



Universidade do Estado do Rio de Janeiro
Instituto Politécnico

Julhane Alice Thomas Schulz

**Simulação Numérica do Escoamento Bifásico
em Meios Porosos Heterogêneos Empregando
uma Formulação Semi-Implícita, Limitadores
de Fluxo e o Método dos Volumes Finitos**

Nova Friburgo
2009

Livros Grátis

<http://www.livrosgratis.com.br>

Milhares de livros grátis para download.

Julhane Alice Thomas Schulz

**Simulação Numérica do Escoamento Bifásico
em Meios Porosos Heterogêneos Empregando
uma Formulação Semi-Implícita, Limitadores
de Fluxo e o Método dos Volumes Finitos**

Tese apresentada como requisito parcial para a obtenção do título de Doutor, ao Programa de Pós-Graduação em Modelagem Computacional do Instituto Politécnico, da Universidade do Estado do Rio de Janeiro. Área de concentração: Matemática Aplicada e Computação Científica.

Orientador: Prof. Helio Pedro Amaral Souto, Docteur de L'INPL

Nova Friburgo
2009

Julhane Alice Thomas Schulz

Simulação Numérica do Escoamento Bifásico em Meios Porosos Heterogêneos Empregando uma Formulação Semi-Implícita, Limitadores de Fluxo e o Método dos Volumes Finitos

Tese apresentada como requisito parcial para a obtenção do título de Doutor, ao Programa de Pós-Graduação em Modelagem Computacional do Instituto Politécnico, da Universidade do Estado do Rio de Janeiro. Área de concentração: Matemática Aplicada e Computação Científica.

Aprovada em 31 de Março de 2009

Banca Examinadora:

Prof. Dr. Helio Pedro Amaral Souto (Orientador)
IPRJ/UERJ

Prof. Dr. Alexandre Santos Francisco
EEIMVR/UFF

Prof. Dr. Márcio Rentes Borges
LNCC/MCT

Prof^a. Dra. Mônica Feijó Naccache
PUC/RJ

Prof. Dr. Pedro Paulo Gomes Watts Rodrigues
IPRJ/UERJ

Nova Friburgo
2009

DEDICATÓRIA

Dedico esta tese ao meu esposo Fernando, aos meus pais,
irmãos e sobrinhos.

AGRADECIMENTOS

Agradeço a todos que de alguma maneira tornaram possível a realização deste trabalho e em especial:

– A Deus que me deu tudo que tenho e tudo que sou, que iluminou e me acompanhou nesta caminhada dando-me forças para não desistir e seguir em frente;

– Ao meu orientador Helio Pedro Amaral Souto e também ao professor Luis Felipe Feres Pereira, que acreditaram na minha capacidade e estiveram ao meu lado com muita atenção, paciência e profissionalismo;

– Ao meu esposo Fernando pelo amor, apoio, paciência e compreensão nos momentos de ausência. E sua família pelo carinho;

– À toda minha família pelo amor, apoio e compreensão. E em especial ao meu irmão Gilberto pelas sugestões e incentivo nos momentos de dificuldade;

– Aos professores do IPRJ que através das aulas ministradas, contribuíram para o avanço do meu conhecimento, em especial ao professor João Flávio Vasconcellos pelas palavras de apoio e incentivo;

– Ao professor Márcio Rentes Borges pela simpatia e solicitude com que sempre me atendeu;

– Aos meus amigos do IPRJ (em ordem alfabética): Alessandra, Aquino, Gabriel, Genilson, Josecley, Julliany, Kamilla, Luis, Nancy, Marcilene, Samuel, Simone, Paulo, Thiago, Welton e em especial Ana Carla e toda a sua família que tantas vezes me acolheram em sua casa;

– Aos professores da UNIJUÍ, principalmente ao coordenador do mestrado Gérson Feldmann e ao meu orientador Oleg Katchatourian, por acreditar em mim e pelo incentivo à realização desse trabalho;

– A direção, coordenação, funcionários e alunos da Faculdade Horizontina pelo apoio e compreensão;

– A todos os funcionários do IPRJ pela atenção e presteza nos serviços solicitados.

“Tudo o que, na oração, pedirdes com fé, vós o recebereis.”

Mateus 21:22.

RESUMO

SCHULZ, Julhane Alice Thomas. *Simulação Numérica do Escoamento Bifásico em Meios Porosos Heterogêneos Empregando uma Formulação Semi-Implícita, Limitadores de Fluxo e o Método dos Volumes Finitos*. 2009. 172 f. Tese (Doutorado em Modelagem Computacional) - Instituto Politécnico, Universidade do Estado do Rio de Janeiro, Nova Friburgo, 2009.

Neste trabalho apresentamos um esquema numérico para a simulação computacional de escoamentos bifásicos, água-óleo, em reservatórios de petróleo. O modelo matemático consiste em um sistema de equações diferenciais parciais não-linear nas incógnitas velocidade, pressão e saturação. Uma quebra de operadores a dois níveis possibilita uma maior eficiência ao método permitindo que a velocidade, fornecida pelo problema de velocidade-pressão, seja atualizada somente para determinados intervalos de tempo associados ao problema de transporte advectivo-difusivo em termos da saturação. O método dos volumes finitos é empregado na resolução numérica do problema de velocidade-pressão e do transporte de massa por advecção e difusão. Na solução do problema de transporte de massa utilizamos limitadores de fluxo na aproximação dos termos advectivos e diferenças centradas para os termos difusivos. O nosso simulador foi validado a partir de confrontações dos seus resultados com as soluções teóricas conhecidas para os problemas unidimensionais, equações de Burgers e de Buckley-Leverett, e com outros resultados numéricos em se tratando do escoamento bifásico água-óleo bidimensional em meios porosos heterogêneos.

