolver um sistema acoplado não linear de equações diferenciais parciais, composto de um sub-sistema elíptico para a pressão-velocidade e uma equação de transporte advectivo-difusivo para a concentração, que modela o problema de escoamento miscível em meios porosos. A pressão é determinada pelo método de Galerkin clássico e para o campo de velocidades é considerado uma técnica de pós-processamento. Na equação de concentração é utilizado o método de estabilização submalha Difusão Dinâmica. Este método, baseado no formalismo multiescala, consiste em adicionar à formulação clássica de Galerkin enriquecida com funções bolhas um operador dissipativo não-linear e não parametrizado agindo isotropicamente em todas as escalas da discretização. O sistema resultante das equações não lineares é resolvido pelo método implícito de avanço no tempo preditor/multicorretor. Para verificar a metodologia adotada são analisados um problema de injeção de traçadores e um problema de injeção contínua bidimensionais, sendo realizadas comparações com a formulação estabilizada SUPG/CAU.

Abstract of dissertation presented to PPGI/UFES as a partial fulfilment of the requirements for the degree of Master.

The Stabilized Dynamic Diffusion Method Applied in Miscible Displacement
Simulations

Suzi Lara Werner

February/2011

Advisor: Isaac Pinheiro dos Santos

Advisor: Lucia Catabriga

Department: Computer Science

This work presents a finite element formulation to solve a coupled non-linear system of partial differential equations, composed by an elliptic sub-system for the pressure-velocity and an advective-diffusive transport equation for the concentration for miscible displacements in porous media. The pressure is determined by the classical Galerkin method and it is considered a post-processing technique for the velocity field. The Dynamic Diffusion subgrid stabilization method is used in the concentration equation. This method is based on the multiscale formalism and consist to add in the classical Galerkin formulation enriched with bubbles functions a nonlinear and non parameterized dissipative operator acting isotropically in all discretization scales. The resulting nonlinear system of ordinary differential equations are discretized using the implicit predictor/multicorrector scheme. Numerical simulations of tracer injection processes and miscible displacements with high adverse mobility ratios in two dimensions are reported, and comparisons with the SUPG/CAU stabilized formulation are performed.

Sumário

1	Introdução	19
1.1	Organização dos Capítulos	24
2	Propriedades Físicas dos Reservatórios de Petróleo e Tipos de Recuperação de Petróleo	25
2.1	Propriedades Físicas Básicas	25
2.1.1	Fluido	25
2.1.2	Rocha Reservatório	26
2.2	Tipos de Recuperação de Petróleo	28
2.2.1	Recuperação Primária	28
2.2.2	Recuperação Secundária	29
2.2.3	Recuperação Terciária	29
3	Formulação Matemática	30
3.1	Lei da Conservação de Massa	30
3.2	Lei de Darcy	32
3.3	Equação da Pressão	34
3.4	Equação da Concentração	35
3.5	Condições de Contorno e Condições Iniciais	40

4	Método de Estabilização Difusão Dinâmica	42
4.1	Método de Estabilização Difusão Dinâmica Para Problemas de Transporte Transientes	43
4.2	Experimentos Numéricos	51
4.2.1	Exemplo 01 - Advecção em um campo de escoamento rotacional com solução suave	52
4.2.2	Exemplo 02 - Problema de Advecção-Difusão-Reação	52
5	Formulação Numérica Variacional	55
5.1	Formulação Variacional para a Equação da Pressão	56
5.2	Técnica de Pós-Processamento e Lei de Darcy	57
5.3	Formulação Estabilizada Difusão Dinâmica para a Equação de Concentração	59
5.4	Formulação Estabilizada SUPG/CAU para a Equação de Concentração	62
6	Estrutura de Dados Elemento-Por-Elemento	65
6.1	Matrizes dos Elementos	68
6.1.1	Matriz Local Associada à Equação da Pressão	69
6.1.2	Matrizes Locais Associadas à Equação da Velocidade	70
	Matriz Local Associada ao Termo da lei de Darcy	70
	Matriz Local Associada ao Divergente da velocidade	71
	Matriz Local Associada ao Gradiente da Pressão	71
	Matriz Local Associada ao Divergente de Fluxo	72
6.1.3	Matrizes Locais Associadas à Equação da Concentração com a Formulação SUPG/CAU	73
	Matriz Local de Massa de Galerkin para a Concentração . . .	73

Matriz Local de Advecção de Galerkin para a Concentração	74
Matriz Local de Difusão de Galerkin para a Concentração	75
Correção SUPG da Matriz de Massa	75
Correção SUPG da Matriz de Advecção	76
Correção SUPG da Matriz de Difusão	76
Matriz de Correção do Operador Captura de Descontinuidades CAU	76
6.1.4 Matrizes Locais Associadas à Equação da Concentração com a Formulação Difusão Dinâmica	77
Matriz Local de Massa 4×4 do Método DD para a Concentração	77
Matriz Local de Advecção 4×4 do Método DD para a Concentração	78
Matriz Local de Difusão 4×4 do Método DD para a Concentração	80
Matriz Local de Rigidez 4×4 do Método DD para a Concentração	82
Matriz Local de Massa Condensada do Método DD para a Concentração	82
Matriz Local de Rigidez Condensada do Método DD para a Concentração	83
6.2 Integração no Tempo	83
6.3 Resolução dos Sistemas Lineares	85
7 Experimentos Numéricos	86
7.1 Características Gerais dos Experimentos	86
7.2 Injeção de Traçadores	89
7.3 Injeção Contínua	95

7.4	Desempenho Computacional	100
8	Conclusões	102

Lista de Figuras

1.1	Corte vertical de um reservatório sujeito a um processo de recuperação de petróleo com injeção de água. Figura extraída de [15].	20
2.1	Volume de referência em um meio poroso.	27
2.2	Caracterização das fases em um deslocamento bifásico.	28
3.1	Volume de controle.	31
3.2	Esquema utilizado para a realização do experimento de Darcy.	33
3.3	Descrição das condições de contorno.	41
4.1	Representação do cenário $\mathbb{P}_1/bolha$	46
4.2	Exemplo 01 - Transporte rotativo: soluções aproximadas CAU e DD usando uma malha 40×40	53
4.3	Exemplo 02 - soluções exatas e pelo método DD, usando uma malha 40×40	54
6.1	Elemento triangular linear.	67
6.2	Transformação de variáveis globais (x, y) para variáveis locais (ξ, η)	68
7.1	Malha <i>five-spot</i>	87
7.2	Modelo <i>five-spot</i>	87
7.3	Tipos de orientação de malhas.	88

7.4	Malhas estruturadas.	88
7.5	Comparação da solução DD do histórico da concentração no poço produtor observado em 3000 dias com uma solução semi-analítica e a solução SUPG/CAU.	90
7.6	Curvas de concentração para os níveis de dispersão, $\alpha_l = 10.0$ e $\alpha_t = 1.0$, 800 dias e $\Delta t = 1.0$ - Problema do traçador.	91
7.7	Curvas de concentração para os níveis de dispersão, $\alpha_l = 10.0$ e $\alpha_t = 1.0$, 1200 dias e $\Delta t = 1.0$ - Problema do traçador.	91
7.8	Curvas de concentração para os níveis de dispersão, $\alpha_l = 1.0$ e $\alpha_t = 0.0$, 800 dias e $\Delta t = 1.0$ - Problema do traçador.	92
7.9	Curvas de concentração para os níveis de dispersão, $\alpha_l = 1.0$ e $\alpha_t = 0.0$, 1200 dias e $\Delta t = 1.0$ - Problema do traçador.	92
7.10	Injeção de traçador com os níveis $\alpha_l = 10.0$ e $\alpha_t = 1.0$, malha 20×20 e $\Delta t = 5.0$	93
7.11	Injeção de traçador com os níveis $\alpha_l = 10.0$ e $\alpha_t = 1.0$, malha 40×40 e $\Delta t = 2.5$	93
7.12	Injeção de traçador com os níveis $\alpha_l = 10.0$ e $\alpha_t = 1.0$, malha 80×80 e $\Delta t = 1.25$	94
7.13	Injeção de traçador com os níveis $\alpha_l = 10.0$ e $\alpha_t = 1.0$, malha 100×100 e $\Delta t = 0.5$	94
7.14	Curvas de concentração do deslocamento miscível com razão de mobilidade unitária para 250 e 500 dias.	96
7.15	Curvas de concentração do deslocamento miscível com razão de mobilidade unitária para 750 e 1000 dias.	97
7.16	Curvas de concentração do deslocamento miscível com razão de mobilidade adversa para 250 e 500 dias.	98
7.17	Curvas de concentração do deslocamento miscível com razão de mobilidade adversa para 750 e 1000 dias.	99

7.18	Comparação das curvas de concentração do deslocamento com razão de mobilidade adversa considerando duas orientações de malha para o método Difusão Dinâmica.	100
------	----------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------	-----

Lista de Tabelas

7.1 Desempenho Computacional - método SUPG/CAU *versus* método DD.101

Capítulo 1

Introdução

A simulação computacional de escoamento de fluidos em meios porosos é de grande interesse para estudos em diversas áreas, tais como: exploração de petróleo, contaminação de lençóis freáticos, extração de águas subterrâneas, etc. Torna-se cada vez mais necessário que os resultados obtidos nestas simulações tenham grande precisão, ou seja, representem uma solução fisicamente real de forma satisfatória. Na área de exploração de petróleo, os métodos computacionais auxiliam muito em tomadas de decisão, pois através deles é viável testar as melhores práticas para realizar a extração e com menor custo financeiro. Além disso, muitos experimentos são inviáveis de serem realizados em laboratórios.

O petróleo consiste fundamentalmente de átomos de carbono, hidrogênio e quase sempre de enxofre. Sua formação vem da decomposição de restos de animais e vegetais mortos ao longo de milhares de anos. Estes restos foram sendo cobertos por sedimentos, que mais tarde se transformaram em rochas sedimentares, também conhecidas como rochas geradoras. Pela ação do calor e da alta pressão, provocados pelo empilhamento das camadas sedimentares, é possível o surgimento de reações complexas, formando o petróleo. Após sua formação, o petróleo migra, principalmente por capilaridade e forças de empuxo, para a rocha reservatório, não conseguindo se deslocar para cima em função da presença de uma rocha capeadora, que tem baixa permeabilidade e que o envolve na parte superior [15]. Para extrair o petróleo acumulado nas rochas reservatório, várias técnicas são utilizadas. No momento da descoberta do reservatório, a alta pressão existente no mesmo faz com

que o petróleo seja expulso do reservatório sem a necessidade de interferência. Neste estágio ocorre a recuperação primária do óleo. À medida que o petróleo vai sendo expelido, a pressão no reservatório diminui, e com isso a capacidade de produção sem utilização de técnicas para a extração fica inviável. Para recuperar a grande parte de petróleo remanescente, utiliza-se técnicas de recuperação avançadas. A Fig. 1.1 ilustra um reservatório sujeito a um processo de recuperação de petróleo com injeção de água.

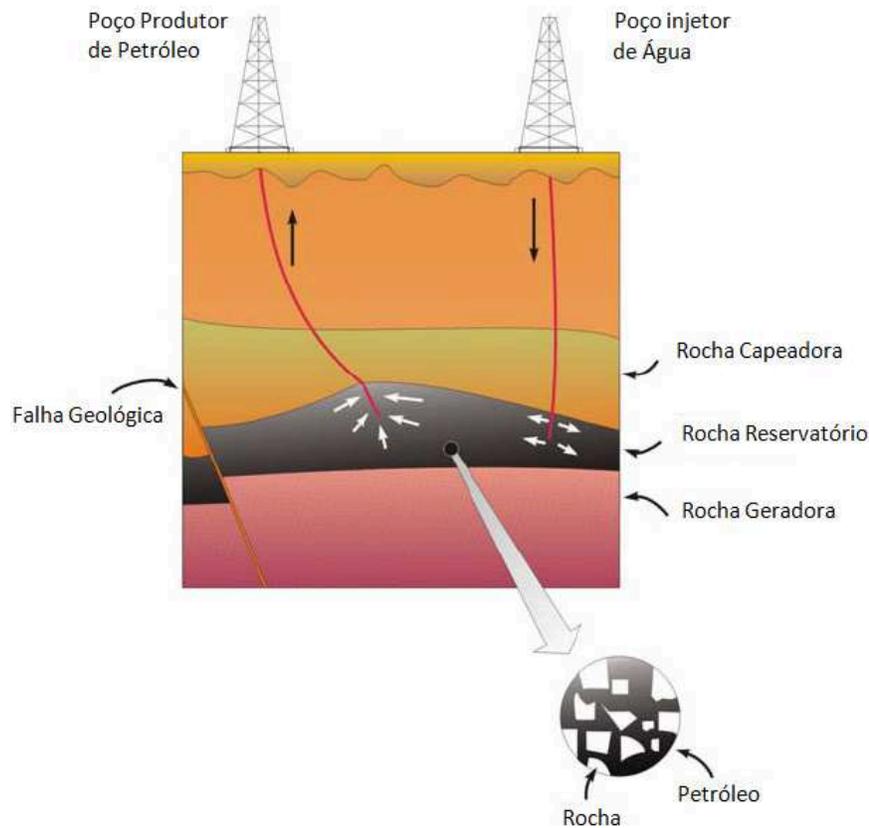


Figura 1.1: Corte vertical de um reservatório sujeito a um processo de recuperação de petróleo com injeção de água. Figura extraída de [15].

Apesar da dificuldade existente na caracterização de reservatórios de petróleo e na determinação de todas as propriedades físicas que afetam o escoamento do óleo, o modelo matemático utilizado para simulação deste escoamento fornece soluções bastante satisfatórias e cada vez mais aperfeiçoadas através da utilização de métodos que incrementam o modelo.

O modelo matemático que governa o escoamento do fluido em um meio poroso é constituído por um conjunto de equações diferenciais, originadas da lei de conservação da mistura, da lei de Darcy e de uma equação de advecção-difusão, predominantemente advectiva [49]. A combinação destas equações origina as equações da pressão e da concentração. Assim, o modelo matemático é descrito por um sistema fortemente acoplado, formado pela equação da pressão, lei de Darcy e equação da concentração. Este sistema é altamente complexo, o que torna inviável sua resolução de forma analítica. Desta forma, são utilizados métodos numéricos para resolver as equações que constituem o modelo, resultando em uma solução aproximada que representa satisfatoriamente o escoamento no meio poroso. As principais técnicas numéricas utilizadas na resolução de tais problemas são os métodos de diferenças finitas, volumes finitos e elementos finitos [15].

Neste trabalho utiliza-se o método dos elementos finitos para aproximar as grandezas físicas de interesse: pressão, velocidade e concentração. Este método é amplamente utilizado devido a sua capacidade de trabalhar com malhas não-estruturadas, que representam formas geológicas complexas, por exemplo. O método dos elementos finitos é uma técnica usada para construir soluções aproximadas através do particionamento do domínio em um número finito de subdomínios, denominados elementos finitos, visando solucionar problemas de valor de contorno e de valor inicial [31].

A formulação clássica de Galerkin para o método dos elementos finitos gera bons resultados quando aplicada a problemas predominantemente difusivos, como é o caso da equação da pressão. Nos casos em que os efeitos advectivos predominam em relação aos difusivos, esta formulação não é indicada, pois a solução numérica obtida pode apresentar oscilações espúrias. Neste caso, é necessário o acréscimo de uma estabilização à formulação de Galerkin. Devido a equação da concentração possuir um comportamento altamente advectivo, para sua aproximação o método de Galerkin será empregado com as seguintes formulações estabilizadas: SUPG (*Streamline Upwind Petrov Galerkin*) [10] com o operador de captura de descontinuidade CAU (*Consistent Approximate Upwind*) [24] e Difusão Dinâmica [2] para problemas transientes, que é a metodologia proposta neste trabalho, aplicada a escoamento miscível em meios porosos.

A formulação estabilizada SUPG, apresentada em [10], consiste em adicionar uma

difusão artificial somente na direção das linhas de fluxo. Este método apresenta soluções numéricas globalmente estáveis para problemas com predominância advectiva, porém nas regiões do domínio com altos gradientes, podem ocorrer instabilidades nos resultados. Neste caso, para a obtenção de uma solução numérica livre de oscilações localizadas, pode-se recorrer aos métodos de captura de descontinuidades, como por exemplo, o método CAU [24]. A formulação SUPG com o operador de captura de descontinuidade CAU, vem sendo utilizada com sucesso para resolver numericamente a equação da concentração, presente no modelo matemático utilizado na simulação de problemas de escoamento miscível em meios porosos [47, 1, 17, 43].

Além do SUPG/CAU, outras formulações estabilizadas são utilizadas para problemas predominantemente advectivos. Pode-se destacar neste contexto os chamados métodos multiescalas, popularizados nos últimos quinze anos pela necessidade de tratar problemas que exibem comportamento multiescala. Estes métodos, conforme descrito em [54], consistem em decompor a variável de interesse (e a função peso) em duas partes: a primeira representada pela discretização utilizada (macro escala ou escala resolvida) e a segunda relacionada às escalas menores, submalhas (micro escala ou escala não resolvida). Esta decomposição permite dividir a formulação variacional do problema em dois sub-problemas: um para a macro escala e outro para a micro escala. Os efeitos da micro escala são incorporados na macro escala resultando em um problema enriquecido para as escalas resolvidas, que é então solucionado numericamente [54]. Exemplos de métodos multiescalas são: *Residual-Free Bubbles* (RFB) [8, 5, 22, 6, 7, 23], *Variational Multiscale* (VMS) [32, 34, 29], *Subgrid Stabilization* (SGS) [27, 40, 28, 37, 30] e *Nonlinear Subgrid Stabilization* (NSGS) [55, 54]. O método NSGS, inspirado nos métodos SGS e CAU, consiste em uma decomposição multiescala do espaço de aproximação e do campo de velocidades da equação de transporte, adicionando uma difusão artificial extra não linear e não parametrizada somente na micro escala. Isto conduz a um método auto adaptativo e livre de parâmetros de estabilização.

Recentemente, o método de estabilização submalha Difusão Dinâmica (DD) foi introduzido em [2] para a equação de transporte advectivo-difusivo-reativo estacionário. Esta metodologia, inspirada no método NSGS, adiciona à formulação clássica de Galerkin um operador extra dissipativo não-linear agindo isotropicamente

em todas as escalas da discretização. Assim como no NSGS, a quantidade de difusão artificial é determinada pela solução da equação na escala resolvida à nível de elemento, conduzindo a um método sem parâmetros de estabilização.

A obtenção do campo de velocidades também requer um cuidado especial, pois ele influencia no cálculo da concentração da mistura. A velocidade, quando calculada diretamente pela lei de Darcy, apresenta uma ordem de aproximação inferior à pressão e à concentração. Para solução deste problema, utiliza-se a técnica de pós-processamento desenvolvida em [43, 44, 41, 45]. Esta técnica consiste em primeiro resolver a equação da pressão e posteriormente obter uma aproximação para a velocidade, considerando uma forma residual da lei de Darcy com a pressão conhecida, combinada com a equação de balanço de massa. Este procedimento conduz a um método mais preciso e com melhores taxas de convergência.

Neste trabalho, o método de estabilização submalha Difusão Dinâmica, para o cenário de discretização $\mathbb{P}_1/bolha$ (ver [2]), é estendido para problemas transientes de advecção-difusão-reação. Esta nova metodologia é utilizada para resolver a equação de concentração do modelo matemático que governa o processo de escoamento em meios porosos, com o campo de velocidades calculado usando a técnica de pós-processamento. São apresentados experimentos numéricos mostrando a performance deste método, como também comparações com a formulação SUPG/CAU. A equação da pressão é resolvida via método de Galerkin clássico. Para o armazenamento das matrizes resultantes do modelo numérico, que são altamente esparsas, é utilizado a estratégia de armazenamento elemento-por-elemento [35].

A discretização utilizando o método dos elementos finitos resulta em um sistema acoplado de equações diferenciais parciais não-lineares. Na solução deste sistema não é indicado usar métodos diretos, pois a medida que se aumenta o tamanho do problema, estes métodos se tornam mais dispendiosos que os métodos iterativos em relação ao tempo de processamento e ao consumo de memória. Neste caso, é mais vantajoso usar métodos iterativos. Dentre os métodos iterativos, são adotados os não-estacionários baseados nos sub-espacos de Krylov, como o método dos Gradientes Conjugados (GC) utilizado para resolução dos sistemas resultantes da equação da pressão e da velocidade, e o método do Resíduo Mínimo Generalizado (GMRES) [53] utilizado para resolução do sistema resultante da equação da concentração.

São realizados experimentos para duas classes de problemas: injeção de traçadores e injeção contínua. A injeção de traçadores é importante para obter informações que caracterizam o meio como barreiras ao escoamento, direção de escoamento, dispersividade, etc. [18]. A injeção contínua está relacionada à recuperação de óleo, sendo caracterizada pela injeção de um fluido buscando o deslocamento do óleo na direção do poço produtor.

1.1 Organização dos Capítulos

No Capítulo 2 são apresentados alguns conceitos físicos sobre meios porosos, as propriedades físicas de reservatórios de petróleo e os tipos de recuperação de petróleo.

As equações matemáticas que governam o escoamento de fluido miscível em meios porosos e suas características fundamentais são apresentadas no Capítulo 3.

No Capítulo 4 é apresentado o método de estabilização submalha Difusão Dinâmica aplicado a problemas transientes de advecção-difusão-reação. São realizados experimentos numéricos, validando a metodologia proposta.

A formulação variacional do modelo matemático composto pelas equações da pressão, da velocidade e da concentração é descrita no Capítulo 5. Para a equação da pressão é aplicado o método de Galerkin padrão, na equação do campo de velocidades é utilizada a técnica de pós-processamento e para a equação da concentração, utilizam-se as formulações SUPG/CAU e Difusão Dinâmica para problemas transientes.

No Capítulo 6 são apresentadas as matrizes dos elementos associadas às formulações numéricas descritas no Capítulo 5, a estrutura de dados elemento-por-elemento e um algoritmo preditor/multicorretor de integração no tempo.

No Capítulo 7 são discutidos os resultados dos experimentos numéricos realizados para verificar a formulação numérica adotada.

No Capítulo 8 são apresentadas as conclusões, as considerações finais e trabalhos futuros.

Capítulo 2

Propriedades Físicas dos Reservatórios de Petróleo e Tipos de Recuperação de Petróleo

Neste capítulo são descritos alguns conceitos fundamentais sobre meios porosos, e mais especificamente, sobre reservatórios de petróleo. Tais conceitos são essenciais para o entendimento das equações que governam o escoamento de fluido em meios porosos.

2.1 Propriedades Físicas Básicas

2.1.1 Fluido

A matéria existe basicamente em dois estados, sólido e fluido. O fluido é dividido em estados líquido e gasoso [21]. Uma das características que diferem os sólidos dos fluidos é a capacidade que os primeiros possuem de suportar forças que provocam tensões de cisalhamento, que não causem ruptura do material, enquanto que fluidos são incapazes de resistir a elas. Assim, o fluido é uma substância que se deforma continuamente quando submetido a uma tensão de cisalhamento, por menor que ela seja.

Alguns fluidos escoam com mais facilidade do que outros. Isso ocorre devido à propriedade de viscosidade do fluido. A viscosidade mede a resistência de um fluido em escoar. Os fluidos escoam da região de maior pressão para a de menor pressão.

Os fenômenos relacionados com o movimento de fluidos podem ser bastante complexos. Devido à inviabilidade de se realizar experimentos em laboratório ou em reservatórios de petróleo, os métodos numéricos são freqüentemente a única ferramenta que se dispõe para o estudo, com algum nível de detalhe, dos fenômenos que ocorrem durante o escoamento de um fluido [21]. Neste trabalho são utilizadas ferramentas numéricas para determinar a solução aproximada do modelo matemático que representa o escoamento do fluido em meios porosos.

2.1.2 Rocha Reservatório

A natureza das rochas e dos fluidos que compõem o meio poroso são duas importantes características de um reservatório de petróleo [11]. O petróleo tem origem em transformações químicas ocorridas na matéria orgânica depositada na rocha geradora, um mineral argiloso e rico em matéria orgânica, existente em ambiente de baixa energia. Posteriormente, com o soterramento do material depositado ocorre aumento da pressão e da temperatura, fatores que são os responsáveis pela transformação da matéria orgânica em petróleo [26].

A estrutura de um reservatório de petróleo é complexa devido à heterogeneidade e principalmente à estratificação em camadas, que é natural nas rochas reservatório (rochas características de um reservatório de petróleo) [4]. A soma do volume de materiais sólidos e do volume de espaços vazios representa o volume total ocupado por uma rocha reservatório. Ao volume de espaços vazios dá-se o nome de volume poroso. A porosidade representa a fração de volume que está disponível para escoamento. Assim, a porosidade (ϕ) de uma rocha é definida como a razão entre volume poroso e o volume total da rocha [48], ou seja,

$$\phi = \frac{V_v}{V} = \frac{V_v}{V_v + V_s}, \quad (2.1)$$

onde V_v e V_s são o volume vazio e o volume ocupado pela matriz sólida, respectivamente, em um dado volume de referência V , como representado na Fig. 2.1.

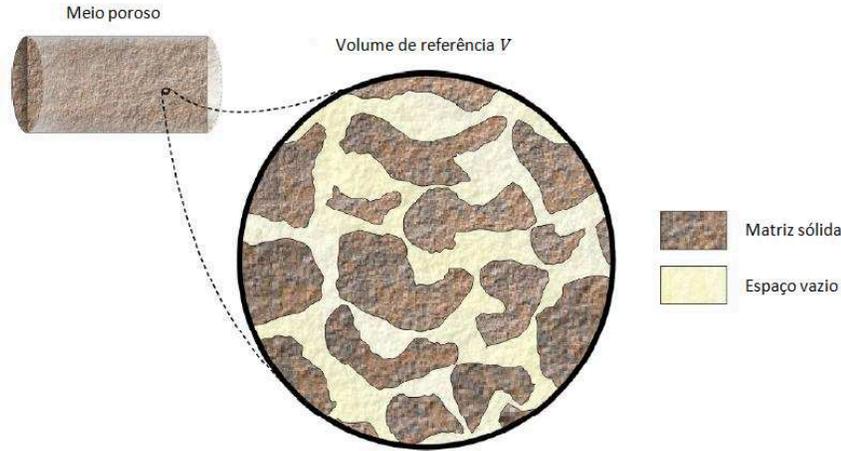


Figura 2.1: Volume de referência em um meio poroso.

A permeabilidade da rocha é a capacidade que ela possui de permitir o escoamento de fluidos. Quando existe um único fluido saturando a rocha, esta propriedade recebe o nome de *permeabilidade absoluta*, denotada por \mathbf{k} . A *permeabilidade efetiva* \mathbf{k}_α (da fase α) é a capacidade que a rocha possui de deixar fluir preferencialmente um fluido particular quando outro fluido está presente no reservatório. A *permeabilidade relativa* $k_{r\alpha}$, amplamente usada em simulação de reservatórios, é a razão entre a permeabilidade efetiva e a permeabilidade absoluta, ou seja,

$$\mathbf{k}_\alpha = k_{r\alpha} \mathbf{k}. \quad (2.2)$$

Em um escoamento bifásico, a fase que adere com maior facilidade à superfície sólida do meio poroso é chamada de *fase molhante*. A outra fase é chamada de *não-molhante*. Exemplos de fase molhante e não-molhante são a água e o óleo (Fig. 2.2). Esta caracterização das fases está intimamente ligada à definição de pressão capilar. Devido à curvatura e à tensão de superfície da interface entre as duas fases, a pressão no fluido molhante é menor do que aquela no fluido não-molhante. A pressão capilar p_c é dada por

$$p_c = p_o - p_w, \quad (2.3)$$

onde p_o é a pressão do fluido não-molhante (óleo) e p_w é a pressão do fluido molhante (água).

A *saturação* de uma fase fluida é definida como a fração do volume vazio de um

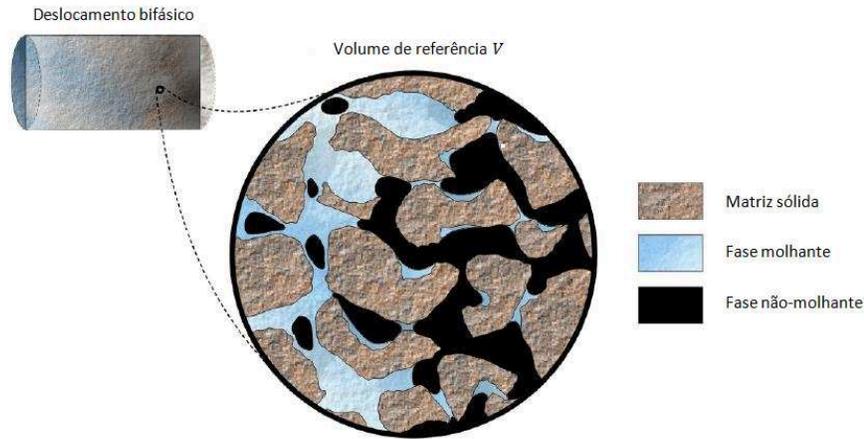


Figura 2.2: Caracterização das fases em um deslocamento bifásico.

meio poroso ocupado por esta fase, ou seja,

$$S_{fase} = \frac{V_{fase}}{V_v}. \quad (2.4)$$

Os dois fluidos, molhante (w) e não-molhante (o), juntos ocupando os espaços vazios implicando na relação

$$S_w + S_o = 1. \quad (2.5)$$

A massa específica ρ é a massa de fluido por unidade de volume. Quando a densidade de um fluido é constante ao longo do escoamento, ou possui variações desprezíveis, define-se o escoamento como *incompressível*.

As variáveis citadas nesta seção são importantes na composição do modelo matemático para simulação de reservatório de petróleo, que será abordado no Capítulo 3.

2.2 Tipos de Recuperação de Petróleo

2.2.1 Recuperação Primária

A natureza dos fluidos que preenchem um reservatório de petróleo depende fortemente do estágio de recuperação do óleo. Em um estágio, muito inicial, o

reservatório contém essencialmente um tipo de fluido, tal como gás ou óleo (a presença de água pode ser normalmente negligenciada) [11]. Muitas vezes a pressão nesse estágio é muito alta, o que faz com que o óleo seja produzido pela decomposição natural, sem a necessidade de utilização de técnicas avançadas de recuperação. A esse estágio dá-se o nome de recuperação primária, que se encerra quando a pressão de equilíbrio entre o campo de óleo e a atmosfera ocorre. A recuperação primária comumente deixa de 70%-85% dos hidrocarbonetos no reservatório [11].

2.2.2 Recuperação Secundária

Para recuperar parte do óleo remanescente da recuperação primária, utiliza-se a técnica de injeção de fluido (normalmente água) em alguns poços de injeção, enquanto o óleo é produzido através dos poços de produção. Esta técnica faz com que a pressão no reservatório permaneça alta, havendo assim deslocamento do óleo em direção ao poço produtor. Na recuperação secundária, o deslocamento é imiscível, composto por duas fases, água e óleo, não ocorrendo transferência de massa entre as fases. Esse fato pode ocasionar altas tensões nas interfaces entre os fluidos, reduzindo a capacidade do fluido injetado de deslocar o óleo. Após este estágio, 50% ou mais de hidrocarbonetos permanecem no reservatório [11].

2.2.3 Recuperação Terciária

Para recuperar mais hidrocarbonetos algumas técnicas para recuperação têm sido desenvolvidas. Tais técnicas envolvem complexos químicos e efeitos térmicos e são chamadas de recuperação terciária. Neste estágio, o óleo é recuperado injetando-se materiais que normalmente não estão presentes em um reservatório de petróleo. O objetivo principal das técnicas melhoradas de recuperação é alcançar miscibilidade e dessa maneira eliminar a saturação do óleo residual. Essa miscibilidade é alcançada com o aumento da temperatura ou injeção de outra espécie química como por exemplo CO_2 [11].

Capítulo 3

Formulação Matemática

Neste capítulo são enunciadas as equações que governam o escoamento de fluido miscível em meios porosos, assim como conceitos fundamentais relativos a este modelo. Modelos matemáticos de reservatórios de petróleo têm sido estudados e utilizados desde 1800 [11]. O modelo matemático é composto por equações diferenciais parciais que descrevem o escoamento de fluidos em um reservatório, juntamente com as condições de contorno e/ou condições iniciais.

O movimento do fluido no reservatório é governado pela lei de conservação da massa, equação do momento e equação da energia. Na simulação do escoamento no reservatório, a equação do momento é dada na forma da lei de Darcy. Derivada empiricamente, essa lei indica uma relação linear entre a velocidade do escoamento do fluido e o gradiente de pressão [11].

Para descrição das equações governantes será considerado o escoamento miscível de fluido incompressível que ocupa todo o espaço vazio no meio poroso isotrópico.

3.1 Lei da Conservação de Massa

A lei da conservação da massa, ou equação de continuidade, estabelece o balanço de massa de um determinado fluido, tomando como referência um elemento de volume de controle.

Considera-se como volume de controle um cubo retangular, tal que suas faces sejam

paralelas aos eixos das coordenadas x, y e z . O centro do cubo é indicado por (x, y, z) e seu comprimento na direção das coordenadas x, y e z é $\Delta x, \Delta y$ e Δz , respectivamente. O volume de controle segue ilustrado na Fig. 3.1.

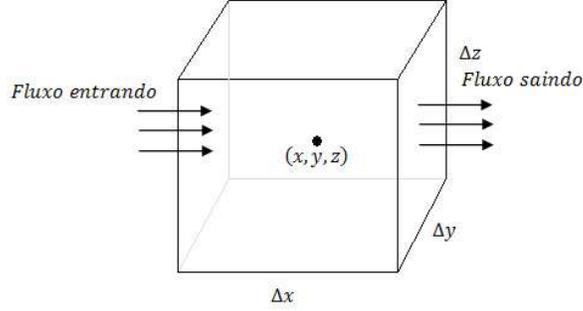


Figura 3.1: Volume de controle.

As variáveis espaciais e temporais são representadas por $\mathbf{x} = (x, y, z)$ e t , respectivamente. Denota-se ϕ para a porosidade do meio e ρ para a massa específica do fluido (massa por unidade de volume), $\mathbf{v} = (v_1, v_2, v_3)$ para a velocidade superficial de Darcy e q para fontes e sumidouros.

Durante um intervalo de tempo Δt , o fluido entra por uma face do cubo e sai pela outra. As componentes x, y e z do fluxo de massa do fluido são $\rho v_1, \rho v_2$ e ρv_3 , respectivamente. Assim, para a coordenada x , a massa que escoia entrando sobre a superfície do cubo, $x - \frac{\Delta x}{2}$, por unidade de tempo, é dada por

$$(\rho v_1)_{x - \frac{\Delta x}{2}, y, z} \Delta y \Delta z \quad (3.1)$$

e a massa que escoia saindo através da superfície do cubo, $x + \frac{\Delta x}{2}$,

$$(\rho v_1)_{x + \frac{\Delta x}{2}, y, z} \Delta y \Delta z. \quad (3.2)$$

De forma análoga, são deduzidas as expressões que fornecem a vazão de massa nas direções das coordenadas y e z .

A massa acumulada devido à compressibilidade, por unidade de tempo é dada por

$$\frac{\partial(\phi\rho)}{\partial t} \Delta x \Delta y \Delta z \quad (3.3)$$

e a massa acumulada/decrementada devido a fontes ou sorvedouros q é

$$-q \Delta x \Delta y \Delta z. \quad (3.4)$$

A diferença entre a vazão de massa que entra e a vazão de massa que sai da superfície do cubo é igual à soma da massa acumulada dentro do cubo, ou seja,

$$\begin{aligned}
& \left[(\rho v_1)_{x-\frac{\Delta x}{2},y,z} - (\rho v_1)_{x+\frac{\Delta x}{2},y,z} \right] \Delta y \Delta z \\
& + \left[(\rho v_2)_{x,y-\frac{\Delta y}{2},z} - (\rho v_2)_{x,y+\frac{\Delta y}{2},z} \right] \Delta x \Delta z \\
& + \left[(\rho v_3)_{x,y,z-\frac{\Delta z}{2}} - (\rho v_3)_{x,y,z+\frac{\Delta z}{2}} \right] \Delta x \Delta y = \\
& \quad \left(\frac{\partial(\phi\rho)}{\partial t} - q \right) \Delta x \Delta y \Delta z.
\end{aligned} \tag{3.5}$$

Dividindo esta equação por $\Delta x \Delta y \Delta z$, obtém-se

$$\begin{aligned}
& - \left[\frac{(\rho v_1)_{x+\frac{\Delta x}{2},y,z} - (\rho v_1)_{x-\frac{\Delta x}{2},y,z}}{\Delta x} \right] \\
& - \left[\frac{(\rho v_2)_{x,y+\frac{\Delta y}{2},z} - (\rho v_2)_{x,y-\frac{\Delta y}{2},z}}{\Delta y} \right] \\
& - \left[\frac{(\rho v_3)_{x,y,z+\frac{\Delta z}{2}} - (\rho v_3)_{x,y,z-\frac{\Delta z}{2}}}{\Delta z} \right] = \\
& \quad \left(\frac{\partial(\phi\rho)}{\partial t} - q \right).
\end{aligned} \tag{3.6}$$

Fazendo $\Delta x \rightarrow 0$, $\Delta y \rightarrow 0$ e $\Delta z \rightarrow 0$, obtém-se a equação de conservação da massa, dada por

$$\frac{\partial(\phi\rho)}{\partial t} = -\nabla \cdot (\rho \mathbf{v}) + q, \tag{3.7}$$

onde

$$\nabla \cdot \mathbf{v} = \frac{\partial v_1}{\partial x} + \frac{\partial v_2}{\partial y} + \frac{\partial v_3}{\partial z} \tag{3.8}$$

é o divergente do campo vetorial \mathbf{v} .

Na próxima seção é apresentada a derivação do campo de velocidades, dada pela lei de Darcy.

3.2 Lei de Darcy

Em 1856, Henry Darcy realizou um experimento que resultou em uma relação entre a taxa de fluxo do fluido e o gradiente de pressão. Este experimento tinha como escopo a purificação de água através de um filtro de areia (ver Fig. 3.2). Darcy percebeu

uma relação direta entre a vazão que atravessava o leito de areia e a diferença de carga associada a essa vazão, sendo a velocidade de filtração proporcional ao gradiente da pressão [50]. A relação encontrada é dada por

$$\mathbf{v} = -\frac{1}{\mu} \mathbf{K} (\nabla p - \rho g \nabla z), \quad (3.9)$$

onde \mathbf{K} é o tensor de permeabilidade absoluta do meio poroso, μ é a viscosidade do fluido, g é a magnitude da aceleração gravitacional e z é a profundidade. O gradiente da pressão é dado por

$$\nabla p = \left(\frac{\partial p}{\partial x}, \frac{\partial p}{\partial y}, \frac{\partial p}{\partial z} \right).$$

Em alguns casos é possível assumir que \mathbf{K} seja um tensor diagonal, ou seja,

$$\mathbf{K} = \begin{bmatrix} k_{11} & 0 & 0 \\ 0 & k_{22} & 0 \\ 0 & 0 & k_{33} \end{bmatrix}.$$

Se $k_{11} = k_{22} = k_{33}$ o meio poroso é chamado isotrópico, caso contrário é chamado anisotrópico.

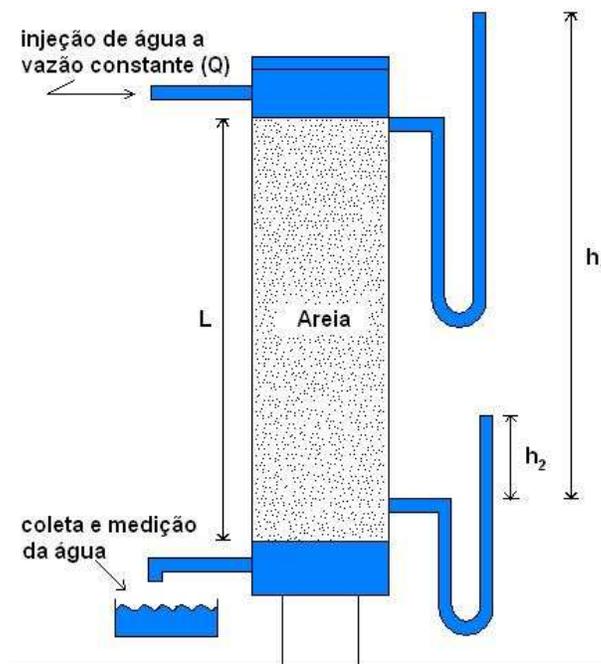


Figura 3.2: Esquema utilizado para a realização do experimento de Darcy.

3.3 Equação da Pressão

A equação da pressão é obtida através da combinação da equação de conservação da massa e a lei de Darcy [11]. Inserindo a velocidade relativa de Darcy (Eq. (3.9)) na equação da continuidade (Eq. (3.7)), resulta na seguinte expressão:

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

Assumindo que os efeitos gravitacionais são desprezíveis [48], a Eq. (3.10) pode ser reescrita como

$$\frac{\partial(\phi\rho)}{\partial t} = \nabla \cdot \left(\frac{\rho}{\mu} \mathbf{K} \nabla p \right) + q. \quad (3.11)$$

A Equação (3.11) possui duas variáveis dependentes, a pressão (p) e a massa específica (ρ). Para obter uma equação com uma única variável dependente, utiliza-se uma equação de estado, relacionada à compressibilidade do fluido. A equação de estado, expressa em termos da compressibilidade do fluido (c_f), é dada por

$$c_f = - \frac{1}{V} \frac{\partial V}{\partial p} \Bigg|_T = \frac{1}{\rho} \frac{\partial \rho}{\partial p} \Bigg|_T, \quad (3.12)$$

onde a temperatura T é fixa e o volume V ocupado pelo fluido é constante, nas condições do reservatório. Integrando a Eq. (3.12), obtém-se

$$\rho = \rho^o e^{c_f(p-p^o)}, \quad (3.13)$$

onde ρ^o é o valor da densidade com a pressão p^o . Usando a expansão em série de Taylor de $\rho = \rho(p)$ em torno de p^o ,

$$\rho = \rho^o \left\{ 1 + c_f(p - p^o) + \frac{1}{2!} c_f^2(p - p^o)^2 + \dots \right\}$$

pode-se obter de forma aproximada o valor de ρ , dado por

$$\rho \approx \rho^o(1 + c_f(p - p^o)). \quad (3.14)$$

A compressibilidade da rocha é definida por

$$c_R = \frac{1}{\phi} \frac{d\phi}{dp}. \quad (3.15)$$

Integrando a equação (3.15), obtém-se

$$\phi = \phi^o e^{c_R(p-p^o)}, \quad (3.16)$$

onde ϕ^o é a porosidade em p^o . Similarmente, obtém-se uma aproximação para ϕ , via expansão em série de Taylor, dada por

$$\phi \approx \phi^o(1 + c_R(p - p^o)). \quad (3.17)$$

Segue-se que

$$\frac{d\phi}{dp} = \phi^o c_R. \quad (3.18)$$

Diferenciando o lado esquerdo de (3.11), a equação da continuidade resulta em

$$\left(\phi \frac{\partial(\rho)}{\partial p} + \rho \frac{d\phi}{dp} \right) \frac{\partial p}{\partial t} = \nabla \cdot \left(\frac{\rho}{\mu} \mathbf{K} \nabla p \right) + q. \quad (3.19)$$

Substituindo (3.12) e (3.18) em (3.19), obtém-se

$$\rho (\phi c_f + \phi^o c_R) \frac{\partial p}{\partial t} = \nabla \cdot \left(\frac{\rho}{\mu} \mathbf{K} \nabla p \right) + q.$$

Como a compressibilidade total é dada por

$$c_t = c_f + \frac{\phi^o}{\phi} c_R, \quad (3.20)$$

segue-se que

$$\phi \rho c_t \frac{\partial p}{\partial t} = \nabla \cdot \left(\frac{\rho}{\mu} \mathbf{K} \nabla p \right) + q, \quad (3.21)$$

uma equação parabólica em p , com ρ dado por (3.14).

Considerando o escoamento incompressível e a porosidade constante, segue-se que $c_f = c_R = 0$ e a Eq. (3.21) é simplificada, resultando na equação que governa o campo de pressão, dada por

$$\nabla \cdot \left(\frac{1}{\mu} \mathbf{K} \nabla p \right) + q = 0. \quad (3.22)$$

Na próxima seção é desenvolvida a derivação da equação da concentração. As equações da continuidade, lei de Darcy e concentração formam um sistema de equações diferenciais parciais, que modela o comportamento físico do problema de deslocamento miscível de fluidos incompressíveis em meios porosos.

3.4 Equação da Concentração

O fluido que se movimenta no meio poroso de volume V é composto por dois componentes, óleo (o) e solvente (s), formando uma única fase. Seja a taxa de

massa acumulada do componente i no volume V do meio poroso dada pela Eq. (3.23), descrita em [51],

$$\frac{d}{dt} \int_V \phi \rho c_i(\mathbf{x}, t) dV, \quad i = o, s, \quad (3.23)$$

onde $c_i \in [0, 1]$ é a concentração do componente i na fase. Restringindo a lei de Darcy ao componente i , obtém-se sua velocidade v_i , dada por

$$v_i = -c_i \frac{\mathbf{K}}{\mu} (\nabla p - \rho g \nabla z) = c_i \mathbf{v}.$$

O deslocamento miscível é caracterizado pelos processos de difusão e dispersão. A difusão é governada pela lei de Fick, que em linhas gerais, é o resultado do movimento aleatório das moléculas no fluido [51]. Este movimento é representado pela expressão

$$\frac{\partial V}{\partial t} = -\alpha_m A \frac{\partial C}{\partial x}, \quad (3.24)$$

onde V é o volume do fluido que passa pelo meio poroso na direção x , cuja face de entrada do meio tem área A , C é a concentração do fluido e α_m é o coeficiente de difusão molecular. Da lei de Fick (3.24), obtém-se a taxa do fluxo difusivo

$$v_{i,diff} = -\phi \alpha_m \nabla c_i. \quad (3.25)$$

A taxa do fluxo dispersivo é obtida da lei de dispersão e pode ser escrita como

$$v_{i,disp} = -\alpha_l |v_i| \frac{\partial c_i}{\partial \hat{e}_l} - \alpha_t |v_i| \frac{\partial c_i}{\partial \hat{e}_t}, \quad (3.26)$$

onde α_l é o coeficiente de dispersão longitudinal, α_t é o coeficiente de dispersão transversal, \hat{e}_l e \hat{e}_t são vetores unitários paralelos e perpendiculares a \mathbf{v} , respectivamente.

Para realizar uma transformação de coordenadas na Eq. (3.26) são definidas as seguintes relações

$$\hat{e}_l = \hat{e}_x \cos(\theta) + \hat{e}_y \sin(\theta); \quad (3.27)$$

$$\hat{e}_t = -\hat{e}_x \sin(\theta) + \hat{e}_y \cos(\theta); \quad (3.28)$$

$$\cos(\theta) = \frac{v_x}{|\mathbf{v}|}; \quad (3.29)$$

$$\sin(\theta) = \frac{v_y}{|\mathbf{v}|}, \quad (3.30)$$

onde θ é o ângulo entre \hat{e}_x e \hat{e}_y que são os vetores unitários cartesianos.

Utilizando estas relações de transformação de coordenadas na lei de dispersão (3.27), resulta na expressão

$$v_{i,disp} = -\alpha_l |\mathbf{v}| \left(\frac{v_x}{|\mathbf{v}|} \frac{\partial c_i}{\partial x} + \frac{v_y}{|\mathbf{v}|} \frac{\partial c_i}{\partial y} \right) \left(\frac{v_x}{|\mathbf{v}|} \hat{e}_x + \frac{v_y}{|\mathbf{v}|} \hat{e}_y \right) - \alpha_t |\mathbf{v}| \left(-\frac{v_y}{|\mathbf{v}|} \frac{\partial c_i}{\partial x} + \frac{v_x}{|\mathbf{v}|} \frac{\partial c_i}{\partial y} \right) \left(-\frac{v_y}{|\mathbf{v}|} \hat{e}_x + \frac{v_x}{|\mathbf{v}|} \hat{e}_y \right),$$

que depois de simplificada, tem a forma

$$v_{i,disp} = -\frac{\alpha_l}{|\mathbf{v}|} \left[\left(-v_x^2 \frac{c_i}{\partial x} + v_x v_y \frac{\partial c_i}{\partial y} \right) \hat{e}_x + \left(v_x v_y \frac{c_i}{\partial x} + v_y^2 \frac{\partial c_i}{\partial y} \right) \hat{e}_y \right] - \frac{\alpha_t}{|\mathbf{v}|} \left[\left(v_y^2 \frac{c_i}{\partial x} - v_x v_y \frac{\partial c_i}{\partial y} \right) \hat{e}_x + \left(-v_x v_y \frac{c_i}{\partial x} + v_x^2 \frac{\partial c_i}{\partial y} \right) \hat{e}_y \right]. \quad (3.31)$$

De (3.23), (3.24), (3.31) e utilizando o teorema da divergência, obtém-se a equação de concentração, dada por

$$\int_V \frac{\partial}{\partial t} (\phi \rho c_i) dV = - \int_V \nabla \cdot (\rho c_i \mathbf{v} + \rho v_{i,diff} + \rho v_{i,disp}) dV + \int_V \tilde{c}_i \rho q dV, \quad (3.32)$$

onde \tilde{c}_i é tanto a concentração do componente i no poço injetor quanto a concentração residente no poço produtor. Assumindo incompressibilidade do fluido e da rocha, a Eq. (3.32) resulta em

$$\int_V \left[\phi \frac{\partial c_i}{\partial t} - \nabla \cdot (\mathbf{D} \nabla c_i - \mathbf{v} c_i) \right] dV = \int_V \tilde{c}_i q dV, \quad (3.33)$$

sendo \mathbf{D} o tensor de difusão-dispersão, definido pela expressão (ver [47])

$$\mathbf{D} = \begin{bmatrix} \alpha_m & 0 \\ 0 & \alpha_m \end{bmatrix} + \frac{\alpha_l}{|\mathbf{v}|} \begin{bmatrix} v_x v_x & v_x v_y \\ v_y v_x & v_y v_y \end{bmatrix} + |\mathbf{v}| \begin{bmatrix} \alpha_t & 0 \\ 0 & \alpha_t \end{bmatrix} - \frac{\alpha_t}{|\mathbf{v}|} \begin{bmatrix} v_x v_x & v_x v_y \\ v_y v_x & v_y v_y \end{bmatrix}. \quad (3.34)$$

Utilizando a notação

$$v_x v_x = v_{xx}, \quad v_x v_y = v_{xy} \quad e \quad v_y v_y = v_{yy},$$

o tensor \mathbf{D} pode ser reescrito da seguinte forma

$$\mathbf{D} = \frac{1}{|\mathbf{v}|} \begin{bmatrix} \alpha_m |\mathbf{v}| + \alpha_t |\mathbf{v}|^2 + (\alpha_l - \alpha_t) v_{xx} & (\alpha_l - \alpha_t) v_{xy} \\ (\alpha_l - \alpha_t) v_{xy} & \alpha_m |\mathbf{v}| + \alpha_t |\mathbf{v}|^2 + (\alpha_l - \alpha_t) v_{yy} \end{bmatrix} \quad (3.35)$$

ou

$$\mathbf{D} = \begin{bmatrix} d_{11} & d_{12} \\ d_{21} & d_{22} \end{bmatrix}, \quad (3.36)$$

onde

$$\begin{aligned}
d_{11} &= \frac{1}{|\mathbf{v}|}(\alpha_m|\mathbf{v}| + \alpha_t|\mathbf{v}|^2 + (\alpha_l - \alpha_t)v_{xx}); \\
d_{12} &= \frac{1}{|\mathbf{v}|}(\alpha_l - \alpha_t)v_{xy}; \\
d_{21} &= \frac{1}{|\mathbf{v}|}(\alpha_l - \alpha_t)v_{xy}; \\
d_{22} &= \frac{1}{|\mathbf{v}|}(\alpha_m|\mathbf{v}| + \alpha_t|\mathbf{v}|^2 + (\alpha_l - \alpha_t)v_{yy}).
\end{aligned} \tag{3.37}$$

Como V é um volume arbitrário, pode-se obter a forma diferencial da Eq. (3.33), que é um sistema acoplado dado por

$$\phi \frac{\partial c_i}{\partial t} - \nabla \cdot (\mathbf{D} \nabla c_i - \mathbf{v} c_i) = \tilde{c}_i q, \quad i = o, s. \tag{3.38}$$

As equações que constituem este sistema são chamadas de *equação do óleo* e *equação do solvente*. Somando estas equações e utilizando o resultado $c_o + c_s = 1$, obtém-se o sistema

$$-\nabla \cdot \left(\frac{\mathbf{K}}{\mu(c)} (\nabla p - \rho g \nabla z) \right) = \nabla \cdot \mathbf{v} - q \tag{3.39}$$

$$\phi \frac{\partial c}{\partial t} - \nabla \cdot (\mathbf{D}(\mathbf{v}) \nabla c - \mathbf{v} c) = \tilde{c} q, \tag{3.40}$$

onde $c = c_s$ e $\tilde{c} = \tilde{c}_s$. A Eq. (3.39) é a equação da pressão, obtida em (3.16) e a Eq. (3.40) é a equação da concentração do solvente, que pode ser escrita como

$$\phi \frac{\partial c}{\partial t} + \nabla \cdot (c \mathbf{v}) - \nabla \cdot (\mathbf{D}(\mathbf{v}) \nabla c) = \tilde{c} q. \tag{3.41}$$

Usando a regra de Leibniz [57],

$$\nabla \cdot (c \mathbf{v}) = \mathbf{v} \cdot \nabla c + c \nabla \cdot \mathbf{v} = \mathbf{v} \cdot \nabla c + q c,$$

a Eq. (3.41) pode ser reescrita como

$$\phi \frac{\partial c}{\partial t} + \mathbf{v} \cdot \nabla c - \nabla \cdot (\mathbf{D}(\mathbf{v}) \nabla c) + c q = \tilde{c} q. \tag{3.42}$$

A fonte externa q é diferente de zero apenas nos poços injetor e produtor. Como a concentração injetada no poço injetor e a concentração residente no poço produtor são iguais [3], a equação da concentração é reescrita como

$$\phi \frac{\partial c}{\partial t} + \mathbf{v} \cdot \nabla c - \nabla \cdot (\mathbf{D}(\mathbf{v}) \nabla c) = 0, \tag{3.43}$$

uma equação de transporte transiente do tipo advectivo-difusivo.

As equações da pressão (Eq. 3.22), da lei de Darcy (3.9) e da concentração (Eq. 3.43) formam um sistema acoplado de equações diferenciais parciais não lineares que modela o escoamento de fluido incompressível em meios porosos. Este sistema é dado por

$$\nabla \cdot \mathbf{v} - q = 0; \quad (3.44)$$

$$\mathbf{v} = -\mathbf{A}(c)\nabla p; \quad (3.45)$$

$$\phi \frac{\partial c}{\partial t} + \mathbf{v} \cdot \nabla c - \nabla \cdot (\mathbf{D}(\mathbf{v})\nabla c) = 0, \quad (3.46)$$

onde \mathbf{v} é o campo de velocidades, q representa os termos de fontes e sumidouros, c é a concentração, p é a pressão e ϕ é a porosidade do meio. Dessa forma, a equação da pressão pode ser reescrita como

$$\nabla \cdot (-\mathbf{A}(c)\nabla p) - q = 0, \quad (3.47)$$

onde o tensor $\mathbf{A}(c)$ é

$$\mathbf{A}(c) = \frac{1}{\mu(c)}\mathbf{K}, \quad (3.48)$$

sendo \mathbf{K} o tensor de permeabilidade e $\mu(c)$ a viscosidade da mistura. O tensor de permeabilidade é dado por

$$\mathbf{K} = \begin{bmatrix} \lambda_{11} & \lambda_{12} \\ \lambda_{21} & \lambda_{22} \end{bmatrix}.$$

Portanto, $\mathbf{A}(c)$ será representado por

$$\mathbf{A} = \begin{bmatrix} \Lambda_{11} & \Lambda_{12} \\ \Lambda_{21} & \Lambda_{22} \end{bmatrix}, \quad (3.49)$$

onde $\Lambda_{ij} = \frac{\lambda_{ij}}{\mu}$ para $i, j = 1, 2$. A viscosidade $\mu(c)$ é dada pela expressão descrita em [60]:

$$\mu(c) = (1 - c + M^{0.25}c)^{-4}\mu_r, \quad (3.50)$$

sendo M a mobilidade do fluido, isto é, a razão entre a viscosidade do fluido residente μ_r e o fluido deslocante μ_d :

$$M = \frac{\mu_r}{\mu_d} = \frac{\mu_o}{\mu_s} = \frac{\mu(0)}{\mu(1)}. \quad (3.51)$$

Quando $M > 1$, a viscosidade do fluido deslocante, o solvente, é menor que a do fluido residente, o óleo. Portanto, podem ocorrer instabilidades nas frentes

de concentração, ocasionando a formação dos dedilhamentos viscosos ("*viscous fingers*") [51]. Essas deformações ocorrem devido à instabilidade do encontro entre os fluidos. Usualmente, o fluido injetado no reservatório para expelir o óleo residente é menos viscoso. Assim, na interface entre os dois fluidos, o menos viscoso invade o óleo, gerando formas semelhante a longos dedos. Quando um desses “dedos” atinge o poço produtor, o fluido deslocante prioriza este caminho e a extração do óleo fica comprometida, pois o fluido injetado através desses caminhos preferenciais se dirige rapidamente para o poço produtor, não se propagando de forma adequada no reservatório, deixando grandes volumes de hidrocarbonetos nos locais onde o deslocamento não ocorreu [48, 58]. Mais detalhes sobre mobilidade adversa serão vistos na descrição dos experimentos numéricos.