Palavras-chave: Escoamentos bifásicos, reservatórios de petróleo, limitadores de fluxo, método dos volumes finitos.

ABSTRACT

A new numerical method is proposed for the solution of two-phase flow problem in petroleum reservoirs. The two-phase (water and oil) flow problem is governed by a pressure-velocity equation coupled to a saturation equation. For computational efficiency an operator splitting technique is used; distinct time steps can be used for the computation of transport and pressure-velocity problems. The finite volume method is used in the numerical solution of the velocity-pressure and mass transport problems. A flux limiter is used for the numerical discretization of the advective terms while centered schemes are employed for the diffusion terms in the mass transport problem. In the validation of our numerical method we compared numerical and theoretical solutions for one dimensional problems, Burgers and Buckley-Leverett equations, and compared our numerical results to others, in the case of oil-water flows in two dimensions for an heterogeneous porous media.

Keywords: Two-phase flow, petroleum reservoirs, flux limiter, finite volume method.

LISTA DE FIGURAS

| | | |
|------------|---|-----|
| Figura 1.1 | Recuperação secundária de um reservatório de petróleo. | 28 |
| Figura 1.2 | Infiltração de água em um solo não saturado. | 29 |
| Figura 2.1 | Escoamento bifásico num meio poroso. | 31 |
| Figura 3.1 | Volume de controle. | 57 |
| Figura 3.2 | Notação para a correção advectiva. | 61 |
| Figura 4.1 | Método TDMA linha por linha. | 91 |
| Figura 4.2 | Apresentação esquemática da decomposição LU. | 95 |
| Figura 5.1 | Estudo do refinamento de malha para a equação de Burgers para $\alpha = 1, 0.10^{-5}$ e $t = 2, 0$, empregando um limitador de fluxo do tipo <i>monotonized central-difference</i> | 105 |
| Figura 5.2 | Estudo do refinamento de malha para a equação de Burgers para $\alpha = 1, 0.10^{-1}$ e $t = 2, 0$, empregando um limitador de fluxo do tipo <i>monotonized central-difference</i> | 105 |
| Figura 5.3 | Solução da equação de Burgers para $\alpha = 0, 1$, $\Delta t = 1, 0.10^{-3}$ e $t = 1, 0; 2, 0; 3, 0$, empregando um limitador de fluxo do tipo <i>monotonized central-difference</i> | 106 |

| | |
|--|-----|
| Figura 5.4 Solução numérica da equação de Burgers, esquemas não-TVD. | 107 |
| Figura 5.5 Solução numérica da equação de Burgers, esquemas TVD. | 107 |
| Figura 5.6 Solução numérica da equação de Burgers do tipo rarefação, esquemas não-TVD. | 109 |
| Figura 5.7 Solução numérica da equação de Burgers do tipo rarefação, esquemas TVD. | 109 |
| Figura 5.8 Comparação entre as soluções analítica (linhas contínuas) e numérica (*) da equação de Burgers unidimensional com dissipação. | 111 |
| Figura 5.9 Envelope convexo para a função de fluxo. | 112 |
| Figura 5.10 Comparação entre a previsão analítica para o salto (linha tracejada) e a solução numérica da equação de Buckley-Leverett unidimensional. ... | 113 |
| Figura 5.11 Construção da solução analítica da equação de Buckley-Leverett sem o termo dissipativo. | 115 |
| Figura 5.12 Comparação entre a solução numérica da equação de Buckley-Leverett unidimensional e a previsão analítica da altura do salto. | 116 |
| Figura 5.13 Solução numérica da equação de Buckley-Leverett, $\gamma = 0,0$ e $\Delta t = 0,125$ dia. | 117 |
| Figura 5.14 Solução numérica da equação de Buckley-Leverett, $\gamma = 0,0$ e $\Delta t = 0,25$ dia. | 118 |

| | |
|---|-----|
| Figura 5.15 Solução numérica da equação de Buckley-Leverett, $\gamma = 0,0$ e $\Delta t = 0,5$ dia. | 119 |
| Figura 5.16 Solução numérica da equação de Buckley-Leverett, $\gamma = 0,0$ e $\Delta t = 1,0$ dia. | 119 |
| Figura 5.17 Solução numérica da equação de Buckley-Leverett, $\gamma = 0,5$ e $\Delta t = 0,125$ dia. | 120 |
| Figura 5.18 Solução numérica da equação de Buckley-Leverett, $\gamma = 0,5$ e $\Delta t = 0,25$ dia. | 120 |
| Figura 5.19 Solução numérica da equação de Buckley-Leverett, $\gamma = 0,5$ e $\Delta t = 0,5$ dia. | 121 |
| Figura 5.20 Solução numérica da equação de Buckley-Leverett, $\gamma = 0,5$ e $\Delta t = 1,0$ dia. | 122 |
| Figura 5.21 Solução numérica da equação de Buckley-Leverett, $\gamma = 0,5$ e $\Delta t = 0,125$ dia, esquemas não-TVD (<i>upwind</i> de primeira ordem e diferenças centradas) e a formulação FSTAB. | 123 |
| Figura 5.22 Solução numérica da equação de Buckley-Leverett, $\gamma = 0,5$ e $\Delta t = 0,125$ dia, esquemas TVD (MINMOD, OSHER e MC) e a formulação FSTAB. | 123 |
| Figura 5.23 Solução numérica da equação de Buckley-Leverett com $G_d = 0$, sem gravidade. | 126 |
| Figura 5.24 Solução numérica da equação de Buckley-Leverett com $G_d = 0,5$, com gravidade. | 126 |