Para finalizar a descrição do modelo matemático, na próxima seção são descritas as condições de contorno e as condições iniciais do problema.

3.5 Condições de Contorno e Condições Iniciais

Para que o modelo matemático formado pelas equações (3.44)-(3.46) possua solução única é necessário a especificação das condições de contorno e iniciais. Considere uma região Ω limitada de \mathbb{R}^2 , com fronteira poligonal $\partial\Omega = \Gamma$. Considere também uma divisão da fronteira Γ , dada por

$$\Gamma = \Gamma_i \cup \Gamma_p \cup \Gamma_d \cup \Gamma_n,$$

onde Γ_i , Γ_p , Γ_d , Γ_n são as partes da fronteira com condições de contorno associadas ao poço injetor, ao poço produtor, à pressão prescrita e ao fluxo nulo, respectivamente (ver Fig. 3.3).

As condições de contorno relacionadas à equação da pressão podem ser tanto de Dirichlet quanto de Neumann. Para o caso de fluxo nulo na fronteira são utilizadas as condições de contorno naturais (Neumann). Para a equação da concentração, apenas a concentração no poço injetor é especificada como condição de contorno.

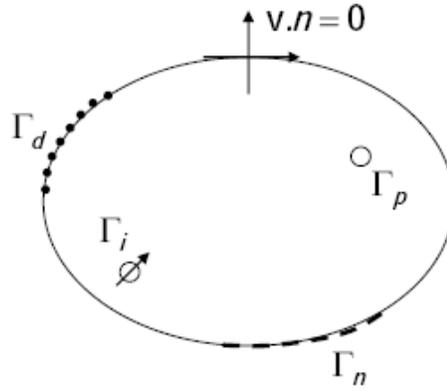


Figura 3.3: Descrição das condições de contorno.

Assim, as condições de contorno adotadas são

$$\mathbf{v} \cdot \mathbf{n} = 0 \quad \text{em} \quad \Gamma_n, \quad \forall t \in (0, t_f]; \quad (3.52)$$

$$\mathbf{D}(\mathbf{v}) \nabla c \cdot \mathbf{n} = 0 \quad \text{em} \quad \Gamma_n; \quad (3.53)$$

$$c(\mathbf{x}, t) = \tilde{c} \quad \text{em} \quad \Gamma_i, \quad (3.54)$$

$$(3.55)$$

onde t_f é o tempo final e \mathbf{n} é o vetor normal unitário externo à fronteira Γ .

As condições iniciais utilizadas para as equações da pressão, concentração e velocidade são

$$p(\mathbf{x}, 0) = p_0 \quad \text{em} \quad \Omega; \quad (3.56)$$

$$c(\mathbf{x}, 0) = c_0 \quad \text{em} \quad \Omega; \quad (3.57)$$

$$\mathbf{v}(\mathbf{x}, 0) = \mathbf{0} = (0, 0) \quad \text{em} \quad \Omega. \quad (3.58)$$

As equações da pressão, velocidade e concentração, juntamente com as condições de contorno e iniciais descrevem o modelo matemático. Este modelo é composto por um sistema de equações diferenciais parciais, acopladas, dependente do tempo e não-linear, inviabilizando desta forma, sua solução analítica. Assim, a solução do modelo é obtida aproximadamente, via metodologias numéricas.

No próximo capítulo é apresentado o método de estabilização submalha Difusão Dinâmica para a equação de transporte advectivo-difusivo-reativo transiente, com advecção dominante. Este método é utilizado na solução numérica da equação de concentração.

Capítulo 4

Método de Estabilização Difusão Dinâmica

Na equação da concentração podem ocorrer fenômenos de propagação de frente de concentração do fluido, gerando regiões de fortes gradientes de concentração em várias partes do domínio. Este fenômeno produz dificuldades numéricas que podem resultar em perda de exatidão da solução, estimativa imprecisa do tempo de chegada do fluido injetado e conseqüentemente, influencia na recuperação do óleo. A equação da concentração é uma equação de transporte do tipo advectivo-difusivo transiente com advecção dominante e dessa forma, o método de elementos finitos de Galerkin clássico não é adequado para resolver este tipo de problema, apresentando soluções não físicas conhecidas como instabilidades numéricas [20]. Soluções estáveis de problemas predominantemente advectivos podem ser obtidas via métodos estabilizados ou métodos multiescalas, tais como SUPG (*Streamline Upwind Petrov Galerkin*) [9], GLS (*Galerkin/Least Square*) [33], RFB (*Residual-Free Bubble*) [7], VMS (*Variational Multiscale*) [34] e SGS (*Subgrid Stabilization*) [27].

Apesar de grande parte dos métodos de elementos finitos estabilizados ou multiescalas mencionados conduzirem às soluções numéricas globalmente estáveis, eles não evitam a possibilidade de ocorrer oscilações localizadas nas vizinhanças de altos gradientes [54]. Neste caso, para a obtenção de uma solução numérica livre de oscilações localizadas, pode-se recorrer aos métodos de captura de descontinuidades,

como por exemplo, o método *Consistent Approximate Upwind* (CAU) [24]. Vale ressaltar que a estabilidade e precisão das soluções obtidas por essas metodologias dependem do projeto adequado dos parâmetros de estabilização [54].

Recentemente, o método de estabilização submalha Difusão Dinâmica (DD) foi introduzido em [2] para a equação de transporte advectivo-difusivo-reativo estacionário. Esta metodologia, baseada no método *Nonlinear Subgrid Stabilization* (NSGS) [55, 54], consiste em uma decomposição multiescala do espaço de aproximação e do campo de velocidades em escalas resolvidas e não-resolvidas. Um operador dissipativo não-linear agindo isotropicamente em todas as escalas da discretização é adicionado à formulação clássica de Galerkin. A quantidade de difusão artificial é determinada pela solução da equação na escala resolvida à nível de elemento, conduzindo a um método auto-adaptativo e livre de parâmetros de estabilização.

Neste capítulo o método de estabilização submalha Difusão Dinâmica é estendido para problemas transientes de advecção-difusão-reação, usando o cenário de discretização $\mathbb{P}_1/bolha$. Experimentos numéricos mostrando a performance desta nova metodologia são apresentados.

4.1 Método de Estabilização Difusão Dinâmica Para Problemas de Transporte Transientes

Considere a equação genérica de transporte advectivo-difusivo-reativo transiente cuja solução $u(\mathbf{x}, t)$ satisfaz

$$\frac{\partial u}{\partial t} - \nabla \cdot (\mathbf{D} \nabla u) + \mathbf{v} \cdot \nabla u + \sigma u = f \quad \text{em } \Omega \times (0, t_f); \quad (4.1)$$

$$u = g \quad \text{em } \Gamma \times (0, t_f); \quad (4.2)$$

$$u(\mathbf{x}, 0) = u_0(\mathbf{x}) \quad \text{em } \Omega, \quad (4.3)$$

onde $\Omega \subset \mathbb{R}^2$ é um domínio limitado aberto com uma fronteira poligonal $\Gamma = \partial\Omega$, $(0, t_f)$ o intervalo aberto de tempo ($t_f > 0$), $t \in (0, t_f)$ o tempo e $\mathbf{x} = (x, y) \in \Omega$ o vetor posição. Os coeficientes desta equação são:

- $\mathbf{v} : \Omega \times (0, t_f) \rightarrow \mathbb{R}^2$, o campo de velocidades;

- $\mathbf{D} : \Omega \times (0, t_f) \rightarrow \mathbb{R}^{2,2}$ é o tensor de difusividade, simétrico e positivo definido;
- $\sigma : \Omega \times (0, t_f) \rightarrow \mathbb{R}$, o coeficiente de reação, onde $\sigma > 0$ para dissipação, destruição ou absorção e $\sigma < 0$ para produção;
- $f : \Omega \times (0, t_f) \rightarrow \mathbb{R}$, o termo de fonte;
- $g : \Gamma \times (0, t_f) \rightarrow \mathbb{R}$, a condição de contorno;
- $u_0 : \Omega \rightarrow \mathbb{R}$, a condição inicial,

considerados funções de (\mathbf{x}, t) ou \mathbf{x} suaves o suficiente. Assume-se que

$$\sigma - \frac{1}{2} \nabla \cdot \mathbf{v} \geq \sigma_0 \quad \text{em } \Omega \times (0, t_f), \quad (4.4)$$

onde $\sigma_0 \geq 0$ é uma constante com $\sigma_0 > 0$ no caso estacionário [38].

A formulação variacional do problema (4.1)-(4.2)-(4.3) é dado por: achar $u(\mathbf{x}, t) \in V_g$, para todo $t \in (0, t_f)$, tal que

$$\left(w, \frac{\partial u}{\partial t}\right) + a(w, u) = (w, f), \quad \forall w \in V, \quad (4.5)$$

onde

- $a(w, u) = (\nabla w, \mathbf{D} \nabla u) + (w, \mathbf{v} \cdot \nabla u) + (w, \sigma u)$,

com $(w, u) = \int_{\Omega} w u d\Omega$ o produto interno usual em $L^2(\Omega)$, o espaço das funções mensuráveis quadrado integráveis em Ω ;

- $V_g = \{u \in H^1(\Omega); u|_{\Gamma} = g\}$, o espaço das funções admissíveis ou testes,

com $H^1(\Omega) = \{u \in L^2(\Omega); \frac{\partial u}{\partial x}, \frac{\partial u}{\partial y} \in L^2(\Omega)\}$ e

- $V = H_0^1(\Omega) = \{u \in H^1(\Omega); u|_{\Gamma} = 0\}$, o espaço das funções pesos.

Para obter o problema discretizado, considera-se uma partição $\mathcal{T}_h = \{\Omega_e\}$ do domínio Ω em n_{el} elementos (triângulos ou quadriláteros), Ω_e , $e = 1, 2, \dots, n_{el}$ tal que

$$\Omega = \bigcup_{e=1}^{n_{el}} \Omega_e \quad \text{e} \quad \Omega_i \cap \Omega_j = \emptyset, \quad i, j = 1, 2, \dots, n_{el}, \quad i \neq j.$$

No modelo discreto, utilizam-se os espaços de aproximações de dimensão finita $V_{g,h} \subset V_g$ e $V_h \subset V$, dados por

$$V_{g,h} = \{u_h \in H^1(\Omega) \text{ tal que } u|_{\Omega_e} \in \mathbb{P}_r, \forall \Omega_e \in \mathcal{T}_h \text{ e } u|_{\Gamma} = g\} \text{ e} \quad (4.6)$$

$$V_h = \{u_h \in H_0^1(\Omega) \text{ tal que } u|_{\Omega_e} \in \mathbb{P}_r, \forall \Omega_e \in \mathcal{T}_h\}, \quad (4.7)$$

com \mathbb{P}_r denotando o espaço de polinômios de grau $\leq r$ definidos em Ω_e e h o parâmetro característico de malha. A forma discreta do modelo (4.5) é dada por: achar $u_h \in V_{g,h}$, $\forall t \in (0, t_f)$, tal que

$$(w_h, \frac{\partial u_h}{\partial t}) + a(w_h, u_h) = (w_h, f), \quad \forall w_h \in V_h. \quad (4.8)$$

Para o método de elementos finitos de Galerkin, considera-se o mesmo espaço de aproximação para as funções admissíveis e pesos. Neste caso,

$$u_h(\mathbf{x}, t) = \sum_{j=1}^{n_{eq}} N_j(\mathbf{x}) d_j(t), \quad (4.9)$$

onde n_{eq} é o número de pontos nodais incógnitas (número de equações), $N_j(\mathbf{x}), j = 1, 2, \dots, n_{eq}$ são as funções de interpolação globais do método de Galerkin e $d_j(t)$ é o valor calculado da solução aproximada no ponto nodal j , no tempo t . A função peso é definida de forma análoga,

$$w_h(\mathbf{x}) = \sum_{i=1}^{n_{eq}} N_i(\mathbf{x}) w_i. \quad (4.10)$$

Usando uma formulação Semidiscreta, substitui-se (4.9) e (4.10) na equação (4.8) para obter um sistema de equações diferenciais ordinárias, que pode ser resolvido por um dos métodos trapezoidais generalizados.

O método Difusão Dinâmica é proposto para dois cenários de discretização: $\mathbb{P}_1/doi\text{-}n\acute{i}veis$ e $\mathbb{P}_1/bolha$ (ver [2] para maiores detalhes). Neste trabalho, utiliza-se o cenário $\mathbb{P}_1/bolha$ (ver Fig. 4.1). Neste caso, a partição \mathcal{T}_h do domínio Ω é formada por elementos triangulares. Por simplicidade, considere $g = 0$ e o seguinte enriquecimento do espaço de aproximação V_h , dado em (4.7) com $r = 1$:

$$V_E = V_h \oplus V_B, \quad (4.11)$$

onde V_B denota o espaço de funções bolhas dado por

$$V_B = \{v \text{ tal que } v|_{\Omega_e} \in H_0^1(\Omega_e), \forall \Omega_e \in \mathcal{T}_h\}.$$

Uma função bolha $\varphi_B \in V_B$ é, portanto, uma função que possui suporte contido em um único elemento $\Omega_e \in \mathcal{T}_h$ e satisfaz

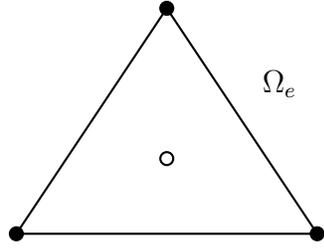
$$\varphi_B(\mathbf{x}) > 0, \forall \mathbf{x} \in \Omega_e;$$

$$\varphi_B(\mathbf{x}) = \begin{cases} 0, & \forall \mathbf{x} \in \partial\Omega_e; \\ 1, & \text{no baricentro do triângulo } \Omega_e. \end{cases}$$

A função bolha utilizada no cenário $\mathbb{P}_1/bolha$ é definida por

$$\varphi_B(\mathbf{x}) = 27N_1^e(\mathbf{x})N_2^e(\mathbf{x})N_3^e(\mathbf{x}),$$

onde $N_j^e(\mathbf{x})$ representa a função de forma local do método de Galerkin associada ao ponto nodal (macro) j , para $j = 1, 2, 3$ do elemento Ω_e .



- pontos nodais de V_h
- ponto nodal de V_B

Figura 4.1: Representação do cenário $\mathbb{P}_1/bolha$

No contexto dos métodos multiescala, V_h representa o espaço das escalas resolvidas (espaço macro) e V_B representa o espaço das escalas não resolvidas (espaço micro ou submalha) [54]. Em geral, o espaço macro V_h é formado por funções contínuas em Ω que são lineares em cada elemento $\Omega_e \in \mathcal{T}_h$. A equação (4.11) implica que toda função $u_E \in V_E$ tem a seguinte decomposição única

$$u_E = u_h + u_B$$

com $u_h \in V_h$ representando a parte macro da solução e $u_B \in V_B$ representando a parte micro ou submalha da solução.

O método de estabilização Difusão Dinâmica para o problema (4.1)-(4.2)-(4.3) consiste em: dado $t \in (0, t_f)$, achar $u_E = u_h + u_B \in V_E$, com $u_h \in V_h, u_B \in V_B$, tal que $u_E(\mathbf{x}, 0) = u_0(\mathbf{x})$ e

$$(w_E, \frac{\partial u_E}{\partial t}) + a(w_E, u_E) + \sum_{\Omega_e} \int_{\Omega_e} \nabla w_E \cdot \xi(u_h) \nabla u_E d\Omega = (w_E, f), \quad \forall w_E \in V_E, \quad (4.12)$$

onde

$$\xi(u_h) = \begin{cases} \frac{1}{2} \varsigma(h) \frac{|R(u_h)|}{|\nabla u_h|}, & \text{se } |\nabla u_h| > tol_\xi; \\ 0, & \text{caso contrário,} \end{cases} \quad (4.13)$$

com

$$\varsigma(h) = \begin{cases} 2\sqrt{meas\Omega_e}, & \text{se } \Omega_e \cap \Gamma_+ \neq \emptyset, \quad \Gamma_+ = \{\mathbf{x} \in \Gamma; \mathbf{v} \cdot \mathbf{n} > 0\}; \\ \sqrt{meas\Omega_e}, & \text{caso contrário} \end{cases} \quad (4.14)$$

denotando o parâmetro característico submalha e

$$R(u_h) = \frac{\partial u_h}{\partial t} - \nabla \cdot (\mathbf{D} \nabla u_h) + \mathbf{v} \cdot \nabla u_h + \sigma u_h - f \quad \text{sobre } \Omega_e.$$

O método é resolvido através de um processo iterativo no tempo e no espaço, cuja solução inicial $u_0(\mathbf{x})$ é dada. O processo iterativo no espaço é definido por: dado u_E^i , achar u_E^{i+1} satisfazendo

$$(w_E, \frac{\partial u_E^{i+1}}{\partial t}) + a(w_E, u_E^{i+1}) + \sum_{\Omega_e} \xi(u_h^i) \int_{\Omega_e} \nabla w_E \cdot \nabla u_E^{i+1} d\Omega = (w_E, f), \quad \forall w_E \in V_E. \quad (4.15)$$

Note que

$$\begin{aligned} \int_{\Omega_e} \nabla w_E \cdot \nabla u_E^{i+1} d\Omega &= \int_{\Omega_e} \nabla w_h \cdot \nabla u_h^{i+1} d\Omega + \int_{\Omega_e} \nabla w_B \cdot \nabla u_B^{i+1} d\Omega \\ &+ \int_{\Omega_e} \nabla w_h \cdot \nabla u_B^{i+1} d\Omega + \int_{\Omega_e} \nabla w_B \cdot \nabla u_h^{i+1} d\Omega. \end{aligned}$$

Usando a primeira identidade de Green ([36]), tem-se

$$\int_{\Omega_e} \nabla w_h \cdot \nabla u_B^{i+1} d\Omega = - \int_{\Omega_e} \Delta w_h u_B^{i+1} d\Omega + \int_{\partial\Omega_e} (\nabla w_h \cdot \mathbf{n}) u_B^{i+1} d\Gamma = 0,$$

pois $\Delta w_h = 0$ em cada elemento Ω_e e $u_B^{i+1} = 0$ em $\partial\Omega_e$. Analogamente, tem-se

$$\int_{\Omega_e} \nabla w_B \cdot \nabla u_h^{i+1} d\Omega = - \int_{\Omega_e} \Delta w_B u_h^{i+1} d\Omega + \int_{\partial\Omega_e} (\nabla w_B \cdot \mathbf{n}) u_h^{i+1} d\Gamma = 0. \quad (4.16)$$

De fato, usando a segunda identidade de Green ([36]),

$$\int_{\Omega_e} (w_B \Delta u_h^{i+1} - u_h^{i+1} \Delta w_B) d\Omega = \int_{\partial\Omega_e} (w_B \nabla u_h^{i+1} \cdot \mathbf{n} - u_h^{i+1} \nabla w_B \cdot \mathbf{n}) d\Gamma$$

e as hipóteses $\Delta u_h^{i+1} = 0$ em Ω_e e $w_B = 0$ em $\partial\Omega_e$, segue-se o resultado em (4.16).

Portanto, para o cenário $\mathbb{P}_1/bolha$, o termo de estabilização extra adicionado à formulação de Galerkin em cada elemento Ω_e é dado por

$$\xi(u_h^i) \int_{\Omega_e} \nabla w_E \cdot \nabla u_E^{i+1} d\Omega = \xi(u_h^i) \int_{\Omega_e} \nabla w_h \cdot \nabla u_h^{i+1} d\Omega + \xi(u_h^i) \int_{\Omega_e} \nabla w_B \cdot \nabla u_B^{i+1} d\Omega. \quad (4.17)$$

Observação 4.1.1 *A equação (4.17) mostra que para o cenário de discretização $\mathbb{P}_1/bolha$, o método Difusão Dinâmica é idêntico ao método Nonlinear Subgrid Stabilization with Discontinuity Capturing (NSGS/DC) [56].*

Para acelerar a convergência do método, caso seja necessário, a seguinte estratégia para calcular $\xi(u_h^i)$ pode ser utilizada [55]:

$$\begin{aligned} \xi(u_h^i) &= c_b^{i+1} \zeta(h); \\ c_b^{i+1} &= \omega \tilde{c}_b^{i+1} + (1 - \omega) \tilde{c}_b^i, \text{ com } \omega \in [0, 1] \text{ escolhido adequadamente;} \\ \tilde{c}_b^{i+1} &= \begin{cases} \frac{1}{2} \frac{|R(u_h^i)|}{|\nabla u_h^i|}, & \text{se } |\nabla u_h^i| > tol_\xi; \\ 0, & \text{caso contrário.} \end{cases} \end{aligned} \quad (4.18)$$

A equação (4.15) pode ser particionada em duas outras, uma associada às escalas resolvidas:

$$\begin{aligned} (w_h, \frac{\partial u_h^{i+1}}{\partial t}) + a(w_h, u_h^{i+1}) + \sum_{\Omega_e} \xi(u_h^i) \int_{\Omega_e} \nabla w_h \cdot \nabla u_h^{i+1} d\Omega + (w_h, \frac{\partial u_B^{i+1}}{\partial t}) + \\ a(w_h, u_B^{i+1}) = (w_h, f), \forall w_h \in V_E \end{aligned} \quad (4.19)$$

e a outra associada às escalas submalhas:

$$\begin{aligned} (w_B, \frac{\partial u_h^{i+1}}{\partial t}) + a(w_B, u_h^{i+1}) + (w_B, \frac{\partial u_B^{i+1}}{\partial t}) + \sum_{\Omega_e} \xi(u_h^i) \int_{\Omega_e} \nabla w_B \cdot \nabla u_B^{i+1} d\Omega + \\ a(w_B, u_B^{i+1}) = (w_B, f), \quad \forall w_B \in V_E. \end{aligned} \quad (4.20)$$

Diferente do caso estacionário, as equações (4.19) e (4.20) resultam em um sistema local de equações diferenciais ordinárias fortemente acoplado da forma

$$\begin{bmatrix} M_{hh} & M_{hB} \\ M_{Bh} & M_{BB} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \dot{U}_h \\ \dot{U}_B \end{bmatrix} + \begin{bmatrix} K_{hh} & K_{hB} \\ K_{Bh} & K_{BB} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} U_h \\ U_B \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} F_h \\ F_B \end{bmatrix}, \quad (4.21)$$

onde

- U_h e U_B são vetores que representam as soluções u_h e u_B nos pontos nodais macro e micro, respectivamente, de cada elemento Ω_e ;
- \dot{U}_h e \dot{U}_B são vetores que representam as variações temporais $\frac{\partial u_h}{\partial t}$ e $\frac{\partial u_B}{\partial t}$ das soluções u_h e u_B nos pontos nodais macro e micro, respectivamente, de cada elemento Ω_e ;
- M_{hh} , M_{hB} , M_{Bh} e M_{BB} são matrizes locais de massa associadas aos termos $(w_h, \frac{\partial u_h^{i+1}}{\partial t})$, $(w_h, \frac{\partial u_B^{i+1}}{\partial t})$, $(w_B, \frac{\partial u_h^{i+1}}{\partial t})$ e $(w_B, \frac{\partial u_B^{i+1}}{\partial t})$, respectivamente;
- K_{hh} é a matriz local de rigidez associadas ao termo

$$a(w_h, u_h^{i+1}) + \sum_{\Omega_e} \xi(u_h^i) \int_{\Omega_e} \nabla w_h \cdot \nabla u_h^{i+1} d\Omega;$$

- K_{hB} e K_{Bh} são matrizes locais de rigidez associadas aos termos

$$a(w_h, u_B^{i+1}) \quad \text{e} \quad a(w_B, u_h^{i+1}),$$

respectivamente;

- K_{BB} é a matriz local de rigidez associadas ao termo

$$a(w_B, u_B^{i+1}) + \sum_{\Omega_e} \xi(u_h^i) \int_{\Omega_e} \nabla w_B \cdot \nabla u_B^{i+1} d\Omega;$$

- F_h e F_B são vetores associados aos termos (w_h, f) e (w_B, f) , respectivamente, em cada elemento Ω_e ;

Devido ao acoplamento do sistema (4.21), utilizando o processo de condensação estática para eliminar a variável U_B , em cada elemento Ω_e , obtém-se uma equação associada à macro escala em função da variável \dot{U}_B :

$$\widehat{M}\dot{U}_h + \widehat{K}U_h + \widehat{N}\dot{U}_B = \widehat{F}, \quad (4.22)$$

onde

$$\begin{aligned}\widehat{M} &= M_{hh} - K_{hB}(K_{BB})^{-1}M_{Bh}; \\ \widehat{K} &= K_{hh} - K_{hB}(K_{BB})^{-1}K_{Bh}; \\ \widehat{N} &= M_{hB} - K_{hB}(K_{BB})^{-1}M_{BB}; \\ \widehat{F} &= F_h - K_{hB}(K_{BB})^{-1}F_B.\end{aligned}$$

O valor de U_B é obtido pela expressão

$$U_B = (K_{BB})^{-1} \left[F_B - K_{Bh}U_h - M_{hB}\dot{U}_h - M_{BB}\dot{U}_B \right].$$

Uma forma de evitar o aparecimento de \dot{U}_B em (4.22) é assumir que as escalas submalhas são *quase estáticas* [13, 12, 39, 59], isto é,

$$\frac{\partial u_B}{\partial t} \approx 0. \quad (4.23)$$

Neste caso, as matrizes M_{hB} e M_{BB} e o vetor \dot{U}_B em (4.21) se anulam e o procedimento de condensação estática resulta no seguinte sistema local de equações diferenciais ordinárias:

$$\widehat{M}\dot{U}_h + \widehat{K}U_h = \widehat{F}. \quad (4.24)$$

Observação 4.1.2 *A validade da hipótese (4.23) é discutida em [13]. Esta hipótese é utilizada para simplificar as equações (4.19) e (4.20), que são fortemente acopladas. O seu uso requer um esquema bastante preciso de integração no tempo, de forma que a variação temporal da solução seja bem representada pela solução associada à macro escala [59]. Trabalhos recentes considerando escalas submalhas transientes para a Equação de Navier-Stokes incompressível são apresentados em [14, 25].*

O sistema global

$$\widehat{M}\dot{U}_h + \widehat{K}U_h = \widehat{F} \quad (4.25)$$

associado a (4.24) é resolvido via um algoritmo preditor-multicorretor, descrito da seguinte forma: sejam n o contador de passos no tempo, Δt o passo no tempo, \dot{U}_n e U_n as aproximações para $\dot{U}_h(t_n)$ e $U_h(t_n)$, respectivamente. Dados \dot{U}_n e U_n , o algoritmo pode ser resumido nos seguintes passos:

Fase de Predição:

$$i = 0;$$

$$\mathbf{U}_{n+1}^{(0)} = \mathbf{U}_n + \alpha \Delta t \dot{\mathbf{U}}_n;$$

$$\dot{\mathbf{U}}_{n+1}^{(0)} = 0;$$

Fase de Correção:

$$i = i + 1;$$

$$\text{Calcule } \mathbf{R} = \widehat{\mathbf{F}} - (\widehat{\mathbf{M}}\dot{\mathbf{U}}_{n+1}^{i-1} + \widehat{\mathbf{K}}\mathbf{U}_{n+1}^{i-1});$$

$$\text{Resolva } \widehat{\mathbf{M}}^* \Delta \dot{\mathbf{U}} = \mathbf{R};$$

$$\text{Atualize } \dot{\mathbf{U}}_{n+1}^i = \dot{\mathbf{U}}_{n+1}^{i-1} + \alpha \Delta \dot{\mathbf{U}};$$

$$\text{Atualize } \mathbf{U}_{n+1}^i = \mathbf{U}_{n+1}^{i-1} + \alpha \Delta t \Delta \mathbf{U},$$

onde

- $\widehat{\mathbf{M}}^* = \widehat{\mathbf{M}} + \alpha \widehat{\mathbf{K}}$ é uma matriz esparsa cuja ordem é o número de pontos nodais (macro) incógnitas;
- $\widehat{\mathbf{R}} = \widehat{\mathbf{F}} - [\widehat{\mathbf{M}}\dot{\mathbf{U}} + \widehat{\mathbf{K}}\mathbf{U}]$ é o vetor de resíduos em função dos valores iniciais da multicorreção dos valores nodais de $\dot{\mathbf{U}}$ e \mathbf{U} ;
- $\Delta \dot{\mathbf{U}}$ é a correção dos valores de $\dot{\mathbf{U}}$ para a próxima iteração;
- α é um parâmetro que estabelece o controle da estabilidade e precisão na integração no tempo. Neste trabalho, utiliza-se $\alpha = 0.5$ por conduzir a um método de segunda ordem e incondicionalmente estável.

O critério de parada do processo não linear (no espaço) é dado por

$$i \leq \text{maxiter} \text{ ou } \max_{j=1, \dots, n_{os}} |u_{h;j}^i - u_{h;j}^{i-1}| \leq \text{tol}_{DD}, \quad (4.26)$$

onde *maxiter* é o número máximo de iterações no espaço, n_{os} é o número de pontos nodais (macro) de \mathcal{T}_h e tol_{DD} é uma tolerância, definida por $\text{tol}_{DD} = 10^{-2}$.

4.2 Experimentos Numéricos

Nesta seção são apresentados alguns experimentos numéricos para avaliar a performance da metodologia apresentada neste capítulo. Em todos os experimentos, são utilizados $\text{tol}_\xi = 10^{-10}$ em (4.13) e $\omega = 0.5$ em (4.18).

4.2.1 Exemplo 01 - Advecção em um campo de escoamento rotacional com solução suave

Este problema simula o transporte, em um problema de advecção-difusão, de uma função seno em um campo de velocidades rotativo. Os dados do problema são:

$$\mathbf{D} = \epsilon \mathbf{I} \text{ com } \epsilon = 10^{-8}, \text{ onde } \mathbf{I} \text{ é o tensor identidade,}$$

$$f = \sigma = 0, \quad \Omega = (-0.5, 0.5) \times (-0.5, 0.5)$$

e o campo de velocidades é dado por

$$\mathbf{v} = (-y, x).$$

As condições de contorno são homogêneas, isto é,

$$u(x, y) = 0, \quad \forall (x, y) \in \Gamma.$$

Na fronteira interna $\{(0, y); y \in [-0.5, 0]\}$ é prescrita a função

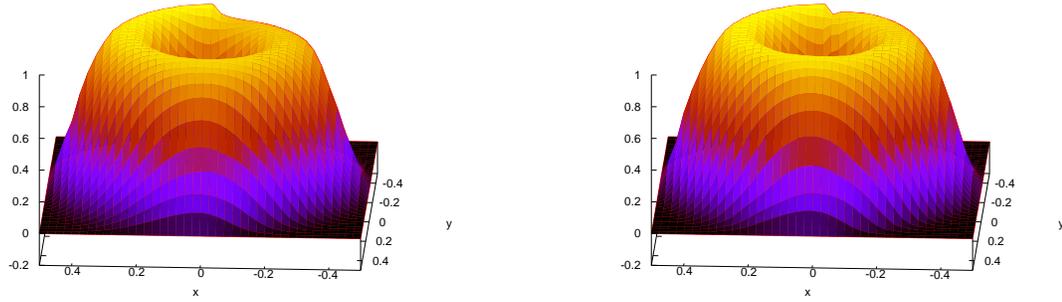
$$u(0, y) = -\text{sen}(2\pi y).$$

As soluções aproximadas obtidas com os métodos SUPG/CAU e DD são apresentadas na Fig. (4.2), utilizando uma malha 40×40 , $t_f = 10$ e $\Delta t = 0.5$. Devido à dominância dos efeitos advectivos, a condição de contorno imposta na fronteira interna deve ser propagada ao longo do domínio sem perda em sua amplitude, isto é, os efeitos difusivos sobre o transporte são mínimos. Observa-se que as soluções obtidas pelos dois métodos introduzem uma difusão efetiva que provoca uma dissipação não física.

4.2.2 Exemplo 02 - Problema de Advecção-Difusão-Reação

Neste exemplo é considerado um problema de advecção-difusão-reação, cuja solução exata e respectivas curvas de nível são apresentadas na Fig. 4.3. Os coeficientes de difusão e reação da equação são $\mathbf{D} = \epsilon \mathbf{I}$ com $\epsilon = 10^{-4}$ e $\sigma = 2$, respectivamente. O campo de velocidades é definido por

$$\mathbf{v} = (v_x, v_y),$$



(a) método SUPG/CAU

(b) método DD

Figura 4.2: Exemplo 01 - Transporte rotativo: soluções aproximadas CAU e DD usando uma malha 40×40 .

onde

$$\begin{aligned} v_x &= -(2y - 1) [r_0^2 - (x - x_0)^2 - (y - y_0)^2]; \\ v_y &= (2x - 1) [r_0^2 - (x - x_0)^2 - (y - y_0)^2], \end{aligned}$$

para

$$0 \leq (x - x_0)^2 - (y - y_0)^2 \leq r_0^2$$

e

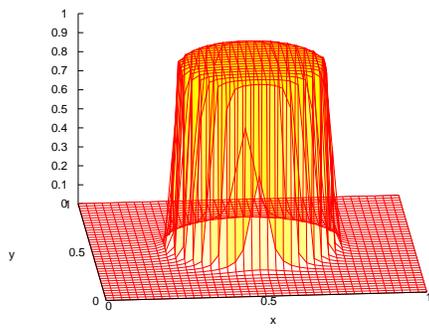
$$\mathbf{v} = (0, 0),$$

caso contrário. O termo de força e as condições de contorno de Dirichlet são escolhidas de forma que

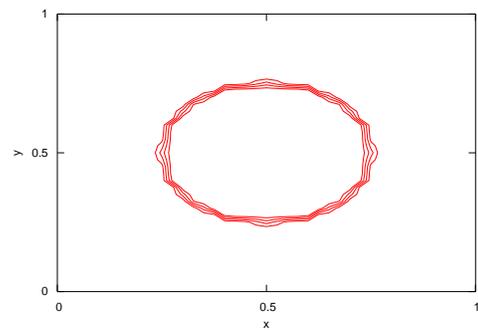
$$u(x, y) = \frac{1}{2} + \frac{1}{\pi} \arctg [a(r_0^2 - (x - x_0)^2 - (y - y_0)^2)],$$

com $x_0 = y_0 = 0.5$, $r_0 = 0.25$ e $a = 1000$, é a solução exata do problema (Fig. 4.3).

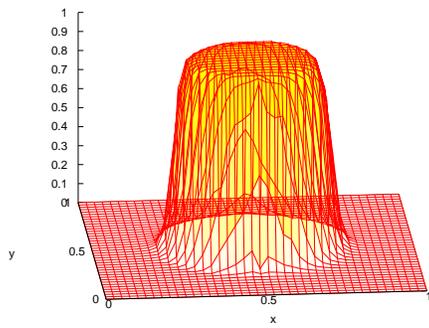
A solução aproximada juntamente com suas curvas de nível, usando o método DD são apresentadas na Fig. 4.3. Foi utilizada uma malha 40×40 , $t_f = 10$ e $\Delta t = 0.5$. A solução obtida pelo método DD representa a região de alto gradiente sem oscilações, porém com um comportamento relativamente difusivo, como pode ser melhor observado comparando suas curvas de nível com as da solução exata.



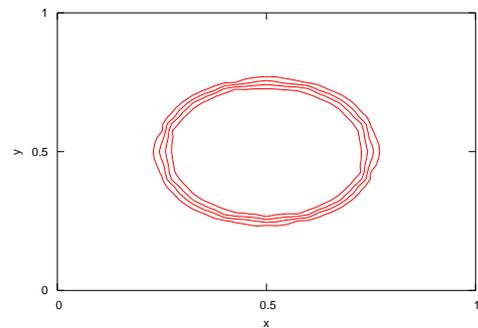
(a) Solução exata



(b) Curvas de nível da solução exata



(c) método DD



(d) Curvas de nível da solução do método DD

Figura 4.3: Exemplo 02 - soluções exatas e pelo método DD, usando uma malha 40×40 .

Capítulo 5

Formulação Numérica Variacional

Em geral, as equações (3.44), (3.45) e (3.46) junto com as condições de contorno e iniciais, dificilmente podem ser resolvidas analiticamente. Desta forma, deve-se recorrer à ferramentas numéricas para obter soluções aproximadas, fisicamente satisfatórias. Os principais métodos numéricos utilizados para resolver equações diferenciais parciais são diferenças finitas, volumes finitos e elementos finitos. Nesta dissertação, utiliza-se uma formulação variacional semidiscreta, que consiste em uma discretização pelo método dos elementos finitos no espaço seguido pela discretização pelo método de diferenças finitas no tempo. Neste capítulo será realizada a discretização espacial das equações (3.44), (3.45) e (3.46), utilizando o método de elementos finitos de Galerkin clássico para a equação da pressão e formulações de elementos finitos estabilizadas para as outras equações.

Como já visto no Capítulo 04, a discretização de elementos finitos no espaço considera uma partição $\mathcal{T}_h = \{\Omega_e\}$ do domínio Ω em n_{el} elementos finitos, Ω_e , $e = 1, 2, \dots, n_{el}$ tal que

$$\Omega = \bigcup_{e=1}^{n_{el}} \Omega_e \quad \text{e} \quad \bigcap_{e=1}^{n_{el}} \Omega_e = \emptyset.$$

Para definir a formulação variacional ou fraca do problema (3.44)-(3.45)-(3.46) (junto com as condições de contorno e iniciais), utiliza-se duas classes de funções: as funções *admissíveis* e as funções *pesos*. A primeira classe é composta por funções candidatas a solução, que atendam as condições de contorno e que tenham regularidade suficiente. Como deseja-se obter a solução das grandezas pressão,

velocidade e concentração, portanto, são definidos grupos de funções candidatas a solução para a pressão p , para a velocidade \mathbf{v} e para a concentração c . A segunda classe é formada por funções similares às funções admissíveis, diferindo destas, por assumirem o valor nulo no contorno.

5.1 Formulação Variacional para a Equação da Pressão

A equação da pressão possui um comportamento predominantemente difusivo. Desta forma, é utilizado o método de Galerkin clássico por apresentar boas soluções aproximadas neste caso. A formulação variacional contínua da equação da pressão é dada por: achar $p \in P = \{p \in H^1(\Omega) \text{ tal que } p = p_p \text{ em } \Gamma_d\}$ tal que

$$(\nabla w, \mathbf{A}(c)\nabla p) = (w, q), \quad \forall w \in P_0 = H_0^1(\Omega), \quad (5.1)$$

onde

$$\begin{aligned} (\nabla w, \mathbf{A}(c)\nabla p) &= \int_{\Omega} \nabla w \cdot \mathbf{A}(c)\nabla p d\Omega, \quad e \\ (w, q) &= \int_{\Omega} w q d\Omega. \end{aligned}$$

Para encontrar uma aproximação p_h da solução p via método de Galerkin, define-se $P_h \subset P$ como o espaço de dimensão finita das funções admissíveis que satisfazem as condições de contorno e $P_{h,0} \subset P_0$, como o espaço de dimensão finita das funções pesos, ou seja,

$$P_h = \{p \in H^1(\Omega) \text{ tal que } p|_{\Omega_e} \in \mathbb{P}_1, \forall \Omega_e \in \mathcal{T}_h \text{ e } p|_{\Gamma_d} = p_p\} \quad (5.2)$$

$$P_{h,0} = \{p \in H_0^1(\Omega) \text{ tal que } p|_{\Omega_e} \in \mathbb{P}_1, \forall \Omega_e \in \mathcal{T}_h\}. \quad (5.3)$$

Para uma partição \mathcal{T}_h de Ω , a formulação de Galerkin para a equação da pressão é obtida restringindo a forma variacional (5.1) aos espaços (5.2) e (5.3), ou seja, achar $p_h \in P_h$ tal que

$$(\nabla w_h, \mathbf{A}(c)\nabla p_h) = (w_h, q), \quad \forall w_h \in P_{h,0}, \quad (5.4)$$

onde

$$(\nabla w_h, \mathbf{A}(c) \nabla p_h) = \int_{\Omega} \nabla w_h \cdot \mathbf{A}(c) \nabla p_h d\Omega, \quad e$$

$$(w_h, q) = \int_{\Omega} w_h q d\Omega.$$

A função p_h é aproximada da seguinte forma:

$$p_h(\mathbf{x}, t) = \sum_{j=1}^{n_{eq}} N_j(\mathbf{x}) p_j(t), \quad (5.5)$$

onde N_j é a função de forma usual do método de Galerkin associada ao ponto nodal j e $p_j(t)$ é o valor incógnita da pressão no ponto nodal j . No método de Galerkin, a função peso w_h é definida de forma que

$$w_h \in P_{h0} = span\{N_1, N_2, \dots, N_{n_{eq}}\}. \quad (5.6)$$

No Capítulo 06 são apresentadas as matrizes locais associadas à formulação (5.4) com p_h e w_h dados por (5.5) e (5.6), respectivamente.

5.2 Técnica de Pós-Processamento e Lei de Darcy

O valor calculado da velocidade de Darcy influencia diretamente na precisão da solução da equação de concentração. Uma vez obtido o campo de pressão através da Eq. (5.4), uma aproximação natural do campo de velocidades é aquela dada diretamente pela Eq. (3.45) (lei de Darcy). Neste caso, ocorre uma redução da ordem de aproximação do campo de velocidades, devido a presença das derivadas parciais de p em (3.45). Além disso, para funções de interpolação lineares, utilizadas neste trabalho, as velocidades obtidas são constantes nos elementos conduzindo a fluxos normais descontínuos nas fronteiras dos mesmos. Para obter uma solução mais precisa e com a mesma ordem de aproximação do campo p , são utilizados esquemas de pós-processamento para a velocidade. A técnica de pós-processamento melhora a aproximação da velocidade baseando-se em uma combinação de formulações variacionais das equações (3.44) e (3.45). Maiores detalhes sobre esta técnica podem ser encontrados em [43].

Seja p_h uma aproximação para a pressão p obtida por (5.4), a técnica de pós-processamento para a obtenção do campo de velocidades consiste em encontrar

$\mathbf{v}_h \in \mathbf{V}_h$, tal que

$$(\mathbf{w}_h, \mathbf{A}(c_h)^{-1}\mathbf{v}_h + \nabla p_h) + \sum_{e=1}^{n_{el}} \delta_{pp}^e \int_{\Omega_e} \nabla \cdot \mathbf{w}_h (\nabla \cdot \mathbf{v}_h - q) d\Omega = 0, \quad \forall \mathbf{w}_h \in \mathbf{V}_h, \quad (5.7)$$

onde

- $(\mathbf{w}_h, \mathbf{A}(c_h)^{-1}\mathbf{v}_h + \nabla p_h) = \int_{\Omega} \mathbf{w}_h \cdot (\mathbf{A}(c_h)^{-1}\mathbf{v}_h + \nabla p_h) d\Omega$;
- $\mathbf{V}_h = \{\mathbf{v} \in W_h \times W_h \text{ tal que } \mathbf{v} \cdot \mathbf{n} = 0 \text{ sobre } \Gamma_n\}$, com
 $W_h = \{v \in H^1(\Omega) \text{ tal que } v|_{\Omega_e} \in \mathbb{P}_1, \forall \Omega_e \in \mathcal{T}_h\}$;
- δ_{pp}^e é uma constante positiva dependente do comprimento característico de malha, definida por

$$\delta_{pp}^e = M^{\frac{1}{2}} \frac{h^e}{2};$$

- $\mathbf{A}(c)^{-1}$ é um tensor de 2^a ordem positivo definido, dado por

$$\mathbf{A}(c)^{-1} = \frac{1}{\det(\mathbf{A})} \begin{bmatrix} \Lambda_{22} & -\Lambda_{12} \\ -\Lambda_{21} & \Lambda_{11} \end{bmatrix}. \quad (5.8)$$

Os termos que compõem a Eq. (5.7) podem ser interpretados da seguinte forma:

Lei de Darcy:
$$\int_{\Omega} \mathbf{w}_h \cdot \mathbf{A}(c_h)^{-1}\mathbf{v}_h d\Omega; \quad (5.9)$$

Divergente da velocidade:
$$\sum_{e=1}^{n_{el}} \delta_{pp}^e \int_{\Omega_e} \nabla \cdot \mathbf{w}_h \nabla \cdot \mathbf{v}_h d\Omega; \quad (5.10)$$

Gradiente da pressão:
$$\int_{\Omega} \mathbf{w}_h \cdot \nabla p_h d\Omega; \quad (5.11)$$

Divergente de fluxo:
$$- \sum_{e=1}^{n_{el}} \delta_{pp}^e \int_{\Omega_e} \nabla \cdot \mathbf{w}_h q d\Omega. \quad (5.12)$$

A função \mathbf{v}_h é aproximada da seguinte forma:

$$\mathbf{v}_h(\mathbf{x}, t) = \sum_{j=1}^{n_{eq}} \mathbf{N}_j(\mathbf{x}) \mathbf{v}_j(t), \quad (5.13)$$

onde \mathbf{N}_j é a função (vetorial) usual do método de Galerkin associada ao ponto nodal j e $\mathbf{v}_j(t)$ é o valor incógnita do campo de velocidades no ponto nodal j . A função peso \mathbf{w}_h é definida de forma análoga. As matrizes locais associadas à formulação (5.7) são apresentadas no próximo capítulo.

5.3 Formulação Estabilizada Difusão Dinâmica para a Equação de Concentração

A equação da concentração é uma equação de transporte do tipo advectivo-difusivo transiente com advecção dominante. Dessa forma, o método de elementos finitos de Galerkin clássico não é adequado para resolver este tipo de problema, pois apresenta soluções não físicas conhecidas como instabilidades numéricas ([20]). Nesta seção, a formulação estabilizada apresentada no Capítulo 04 é utilizada para estabilizar a equação da concentração. Por simplicidade, considere as condições de contorno para a equação da concentração como sendo homogêneas. Seja

$$C_h = \{c_h \in H_0^1(\Omega) \text{ tal que } c|_{\Omega_e} \in \mathbb{P}_1, \forall \Omega_e \in \mathcal{T}_h\} \quad (5.14)$$

o espaço de aproximações do método de Galerkin clássico. A estabilização via método Difusão Dinâmica é obtida através do enriquecimento do espaço C_h com funções bolhas e a inserção de uma difusão artificial no modelo numérico. Para isto, considere

$$C_E = C_h \oplus C_B,$$

onde C_B é o espaço das funções bolhas, dado por

$$C_B = \{w \text{ tal que } w|_{\Omega_e} \in H_0^1(\Omega_e), \forall \Omega_e \in \mathcal{T}_h\}.$$

O método de estabilização Difusão Dinâmica para a equação de concentração (3.46) consiste em: dado $t \in (0, t_f)$, achar $c_E = c_h + c_B \in C_E$, com $c_h \in C_h, c_B \in C_B$ tal que $c_E(\mathbf{x}, 0) = c_0(\mathbf{x})$ e

$$(w_E, \phi \frac{\partial c_E}{\partial t}) + B(w_E, c_E) + \sum_{\Omega_e} \xi(c_h) \int_{\Omega_e} \nabla w_E \cdot \nabla c_E d\Omega = 0, \quad \forall w_E \in C_E, \quad (5.15)$$

onde $\xi(c_h)$ é dada por (4.13) e

$$B(w_E, c_E) = (\nabla w_E, \mathbf{D}(\mathbf{v}) \nabla c_E) + (w_E, \mathbf{v} \cdot \nabla c_E).$$

Usando a hipótese (4.23), (4.17) e ponderando (5.15) com $w_h \in C_h \subset C_E$, obtém-se a equação associada às escalas resolvidas

$$(w_h, \phi \frac{\partial c_h}{\partial t}) + B(w_h, c_h) + B(w_h, c_B) + \sum_{\Omega_e} \xi(c_h) \int_{\Omega_e} \nabla w_h \cdot \nabla c_h d\Omega = 0, \quad \forall w_h \in C_h. \quad (5.16)$$

Analogamente, fazendo a ponderação de (5.15) com $w_B \in C_B \subset C_E$, obtém-se a equação associada às escalas não resolvidas ou submalhas

$$(w_B, \phi \frac{\partial c_h}{\partial t}) + B(w_B, c_h) + B(w_B, c_B) + \sum_{\Omega_e} \xi(c_h) \int_{\Omega_e} \nabla w_B \cdot \nabla c_h d\Omega = 0, \quad \forall w_B \in C_B. \quad (5.17)$$

As equações (5.16) e (5.17) resultam em um sistema local de equações diferenciais ordinárias da forma

$$\begin{bmatrix} M_{hh} & O \\ M_{Bh} & O \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \dot{U}_h \\ O \end{bmatrix} + \begin{bmatrix} C_{hh} & C_{hB} \\ C_{Bh} & C_{BB} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} U_h \\ U_B \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} O \\ O \end{bmatrix}, \quad (5.18)$$

onde

- M_{hh} e M_{Bh} são matrizes de massa associadas aos termos $(w_h, \phi \frac{\partial c_h}{\partial t})$ e $(w_B, \phi \frac{\partial c_h}{\partial t})$, respectivamente;
- \dot{U}_h é um vetor associado ao termo $\frac{\partial u_h}{\partial t}$;
- C_{hh} é a matriz de rigidez associadas ao termo

$$B(w_h, c_h) + \sum_{\Omega_e} \xi(c_h) \int_{\Omega_e} \nabla w_h \cdot \nabla c_h d\Omega;$$

- C_{hB} e C_{Bh} são matrizes de rigidez associadas aos termos

$$B(w_h, c_B) \quad \text{e} \quad B(w_B, c_h),$$

respectivamente;

- K_{BB} é a matriz de rigidez associadas ao termo

$$B(w_B, c_B) + \sum_{\Omega_e} \xi(c_h) \int_{\Omega_e} \nabla w_B \cdot \nabla c_B d\Omega;$$

- U_h e U_B são vetores que representam as soluções c_h e c_B nos pontos nodais macro e micro, respectivamente, de cada elemento Ω_e .

Utilizando o processo de condensação estática em (5.18) para eliminar a variável U_B , em cada elemento Ω_e , obtém-se um sistema local de equações diferenciais ordinárias da forma

$$\widehat{M}\dot{U}_h + \widehat{C}U_h = \widehat{O}, \quad (5.19)$$

onde

$$\begin{aligned}\widehat{M} &= M_{hh} - C_{hB}(C_{BB})^{-1}M_{Bh}; \\ \widehat{K} &= K_{hh} - K_{hB}(K_{BB})^{-1}K_{Bh}.\end{aligned}$$

O valor de U_B é recuperado pela expressão

$$U_B = -(K_{BB})^{-1}K_{Bh}U_h.$$

O sistema global associado a (5.19) é resolvido via um algoritmo predictor-multicorretor, descrito no próximo capítulo.

As funções c_h , $\frac{\partial c_h}{\partial t}$ e c_B em (5.15) são aproximadas, respectivamente, da seguinte forma:

$$c_h(\mathbf{x}, t) = \sum_{j=1}^{n_{eq}} N_j(\mathbf{x})c_j(t); \quad (5.20)$$

$$\frac{\partial c_h(\mathbf{x}, t)}{\partial t} = \sum_{j=1}^{n_{eq}} N_j(\mathbf{x})a_j(t); \quad (5.21)$$

$$c_B(\mathbf{x}, t) = \sum_{e=1}^{n_{el}} N_{B_e}(\mathbf{x})c_{B_e}(t), \quad (5.22)$$

onde

- N_j é a função de forma usual do método de Galerkin associada ao ponto nodal macro j ;
- $c_j(t)$ é o valor incógnita da concentração no ponto nodal macro j ;
- $a_j(t)$ é o valor incógnita da derivada temporal da função c_h no ponto nodal macro j ;
- $N_{B_e} = 27N_1^e N_2^e N_3^e$ é a função bolha para o elemento Ω_e , com N_1^e , N_2^e e N_3^e as três funções de forma do método de Galerkin associadas aos três pontos nodais macro do elemento Ω_e ;
- $c_{B_e}(t)$ é o valor incógnita da solução c_B no ponto nodal micro do elemento Ω_e .

As funções pesos w_h e w_B são aproximadas de forma análoga. As matrizes locais associadas à formulação (5.15) são apresentadas no próximo capítulo.

5.4 Formulação Estabilizada SUPG/CAU para a Equação de Concentração

Nesta seção será apresentada a formulação variacional estabilizada SUPG/CAU para a equação da concentração. Como descrito na seção anterior, a equação de concentração possui um comportamento predominantemente advectivo e o método de Galerkin clássico não é adequado para este tipo de problema, necessitando desta forma, de uma formulação estabilizada. A formulação SUPG, introduzida por [10] para a estabilização de problemas predominantemente advectivos, faz parte da classe dos métodos estabilizados de Petrov-Galerkin. Estes métodos utilizam funções peso diferentes das empregadas no método de Galerkin, visando a obtenção de formulações numéricas variacionalmente consistentes com propriedades de estabilidade superiores às deste. O método SUPG é uma formulação estabilizada de Petrov-Galerkin com funções peso descontínuas, que adiciona uma difusão artificial somente na direção das linhas de corrente. A função peso para o método SUPG é dada por

$$\tilde{w}_h = w_h + \tilde{p}_h, \quad (5.23)$$

onde w_h é a função peso contínua do método de Galerkin e \tilde{p}_h é a função descontínua de Petrov-Galerkin, definida (ver [10]) por

$$\tilde{p}_h = \tau^e \mathbf{v} \cdot \nabla w_h, \quad (5.24)$$

onde τ^e é o parâmetro de estabilização, dado pela expressão

$$\tau^e = \frac{1}{2\|\mathbf{v}\|} h^e \min \left\{ \frac{P_e}{3}, 1.0 \right\}, \quad (5.25)$$

sendo

- \mathbf{v} o campo de velocidades;
- $h^e = \sqrt{2A^e}$, o parâmetro característico, onde A^e é a área do elemento Ω_e e
- P_e o número de Peclet local, definido por

$$P_e = \frac{1}{2} h^e \frac{\|\mathbf{v}\|^3}{\mathbf{v}^T \mathbf{D}(\mathbf{v}) \mathbf{v}}. \quad (5.26)$$

Apesar do método SUPG conduzir à soluções globalmente estáveis para problemas com advecção dominante, é preciso evitar as oscilações localizadas na vizinhança de camadas limites internas e/ou externas. Para isso, pode-se utilizar o método de captura de descontinuidades CAU, apresentado em [24]. Este método, que consiste em acrescentar um operador não linear da forma

$$\sum_{e=1}^{nel} \int_{\Omega_e} \delta_{cau}^e \nabla w_h \cdot \nabla c_h d\Omega \quad (5.27)$$

à formulação de Galerkin com SUPG, evita as oscilações indesejáveis localizadas próximo às regiões com altos gradientes. O termo δ_{cau}^e em (5.27) é um parâmetro de estabilização não linear, definido (ver [1, 16, 17, 47]) por

$$\delta_{cau}^e = \frac{1}{2} h^e \min \left\{ \frac{Pe_p}{3}, 0.7 \right\} \frac{|R(c^h)|}{\|\nabla c_h\|}, \quad (5.28)$$

onde

- $Pe_p = \frac{1}{2} h^e \frac{\|\mathbf{v}_p\|^3}{\mathbf{v}_p^T \mathbf{D}(\mathbf{v}) \mathbf{v}_p}$ é o número de Peclet local correspondente ao campo de velocidades \mathbf{v}_p ;
- $\mathbf{v}_p = \frac{\mathbf{v} \cdot \nabla c^h}{\|\nabla c^h\|^2} \nabla c_h$ é o campo de velocidades projetado na direção paralela ao gradiente da solução, ∇c_h ;
- $R(c_h)$ é o resíduo da equação no interior do elemento Ω_e , dado por

$$R(c_h) = \phi \frac{\partial c_h}{\partial t} + \mathbf{v} \cdot \nabla c_h - \nabla \cdot (\mathbf{D}(\mathbf{v}) \nabla c_h). \quad (5.29)$$

Portanto, a formulação variacional SUPG/CAU da equação da concentração é dada por: encontrar $c_h \in C_h$, $\forall t \in (0, t_f)$ tal que $c_h(\mathbf{x}, 0) = c_0(\mathbf{x})$ e

$$\underbrace{\int_{\Omega} \tilde{w}_h \left(\phi \frac{\partial c_h}{\partial t} + \mathbf{v} \cdot \nabla c_h + \nabla \cdot (\mathbf{D}(\mathbf{v}) \nabla c_h) \right) d\Omega}_{GALERKIN} + \underbrace{\sum_{e=1}^{nel} \int_{\Omega^e} \tilde{p}_h \left(\phi \frac{\partial c_h}{\partial t} + \mathbf{v} \cdot \nabla c_h + \nabla \cdot (\mathbf{D}(\mathbf{v}) \nabla c_h) \right) d\Omega}_{SUPG} + \underbrace{\sum_{e=1}^{nel} \int_{\Omega^e} \delta_{cau}^e \nabla w_h \cdot \nabla c_h d\Omega}_{CAU} = 0, \quad \forall w_h \in C_h, \quad (5.30)$$

onde C_h é dado por (5.14). Substituindo \tilde{p}_h por (5.24) e aplicando a primeira identidade de Green [36] nos termos difusivos da Eq. (5.30), tem-se

$$\begin{aligned}
& \underbrace{\left(w_h, \phi \frac{\partial c_h}{\partial t} \right) + (w_h, \mathbf{v} \cdot \nabla c_h) + (\nabla w_h, \mathbf{D}(\mathbf{v}) \nabla c_h)}_{GALERKIN} + \\
& \underbrace{\sum_{e=1}^{nel} \tau^e \left(\int_{\Omega_e} \mathbf{v} \cdot \nabla w_h \phi \frac{\partial c_h}{\partial t} d\Omega + \int_{\Omega_e} (\mathbf{v} \cdot \nabla w_h)(\mathbf{v} \cdot \nabla c_h) d\Omega - \int_{\Omega_e} \nabla(\mathbf{v} \cdot \nabla w_h) \cdot \mathbf{D}(\mathbf{v}) \nabla c_h d\Omega \right)}_{SUPG} \\
& + \underbrace{\sum_{e=1}^{nel} \int_{\Omega_e} \delta_{cau}^e \nabla w_h \cdot \nabla c_h d\Omega^e}_{CAU} = 0, \tag{5.31}
\end{aligned}$$

onde

$$\begin{aligned}
\left(w_h, \phi \frac{\partial c_h}{\partial t} \right) &= \int_{\Omega} w_h \phi \frac{\partial c_h}{\partial t} d\Omega; \\
(w_h, \mathbf{v} \cdot \nabla c_h) &= \int_{\Omega} w_h \mathbf{v} \cdot \nabla c_h d\Omega; \\
(\nabla w_h, \mathbf{D}(\mathbf{v}) \nabla c_h) &= \int_{\Omega} \nabla w_h \cdot \mathbf{D}(\mathbf{v}) \nabla c_h d\Omega.
\end{aligned}$$

Cada termo que compõe a Eq. (5.31) recebe uma denominação:

$$\text{massa:} \quad \int_{\Omega} w_h \phi \frac{\partial c_h}{\partial t} d\Omega \quad e \quad \sum_{e=1}^{nel} \tau^e \int_{\Omega_e} \mathbf{v} \cdot \nabla w_h \phi \frac{\partial c_h}{\partial t} d\Omega; \tag{5.32}$$

$$\text{advecção:} \quad \int_{\Omega} w_h \mathbf{v} \cdot \nabla c_h d\Omega \quad e \quad \sum_{e=1}^{nel} \tau^e \int_{\Omega_e} (\mathbf{v} \cdot \nabla w_h)(\mathbf{v} \cdot \nabla c_h) d\Omega; \tag{5.33}$$

$$\text{difusão:} \quad \int_{\Omega} \nabla w_h \cdot \mathbf{D}(\mathbf{v}) \nabla c_h d\Omega \quad e \quad \sum_{e=1}^{nel} \tau^e \int_{\Omega_e} \nabla(\mathbf{v} \cdot \nabla w_h) \cdot \mathbf{D}(\mathbf{v}) \nabla c_h d\Omega; \tag{5.34}$$

$$\text{CAU:} \quad \sum_{e=1}^{nel} \int_{\Omega_e} \delta_{cau}^e \nabla w_h \cdot \nabla c_h d\Omega. \tag{5.35}$$

As funções c_h e $\frac{\partial c_h}{\partial t}$ em (5.31) são aproximadas conforme (5.20) e (5.21), respectivamente. De forma análoga, obtém-se a aproximação w_h .