| | |
|--|-----|
| Figura 5.25 Solução numérica da equação de Buckley-Leverett com $G_d = 1$, com gravidade. | 127 |
| Figura 5.26 Solução numérica da equação de Buckley-Leverett com $G_d = 1,5$, com gravidade. | 127 |
| Figura 5.27 Solução numérica da equação de Buckley-Leverett com $G_d = 2$, com gravidade. | 128 |
| Figura 6.1 Campo de permeabilidade fractal usado nas simulações numéricas. Malha geológica de 32 x 16 elementos e $CV=0,5$ | 131 |
| Figura 6.2 Campo de permeabilidade fractal usado nas simulações numéricas. Malha geológica de 64 x 32 elementos e $CV=0,5$ | 131 |
| Figura 6.3 Domínio computacional para o escoamento bifásico bidimensional. | 132 |
| Figura 6.4 Gráficos das superfícies de saturação das frentes de propagação de água, obtidos com os diferentes métodos iterativos para um critério de parada igual a $1,0 \cdot 10^{-8}$ e malha computacional de 128 x 64 volumes de controle. | 136 |
| Figura 6.5 Gráficos das superfícies de saturação das frentes de propagação de água, obtidos com os diferentes métodos iterativos para um critério de parada igual a $1,0 \cdot 10^{-7}$ e malha computacional de 128 x 64 volumes de controle. | 136 |
| Figura 6.6 Gráficos das superfícies de saturação das frentes de propagação de água, obtidos com os diferentes métodos iterativos para um critério de parada igual a $1,0 \cdot 10^{-8}$ e malha computacional de 256 x 128 volumes de controle. | 137 |
| Figura 6.7 Gráficos das superfícies de saturação das frentes de propagação de água, | |

obtidos com os diferentes métodos iterativos para um critério de parada igual a $1,0 \cdot 10^{-7}$ e malha computacional de 256 x 128 volumes de controle. 137

Figura 6.8 Gráficos das superfícies de saturação da água para o estudo de refinamento de malha após transcorridos 750 dias. Campo de permeabilidades com 32 x 16 elementos. 139

Figura 6.9 Gráficos das superfícies de saturação da água para o estudo de refinamento de malha após transcorridos 1500 dias. Campo de permeabilidades com 32 x 16 elementos. 140

Figura 6.10 Gráficos das superfícies de saturação da água para o estudo de refinamento de malha após transcorridos 3000 dias. Campo de permeabilidades com 32 x 16 elementos. 141

Figura 6.11 Gráficos das superfícies de saturação da água para o estudo de refinamento de malha após transcorridos 3000 dias. Campo de permeabilidades com 32 x 16 elementos. 142

Figura 6.12 Gráfico das superfícies da frente de propagação da fase água com as malhas computacionais de 512 x 256 e 1024 x 512 volumes de controle sobrepostas para um campo de permeabilidades com 32 x 16 elementos. 143

Figura 6.13 Gráficos das superfícies de saturação da água para o estudo de refinamento de malha após transcorridos 750 dias. Campo de permeabilidades com 64 x 32 elementos. 144

Figura 6.14 Gráficos das superfícies de saturação da água para o estudo de refinamento de malha após transcorridos 1500 dias. Campo de permeabilidades com 64 x 32 elementos. 145

Figura 6.15 Gráficos das superfícies de saturação da água para o estudo de refinamento

| | |
|--|-----|
| de malha após transcorridos 3000 dias. Campo de permeabilidades com 64 x 32 elementos. | 146 |
| Figura 6.16 Gráficos das superfícies de saturação da água para o estudo de refinamento de malha após transcorridos 3000 dias. Campo de permeabilidades com 64 x 32 elementos. | 147 |
| Figura 6.17 Gráfico das superfícies da frente de propagação da fase água com as malhas computacionais de 512 x 256 e 1024 x 512 volumes de controle sobrepostas para um campo de permeabilidades com 64 x 32 elementos. | 148 |
| Figura 6.18 Superfícies de saturação da água após transcorridos 1500 dias. Campo de permeabilidades com 32 x 16 elementos e $CV=0,3$ | 151 |
| Figura 6.19 Superfícies de saturação da água após transcorridos 2250 dias. Campo de permeabilidades com 32 x 16 elementos e $CV=0,3$ | 152 |
| Figura 6.20 Superfícies de saturação da água após transcorridos 3000 dias. Campo de permeabilidades com 32 x 16 elementos e $CV=0,3$ | 153 |
| Figura 6.21 Superfícies de saturação da água após transcorridos 1500 dias. Campo de permeabilidades com 32 x 16 elementos e $CV=0,5$ | 155 |
| Figura 6.22 Superfícies de saturação da água após transcorridos 2250 dias. Campo de permeabilidades com 32 x 16 elementos e $CV=0,5$ | 156 |
| Figura 6.23 Superfícies de saturação da água após transcorridos 3000 dias. Campo de permeabilidades com 32 x 16 elementos e $CV=0,5$ | 157 |
| Figura 6.24 Superfícies de saturação da água após transcorridos 1500 dias. Campo de permeabilidades com 64 x 32 elementos e $CV=0,3$ | 159 |