No próximo capítulo são descritas as matrizes locais provenientes das formulações variacionais vistas neste capítulo, bem como a estrutura de dados elemento-por-elemento utilizada para armazenagem das matrizes globais.

Capítulo 6

Estrutura de Dados

Elemento-Por-Elemento

A formulação numérica variacional apresentada no capítulo anterior resulta em um sistema algébrico de equações diferenciais ordinárias não lineares, que é resolvido por um esquema discreto de integração no tempo. As matrizes globais provenientes da formulação discreta são armazenadas em uma estrutura de dados elemento-por-elemento. Nesta estrutura de dados, os elementos de uma matriz são armazenados a nível de elemento. Neste capítulo são apresentadas as matrizes dos elementos associadas às formulações numéricas descritas no Capítulo 5, a estrutura de dados elemento-por-elemento e um algoritmo preditor/multicorretor de integração no tempo.

O conjunto de equações originadas da aproximação pelo método de elementos finitos forma um sistema acoplado que pode ser representado de forma matricial por

$$\mathbf{K}\mathbf{p} = \mathbf{Q}; \quad (6.1)$$

$$\overline{\mathbf{M}}\overline{\mathbf{v}} = \mathbf{F}; \quad (6.2)$$

$$\widetilde{\mathbf{M}}\mathbf{a} + \widetilde{\mathbf{C}}\mathbf{c} = \mathbf{0}, \quad (6.3)$$

onde \mathbf{p} , $\overline{\mathbf{v}}$ e \mathbf{c} são os vetores incógnitas da pressão, velocidade e concentração, respectivamente.

As matrizes globais \mathbf{K} , $\overline{\mathbf{M}}$, $\widetilde{\mathbf{M}}$ e $\widetilde{\mathbf{C}}$, formadas a partir das contribuições das matrizes locais, são esparsas. Para reduzir o consumo desnecessário de memória e o número

de operações de ponto flutuante, será utilizada a estratégia de armazenamento elemento-por-elemento (EBE) [35].

As matrizes e vetores do sistema acoplado (6.1), (6.2) e (6.3) são construídos a partir da contribuição de matrizes associadas à cada elemento da malha, da seguinte forma

$$\mathbf{K} = \mathbf{A}_{e=1}^{nel}(k^e); \quad (6.4)$$

$$\overline{\mathbf{M}} = \mathbf{A}_{e=1}^{nel}(m_w^e + m_{div}^e); \quad (6.5)$$

$$\widetilde{\mathbf{M}} = \mathbf{A}_{e=1}^{nel}(\widetilde{m}^e); \quad (6.6)$$

$$\widetilde{\mathbf{C}} = \mathbf{A}_{e=1}^{nel}(\widetilde{c}^e); \quad (6.7)$$

$$\mathbf{F} = \mathbf{A}_{e=1}^{nel}(f_g^e + f_{pos}^e); \quad (6.8)$$

$$\mathbf{Q} = \mathbf{A}_{e=1}^{nel}f_q^e; \quad (6.9)$$

onde $\mathbf{A}_{e=1}^{nel}$ é o operador "assembly" conforme definido em [31], que indica a montagem das matrizes globais a partir das contribuições de cada elemento.

As aproximações de elementos finitos para a pressão, a velocidade e a concentração, descritas no Capítulo 5, são dadas a nível de cada elemento triangular linear (ver Fig. 6.1) da seguinte forma:

$$p_h^e(\mathbf{x}, t) = \sum_{j=1}^3 N_j(\mathbf{x})p_j(t); \quad (6.10)$$

$$c_h^e(\mathbf{x}, t) = \sum_{j=1}^3 N_j(\mathbf{x})c_j(t); \quad (6.11)$$

$$\mathbf{v}_h^e(x, t) = \sum_{j=1}^3 \widetilde{\mathbf{N}}_j(\mathbf{x})\mathbf{v}_j(t), \quad (6.12)$$

onde N_j e $\widetilde{\mathbf{N}}_j$, $j = 1, 2, 3$ são as funções de interpolação locais para a pressão, a concentração e a velocidade. Para simplificar a descrição do processo de implementação computacional, define-se o vetor de interpolação, formado pelas funções de interpolação, como

$$\mathbf{N} = \begin{bmatrix} N_1 I & N_2 I & N_3 I \end{bmatrix}, \quad (6.13)$$

onde I é a matriz identidade de ordem 1 para a pressão e concentração e de ordem 2 para a velocidade, devido a velocidade ser um campo vetorial com duas componentes

v_x e v_y . Desta forma, para os campos de pressão e concentração, o vetor de interpolação é dado por

$$\mathbf{N} = \begin{bmatrix} N_1 & N_2 & N_3 \end{bmatrix} \quad (6.14)$$

e para o campo de velocidades,

$$\tilde{\mathbf{N}} = \begin{bmatrix} N_1 & 0 & N_2 & 0 & N_3 & 0 \\ 0 & N_1 & 0 & N_2 & 0 & N_3 \end{bmatrix}. \quad (6.15)$$

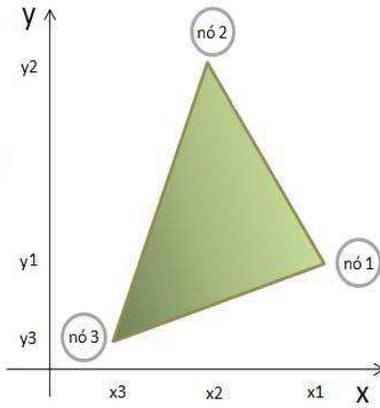


Figura 6.1: Elemento triangular linear.

Buscando simplificar as funções de interpolação, realiza-se uma transformação de variáveis globais (x, y) para variáveis locais (ξ, η) , conforme representada na Fig. 6.2. Após esta transformação, as funções de interpolação podem ser definidas como

$$\begin{aligned} N_1 &= \xi; \\ N_2 &= \eta; \\ N_3 &= 1 - \xi - \eta. \end{aligned} \quad (6.16)$$

A Matriz Jacobiana que define a transformação das coordenadas globais para as coordenadas locais é dada por

$$X_{,\xi} = \mathbf{J} = \begin{bmatrix} \frac{\partial x}{\partial \xi} & \frac{\partial x}{\partial \eta} \\ \frac{\partial y}{\partial \xi} & \frac{\partial y}{\partial \eta} \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} x_{13} & -x_{32} \\ -y_{31} & y_{23} \end{bmatrix}, \quad (6.17)$$

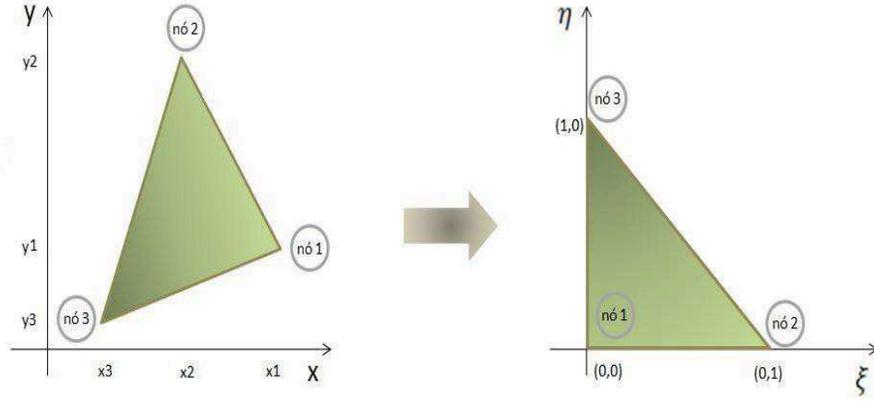


Figura 6.2: Transformação de variáveis globais (x, y) para variáveis locais (ξ, η) .

onde $x_{ij} = x_i - x_j$ e $y_{ij} = y_i - y_j$, com x_i e y_j as coordenadas globais dos pontos nodais do elemento Ω_e , $i, j = 1, 2, 3$. A inversa da Matriz Jacobiana é dada por

$$\mathbf{J}^{-1} = \begin{bmatrix} \frac{\partial \xi}{\partial x} & \frac{\partial \xi}{\partial y} \\ \frac{\partial \eta}{\partial x} & \frac{\partial \eta}{\partial y} \end{bmatrix} = \frac{1}{2A^e} \begin{bmatrix} y_{23} & x_{32} \\ y_{31} & x_{13} \end{bmatrix}, \quad (6.18)$$

onde A^e é a área do elemento Ω_e . O operador gradiente discreto das funções de interpolação é definido por

$$\mathbf{B} = \begin{bmatrix} \mathbf{B}_x \\ \mathbf{B}_y \end{bmatrix} = \frac{1}{2A^e} \begin{bmatrix} \frac{\partial N_1}{\partial x} & \frac{\partial N_2}{\partial x} & \frac{\partial N_3}{\partial x} \\ \frac{\partial N_1}{\partial y} & \frac{\partial N_2}{\partial y} & \frac{\partial N_3}{\partial y} \end{bmatrix} \quad (6.19)$$

ou

$$\mathbf{B} = \frac{1}{2A^e} \begin{bmatrix} y_{23}\mathbf{I} & y_{31}\mathbf{I} & y_{12}\mathbf{I} \\ x_{32}\mathbf{I} & x_{13}\mathbf{I} & x_{21}\mathbf{I} \end{bmatrix}. \quad (6.20)$$

Esta definição do operador gradiente será utilizado nas seções seguintes para a definição das matrizes locais correspondentes à pressão, velocidade e concentração.

6.1 Matrizes dos Elementos

Nesta seção são apresentadas as matrizes dos elementos a partir das formulações numéricas descritas no capítulo anterior e das funções usuais de interpolação dadas

por (6.16). As integrais presentes nas formulações podem ser resolvidas facilmente de forma analítica, usando a fórmula de integração sobre elementos triangulares

$$\int_{\Omega_e} (N_1)^a (N_2)^b (N_3)^c d\Omega = \frac{a!b!c!}{(a+b+c+2)!} 2A^e, \quad (6.21)$$

onde A^e é a área do elemento Ω_e e $N_j = N_j(\mathbf{x})$, $j = 1, 2, 3$ as funções de forma do método de Galerkin.

6.1.1 Matriz Local Associada à Equação da Pressão

Usando a formulação variacional para a pressão, dada pela Eq. (5.4), segue-se que

$$\int_{\Omega_e} \nabla w_h \cdot \mathbf{A}(c_h) \nabla p_h d\Omega \Rightarrow \mathbf{k}^e = \int_{\Omega_e} \mathbf{B}^T \mathbf{A}(c_h) \mathbf{B} d\Omega. \quad (6.22)$$

Considerando a permeabilidade homogênea, o tensor $\mathbf{A}(c_h)$ é dado por

$$\mathbf{A}(c_h) = \begin{bmatrix} \Lambda_{11} & 0 \\ 0 & \Lambda_{22} \end{bmatrix}$$

onde $\Lambda_{ii} = \frac{\lambda_{ii}}{\mu}$, $i = 1, 2$.

Reescrevendo \mathbf{k}^e na forma matricial, obtém-se

$$\mathbf{k}^e = \frac{1}{4A^e} \begin{bmatrix} y_{23} & x_{32} \\ y_{31} & x_{13} \\ y_{12} & x_{21} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \Lambda_{11} & 0 \\ 0 & \Lambda_{22} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} y_{23} & y_{31} & y_{12} \\ x_{32} & x_{13} & x_{21} \end{bmatrix}. \quad (6.23)$$

Efetuada as operações matriciais envolvidas em (6.23), conclui-se que \mathbf{k}^e é uma matriz simétrica positiva e com deficiência de posto, podendo ser reescrita da seguinte forma:

$$\mathbf{k}^e = \frac{1}{4\mu A^e} \begin{bmatrix} -(P_{12} + P_{13}) & P_{12} & P_{13} \\ & -(P_{12} + P_{23}) & P_{23} \\ \textit{simétrica} & & -(P_{13} + P_{23}) \end{bmatrix}, \quad (6.24)$$

onde os coeficientes P_{ij} são dados por

$$P_{12} = \lambda_{11} y_{31} y_{23} + \lambda_{22} x_{13} x_{32};$$

$$P_{13} = \lambda_{11} y_{23} y_{12} + \lambda_{22} x_{32} x_{21};$$

$$P_{23} = \lambda_{11} y_{31} y_{12} + \lambda_{22} x_{13} x_{21}.$$

6.1.2 Matrizes Locais Associadas à Equação da Velocidade

Todos os termos que compõem a formulação numérica da equação do campo de velocidades, dados por (5.9), (5.10), (5.11) e (5.12), serão analisados separadamente.

Matriz Local Associada ao Termo da lei de Darcy

O termo correspondente a lei de Darcy (Eq. 5.9) na formulação numérica para a equação da velocidade é dado por

$$\int_{\Omega_e} \mathbf{w}_h \cdot \mathbf{A}(c)^{-1} \mathbf{v}_h d\Omega \Rightarrow \tilde{\mathbf{m}}_w^e = \int_{\Omega_e} \tilde{\mathbf{N}} \mathbf{A}^{-1} \tilde{\mathbf{N}} d\Omega \quad (6.25)$$

ou

$$\tilde{\mathbf{m}}_w^e = \int_{\Omega_e} \begin{bmatrix} N_1 & 0 \\ 0 & N_1 \\ N_2 & 0 \\ 0 & N_2 \\ N_3 & 0 \\ 0 & N_3 \end{bmatrix} \frac{1}{\det(\mathbf{A})} \begin{bmatrix} \Lambda_{22} & -\Lambda_{12} \\ -\Lambda_{21} & \Lambda_{11} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} N_1 & 0 & N_2 & 0 & N_3 & 0 \\ 0 & N_1 & 0 & N_2 & 0 & N_3 \end{bmatrix} d\Omega. \quad (6.26)$$

Considerando a permeabilidade homogênea e usando

$$\int_{\Omega_e} N_i N_j d\Omega = \begin{cases} \frac{A^e}{6}, & \text{se } i = j; \\ \frac{A^e}{12}, & \text{se } i \neq j, \end{cases}$$

segue-se que

$$\tilde{\mathbf{m}}_w^e = \frac{\mu A^e}{12} \begin{bmatrix} 2\lambda_{22} & 0 & \lambda_{22} & 0 & \lambda_{22} & 0 \\ 0 & 2\lambda_{11} & 0 & \lambda_{11} & 0 & \lambda_{11} \\ \lambda_{22} & 0 & 2\lambda_{22} & 0 & \lambda_{22} & 0 \\ 0 & \lambda_{11} & 0 & 2\lambda_{11} & 0 & \lambda_{11} \\ \lambda_{22} & 0 & \lambda_{22} & 0 & 2\lambda_{22} & 0 \\ 0 & \lambda_{11} & 0 & \lambda_{11} & 0 & 2\lambda_{11} \end{bmatrix}. \quad (6.27)$$

Matriz Local Associada ao Divergente da velocidade

A parcela referente ao divergente da velocidade (Eq. 5.10) é expressa por

$$\sum_{e=1}^{n_{el}} \delta_{pp}^e \int_{\Omega_e} (\nabla \cdot \mathbf{w}_h)(\nabla \cdot \mathbf{v}_h) d\Omega \Rightarrow \tilde{\mathbf{m}}_{div}^e = \int_{\Omega_e} \mathbf{B}_{Div}^T \mathbf{B}_{Div} d\Omega, \quad (6.28)$$

onde \mathbf{B}_{Div} é o operador divergente discreto para a velocidade, dado por

$$\mathbf{B}_{Div} = \frac{1}{2A^e} \begin{bmatrix} y_{23} & x_{32} & y_{31} & x_{13} & y_{12} & x_{21} \end{bmatrix}. \quad (6.29)$$

Considerando o vetor de interpolação com dois graus de liberdade, tem-se

$$\tilde{\mathbf{m}}_{div}^e = \frac{\delta_{pp}^e}{4A^e} \begin{bmatrix} y_{23} \\ x_{32} \\ y_{31} \\ x_{13} \\ y_{12} \\ x_{21} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} y_{23} & x_{32} & y_{31} & x_{13} & y_{12} & x_{21} \end{bmatrix}. \quad (6.30)$$

Efetuando as operações matriciais envolvidas em (6.30), segue-se que

$$\tilde{\mathbf{m}}_{div}^e = \frac{\delta_{pp}^e}{4A^e} \begin{bmatrix} y_{23}y_{23} & y_{23}x_{32} & y_{23}y_{31} & y_{23}x_{13} & y_{23}y_{12} & y_{23}x_{21} \\ & x_{32}x_{32} & x_{32}y_{31} & x_{32}x_{13} & x_{32}y_{12} & x_{32}x_{21} \\ & & y_{31}y_{31} & y_{31}x_{13} & y_{31}y_{12} & y_{31}x_{21} \\ & & & x_{13}x_{13} & x_{13}y_{12} & x_{13}x_{21} \\ & & & & y_{12}y_{12} & y_{12}x_{21} \\ \text{simétrica} & & & & & x_{21}x_{21} \end{bmatrix} \quad (6.31)$$

Matriz Local Associada ao Gradiente da Pressão

A parcela referente ao gradiente da pressão (Eq. 5.11) é representada por

$$\int_{\Omega_e} \mathbf{w}_h \cdot \nabla p_h d\Omega \Rightarrow \tilde{\mathbf{f}}_g^e = \int_{\Omega_e} \tilde{\mathbf{N}}^T \mathbf{B}_p d\Omega, \quad (6.32)$$

onde \mathbf{Bp} é o vetor associado ao gradiente da pressão. Como \mathbf{Bp} é constante e $\int_{\Omega_e} N_i d\Omega = \frac{A^e}{3}$, a forma matricial para o gradiente da pressão é

$$\tilde{\mathbf{f}}_g^e = \frac{1}{6} \begin{bmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1 \\ 1 & 0 \\ 0 & 1 \\ 1 & 0 \\ 0 & 1 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} y_{23} & y_{31} & y_{12} \\ x_{32} & x_{13} & x_{21} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} p_1 \\ p_2 \\ p_3 \end{bmatrix}. \quad (6.33)$$

Efetuada as operações matriciais, resulta em

$$\tilde{\mathbf{f}}_g^e = \frac{1}{6} \begin{bmatrix} y_{23}p_1 + y_{31}p_2 + y_{12}p_3 \\ x_{32}p_1 + x_{13}p_2 + x_{21}p_3 \\ y_{23}p_1 + y_{31}p_2 + y_{12}p_3 \\ x_{32}p_1 + x_{13}p_2 + x_{21}p_3 \\ y_{23}p_1 + y_{31}p_2 + y_{12}p_3 \\ x_{32}p_1 + x_{13}p_2 + x_{21}p_3 \end{bmatrix}. \quad (6.34)$$

Matriz Local Associada ao Divergente de Fluxo

A parcela referente ao divergente de fluxo (Eq. 5.12) é representada por

$$\delta_{pp}^e \sum_{e=1}^{nel} \int_{\Omega_e} (\nabla \cdot \mathbf{w}_h) q d\Omega \Rightarrow \tilde{\mathbf{f}}_{pos}^e = \delta_{pp}^e \mathbf{B}_{Div}^T q \quad (6.35)$$

ou

$$\tilde{\mathbf{f}}_{pos}^e = \frac{\delta_{pp}^e}{2A^e} \delta(x - x_i) \begin{bmatrix} y_{23} \\ x_{32} \\ y_{31} \\ x_{13} \\ y_{12} \\ x_{21} \end{bmatrix}, \quad (6.36)$$

onde $q = \delta(x - x_i)$, com δ a função Delta de Dirac. O valor de q não é nulo somente nos poços injetor e produtor. Assim, a função Delta de Dirac é não nula apenas nos pontos nodais que representam os poços injetor e produtor.

6.1.3 Matrizes Locais Associadas à Equação da Concentração com a Formulação SUPG/CAU

Todos os termos que compõem a formulação numérica estabilizada SUPG/CAU da equação de concentração, dados por (5.32), (5.33), (5.34) e (5.35), são analisados separadamente.

As contribuições de cada elemento utilizando a formulação SUPG/CAU

$$\widetilde{\mathbf{M}} = \mathbf{A}_{e=1}^{nel}(\widetilde{m}^e);$$

$$\widetilde{\mathbf{C}} = \mathbf{A}_{e=1}^{nel}(\widetilde{c}^e),$$

são reescritas como

$$\widetilde{\mathbf{M}} = \mathbf{A}_{e=1}^{nel}(m_g^e + m_{pg}^e);$$

$$\widetilde{\mathbf{C}} = \mathbf{A}_{e=1}^{nel}(c_g^e + d_g^e + c_{pg}^e + d_{pg}^e + c_{cau}^e),$$

onde

- m_g^e é a contribuição de massa de Galerkin;
- m_{pg}^e é a contribuição para a correção de massa do SUPG;
- c_g^e é a contribuição de advecção de Galerkin;
- d_g^e é a contribuição de difusão de Galerkin;
- c_{pg}^e é a contribuição de correção de advecção do SUPG;
- d_{pg}^e é a contribuição de correção de difusão do SUPG;
- c_{cau}^e é a contribuição de correção do CAU.

Matriz Local de Massa de Galerkin para a Concentração

A matriz de massa para cada elemento Ω_e é dada por

$$\int_{\Omega_e} w_h \phi \frac{\partial c_h}{\partial t} d\Omega \quad \Rightarrow \quad \mathbf{m}_g^e = \int_{\Omega_e} \phi \mathbf{N}^T \mathbf{N} d\Omega \quad (6.37)$$

ou

$$\mathbf{m}_g^e = \frac{\phi A^e}{12} \begin{bmatrix} 2 & 1 & 1 \\ 1 & 2 & 1 \\ 1 & 1 & 2 \end{bmatrix}. \quad (6.38)$$

Matriz Local de Advecção de Galerkin para a Concentração

A matriz de advecção para cada elemento Ω_e é dada por

$$\int_{\Omega_e} w_h \mathbf{v}^h \cdot \nabla c_h d\Omega \Rightarrow \mathbf{c}_g^e = \int_{\Omega_e} \mathbf{N}^T \mathbf{v}^T \mathbf{B} d\Omega. \quad (6.39)$$

Como $\mathbf{B}^T \mathbf{v}$ é constante,

$$\mathbf{c}_g^e = \left(\int_{\Omega_e} \mathbf{N}^T d\Omega^e \right) \mathbf{v}^T \mathbf{B}. \quad (6.40)$$

Segue-se que a matriz \mathbf{c}_g^e é dada por

$$\mathbf{c}_g^e = \frac{2A^e}{6} \begin{bmatrix} 1 \\ 1 \\ 1 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} v_x & v_y \end{bmatrix} \frac{1}{2A^e} \begin{bmatrix} y_{23} & y_{31} & y_{12} \\ x_{32} & x_{13} & x_{21} \end{bmatrix}. \quad (6.41)$$

Realizando as operações matriciais e considerando que \mathbf{c}_g^e possui deficiência de posto, resulta em

$$\mathbf{c}_g^e = \frac{1}{6} \begin{bmatrix} -(c_{12} + c_{13}) & c_{12} & c_{13} \\ c_{11} & -(c_{11} + c_{13}) & c_{13} \\ c_{11} & c_{12} & -(c_{11} + c_{13}) \end{bmatrix}, \quad (6.42)$$

onde c_{1i} com $i = 1, 2, 3$ representam as parcelas

$$c_{11} = y_{23}v_x + x_{32}v_y;$$

$$c_{12} = y_{31}v_x + x_{13}v_y;$$

$$c_{13} = y_{12}v_x + x_{21}v_y.$$

A matriz \mathbf{c}_g não é simétrica e pode ser representada por apenas três coeficientes

$$\mathbf{c}_g^e = \frac{1}{6} \begin{bmatrix} c_{11} & c_{12} & c_{13} \\ c_{11} & c_{12} & c_{13} \\ c_{11} & c_{12} & c_{13} \end{bmatrix}. \quad (6.43)$$

Matriz Local de Difusão de Galerkin para a Concentração

A parcela referente ao termo de difusão no método de Galerkin para a concentração (Eq. 3.22) é dada por

$$\int_{\Omega_e} \nabla w_h \cdot \mathbf{D} \nabla c_h d\Omega \Rightarrow \mathbf{d}_g^e = \int_{\Omega_e} \mathbf{B}^T \mathbf{D} \mathbf{B} d\Omega. \quad (6.44)$$

Segue-se que

$$\mathbf{d}_g^e = \frac{1}{2A^e} \begin{bmatrix} y_{23} & x_{32} \\ y_{31} & x_{13} \\ y_{12} & x_{21} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} d_{11} & d_{12} \\ d_{21} & d_{22} \end{bmatrix} \frac{1}{2A^e} \begin{bmatrix} y_{23} & y_{31} & y_{12} \\ x_{32} & x_{13} & x_{21} \end{bmatrix} A^e. \quad (6.45)$$

Efetuando as operações matriciais, \mathbf{d}_g^e resulta em

$$\mathbf{d}_g^e = \frac{1}{4A^e} \begin{bmatrix} D_{11} & D_{12} & D_{13} \\ & D_{22} & D_{23} \\ sim & & D_{33} \end{bmatrix}, \quad (6.46)$$

onde

$$\begin{aligned} D_{11} &= y_{23}(d_{11}y_{23} + d_{21}x_{32}) + x_{32}(d_{12}y_{23} + d_{22}x_{32}); \\ D_{12} &= y_{31}(d_{11}y_{23} + d_{21}x_{32}) + x_{13}(d_{12}y_{23} + d_{22}x_{32}); \\ D_{13} &= y_{12}(d_{11}y_{23} + d_{21}x_{32}) + x_{21}(d_{12}y_{23} + d_{22}x_{32}); \\ D_{22} &= y_{31}(d_{11}y_{31} + d_{21}x_{13}) + x_{13}(d_{12}y_{31} + d_{22}x_{13}); \\ D_{23} &= y_{12}(d_{11}y_{31} + d_{21}x_{13}) + x_{21}(d_{12}y_{31} + d_{22}x_{13}); \\ D_{33} &= y_{12}(d_{11}y_{12} + d_{21}x_{21}) + x_{21}(d_{12}y_{21} + d_{22}x_{21}). \end{aligned}$$

Observa-se que \mathbf{d}_g^e possui deficiência de posto, podendo ser reescrita como

$$\mathbf{d}_g^e = \frac{1}{4A^e} \begin{bmatrix} -(D_{12} + D_{13}) & D_{12} & D_{13} \\ & -(D_{21} + D_{23}) & D_{23} \\ sim & & -(D_{31} + D_{32}) \end{bmatrix}. \quad (6.47)$$

Correção SUPG da Matriz de Massa

A parcela referente à correção SUPG da matriz de massa é dado por

$$\tau^e \int_{\Omega_e} \mathbf{v}_h \nabla w^h \phi \frac{\partial c_h}{\partial t} d\Omega \Rightarrow \mathbf{m}_{pg}^e = \tau^e \phi \int_{\Omega_e} \mathbf{B}^T \mathbf{v} \mathbf{N} d\Omega. \quad (6.48)$$

Sendo $\mathbf{B}^T \mathbf{v}$ constante, verifica-se que

$$\mathbf{m}_{pg}^e = \tau^e \phi \mathbf{B}^T \mathbf{v} \int_{\Omega_e} \mathbf{N} d\Omega. \quad (6.49)$$

ou

$$\mathbf{m}_{pg}^e = \tau^e \phi \frac{1}{2A^e} \begin{bmatrix} y_{23} & x_{32} \\ y_{31} & x_{13} \\ y_{12} & x_{21} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \mathbf{v}_x \\ \mathbf{v}_y \end{bmatrix} \frac{2A^e}{6} \begin{bmatrix} 1 & 1 & 1 \end{bmatrix}. \quad (6.50)$$

Correção SUPG da Matriz de Advecção

A parcela referente à correção SUPG da matriz de advecção é dado por

$$\tau^e \int_{\Omega_e} \mathbf{v}_h \cdot \nabla w_h \mathbf{v}_h \cdot \nabla c_h d\Omega \Rightarrow \mathbf{c}_{pg}^e = \tau^e \int_{\Omega_e} \mathbf{B}^T \mathbf{v} \mathbf{v}^T \mathbf{B} d\Omega. \quad (6.51)$$

Considerando a velocidade constante no elemento, tem-se

$$\mathbf{c}_{pg}^e = \tau^e \frac{1}{2A^e} \begin{bmatrix} y_{23} & x_{32} \\ y_{31} & x_{13} \\ y_{12} & x_{21} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \mathbf{v}_{xx} & \mathbf{v}_{xy} \\ \mathbf{v}_{xy} & \mathbf{v}_{yy} \end{bmatrix} \frac{1}{2A^e} \begin{bmatrix} y_{23} & y_{31} & y_{12} \\ x_{32} & x_{13} & x_{21} \end{bmatrix} A^e. \quad (6.52)$$

Correção SUPG da Matriz de Difusão

A parcela referente à correção SUPG da matriz de difusão é dado por

$$\tau^e \int_{\Omega_e} \nabla(\mathbf{v}_h \cdot \nabla w_h) \cdot \mathbf{D} \nabla c_h d\Omega. \quad (6.53)$$

Devido a utilização de funções lineares e o integrando da expressão depender de derivadas de segunda ordem das funções de interpolação, segue-se que

$$\mathbf{d}_{pg}^e = \mathbf{0}. \quad (6.54)$$

Matriz de Correção do Operador Captura de Descontinuidades CAU

A parcela referente à correção do operador CAU (Eq. 5.4) é representada por

$$\int_{\Omega_e} \delta_{cau}^e \nabla w_h \cdot \nabla c_h d\Omega \Rightarrow \mathbf{c}_{cau}^e = \int_{\Omega_e} \delta_{cau}^e \mathbf{B}^T \mathbf{B} d\Omega. \quad (6.55)$$

Como δ é constante no interior de cada elemento Ω_e , tem-se

$$\mathbf{c}_{cau}^e = \frac{\delta_{cau}^e}{4A^e} \begin{bmatrix} y_{23} & x_{32} \\ y_{31} & x_{13} \\ y_{12} & x_{21} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} y_{23} & y_{31} & y_{12} \\ x_{32} & x_{13} & x_{21} \end{bmatrix}. \quad (6.56)$$

6.1.4 Matrizes Locais Associadas à Equação da Concentração com a Formulação Difusão Dinâmica

As contribuições de cada elemento utilizando a formulação DD

$$\widetilde{\mathbf{M}} = \mathbf{A} \sum_{e=1}^{nel} (\widetilde{m}^e);$$

$$\widetilde{\mathbf{C}} = \mathbf{A} \sum_{e=1}^{nel} (\widetilde{c}^e),$$

são reescritas como

$$\widetilde{\mathbf{M}} = \mathbf{A} \sum_{e=1}^{nel} (m_g^e + m_{bh}^e);$$

$$\widetilde{\mathbf{C}} = \mathbf{A} \sum_{e=1}^{nel} (c_g^e + c_{hb}^e + c_{bh}^e + c_{bb}^e),$$

onde

- m_g^e é a contribuição de massa do método de Galerkin;
- m_{bh}^e é a contribuição para a correção de massa do método DD;
- c_g^e é a contribuição de rigidez do método de Galerkin;
- c_{hb}^e , c_{bh}^e e c_{bb}^e são as contribuições de correção de rigidez do método DD.

Matriz Local de Massa 4×4 do Método DD para a Concentração

A matriz local de massa proveniente do método DD é formada pelos termos $(w_h, \phi \frac{\partial c_h}{\partial t})$ e $(w_B, \phi \frac{\partial c_h}{\partial t})$. O primeiro termo, idêntico a parcela referente à formulação de Galerkin calculada em (6.58), gera uma submatriz 3×3 e é dado por

$$\int_{\Omega_e} w_h \phi \frac{\partial c_h}{\partial t} d\Omega \Rightarrow \mathbf{m}_g^e = \int_{\Omega_e} \phi \mathbf{N}^T \mathbf{N} d\Omega \quad (6.57)$$

ou

$$\mathbf{m}_g^e = \frac{\phi A^e}{12} \begin{bmatrix} 2 & 1 & 1 \\ 1 & 2 & 1 \\ 1 & 1 & 2 \end{bmatrix}. \quad (6.58)$$

O segundo termo, que resulta em uma submatriz 1×3 , é dado por

$$\int_{\Omega_e} w_B \phi \frac{\partial c_h}{\partial t} d\Omega \Rightarrow \mathbf{m}_{bh}^e = \int_{\Omega_e} \phi 27 N_1 N_2 N_3 \mathbf{N} d\Omega, \quad (6.59)$$

ou seja,

$$\mathbf{m}_{bh}^e = \frac{3\phi A^e}{20} [1 \quad 1 \quad 1]. \quad (6.60)$$

Portanto, a matriz local de massa 4×4 do método DD para a equação da concentração é dada por

$$\mathbf{m}_{dd}^e = \phi A^e \begin{bmatrix} 1/6 & 1/12 & 1/12 & 0 \\ 1/12 & 1/6 & 1/12 & 0 \\ 1/12 & 1/12 & 1/6 & 0 \\ 3/20 & 3/20 & 3/20 & 0 \end{bmatrix}. \quad (6.61)$$

Matriz Local de Advecção 4×4 do Método DD para a Concentração

A matriz local de advecção proveniente do método DD é formada pelos termos $(w_h, \mathbf{v} \cdot \nabla c_h)$, $(w_h, \mathbf{v} \cdot \nabla c_B)$, $(w_B, \mathbf{v} \cdot \nabla c_h)$ e $(w_B, \mathbf{v} \cdot \nabla c_B)$. O primeiro termo, idêntico a parcela advectiva referente à formulação de Galerkin em (6.62), gera uma submatriz 3×3 dada por

$$\mathbf{c}_g^e = \frac{1}{6} \begin{bmatrix} c_{11} & c_{12} & c_{13} \\ c_{11} & c_{12} & c_{13} \\ c_{11} & c_{12} & c_{13} \end{bmatrix}. \quad (6.62)$$

onde c_{1i} com $i = 1, 2, 3$ representam as parcelas

$$c_{11} = y_{23}v_x + x_{32}v_y;$$

$$c_{12} = y_{31}v_x + x_{13}v_y;$$

$$c_{13} = y_{12}v_x + x_{21}v_y.$$

O segundo termo, que resulta em uma submatriz 3×1 , é dado por

$$\int_{\Omega_e} w_h(\mathbf{v} \cdot \nabla c_B) d\Omega \Rightarrow \mathbf{c}_{hb}^e = \begin{bmatrix} \beta_1 \\ \beta_2 \\ \beta_3 \end{bmatrix},$$

com

$$\begin{aligned} \beta_1 &= \frac{27}{120} [v_x(y_{23} + 2y_{31} + 2y_{12}) + v_y(x_{32} + 2x_{13} + 2x_{21})]; \\ \beta_2 &= \frac{27}{120} [v_x(2y_{23} + y_{31} + 2y_{12}) + v_y(2x_{32} + x_{13} + 2x_{21})]; \\ \beta_3 &= \frac{27}{120} [v_x(2y_{23} + 2y_{31} + y_{12}) + v_y(2x_{32} + 2x_{13} + x_{21})]. \end{aligned}$$

O terceiro termo resulta em uma submatriz 1×3 e é dado por

$$\int_{\Omega_e} w_B(\mathbf{v} \cdot \nabla c_h) d\Omega \Rightarrow \mathbf{c}_{bh}^e = [\gamma_1 \quad \gamma_2 \quad \gamma_3],$$

com

$$\begin{aligned} \gamma_1 &= \frac{27}{120} (v_x y_{23} + v_y x_{32}); \\ \gamma_2 &= \frac{27}{120} (v_x y_{31} + v_y x_{13}); \\ \gamma_3 &= \frac{27}{120} (v_x y_{12} + v_y x_{21}). \end{aligned}$$

O último termo resulta em uma submatriz 1×1 e é dado por

$$\int_{\Omega_e} w_B(\mathbf{v} \cdot \nabla c_B) d\Omega \Rightarrow \mathbf{c}_{bb}^e = [\theta],$$

com

$$\theta = \frac{81}{140} [v_x(y_{23} + y_{31} + y_{12}) + v_y(x_{32} + x_{13} + x_{21})].$$

Portanto, a matriz local de advecção 4×4 do método DD para a equação da concentração é dada por

$$\mathbf{c}_{dd}^e = \begin{bmatrix} c_{11} & c_{12} & c_{13} & \beta_1 \\ c_{11} & c_{12} & c_{13} & \beta_2 \\ c_{11} & c_{12} & c_{13} & \beta_3 \\ \gamma_1 & \gamma_2 & \gamma_3 & \theta \end{bmatrix}. \quad (6.63)$$

Matriz Local de Difusão 4×4 do Método DD para a Concentração

A matriz local de difusão proveniente do método DD é formada pelos termos $(\nabla w_h, \mathbf{D} \nabla c_h)$, $(\nabla w_h, \mathbf{D} \nabla c_B)$, $(\nabla w_B, \mathbf{D} \nabla c_h)$ e $(\nabla w_B, \mathbf{D} \nabla c_B)$. O primeiro termo, idêntico a parcela difusiva referente à formulação de Galerkin (ver (6.64)), gera uma submatriz 3×3 dada por

$$\mathbf{d}_g^e = \frac{1}{4A^e} \begin{bmatrix} -(D_{12} + D_{13}) & D_{12} & D_{13} \\ & -(D_{21} + D_{23}) & D_{23} \\ \text{sim} & & -(D_{31} + D_{32}) \end{bmatrix}, \quad (6.64)$$

onde

$$\begin{aligned} D_{12} &= y_{31}(d_{11}y_{23} + d_{21}x_{32}) + x_{13}(d_{12}y_{23} + d_{22}x_{32}); \\ D_{13} &= y_{12}(d_{11}y_{23} + d_{21}x_{32}) + x_{21}(d_{12}y_{23} + d_{22}x_{32}); \\ D_{23} &= y_{12}(d_{11}y_{31} + d_{21}x_{13}) + x_{21}(d_{12}y_{31} + d_{22}x_{13}). \end{aligned}$$

O segundo termo, que resulta em uma submatriz 3×1 , é dado por

$$\int_{\Omega_e} \nabla w_h \cdot \mathbf{D} \nabla c_B d\Omega \Rightarrow \mathbf{d}_{hb}^e = \begin{bmatrix} \epsilon_1 \\ \epsilon_2 \\ \epsilon_3 \end{bmatrix},$$

com

$$\begin{aligned} \epsilon_1 &= \frac{9}{16A^e} [(y_{23} + x_{32})(d_{11} + d_{21})(y_{23} + y_{31} + y_{12}) + (d_{12} + d_{22})(x_{32} + x_{13} + x_{21})]; \\ \epsilon_2 &= \frac{9}{16A^e} [(y_{31} + x_{13})(d_{11} + d_{21})(y_{23} + y_{31} + y_{12}) + (d_{12} + d_{22})(x_{32} + x_{13} + x_{21})]; \\ \epsilon_3 &= \frac{9}{16A^e} [(y_{12} + x_{21})(d_{11} + d_{21})(y_{23} + y_{31} + y_{12}) + (d_{12} + d_{22})(x_{32} + x_{13} + x_{21})], \end{aligned}$$

onde d_{ij} para $i, j = 1, 2$, são as componentes do tensor \mathbf{D} .

O terceiro termo resulta em uma submatriz 1×3 e é dado por

$$\int_{\Omega_e} \nabla w_B \cdot \mathbf{D} \nabla c_h d\Omega \Rightarrow \mathbf{d}_{bh}^e = [\alpha_1 \quad \alpha_2 \quad \alpha_3],$$

com

$$\begin{aligned} \alpha_1 &= \frac{9}{16A^e} [(y_{23} + x_{32})(d_{11} + d_{12})(y_{23} + y_{31} + y_{12}) + (d_{21} + d_{22})(x_{32} + x_{13} + x_{21})]; \\ \alpha_2 &= \frac{9}{16A^e} [(y_{31} + x_{13})(d_{11} + d_{12})(y_{23} + y_{31} + y_{12}) + (d_{21} + d_{22})(x_{32} + x_{13} + x_{21})]; \\ \alpha_3 &= \frac{9}{16A^e} [(y_{12} + x_{21})(d_{11} + d_{12})(y_{23} + y_{31} + y_{12}) + (d_{21} + d_{22})(x_{32} + x_{13} + x_{21})]. \end{aligned}$$

Como $d_{12} = d_{21}$, as matrizes associadas aos termos $(\nabla w_h, \mathbf{D}\nabla c_B)$ e $(\nabla w_B, \mathbf{D}\nabla c_h)$ são iguais.

O último termo resulta em uma submatriz 1×1 e é dado por

$$\int_{\Omega} \nabla w_B \cdot \mathbf{D}\nabla c_B d\Omega \Rightarrow \mathbf{d}_{bb}^e = [\eta],$$

com

$$\begin{aligned} \eta = & \frac{81d_{11}}{140} [(y_{23}^2 + y_{31}^2 + y_{12}^2) + (y_{23}y_{31} + y_{23}y_{12} + y_{31}y_{12})] + \\ & \frac{81d_{22}}{140} [(x_{32}^2 + x_{13}^2 + x_{21}^2) + (x_{32}x_{13} + x_{32}x_{21} + x_{13}x_{21})] + \\ & \frac{81(d_{12} + d_{21})}{140} [y_{23}x_{32} + y_{31}x_{13} + y_{12}x_{21}] + \\ & \frac{81(d_{12} + d_{21})}{280} [(y_{23}x_{13} + y_{31}x_{32}) + (y_{23}x_{21} + y_{12}x_{32}) + (y_{31}x_{21} + y_{12}x_{13})]. \end{aligned} \quad (6.65)$$

Portanto, a matriz local de difusão 4×4 do método DD para a equação da concentração é dada por

$$\mathbf{d}_{dd}^e = \begin{bmatrix} d_{11} & d_{12} & d_{13} & \epsilon_1 \\ d_{21} & d_{22} & d_{23} & \epsilon_2 \\ d_{31} & d_{32} & d_{33} & \epsilon_3 \\ \alpha_1 & \alpha_2 & \alpha_3 & \eta \end{bmatrix}. \quad (6.66)$$

onde

$$\begin{aligned} d_{11} &= -(D_{12} + D_{13}); \\ d_{12} &= D_{12}; \\ d_{13} &= D_{13}; \\ d_{21} &= D_{21}; \\ d_{22} &= -(D_{21} + D_{23}); \\ d_{23} &= D_{23}; \\ d_{31} &= D_{31}; \\ d_{32} &= D_{32}; \\ d_{33} &= -(D_{31} + D_{32}). \end{aligned}$$

Matriz Local de Rigidez 4×4 do Método DD para a Concentração

A matriz local de Rigidez 4×4 do método DD para a concentração é formada pela soma dos termos difusivos $(\nabla w_h, \mathbf{D}\nabla c_h)$, $(\nabla w_h, \mathbf{D}\nabla c_B)$, $(\nabla w_B, \mathbf{D}\nabla c_h)$ e $(\nabla w_B, \mathbf{D}\nabla c_B)$ adicionados aos termos advectivos $(w_h, \mathbf{v} \cdot \nabla c_h)$, $(w_h, \mathbf{v} \cdot \nabla c_B)$, $(w_B, \mathbf{v} \cdot \nabla c_h)$ e $(w_B, \mathbf{v} \cdot \nabla c_B)$.

Portanto, a matriz local de rigidez 4×4 do método DD para a equação da concentração é dada por

$$\mathbf{r}_{dd}^e = \mathbf{d}_{dd}^e + \mathbf{c}_{dd}^e,$$

sendo \mathbf{d}_{dd}^e definido por (6.66) e \mathbf{c}_{dd}^e definido por (6.63).

Matriz Local de Massa Condensada do Método DD para a Concentração

A condensação estática é realizada conforme (5.19). As matrizes locais de massa e rigidez são dadas, respectivamente, por

$$\mathbf{m}_{dd}^e = \begin{bmatrix} m_{11} & m_{12} & m_{13} & m_{14} \\ m_{21} & m_{22} & m_{23} & m_{24} \\ m_{31} & m_{32} & m_{33} & m_{34} \\ m_{41} & m_{42} & m_{43} & m_{44} \end{bmatrix} = \phi A^e \begin{bmatrix} \frac{1}{6} & \frac{1}{12} & \frac{1}{12} & 0 \\ \frac{1}{12} & \frac{1}{6} & \frac{1}{12} & 0 \\ \frac{1}{12} & \frac{1}{12} & \frac{1}{6} & 0 \\ \frac{3}{20} & \frac{3}{20} & \frac{3}{20} & 0 \end{bmatrix}, \quad (6.67)$$

e

$$\mathbf{r}_{dd}^e = \begin{bmatrix} r_{11} & r_{12} & r_{13} & r_{14} \\ r_{21} & r_{22} & r_{23} & r_{24} \\ r_{31} & r_{32} & r_{33} & r_{34} \\ r_{41} & r_{42} & r_{43} & r_{44} \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} d_{11} & d_{12} & d_{13} & \epsilon_1 \\ d_{21} & d_{22} & d_{23} & \epsilon_2 \\ d_{31} & d_{32} & d_{33} & \epsilon_3 \\ \alpha_1 & \alpha_2 & \alpha_3 & \eta \end{bmatrix} + \begin{bmatrix} c_{11} & c_{12} & c_{13} & \beta_1 \\ c_{11} & c_{12} & c_{13} & \beta_2 \\ c_{11} & c_{12} & c_{13} & \beta_3 \\ \gamma_1 & \gamma_2 & \gamma_3 & \theta \end{bmatrix}. \quad (6.68)$$

A matriz local de massa proveniente da condensação estática é dada por

$$\mathbf{m}_{dd}^e = \begin{bmatrix} m_{11} - (r_{14}/r_{44})m_{41} & m_{12} - (r_{14}/r_{44})m_{42} & m_{13} - (r_{14}/r_{44})m_{43} \\ m_{21} - (r_{24}/r_{44})m_{41} & m_{22} - (r_{24}/r_{44})m_{42} & m_{23} - (r_{24}/r_{44})m_{43} \\ m_{31} - (r_{34}/r_{44})m_{41} & m_{32} - (r_{34}/r_{44})m_{42} & m_{33} - (r_{34}/r_{44})m_{43} \end{bmatrix}. \quad (6.69)$$

Matriz Local de Rigidez Condensada do Método DD para a Concentração

Usando (5.19), (6.67) e (6.68), a matriz local de rigidez proveniente da condensação estática do método Difusão Dinâmica é dada por

$$\mathbf{r}_{dd}^e = \begin{bmatrix} r_{11} - (r_{14}/r_{44})r_{41} & r_{12} - (r_{14}/r_{44})r_{42} & r_{13} - (r_{14}/r_{44})r_{43} \\ r_{21} - (r_{24}/r_{44})r_{41} & r_{22} - (r_{24}/r_{44})r_{42} & r_{23} - (r_{24}/r_{44})r_{43} \\ r_{31} - (r_{34}/r_{44})r_{41} & r_{32} - (r_{34}/r_{44})r_{42} & r_{33} - (r_{34}/r_{44})r_{43} \end{bmatrix}. \quad (6.70)$$

6.2 Integração no Tempo

O algoritmo de integração no tempo adotado é o preditor-multicorretor, apresentado no Capítulo 4 para a resolução da equação de transporte transiente via método de estabilização Difusão Dinâmica. O algoritmo é apresentado novamente nesta seção em um contexto mais geral, envolvendo a resolução numérica do problema (3.44)-(3.45)-(3.46). O método preditor-multicorretor é usado amplamente na resolução de problemas de escoamento [1, 19, 46]. Para sua descrição, seja n o contador de passos no tempo, i o contador das iterações não-lineares no espaço, p_n , \mathbf{v}_n , c_n e a_n as aproximações da pressão, da velocidade, da concentração e da derivada temporal para a concentração, respectivamente. O tamanho do passo de tempo é dado como Δt e Δa é o incremento da derivada temporal da concentração. Portanto, o algoritmo de integração no tempo preditor-multicorretor é descrito como

Loop no tempo

Predição:

$$\begin{aligned} \mathbf{c}_{n+1}^0 &= \mathbf{c}_n + 0.5 \Delta t \mathbf{a}_n \\ \mathbf{a}_{n+1}^0 &= 0 \end{aligned}$$

Correção:

Loop não linear

Bloco 1 : Resolver a equação da pressão

$$\mathbf{K}(\mathbf{c}_{n+1}^i) \mathbf{p}_{n+1}^i = \mathbf{Q} \quad (6.71)$$

Bloco 2 : Resolver a equação da velocidade

$$\overline{\mathbf{M}}(\mathbf{c}_{n+1}^i) \mathbf{v}_{n+1}^i = \mathbf{f}_g(\mathbf{p}_{n+1}^{i+1}) + \mathbf{f}_{pos} \quad (6.72)$$

Bloco 3 : Resolver a equação da concentração

$$\mathbf{M}^* \Delta \mathbf{a} = \mathbf{R} \quad (6.73)$$

onde

$$\mathbf{M}^* = \widetilde{\mathbf{M}} + 0.5 \Delta t \widetilde{\mathbf{C}} \quad (6.74)$$

$$\mathbf{R} = -\widetilde{\mathbf{M}}(\mathbf{a}_{n+1}^i) \mathbf{a}_{n+1}^i - \widetilde{\mathbf{C}}(\mathbf{v}_{n+1}^{i+1}, \mathbf{p}_{n+1}^{i+1}, \mathbf{c}_{n+1}^i) \mathbf{c}_{n+1}^i \quad (6.75)$$

Atualização das variáveis

$$\mathbf{c}_{n+1}^{i+1} = \mathbf{c}_{n+1}^i + 0.5 \Delta \mathbf{a} \Delta t \quad (6.76)$$

$$\mathbf{a}_{n+1}^{i+1} = \mathbf{a}_{n+1}^i + \Delta \mathbf{a} \quad (6.77)$$

Até obter a convergência

fim do Loop no tempo

A convergência é alcançada após as seguintes condições serem satisfeitas:

$$e_p \leq tol; \quad (6.78)$$

$$e_v \leq tol; \quad (6.79)$$

$$e_c = \max\{e_a, e_R, e_E\} \leq tol, \quad (6.80)$$

onde tol uma tolerância pré-fixada. As medidas de erros das incógnitas de interesse e_p , e_v , e_c , e_a , e_R e e_E são dadas por

$$e_p = \frac{\|\mathbf{p}_{n+1}^{i+1} - \mathbf{p}_{n+1}^i\|}{\|\mathbf{p}_{n+1}^{i+1}\|}, \quad (6.81)$$

$$e_v = \frac{\|\mathbf{v}_{n+1}^{i+1} - \mathbf{v}_{n+1}^i\|}{\|\mathbf{v}_{n+1}^{i+1}\|}, \quad (6.82)$$

$$e_a = \frac{\|\Delta \mathbf{a}_{n+1}^{i+1}\|}{\|\mathbf{a}_{n+1}^{i+1}\|}, \quad (6.83)$$

$$e_R = \frac{\|\mathbf{R}_{n+1}^{i+1}\|}{\|\mathbf{R}_{n+1}^i\|}, \quad (6.84)$$

$$e_E = \sqrt{\frac{(\Delta \mathbf{a}_{n+1}^{i+1})^T \mathbf{R}_{n+1}^{i+1}}{(\Delta \mathbf{a}_{n+1}^{i=0})^T \mathbf{R}_{n+1}^{i=0}}}, \quad (6.85)$$

onde $\|\cdot\|$ é a norma Euclidiana. A valor e_R mede o erro no balanço de massa da equação da concentração e e_E representa o erro relativo à norma da energia.

Quando as condições (6.78) e (6.79) forem satisfeitas, o processo iterativo para obtenção da solução numérica do sistema pressão-velocidade pára, permanecendo constante durante as iterações não-lineares envolvendo o cálculo da concentração [47].

O algoritmo preditor-multicorretor requer a solução de três sistemas de equações lineares. Na próxima seção, são apresentados os métodos utilizados para a resolução destes sistemas.

6.3 Resolução dos Sistemas Lineares

A solução dos sistemas lineares pode ser obtida através de métodos diretos e iterativos. Um método direto ou exato é caracterizado por fornecer a solução exata para o sistema dado, não fossem os erros provenientes de arredondamento. Estes métodos não são recomendados para sistemas de grande porte, devido ao elevado tempo de processamento que necessitam. Os métodos iterativos são métodos que refinam a solução a cada iteração. Os mais utilizados na atualidade para sistemas de grande porte são aqueles baseados nos espaços de Krylov denominados métodos iterativos não-estacionários.

Os métodos não-estacionários utilizam informações das iterações anteriores o que resulta em taxas mais elevadas de convergência. Devido à sua performance, neste trabalho são empregados os métodos iterativos não-estacionários. Como as características da matriz referente à equação da concentração são diferentes das características das matrizes referentes às equações da pressão e velocidade, são utilizados métodos distintos para a resolução destes sistemas. Para o sistema de equações referente à pressão e à velocidade, as matrizes \mathbf{K} e $\overline{\mathbf{M}}$ são simétricas, portanto foi empregado o método dos gradientes conjugados (GC) [52]. Para a resolução da equação de concentração foi utilizado o método do resíduo mínimo generalizado (GMRES) [53].