| | |
|--|-----|
| Figura 6.25 Superfícies de saturação da água após transcorridos 2250 dias. Campo de permeabilidades com 64 x 32 elementos e $CV=0,3$ | 160 |
| Figura 6.26 Superfícies de saturação da água após transcorridos 3000 dias. Campo de permeabilidades com 64 x 32 elementos e $CV=0,3$ | 161 |
| Figura 6.27 Superfícies de saturação da água após transcorridos 1500 dias. Campo de permeabilidades com 64 x 32 elementos e $CV=0,5$ | 163 |
| Figura 6.28 Superfícies de saturação da água após transcorridos 2250 dias. Campo de permeabilidades com 64 x 32 elementos e $CV=0,5$ | 164 |
| Figura 6.29 Superfícies de saturação da água após transcorridos 3000 dias. Campo de permeabilidades com 64 x 32 elementos e $CV=0,5$ | 165 |

LISTA DE TABELAS

- Tabela 6.1 Tempo de execução para os diferentes métodos iterativos e para um critério de parada $r_{pv} = 1, 0.10^{-8}$ 134
- Tabela 6.2 Tempo de execução para os diferentes métodos iterativos e para um critério de parada $r_{pv} = 1, 0.10^{-7}$ 134

LISTA DE ABREVIATURAS E SIGLAS

| | |
|-----------|---|
| ACM | Artificial Compression Method |
| AMG | Algebraic Multigrid |
| BI-CG | Método do Gradiente Biconjugado |
| BI-CGSTAB | Método do Gradiente Biconjugado Estável |
| BOX | Box Method |
| CG | Método do Gradiente Conjugado |
| CV | Coefficiente de Variação |
| CVFE | Control-Volume Finite Element Method |
| EMQ | Erro Médio Quadrático |
| ILU | Decomposição LU Incompleta |
| IMPES | Implicit Pressure - Explicit Saturation |
| LTVD | Total Variation Diminishing de Leonard |
| MC | Monotonized Central-Difference |
| SIP | Strongly Implicit Procedure |
| TDMA | Tri-Diagonal Matrix Algorithm |
| TVD | Total Variation Diminishing |
| VER | Volume Elementar Representativo |

LISTA DE SÍMBOLOS

| | |
|---------------------------------------|--|
| Δt | passo de tempo |
| Δx | largura da célula na malha na direção x |
| Δy | largura da célula na malha na direção y |
| Γ | valor infinitesimal não-nulo e positivo (coeficiente de difusão) |
| Ω | domínio bidimensional retangular |
| α | coeficiente de dissipação |
| β | coeficiente de Hurst (Capítulo 6) |
| β | fase água (Capítulo 2) |
| \mathbf{n} | vetor normal unitário |
| ℓ | diâmetro médio do poro do meio poroso |
| η | coeficiente para a função de pressão capilar |
| γ | fase óleo (Capítulo 2) |
| λ_α | função de fluxo para a fase α |
| λ | mobilidade total |
| $\langle K(x) \rangle$ | média estatística |
| $\mathcal{C}(\mathbf{x}, \mathbf{y})$ | função de covariância |
| $\langle \psi_\beta \rangle$ | média volumétrica |
| μ_o | viscosidade do óleo |
| μ_w | viscosidade da água |
| \bar{S} | valor médio do termo de fonte |
| ϕ | valor numérico da variável dependente |
| $\psi(r)$ | função limitadora de fluxo |
| ρ_o | massa específica da óleo |
| ρ_w | massa específica da água |
| σ | desvio padrão (Capítulo 6) |
| σ | fase sólida (Capítulo 2) |
| $\bar{\bar{A}}$ | matriz tridiagonal |
| $\bar{\bar{K}}$ | campo de permeabilidade tensorial |

| | |
|----------------------------|---|
| K | permeabilidade absoluta |
| $\overline{\underline{L}}$ | matriz triangular inferior |
| $\overline{\overline{U}}$ | matriz triangular superior |
| ε | porosidade |
| φ | fator que controla o grau de heterogeneidade do meio |
| φ | variável dependente (Capítulo 3) |
| \vec{g} | vetor aceleração da gravidade |
| \vec{j} | vetor de fluxo advectivo |
| $\vec{n}_{\alpha\beta}$ | normal unitária à superfície |
| \vec{u} | velocidade total |
| \vec{v}_α | velocidade de Darcy |
| $\xi(x)$ | campo gaussiano aleatório |
| A_i | área da face do volume de controle |
| Ca | número de capilaridade |
| G_d | quantifica a razão entre os efeitos gravitacionais e advectivos |
| $K(\mathbf{x})$ | campo de permeabilidade escalar bidimensional |
| k_0 | constante para o campo de permeabilidades |
| $k_{r\alpha}$ | permeabilidade relativa da fase α |
| L | comprimento da malha computacional (Capítulo 5) |
| L_a | operador algébrico |
| N | número de volumes de controle |
| p | pressão global |
| p_c | pressão capilar |
| r_o | raio do volume elementar representativo |
| S_φ | termo de fonte de φ |
| S_{ro} | saturação residual do óleo |
| S_{rw} | saturação residual da água |
| S_w | saturação da fase água |
| t | tempo |
| U | velocidade do escoamento |
| u_0 | taxa de injeção |