Capítulo 7

Experimentos Numéricos

A metodologia adotada e as formulações estabilizadas Difusão Dinâmica e SUPG/CAU são examinadas nos exemplos a seguir com relação à precisão da solução, interpretação física dos métodos e desempenho computacional. A performance do método de estabilização submalha Difusão Dinâmica para problemas transientes, apresentada no Capítulo 4, é comparada com a performance do método de estabilização SUPG/CAU. Os experimentos foram divididos em duas classes de problemas: injeção de traçadores e injeção contínua. A injeção de traçadores é bastante utilizada quando deseja-se obter informações que caracterizam o meio, tais como barreiras ao escoamento, direção do escoamento, dispersividade, etc. A injeção contínua está relacionada à recuperação de óleo, sendo caracterizada pela injeção de um fluido buscando deslocar o óleo residente no reservatório. Os tempos de execução de cada método de estabilização utilizado e o número de iterações dos métodos Gradiente Conjugado para pressão e velocidades e GMRES para a concentração são comparados.

7.1 Características Gerais dos Experimentos

Na simulação dos problemas de injeção de traçador e injeção contínua foi utilizado o esquema de injeção conhecido como *five-spot*. Neste esquema, os poços injetores são distribuídos no reservatório em linhas e os produtores estão dispostos a uma distância média destas linhas, conforme pode ser observado na Fig. 7.1. Considere um

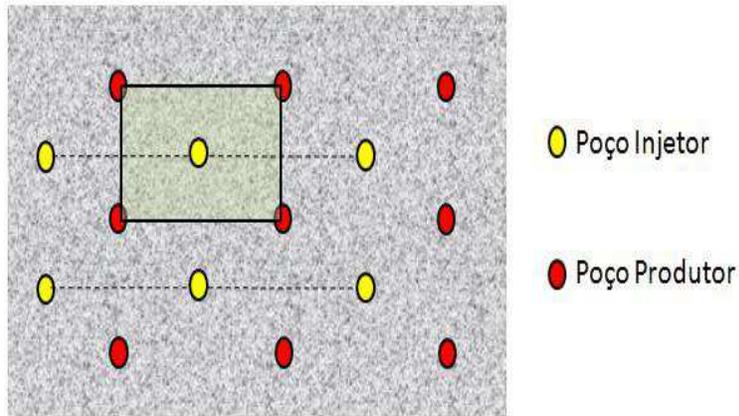


Figura 7.1: Malha *five-spot*.

reservatório de petróleo hipotético constituído por um poço produtor localizado no centro do reservatório e quatro poços injetores dispostos nos vértices do reservatório como apresentado na Fig. 7.2. Observa-se nesta figura que o reservatório pode ser

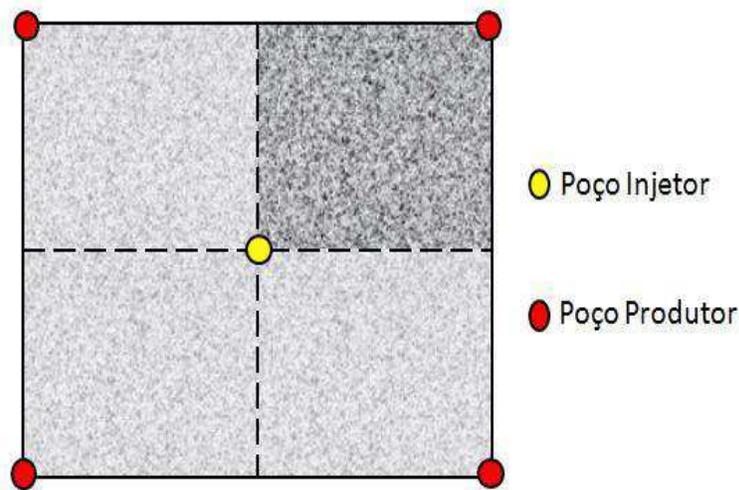


Figura 7.2: Modelo *five-spot*.

dividido em quatro setores iguais em relação a forma e ao comportamento no que se refere a distribuição de pressões, de escoamento de fluxos, etc [50]. Assim, a simulação pode ser realizada em apenas um setor, e o que ocorrer nesse setor será observado no restante do reservatório. Portanto, o estudo será considerado em um quarto do domínio.

O setor do reservatório a ser utilizado na simulação é representado por uma malha estruturada dividida em células, onde cada célula está dividida em dois triângulos.

Os lados do setor medem $L = 1000.0ft$. O poço injetor está localizado no canto inferior esquerdo ($x = y = 0$) e o poço produtor no canto superior direito ($x = y = 1000$). O meio poroso é homogêneo com permeabilidade $\mathbf{K} = k\mathbf{I}$, sendo $k = 100mD$, porosidade $\phi = 0.1$, difusão molecular $\alpha_m = 0.0$ e a viscosidade do fluido residente $\mu(1) = 1.0cP$ para o problema de injeção de traçador e $\mu(1) = 1.0cP$ ou $\mu(1) = 20.0cP$ para injeção contínua.

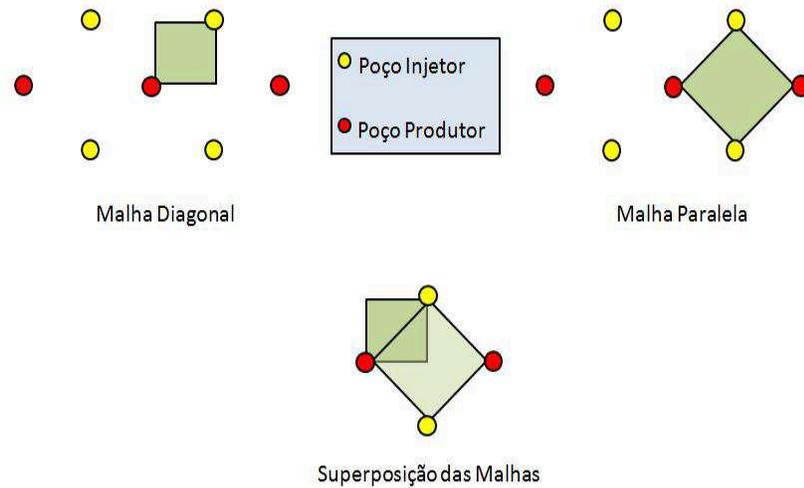


Figura 7.3: Tipos de orientação de malhas.

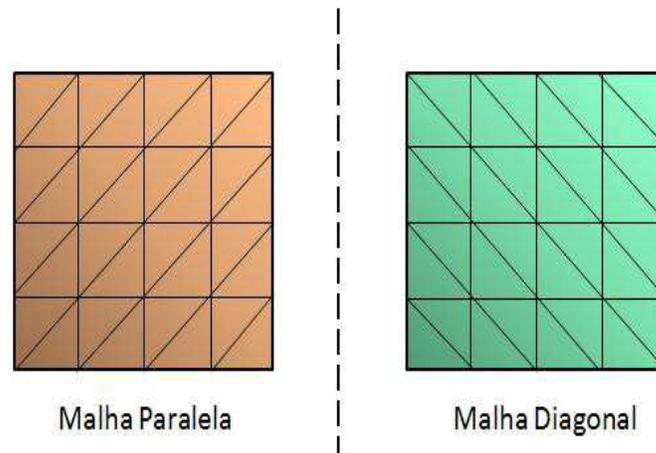


Figura 7.4: Malhas estruturadas.

Para o problema do traçador e para o de injeção contínua utilizou-se as seguintes condições de contorno e iniciais [3]:

- A pressão é prescrita em um dos vértices onde não existe vazão, assim, no ponto $(0, 1000)$ ou no ponto $(1000, 0)$ o valor da pressão é nulo. É importante ressaltar que não se deve forçar uma simetria prescrevendo o valor da pressão em $(0, 1000)$ e $(1000, 0)$ simultaneamente, pois isso pode comprometer a solução para $M > 1$;
- As condições de contorno para o campo de velocidades são:

$$\text{Em } x = 0, v_x = 0;$$

$$\text{Em } y = 0, v_y = 0.$$

Estes valores representam as condições de contorno de Dirichlet para a técnica de pós-processamento;

- Para a concentração apenas o ponto $(0, 0)$ é prescrito com valor 1.

7.2 Injeção de Traçadores

A injeção de traçadores, no contexto da engenharia de petróleo, visa monitorar o movimento do fluido para obter informações relevantes sobre as propriedades do reservatório. A injeção de traçadores ocorre por um período de tempo determinado e, posteriormente, há a sua interrupção. Nos experimentos realizados, um volume de traçador é injetado no poço injetor e é movimentado pelo escoamento de água, sendo retirado no poço produtor. No exemplo, o volume do traçador injetado é de 0,25% do volume poroso (250ft^3), o que equivale a uma injeção realizada por um período de 5 dias a uma taxa de $200\text{ft}^2/\text{dia}$. A viscosidade do traçador é a mesma do fluido residente ($M = 1$), de forma que não existem instabilidades provenientes da não-linearidade. A malha utilizada para os experimentos é a paralela.

O resultado do histórico da concentração observado no poço produtor para o nível de dispersão, $\alpha_l = 1.0$, $\alpha_t = 0.0$, é comparado com a solução semi-analítica obtida por Abbaszadeh-Dehghani [42] e a solução obtida pelo método SUPG/CAU (Fig. 7.5). A solução numérica via método DD é bem representada e os resultados assemelham-se aos obtidos em [19, 47].

O comportamento do traçador foi observado em 800 e 1200 dias com dois níveis de dispersão $\alpha_l = 10.0$, $\alpha_t = 1.0$ (Fig. 7.6 e Fig. 7.7) e $\alpha_l = 1.0$, $\alpha_t = 0.0$

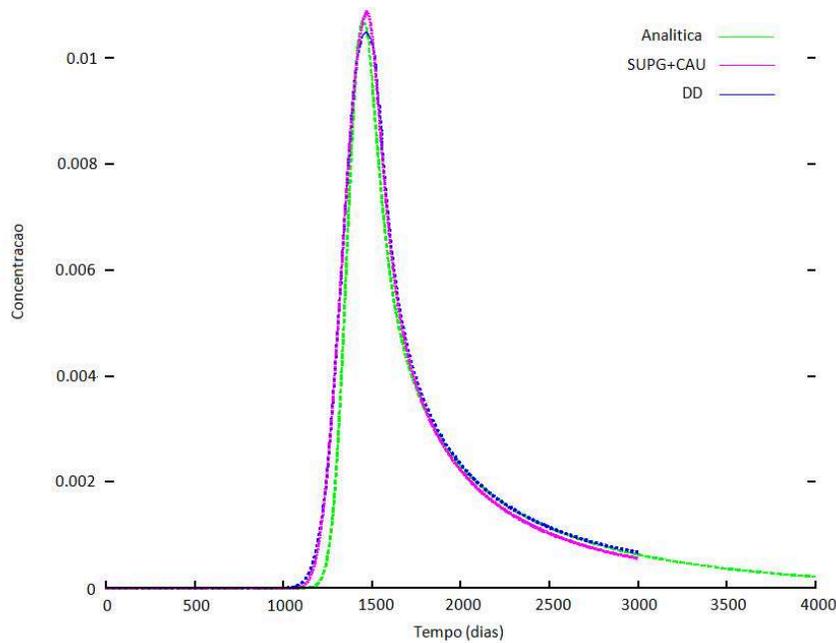
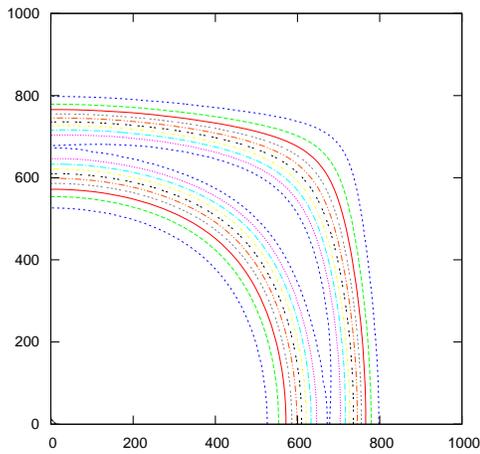


Figura 7.5: Comparação da solução DD do histórico da concentração no poço produtor observado em 3000 dias com uma solução semi-analítica e a solução SUPG/CAU.

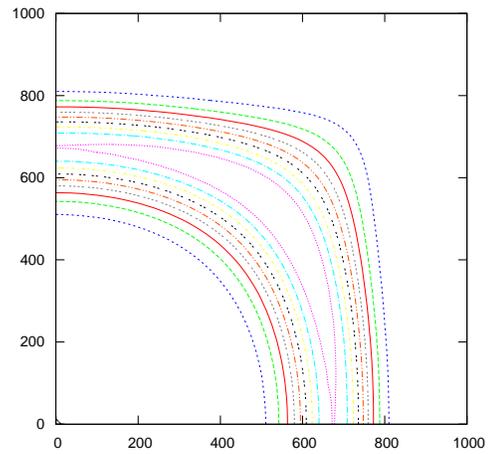
(Fig. 7.8 e Fig. 7.9). Os resultados à esquerda das duas figuras correspondem à formulação SUPG/CAU e os resultados à direita correspondem à formulação DD. Pode-se observar que os resultados numéricos obtidos pelas duas metodologias são bastante similares e condizem com àqueles apresentados em [19, 47, 44]. Porém, o método DD apresenta um comportamento ligeiramente mais difusivo que o método SUPG/CAU.

Com o objetivo de observar o comportamento dos métodos em relação ao tamanho da malha e a variação do passo de tempo Δt , foi analisada a injeção de traçadores para 1200 dias, com níveis de dispersão $\alpha_l = 10.0$ e $\alpha_t = 1.0$, utilizando as seguintes configurações:

- malha (20×20) com $\Delta t = 5.0$ (Fig. 7.10);
- malha (40×40) com $\Delta t = 2.5$ (Fig. 7.11);
- malha (80×80) com $\Delta t = 1.25$ (Fig. 7.12) ;
- malha (100×100) com $\Delta t = 0.5$ (Fig. 7.13).

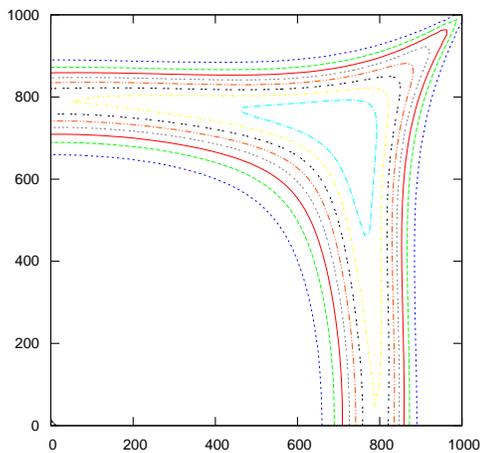


(a) 800 dias - método SUPG/CAU

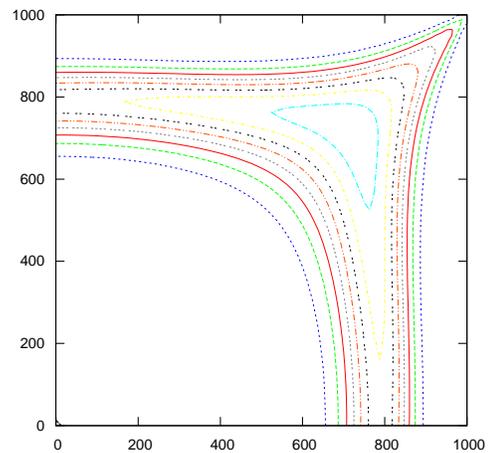


(b) 800 dias - método DD

Figura 7.6: Curvas de concentração para os níveis de dispersão, $\alpha_l = 10.0$ e $\alpha_t = 1.0$, 800 dias e $\Delta t = 1.0$ - Problema do traçador.

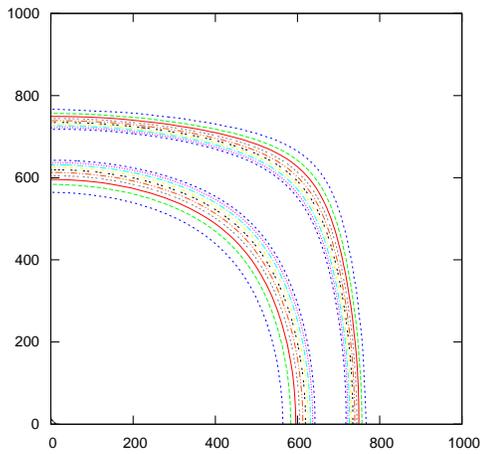


(a) 1200 dias - método SUPG/CAU

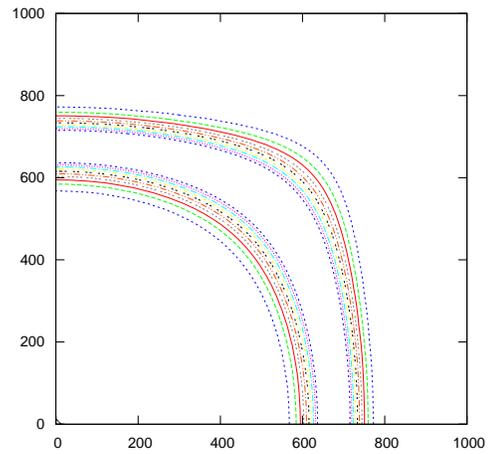


(b) 1200 dias - método DD

Figura 7.7: Curvas de concentração para os níveis de dispersão, $\alpha_l = 10.0$ e $\alpha_t = 1.0$, 1200 dias e $\Delta t = 1.0$ - Problema do traçador.

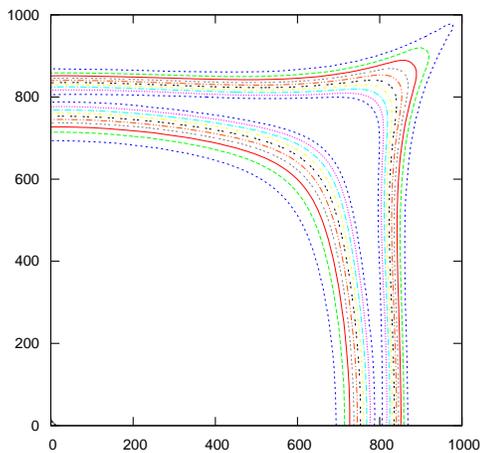


(a) 800 dias - método SUPG/CAU

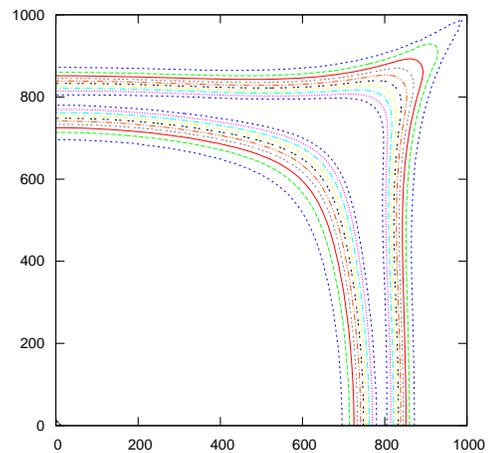


(b) 800 dias - método DD

Figura 7.8: Curvas de concentração para os níveis de dispersão, $\alpha_l = 1.0$ e $\alpha_t = 0.0$, 800 dias e $\Delta t = 1.0$ - Problema do traçador.



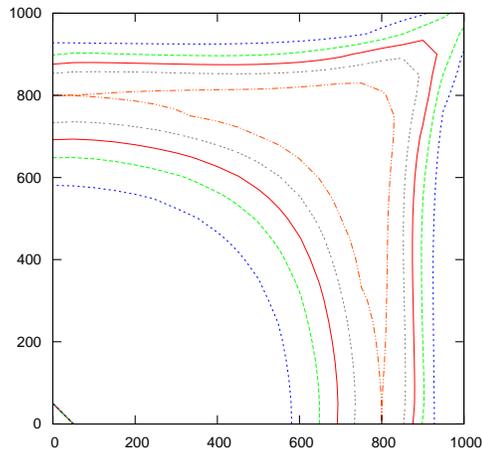
(a) 1200 dias - método SUPG/CAU



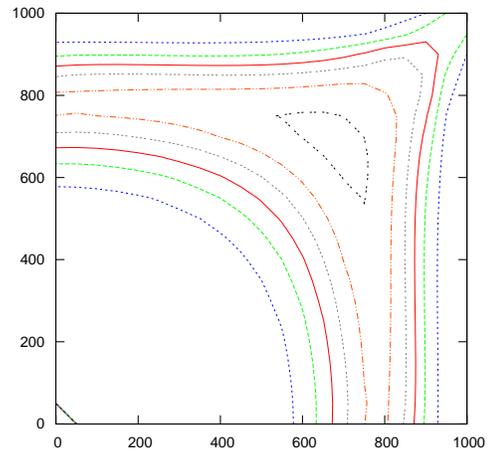
(b) 1200 dias - método DD

Figura 7.9: Curvas de concentração para os níveis de dispersão, $\alpha_l = 1.0$ e $\alpha_t = 0.0$, 1200 dias e $\Delta t = 1.0$ - Problema do traçador.

Observa-se que à medida que a malha vai sendo refinada e o passo de tempo diminuindo, a precisão da solução aproximada aumenta.

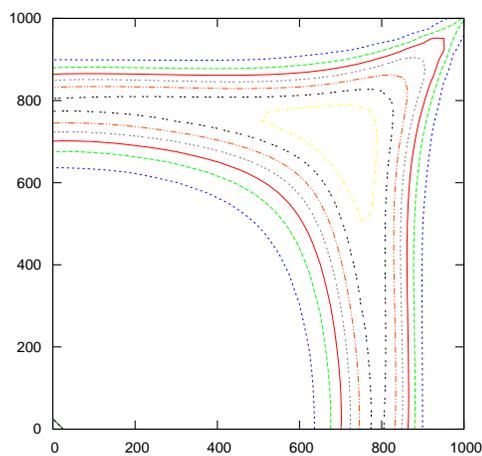


(a) 1200 dias - método SUPG/CAU

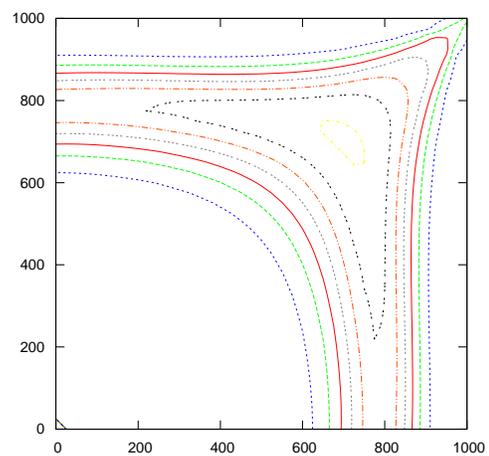


(b) 1200 dias - método DD

Figura 7.10: Injeção de traçador com os níveis $\alpha_l = 10.0$ e $\alpha_t = 1.0$, malha 20×20 e $\Delta t = 5.0$

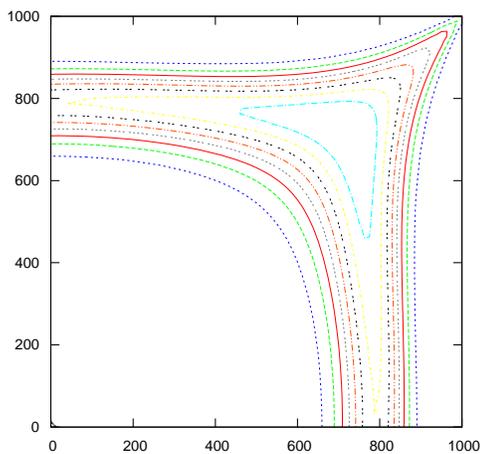


(a) 1200 dias - método SUPG/CAU

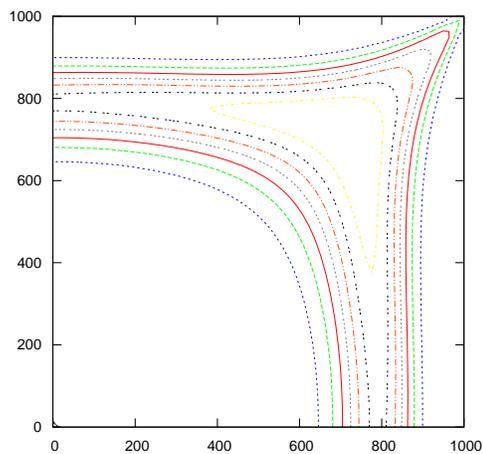


(b) 1200 dias - método DD

Figura 7.11: Injeção de traçador com os níveis $\alpha_l = 10.0$ e $\alpha_t = 1.0$, malha 40×40 e $\Delta t = 2.5$

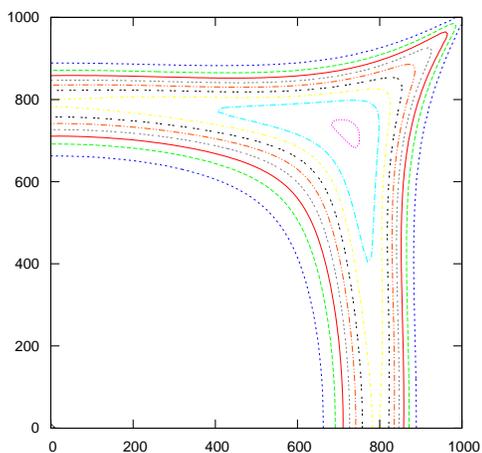


(a) 1200 dias - método SUPG/CAU

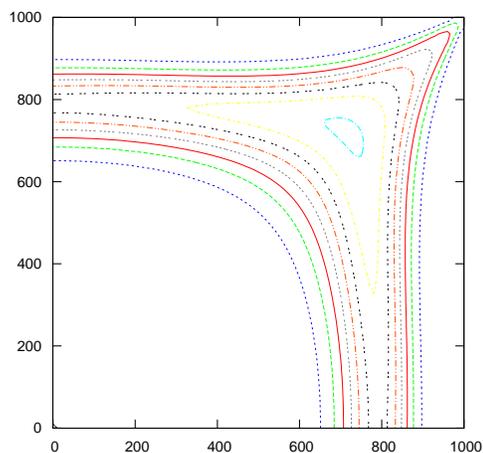


(b) 1200 dias - método DD

Figura 7.12: Injeção de traçador com os níveis $\alpha_l = 10.0$ e $\alpha_t = 1.0$, malha 80×80 e $\Delta t = 1.25$



(a) 1200 dias - método SUPG/CAU



(b) 1200 dias - método DD

Figura 7.13: Injeção de traçador com os níveis $\alpha_l = 10.0$ e $\alpha_t = 1.0$, malha 100×100 e $\Delta t = 0.5$

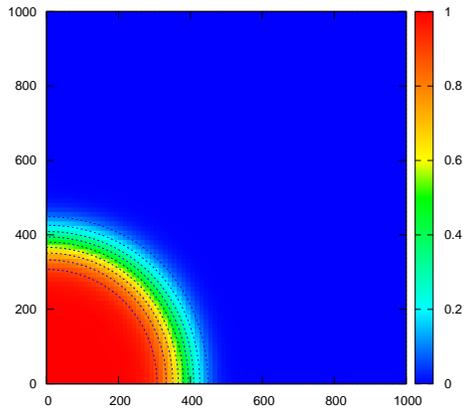
7.3 Injeção Contínua

A injeção contínua trata do escoamento monofásico com duas componentes em um meio poroso bidimensional, óleo e solvente. Esta classe de problemas representa uma das formas de recuperação terciária, abordada na Seção 2.2.

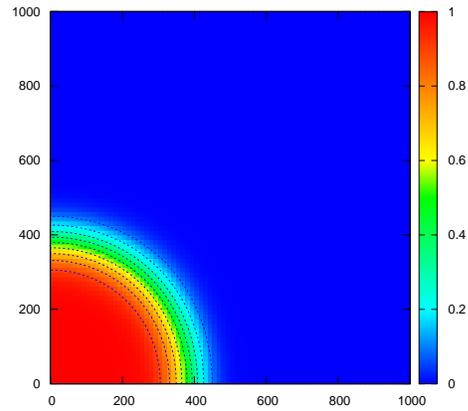
Quando o fluido residente (óleo) possui a mesma viscosidade que o fluido deslocante (solvente), isto é, ($M = 1$), não existem instabilidades numéricas causadas pela não-linearidade. A razão de mobilidade unitária significa que o fluido injetado e o óleo do reservatório podem escoar através do meio poroso com a mesma facilidade ou mobilidade. Na simulação do problema de deslocamento miscível com mobilidade unitária ($M = 1$), foi utilizado o mesmo reservatório hipotético definido para o problema do traçador. A Fig. 7.14 apresenta a trajetória da mistura para 250 e 500 dias, e a Fig. 7.15, para 750 e 1000 dias, com níveis de dispersão $\alpha_l = 10.0$ e $\alpha_t = 1.0$, sendo que as figuras da esquerda correspondem à formulação SUPG/CAU e as figuras da direita correspondem à formulação DD. Os resultados são similares e condizem com àqueles apresentados em [19, 44]. No entanto, nota-se um comportamento um pouco mais difusivo do método DD em relação ao SUPG/CAU.