SUMÁRIO

| | | |
|------------|--|-----------|
| 1 | INTRODUÇÃO | 21 |
| 1.1 | Breve Histórico | 21 |
| 1.2 | Aplicações | 27 |
| 1.2.1 | Recuperação de Petróleo | 27 |
| 1.2.2 | Contaminação de Solos | 27 |
| 1.3 | Objetivos e Organização do Trabalho | 28 |
| 2 | ESCOAMENTO BIFÁSICO DE DOIS FLUIDOS IMISCÍVEIS | 31 |
| 2.1 | Equações Microscópicas | 31 |
| 2.2 | Obtenção da Equação Macroscópica | 33 |
| 2.2.1 | O Problema de Fechamento | 40 |
| 2.2.2 | Condições de Contorno | 43 |
| 2.2.3 | Pressão Capilar | 44 |
| 2.3 | As Equações Governantes | 49 |
| 2.3.1 | Formulação do Problema de Pressão-Velocidade | 51 |
| 2.3.2 | Reformulação da Equação de Transporte de Massa | 53 |
| 3 | APROXIMAÇÃO NUMÉRICA | 55 |
| 3.1 | O Método dos Volumes Finitos | 56 |
| 3.2 | Formulação Semi-implícita | 58 |
| 3.2.1 | Esquemas TVD | 60 |
| 3.2.2 | Diferenças Centradas | 62 |
| 3.2.3 | Forma Final Discretizada | 63 |

| | | |
|------------|--|------------|
| 3.2.4 | Primeira Formulação Alternativa (FSTAB) | 70 |
| 3.2.5 | Segunda Formulação Alternativa (FSTAB_S) | 72 |
| 3.2.6 | Terceira Formulação Alternativa (FUPW) | 73 |
| 3.2.7 | Quarta Formulação Alternativa (FUPW_S) | 75 |
| 3.2.8 | Quinta Formulação Alternativa (FSADV) | 76 |
| 3.2.9 | Função de Fluxo Linear | 76 |
| 3.3 | Formulação Totalmente Explícita | 79 |
| 3.3.1 | Forma Final Discretizada | 81 |
| 3.4 | O Problema Elíptico | 86 |
| 4 | MÉTODOS ITERATIVOS | 88 |
| 4.1 | O Algoritmo de Thomas | 88 |
| 4.1.1 | O Método TDMA Linha por Linha | 91 |
| 4.1.2 | Correção por Blocos | 92 |
| 4.2 | Decomposição LU Incompleta | 93 |
| 4.3 | O Método do Gradiente Biconjugado | 98 |
| 4.4 | O Método do Gradiente Biconjugado Estável | 99 |
| 5 | VALIDAÇÃO NUMÉRICA | 102 |
| 5.1 | Equação de Burgers | 102 |
| 5.1.1 | Primeiro Problema Teste | 104 |
| 5.1.2 | Segundo Problema Teste | 108 |
| 5.1.3 | Terceiro Problema Teste | 110 |
| 5.2 | Equação de Buckley-Leverett | 110 |
| 5.2.1 | Primeiro Problema Teste | 112 |
| 5.2.2 | Segundo Problema Teste | 113 |
| 5.2.3 | Terceiro Problema Teste | 124 |

| | | |
|------------|--|------------|
| 6 | SIMULAÇÕES NUMÉRICAS BIDIMENSIONAIS EM MEIOS POROSOS HETEROGÊNEOS | 129 |
| 6.1 | Campos de Permeabilidade | 129 |
| 6.2 | Condições de Contorno e Inicial | 132 |
| 6.3 | Verificação da Eficiência Computacional | 133 |
| 6.4 | Estudo da Convergência Numérica | 138 |
| 6.4.1 | Campo Geológico com 32 x 16 Elementos | 138 |
| 6.4.2 | Campo Geológico com 64 x 32 Elementos | 143 |
| 6.5 | Escoamento Bifásico Água-Óleo Bidimensional | 149 |
| 6.5.1 | Campo Geológico com 32 x 16 Elementos e $CV=0,3$ | 149 |
| 6.5.2 | Campo Geológico com 32 x 16 Elementos e $CV=0,5$ | 154 |
| 6.5.3 | Campo Geológico com 64 x 32 Elementos e $CV=0,3$ | 158 |
| 6.5.4 | Campo Geológico com 64 x 32 Elementos e $CV=0,5$ | 162 |
| 7 | CONCLUSÕES E PERSPECTIVAS | 166 |
| 7.1 | Conclusões | 166 |
| 7.2 | Perspectivas | 167 |
| | REFERÊNCIAS | 169 |

1 INTRODUÇÃO

Nos últimos anos, devido à pertinência para a indústria petrolífera, a simulação de reservatórios de petróleo recebeu atenção e foi alvo de amplos estudos. Do ponto de vista econômico, é importante o conhecimento do comportamento do escoamento no reservatório durante sua exploração, porque fornece dados que ajudam a estimar as características da produção do petróleo, padrões de fluxo, tempo de produção etc. O principal objetivo da modelagem computacional e do uso de métodos numéricos envolvidos na simulação de reservatórios de petróleo é possibilitar um melhor direcionamento e controle dos poços, de maneira que haja uma maximização na recuperação do petróleo.

1.1 Breve Histórico

Diversos autores têm apresentado, nos últimos anos, diferentes formulações usando o método dos volumes finitos que são empregados na discretização de problemas de escoamento bifásico de fluidos em meios porosos, onde o modelo matemático é expresso por equações diferenciais parciais não-lineares, acopladas e dependentes do tempo. A simulação numérica do escoamento bifásico em meios porosos depende, em grande parte, do desenvolvimento de simuladores numéricos robustos que sejam capazes de fornecer resultados acurados. O grande desafio consiste em empregar esquemas de discretização que sejam, ao mesmo tempo, estáveis, acurados, não-oscilatórios e que apresentem soluções numéricas que sejam fisicamente corretas.

Na simulação do escoamento bifásico de fluidos em meios porosos, Durlofsky (1993) utilizou o método de elementos finitos mistos para a equação da pressão com o método dos volumes finitos e esquemas do tipo TVD (*Total Variation Diminishing*) para a equação da saturação.

Para a discretização das equações que governam o escoamento bifásico em meios porosos, Verdière e Vignal (1998) usaram o *Dual Mesh Method* e o método dos volumes finitos. Estes esquemas são usados para discretizar o sistema de equações empregando aproximações com cinco pontos para a equação de pressão e um esquema *upwind* explícito

para a equação da saturação. O *Dual Mesh Method* foi validado por sua eficiência e seu baixo custo computacional quando comparado a métodos clássicos.

Uma estrutura geral de esquemas de volumes finitos é apresentada por Edwards (1998), onde a discretização, através de um esquema de nove nós, pode ser escrita como um esquema de cinco nós mais um termo residual que envolve os nós extras, de modo a aumentar a acurácia do método. O método IMPES (Implicit Pressure - Explicit Saturation) é acoplado com o esquema de alta ordem de Godunov para a integração dos componentes da equação de fluxo.

Os estudos de Bastian e Helmig (1999) concentram-se na resolução de equações algébricas lineares e não-lineares que surgem da discretização das equações que governam os escoamentos bifásicos em meios porosos, empregando o método dos volumes finitos e uma formulação totalmente implícita. Neste caso, foi empregado um algoritmo do tipo *Newton-Multigrid* em malhas não-estruturadas para problemas bidimensionais e tridimensionais. Além disso, foi mostrada uma boa ordem de convergência para uma variedade de problemas de escoamentos bifásicos incluindo meios heterogêneos e foram apresentados também resultados utilizando a computação paralela e seqüencial.

Huber e Helmig (2000), no intuito de simular o escoamento multifásico em meios porosos heterogêneos, descreveram e compararam três metodologias de Volumes Finitos centrados no nó, considerando malhas não-estruturadas mistas, compostas por triângulos e quadriláteros. Cada um dos três métodos denominados por *Box method* (BOX), *Control-volume finite element method* (CVFE) e *IFDM method* apresentaram alguma desvantagem. Pela combinação destes métodos, dois outros métodos foram gerados, o BOXIFDM e o CVBOXIFDM, ambos os métodos combinados são aplicáveis a qualquer malha sem gerar perfis de saturação não-físicos.

Oldenburg e Pruess (2000) apresentaram experimentos numéricos de problemas de escoamentos complexos que surgem na Engenharia Geotérmica de Reservatórios e compararam o esquema *total variation diminishing* de Leonard (LTVD) com o esquema *upstream weighting* para uma formulação implícita. Os resultados mostraram que o esquema LTVD implícito reduziu a dispersão numérica e teve bom desempenho mesmo se a saturação variar com o tempo. Os autores concluíram que o esquema LTVD é um método prático e robusto para reduzir a dispersão numérica em problemas de escoamentos complexos, relevantes para a engenharia geotérmica de reservatórios.

Um esquema numérico foi proposto por Granet et al. (2001), para simular o escoamento bifásico incompressível em reservatórios fraturados. Esse esquema é baseado em

um método de elementos de fissura, que constitui-se na aplicação de uma malha específica para o meio fraturado. Esta malha não-estruturada é composta de dois tipos de elementos: elementos lineares para a rede de fissuras; e elementos triangulares para a matriz. Um esquema de volumes finitos apropriado foi desenvolvido para prover uma descrição acurada do escoamento na fissura-interface da matriz sólida. A equação da pressão é discretizada com um esquema implícito e a saturação com um esquema explícito (IMPES). O esquema de discretização, baseado em elementos de fissura, permitiu a simulação do escoamento em redes de fissura com formas geométricas complexas, geradas por um *software* de caracterização de fissura comercial.

Souadnia e Latifi (2001) desenvolveram um modelo fenomenológico para prever a queda de pressão e a distribuição da saturação líquida de um reator de leite gotejante que são usados na indústria do petróleo. Os autores combinaram o método dos volumes finitos com o método de Godunov. O método computacional mostrou ser eficiente e todos os problemas considerados foram corretamente modelados.