A simulação do deslocamento miscível com $M > 1$ é uma das classes mais importantes de problemas envolvendo a recuperação terciária. Na maioria das vezes, o deslocamento miscível possui mobilidade adversa, o que pode causar oscilações numéricas indesejáveis, sensibilidade à orientação da malha e formação de *fingers*. O comportamento do fluido presente no reservatório, a partir da reação com os fluidos injetados, afeta diretamente na forma de produção do reservatório. A razão de mobilidade adversa indica que o fluido injetado é menos viscoso que o fluido residente. Quanto maior o valor de M , maior o acoplamento do sistema e a probabilidade de ocorrer instabilidades.

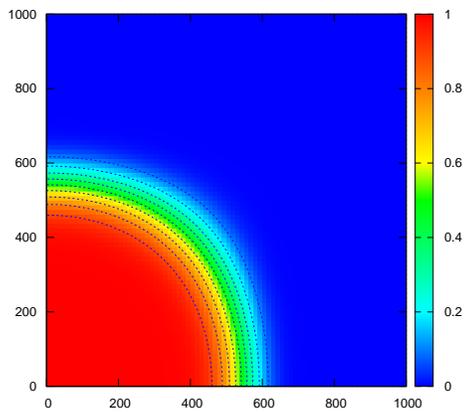
Os experimentos para mobilidade adversa foram realizados utilizando $\mu_r = 20$ e $\mu_d = 1$. Os demais parâmetros são idênticos aos experimentos realizados para mobilidade unitária. A Fig. 7.16 apresenta a trajetória da mistura para 250 e 500 dias, e a Fig. 7.17 para 750 e 1000 dias, com níveis de dispersão $\alpha_l = 10.0$ e $\alpha_t = 1.0$, sendo que as figuras da esquerda correspondem à formulação SUPG/CAU e as figuras da direita correspondem à formulação DD. Nota-se que os resultados obtidos pelo método Difusão Dinâmica reduzem os erros numéricos, apresentando



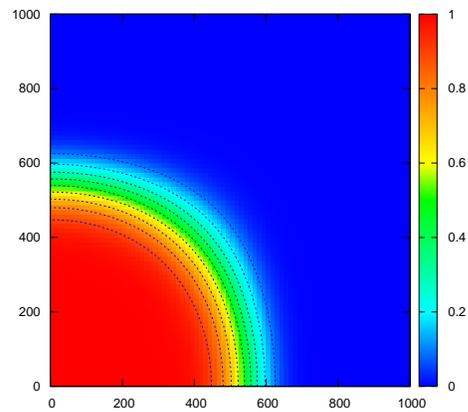
(a) 250 dias - método SUPG/CAU



(b) 250 dias - método DD

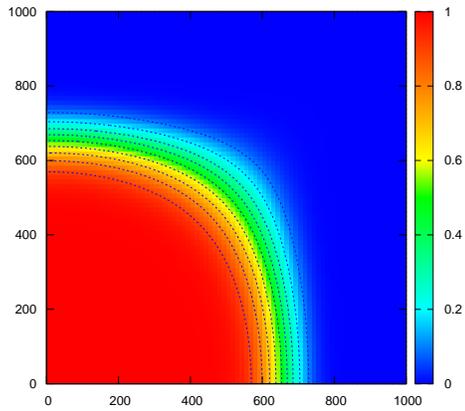


(c) 500 dias - método SUPG/CAU

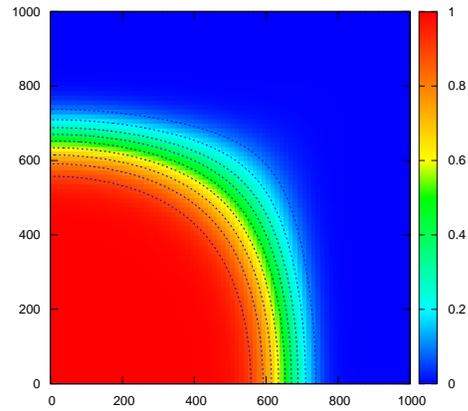


(d) 500 dias - método DD

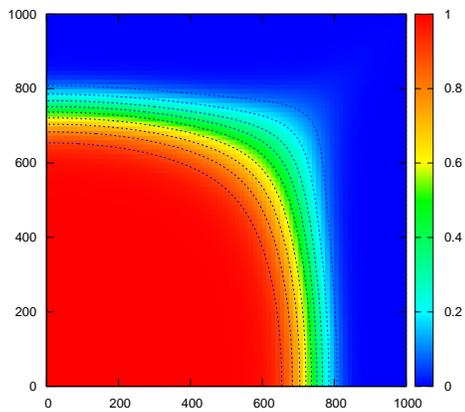
Figura 7.14: Curvas de concentração do deslocamento miscível com razão de mobilidade unitária para 250 e 500 dias.



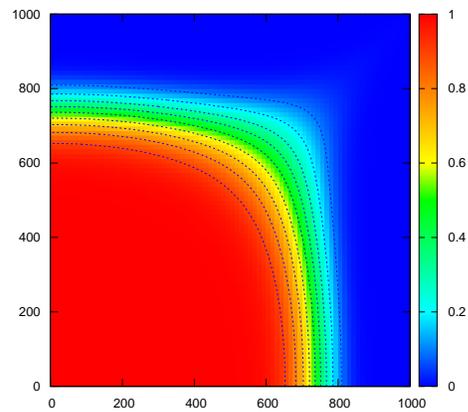
(a) 750 dias - método SUPG/CAU



(b) 750 dias - método DD



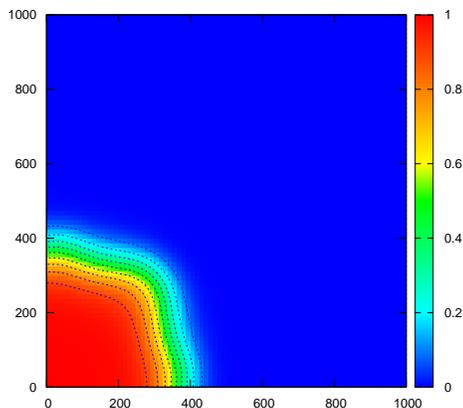
(c) 1000 dias - método SUPG/CAU



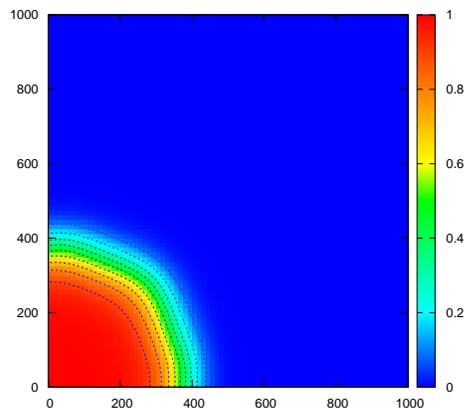
(d) 1000 dias - método DD

Figura 7.15: Curvas de concentração do deslocamento miscível com razão de mobilidade unitária para 750 e 1000 dias.

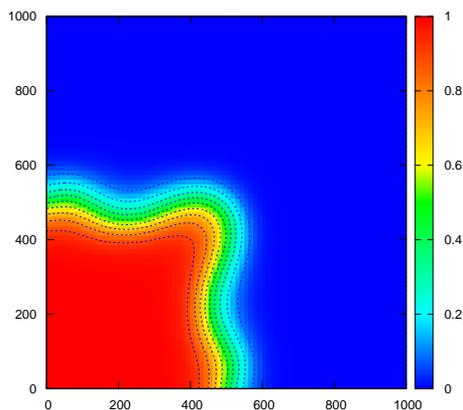
melhores soluções comparando-se ao método SUPG/CAU. Estes resultados também são bastante similares e condizem com àqueles apresentados por [19, 44, 3].



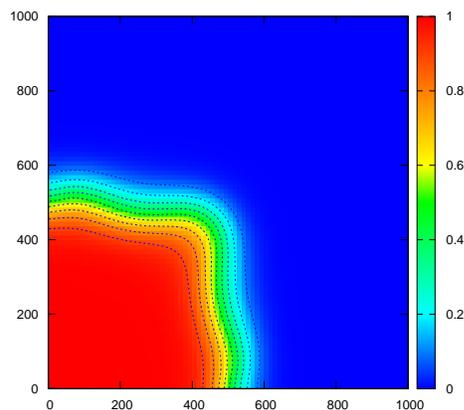
(a) 250 dias - método SUPG/CAU



(b) 250 dias - método DD



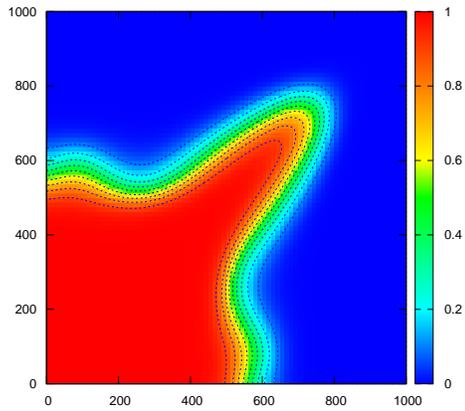
(c) 500 dias - método SUPG/CAU



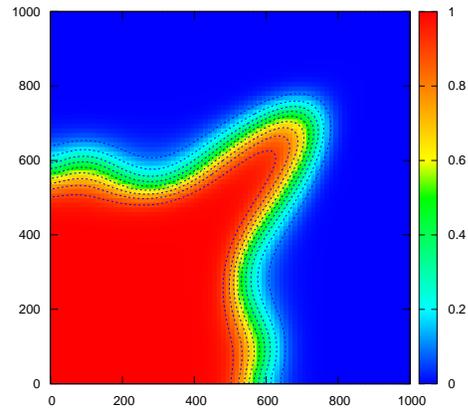
(d) 500 dias - método DD

Figura 7.16: Curvas de concentração do deslocamento miscível com razão de mobilidade adversa para 250 e 500 dias.

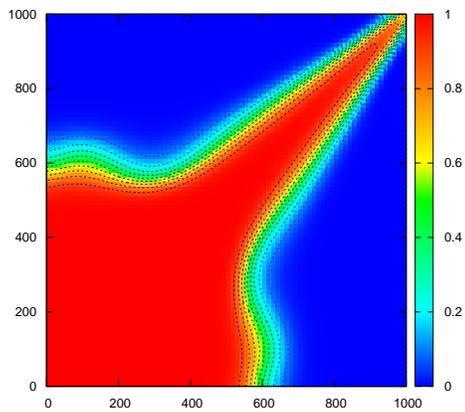
Neste problema de injeção contínua, os resultados são observados com duas configurações de malha estruturada: paralela e diagonal. Esta representação pode ser vista nas figuras (7.3) e (7.4). O efeito de orientação da malha é um dos mais indesejáveis das formulações numéricas para a simulação de escoamento em meios porosos. De fato, o ideal seria que os resultados para as simulações obtidas em ambas as malhas fossem iguais, contudo não é isso que acontece, como pode ser



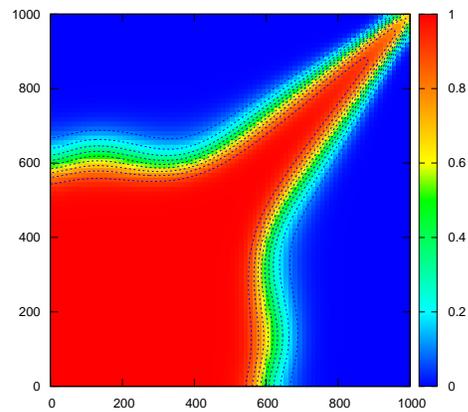
(a) 750 dias - método SUPG/CAU



(b) 750 dias - método DD



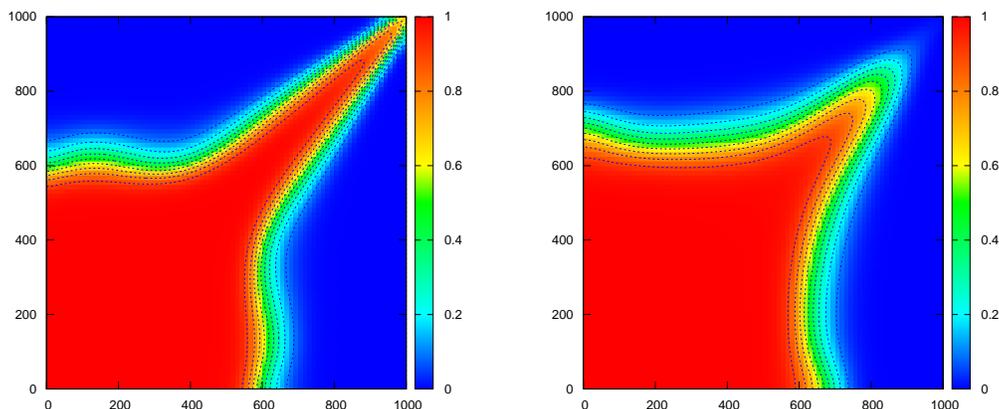
(c) 1000 dias - método SUPG/CAU



(d) 1000 dias - método DD

Figura 7.17: Curvas de concentração do deslocamento miscível com razão de mobilidade adversa para 750 e 1000 dias.

observado na Fig. (7.18). Observa-se que os resultados obtidos utilizando malhas paralelas têm um comportamento mais estável do que aqueles obtidos com malhas diagonais.



(a) 1000 dias - Malha Paralela - método DD (b) 1000 dias - Malha Diagonal - método DD

Figura 7.18: Comparação das curvas de concentração do deslocamento com razão de mobilidade adversa considerando duas orientações de malha para o método Difusão Dinâmica.

7.4 Desempenho Computacional

O desempenho computacional dos métodos Difusão Dinâmica (DD) e SUPG/CAU é avaliado quando o método GMRES($Kmax$) é utilizado para resolver o sistema de equações algébricas, proveniente da equação de concentração. As dimensões $Kmax$ dos subespaços de *Krylov* utilizadas são 5, 25, 50 e 100. Os resultados obtidos são apresentados na Tabela 7.1. Note que o método DD apresenta um tempo de processamento menor do que aquele apresentado pelo método SUPG/CAU. Para ambos os métodos, os melhores tempos são obtidos com $Kmax = 25$. O método DD para este caso apresenta uma melhora aproximada de 28%.

As configurações da máquina utilizada nos experimentos foi:

- Processador Intel Pentium Dual-Core 1.73 GHz;

- Sistema Operacional Windows Vista Home Basic.

	SUPG/CAU		DD	
$Kmax$	$Iter_{GMRES}$	$Tempo_{CPU} (s)$	$Iter_{GMRES}$	$Tempo_{CPU} (s)$
5	18034	22418.4900	17753	21703.8920
25	4163	14872.9660	4089	10738.9280
50	4264	15685.5780	4136	10840.6330
100	4279	15779.8450	4253	15215.9130

Tabela 7.1: Desempenho Computacional - método SUPG/CAU *versus* método DD.

Capítulo 8

Conclusões

Este trabalho apresentou uma extensão do método Difusão Dinâmica (DD) para problemas de transporte advectivo-difusivo-reativo transiente, analisando os resultados desta metodologia quando aplicada a problemas de escoamento miscível em meios porosos.

O escoamento miscível em meios porosos é governado pela equação da pressão, lei de Darcy e equação da concentração. Juntas, estas equações formam um sistema fortemente acoplado, não linear, composto por um subproblema elíptico (pressão e velocidade) e uma equação de transporte (concentração). Para aproximação numérica da solução deste sistema, foi utilizado o método de elementos finitos para a discretização no espaço e o método de diferenças finitas predictor/multicorretor para a discretização no tempo. Devido a equação da pressão possuir um comportamento predominantemente difusivo, a formulação de Galerkin foi aplicada com sucesso para sua resolução. Para a equação da velocidade foi usada a formulação de Galerkin com uma técnica de Pós-Processamento. A equação da concentração, devido ao seu comportamento predominantemente advectivo, foi aproximada pelo método DD. Os resultados obtidos foram comparados com aqueles obtidos pelo método SUPG/CAU. Para o armazenamento das matrizes associadas às formulações numéricas foi utilizada a estrutura de dados elemento-por-elemento.

Duas aplicações importantes foram simuladas: injeção de traçadores e injeção contínua. Os resultados obtidos pelo método DD para o problema do traçador e injeção contínua com mobilidade unitária ($M = 1$) mostraram-se um pouco mais

difusivos que os resultados obtidos pelo método SUPG/CAU. Para o problema de injeção contínua com mobilidade adversa ($M > 1$) o método Difusão Dinâmica apresentou uma melhora significativa da solução aproximada.

Durante a verificação do problema de injeção de traçadores, também foram realizados experimentos com diferentes tamanhos de malha e passos de tempo, mostrando que quanto mais refinada a malha, melhores são as aproximações.

Foi avaliado também o desempenho computacional dos métodos DD e SUPG/CAU em relação à dimensão dos subespaços de *Krylov* quando o sistema algébrico, proveniente da equação de concentração, é resolvido via método GMRES. A performance do método DD foi melhor, tanto em relação ao número de iterações do método GMRES quanto ao tempo computacional despendido na solução do problema.

A metodologia numérica apresentada nesta dissertação mostrou-se bastante promissora, apresentando várias perspectivas para desenvolvimentos futuros. Podemos destacar neste contexto:

- utilização de escalas submalhas transientes;
- estruturas de dados por arestas;
- implementação de pré-condicionadores;
- paralelização do código computacional;
- utilização de malhas não estruturadas;
- extensão para escoamento imiscível;
- implementação de modelos tridimensionais.

Referências Bibliográficas

- [1] A.L.G.A.Coutinho and J.L.D. Alves. Finite element simulation of nonlinear viscous fingering in miscible displacement with anisotropic dispersion and nonmonotonic viscosity profiles. *Computational Mechanics*, 423:108–116, 1999.
- [2] N. C. B. Arruda, R. C. Almeida, and E. G. D. do Carmo. Dynamic diffusion formulations for advection dominated transport problems. in preparation for *Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering*, 2010.
- [3] A. C. Barbosa. Implementação em paralelo do método dos elementos finitos empregando estrutura de dados por aresta para simulação em cluster multi-core de escoamento miscível em meios porosos. Dissertação de mestrado, UFES, Vitória, ES, Agosto 2009.
- [4] V. M. Barenblatt, G. I. Entov, and V. M. Ryzhik. Theory of fluid flows through natural rocks. *Dordrecht Boston Kluwer Academic Publishers*, 1990.
- [5] F. Brezzi, L. P. Franca, T. J. R. Hughes, and A. Russo. $b = \int g$. *Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering*, 145:329–339, 1997.
- [6] F. Brezzi, P. Houston, D. Marini, and E. Suli. Modeling subgrid viscosity for advection-diffusion problems. *Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering*, 190:1601–1610, 2000.
- [7] F. Brezzi, L. D. Marini, and G. Sangalli. Link-cutting bubbles for the stabilization of convection-diffusion-reaction problems. *Mathematical Models and Methods in Applied Science*, 13:445–461, 2003.
- [8] F. Brezzi and A. Russo. Choosing bubbles for advection-diffusion problems. *Math. Models Methods Appl. Sci.*, 4:571–587, 1994.

- [9] A. N. Brooks and T. J. R. Hughes. Streamline upwind Petrov-Galerkin formulations for convection dominated flows with particular emphasis on the incompressible Navier-Stokes equations. *Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering*, 32:199–259, 1982.
- [10] A. N. Brooks and T. J. R. Hughes. Streamline upwind/ Petrov-galerkin formulations for convection dominated flows with particular emphasis on the incompressible Navier-Stokes equations. *Comput. Methods Appl. Mech. and Engrg.*, 32:199–259, 1982.
- [11] Z. Chen, G. Huan, and Y. Ma. *Computational Methods for Multiphase Flows in Porous Media*. SIAM, 2006.
- [12] R. Codina. Stabilized finite element approximation of transient incompressible flows using orthogonal subscales. *Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering*, 191:4295–4321, 2002.
- [13] R. Codina and J. Blasco. Analysis of a stabilized finite element approximation of the transient convection-diffusion-reaction equation using orthogonal subscales. *Computing and Visualization in Science*, 4:167–174, 2002.
- [14] R. Codina, J. Principe, O. Guasch, and S. Badia. Time dependent subscales in the stabilized finite element approximation of incompressible flow problems. *Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering*, 196:2413–2430, 2007.
- [15] J. Cordazzo. *Simulação de reservatórios de petróleo utilizando o método EbFVM e multigrid algébrico*. Tese de doutorado, UFSC, Florianópolis, SC, Abril 2006.
- [16] A.L.G.A Coutinho and J.L.D. Alves. Parallel finite element simulation of miscible displacement in porous media. *SPE Journal*, 4(1):487–500, 1996.
- [17] A.L.G.A. Coutinho, C.M. Dias, and J.L.D. Alves. Stabilized methods and post-processing techniques for miscible displacement. *Computational Mechanics*, 193:1421–1436, 2004.
- [18] M. C. Damiani. Determinação de padrões de fluxo em simulações de reservatórios de petróleo utilizando traçadores. Dissertação de mestrado, COPPE/UFRJ, Rio de Janeiro, RJ, Maio 2007.

- [19] M. C. Dias. *Técnicas de integração reduzida para simulação de problemas não-lineares de transporte pelo método dos elementos finitos*. Tese de doutorado, COPPE/UFRJ, Rio de Janeiro, RJ, Novembro 2001.
- [20] J. Donea and A. Huerta. *Finite Element Methods for Flow Problems*. John Wiley and Sons, Ltd, 2003.
- [21] A. O. Fortuna. *Técnicas Computacionais para Dinâmica dos Fluidos*. EDUSP, 2000.
- [22] L. P. Franca, A. Nesliturk, and M. Stynes. On the stability of residual-free bubbles for convection-diffusion problems and their approximation by a two-level finite element method. *Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering*, 166:35–49, 1998.
- [23] L. P. Franca, J. V. A. Ramalho, and F. Valentin. Enriched finite element methods for unsteady reaction-diffusion problems. *Communications in Numerical Methods in Engineering*, 22:619–625, 2006.
- [24] A.C Galeao and E.G.D Carmo. A consistent approximate upwind petrov-galerkin method for convection-dominated problems. *Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering*, 68:83–95, 1988.
- [25] P. Gamnitzer, V. Gravemeier, and W. A. Wall. Time-dependent subgrid scales in residual-based large eddy simulation of turbulent channel flow. *Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering*, 199:819–827, 2010.
- [26] A. C. A. Gomes. Efeitos do fluxo bifásico e da compressibilidade no declínio da injetividade nos poços injetores de água. Dissertação de mestrado, UENF, Macaé, RJ, Dezembro 2003.
- [27] J.-L. Guermond. Subgrid stabilization of galerkin approximations of linear monotone operators. *IMA Journal of Numerical Analysis*, 21:165–197, 2001.
- [28] J.-L. Guermond, J. T. Oden, and S. Prudhomme. Mathematical perspectives on large eddy simulation models for turbulent flows. *J. Math. Fluid mech.*, 6:194–248, 2004.

- [29] G. Hauke and A. García-Olivares. Variational subgrid scale formulations for the advection-diffusion-reaction equation. *Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering*, 190:6847–6865, 2001.
- [30] N. Heitmann. Subgridscale stabilization of time-dependent convection dominated diffusive transport. *J. Math. Anal. Appl.*, 331:38–50, 2007.
- [31] T. J. R. Hughes. *The Finite Element Method - Linear Static and Dynamic Finite Element Analysis*. Prentice-Hall International, Inc., 1987.
- [32] T. J. R. Hughes. Multiscale phenomena: Green’s functions, the dirichlet-to-neumann formulation, sugrid scale models, bubbles and the origin of stabilized methods. *Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering*, 127:387–401, 1995.
- [33] T. J. R. Hughes, L. P. Franca, and G. M. Hulbert. A new finite element formulation for computational fluid dynamics: Viii. the galerkin-least-squares method for advective-diffusive equations. *Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering*, 73:173–189, 1989.
- [34] T. J. R. Hughes, G. Scovazzi, and L. P. Franca. *Multiscale and Stabilized Methods, Encyclopedia of Computational Mechanics*. John Wiley & Sons, Ltd., 2004.
- [35] Thomas J. R. Hughes. *The Finite Element Method*. Prentice-Hall International, 1987.
- [36] V. Iório. *EDP Um Curso de Graduação*. Coleção Matemática Universitária, IMPA, Rio de Janeiro, RJ, Brasil, 2005.
- [37] V. John, S. Kaya, and W. Layton. A two-level variational multiscale method for convection-dominated convection-diffusion equations. *Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering*, 195:4594–4603, 2006.
- [38] C. Johnson. *Numerical Solutions of Partial Differential Equations by the Finite Element Method*. Studentlitteratur, Lund, Sweden., 1987.
- [39] R. Juanes. *Displacement theory and multiscale numerical modeling of three-phase flow in porous media*. Phd thesis, Engineering - Civil and Environmental Engineering, University of California, Berkeley, 2003.

- [40] W. J. Layton. A connection between subgrid scale eddy viscosity and mixed methods. *Appl. Math. and Comput.*, 133:147–157, 2002.
- [41] A.F.D. Loula, A.L.G.A. Coutinho, and E.L.M. Garcia. Miscible displacement simulation by finite element methods in distributed memory machines. *Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering*, 174:339–354, 1999.
- [42] W. E. Brigham M. Abbaszadeh-Dehghani. Analysis of unit mobility ratio well-to-well tracer flow to determine reservoir heterogeneity. Technical report, University of Stanford, Petroleum Research Institute, August 1982.
- [43] S.M.C. Malta, A.F.D. Loula, and E.L.M. Garcia. A post-processing technique to approximate the velocity field in miscible displacement simulations. *Matemática contemporânea*, 8:239–268, 1995.
- [44] S.M.C. Malta, A.F.D. Loula, and E.L.M. Garcia. Numerical analysis of a stabilized finite element method for tracer injection simulations. *Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering*, 187:119–136, 1998.
- [45] S.M.C. Malta, A.F.D. Loula, and E.L.M. Garcia. Numerical analysis of a stabilized finite element method for tracer injection simulations. *Comput. Methods Appl. Mech. Engrg.*, 187:119–136, 2000.
- [46] A. L. Mendonça. *Simulação numérica de escoamentos incompressíveis bifásicos de fluidos não-newtonianos e imiscíveis em meios porosos via método dos elementos finitos*. Tese de doutorado, COPPE/UFRJ, Rio de Janeiro, RJ, Outubro 2003.
- [47] W. G. Ney. Um estudo comparativo sobre formulações estabilizadas e adaptatividade na simulação de deslocamento miscíveis em meios porosos pelo método dos elementos finitos. Dissertação de mestrado, COPPE/UFRJ, Rio de Janeiro, RJ, Dezembro 2002.
- [48] D.W. Peaceman. *Fundamentals of Numerical Reservoir Simulation*.
- [49] D.W. Peaceman. Survey of problems in numerical reservoir simulation. *SIAM. J. Sci. Stat. Comput.*, 1986.
- [50] A. J. Rosa, R. S. Carvalho, and J. A. D. Xavier. *Engenharia de Reservatório de Petróleo*. Interciência, Rio de Janeiro, RJ, 2006.

- [51] Thomas F. Russell and Mary Fanett Wheeler. Finite element and finite difference methods for continuous flows in porous media. In Richard E. Ewing, editor, *The Mathematics of Reservoir Simulation*, Volume I, chapter 2, pages 35–106. Society for Industrial and Applied Mathematics, Philadelphia, 1983.
- [52] Y. Saad. *Iterative Methods for Sparse Linear Systems*. SIAM, second edition, 2003.
- [53] Y. Saad and H. Schultz. GMRES: A generalized minimal residual algorithm for solving nonsymmetric linear systems. *SIAM. J. Sci. Stat. Comput.*, 7(3):856–869, 1986.
- [54] I. P. Santos. *Métodos Submalhas Não Lineares Para o Problema de Convecção-Difusão-Reação*. Tese de doutorado, Laboratório Nacional de Computação Científica - LNCC, Petrópolis, RJ, Outubro 2007.
- [55] I. P. Santos and R. C. Almeida. A nonlinear subgrid method for advection-diffusion problems. *Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering*, 196:4771–4778, 2007.
- [56] I. P. Santos and R. C. Almeida. The nonlinear subgrid stabilization with discontinuity capturing. in preparation for *Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering*, 2011.
- [57] J. Stewart. *Cálculo*, volume 1. São Paulo, SP, 2002.
- [58] J. E. Thomas. *Fundamentos de Reservatório de Petróleo*. Interciência, Rio de Janeiro, RJ, 2001.
- [59] C. Yang and J. Samper. A subgrid-scale stabilized finite element method for multicomponent reactive transport through porous media. *Transp Porous Media*, 78:101–126, 2009.
- [60] L.C. Young. A finite element method for reservoir simulation. *Society of Petroleum Engineers, SPE*, 4, 1981.