Afif e Amazine (2002) desenvolveram e aplicaram o método dos volumes finitos para problemas de advecção-difusão que têm aplicações em reservatórios de petróleo e simulação de aquíferos subterrâneos. Os autores estudaram e analisaram três esquemas numéricos de discretização no tempo: o explícito, o semi-implícito e o implícito. Os três esquemas foram testados numericamente para a discretização da equação de advecção-difusão para o problema do escoamento bifásico imiscível em um meio poroso. Resultados numéricos usando volumes finitos são mostrados e comparados com o método dos elementos finitos mistos. Os autores entenderam que o método dos volumes finitos provou ser uma melhor alternativa na aproximação da solução deste problema do que o método dos elementos finitos.

Lee, Jenny e Tchelepi (2002) apresentaram o método dos volumes finitos para malhas multiblocos hexaedrais para simular escoamentos multifásicos em reservatórios geologicamente complexos. Estruturas geológicas com geometrias complexas, tais como falhas e estratificações, em um modelo de reservatório requerem malhas não-estruturadas e/ou não-ortogonais em lugar da malha cartesiana convencional. Para obter uma maior flexibilidade para a malha computacional e também uma maior eficiência no cálculo do fluxo, os autores usaram malhas multiblocos hexaedrais. Estas malhas são localmente estruturadas, mas globalmente não-estruturadas. A principal vantagem deste tipo de malha sobre as malhas tetraedrais totalmente não-estruturadas é que a maioria dos métodos numéricos desenvolvidos para malhas estruturadas podem ser diretamente empregados

para resolver os problemas locais. Foram apresentados vários exemplos, gerados por uma ferramenta comercial disponível, que demonstraram a eficiência do método empregando malhas hexaedrais.

Bürkle e Ohlberger (2002) consideraram o método dos volumes finitos adaptado para tratar de problemas de transporte miscíveis e imiscíveis em meios porosos, que são modelados por equações de fluxo em uma e duas fases. Para a aproximação do sistema de equações foi empregada a técnica de decomposição de operadores (*operador splitting*), onde as equações de fluxo são discretizadas, empregando o método de elementos finitos mistos, usando elementos de Raviart-Thomas e a equação de transporte é discretizada pelo método dos volumes finitos com o esquema *upwind* implícito centrado no vértice. Usando estimativas de erro para ambos os esquemas de aproximações foi deduzido um algoritmo de solução, adaptado para sistemas de equações, que mostrou a aplicabilidade e eficiência do mesmo.

Afif e Amazine (2003) combinaram o método de elementos finitos mistos com um método dos volumes finitos em malhas estruturadas e não-estruturadas para a aproximação da solução do escoamento incompressível em um meio poroso heterogêneo. Esses autores usaram um método de elementos finitos para obter uma solução acurada da equação de fluxo e um método de volumes finitos centrado no vértice para a equação da saturação. Simulações numéricas bidimensionais mostraram que esta aproximação leva a um conjunto de esquemas robustos.

Segundo Eymard e Gallouet (2004), o sistema de equações obtido da discretização das equações de conservação do escoamento de fluidos multifásicos em meios porosos é normalmente aproximado por esquemas de volumes finitos em reservatórios de petróleo. Esses autores fizeram um estudo das propriedades de convergência de esquemas de volumes finitos aplicados a escoamentos bifásicos em meios porosos. As propriedades de convergência destes esquemas são geralmente conhecidas para casos mais simplificados. Neste trabalho os autores apresentaram alguns resultados da análise de convergência em casos mais complexos. Os resultados baseiam-se em uma adaptação da idéia da convergência H para o limite de aproximações discretas. Essa adaptação fornece uma ferramenta útil que ajuda nos estudos de convergência dos esquemas de volumes finitos usados na aproximação da solução do escoamento bifásico em meios porosos.

Rees et al. (2004) aplicaram o método dos volumes finitos para modelar escoamentos subterrâneos bidimensionais em solos saturados e não-saturados. A equação de fluxo é resolvida com o uso de uma formulação do método dos volumes finitos com volumes

de controle centrados no nó e com estrutura de dados baseada em arestas para malhas estruturadas e não-estruturadas. O esquema é empregado para resolver um problema de escoamento subterrâneo bidimensional e os resultados obtidos são comparados com soluções encontradas na literatura. Os autores mostraram que o esquema de volumes finitos baseado em arestas captura a frente de propagação da saturação mais eficientemente que a solução pelo método de elementos finitos.

No mesmo ano, Carvalho, Willmersdorf e Lyra (2004) apresentaram uma formulação do método dos volumes finitos com volumes de controle centrados no nó e com estrutura de dados baseada em arestas, utilizada para resolver as equações diferenciais parciais que governam o deslocamento imiscível óleo-água em meios porosos. As equações governantes são resolvidas a partir do procedimento IMPES (Implicit Pressure - Explicit Saturation). Foram simulados problemas de escoamentos de fluidos em meios porosos altamente heterogêneos a fim de validar o método.

Os estudos de Geiger et al. (2004) mostraram que a combinação do método dos volumes finitos com um esquema TVD (*Total Variation Diminishing*), centrado no nó, com o método de elementos finitos de Galerkin, em uma malha triangular não-estruturada com uma sub-malha de volumes finitos, é satisfatória para modelar um escoamento multifásico em um meio geológico com estrutura complexa. O uso do esquema de segunda ordem TVD permitiu obter soluções numéricas mais precisas e que são capazes de reproduzir acuradamente as frentes de choque e rarefações.

Uma formulação híbrida mista, baseada no método dos elementos finitos e no método dos volumes finitos, para a simulação do escoamento bifásico em um meio poroso heterogêneo foi apresentada por Wendland e Flensburg (2005). As equações de fluxo são resolvidas de maneira segregada através do procedimento IMPES (Implicit Pressure - Explicit Saturation). Sua maior limitação é a restrição do passo de tempo devido à avaliação explícita do campo de saturações. Os termos advectivos e difusivos da equação da saturação foram separados através de uma decomposição de operadores sequencial (*sequential operator splitting*). O método dos volumes finitos, para a solução da equação da saturação, é aplicado com um limitador de inclinação e o problema elíptico é resolvido mediante o emprego do método dos elementos finitos mistos. O sistema de equações algébricas foi resolvido usando o método do Gradiente Conjugado empregando como pré-condicionador o *Algebraic Multigrid* (AMG). O método provou ser rápido e eficaz. Segundo os autores, os esquemas de discretização mostraram ser estáveis, acurados, não-oscilatórios e apresentaram soluções numéricas fisicamente corretas.

Niessner et al. (2005) investigaram a influência de três esquemas numéricos, para o escoamento bifásico em meios porosos heterogêneos, na performance do algoritmo de Newton. No sentido de combinar as vantagens do método dos volumes finitos e elementos finitos, foi desenvolvido o esquema de volumes finitos centrado no vértice. Para a discretização no tempo foi usada uma aproximação totalmente implícita. Os autores compararam diferentes esquemas de linearização nas iterações de Newton a fim de obter uma boa eficiência do simulador numérico. Eles constataram que para um problema de águas subterrâneas o esquema de volumes finitos centrado no vértice com linearização numérica apresentou um desempenho numérico melhor. Entretanto, para representar a interface entre dois materiais de uma maneira fisicamente correta é necessário implementar uma condição de transição. Neste caso, o esquema de volumes finitos centrado no nó com condição de interface e linearização numérica é mais eficiente que o esquema de linearização exata.

Conforme Cordazzo (2006), no artigo de Edwards (1998) foi proposto um método dos volumes finitos que emprega malhas estruturadas não-ortogonais e que impõe a continuidade dos fluxos mediante a utilização de funções contínuas nas interfaces dos volumes. Esse procedimento é bastante apropriado para lidar com situações de grande anisotropia causada pelo tensor de permeabilidade absoluta ou pela malha. A sua aplicação em malhas não-estruturadas foi proposta por Edwards (2003), com notável redução do custo computacional em relação ao método anterior.

A procura de uma metodologia que una, da melhor forma possível, as características mais atrativas apresentadas por estes autores foi a principal motivação para que este trabalho se destinasse ao estudo e implementação do método dos volumes finitos empregando uma formulação semi-implícita e esquemas do tipo TVD. Conforme pudemos constatar nesta breve revisão bibliográfica, o método dos volumes finitos e formulações do tipo implícita têm sido aplicadas com sucesso na resolução de problemas de escoamentos multifásicos em meios porosos heterogêneos. Portanto, tal fato nos motivou a estender o método clássico dos volumes finitos (PATANKAR, 1980; VERSTEEG; MALALASEKERA, 1995), tradicionalmente empregado na resolução de problemas lineares do tipo advecção-difusão, para a resolução de problemas do tipo advecção-difusão não-lineares. A nossa proposta foi a de empregarmos uma expansão em série de Taylor da função (não-linear) de fluxo advectivo e limitadores de fluxo do tipo TVD na discretização das equações de transporte de massa presentes na modelagem do escoamento bifásico em meios porosos, de modo a preservarmos o máximo possível a metodologia empregada na resolução dos problemas lineares.

1.2 Aplicações

Os problemas envolvendo fenômenos de transporte em meios porosos encontram aplicação em diferentes áreas do conhecimento científico e tecnológico. Dentre os setores onde estes conhecimentos podem ser empregados encontram-se as indústrias do petróleo (recuperação avançada de reservatórios) e química, o meio ambiente (transporte de contaminantes no subsolo), a geologia, a engenharia mecânica, a medicina etc.

Para uma melhor compreensão do nosso problema físico de interesse, apresentamos a seguir dois exemplos, específicos, de aplicações do estudo de escoamentos multifásicos em meios porosos.

1.2.1 Recuperação Avançada de Reservatórios de Petróleo

Um primeiro exemplo de grande importância na aplicação da simulação numérica do escoamento multifásico é o estudo das diferentes técnicas de recuperação avançada de petróleo:

- injeção de água em reservatórios de petróleo;
- injeção de água e polímeros em reservatórios de petróleo;
- injeção alternada de água e gás em reservatórios de petróleo;
- etc.

A Figura 1.1 apresenta uma ilustração do emprego da injeção de água na recuperação (recuperação secundária) de petróleo em um reservatório.

1.2.2 Transporte de Contaminantes em Meios Porosos

Um outro exemplo de aplicação do estudo de escoamentos multifásicos em meios porosos é o caso do transporte de um contaminante devido à infiltração de água em um meio poroso heterogêneo e não-saturado. Este estudo pode ser aplicado no intuito de obtermos uma maior compreensão dos seguintes processos:

- contaminação do subsolo por agrotóxicos;
- contaminação do subsolo por metais pesados;

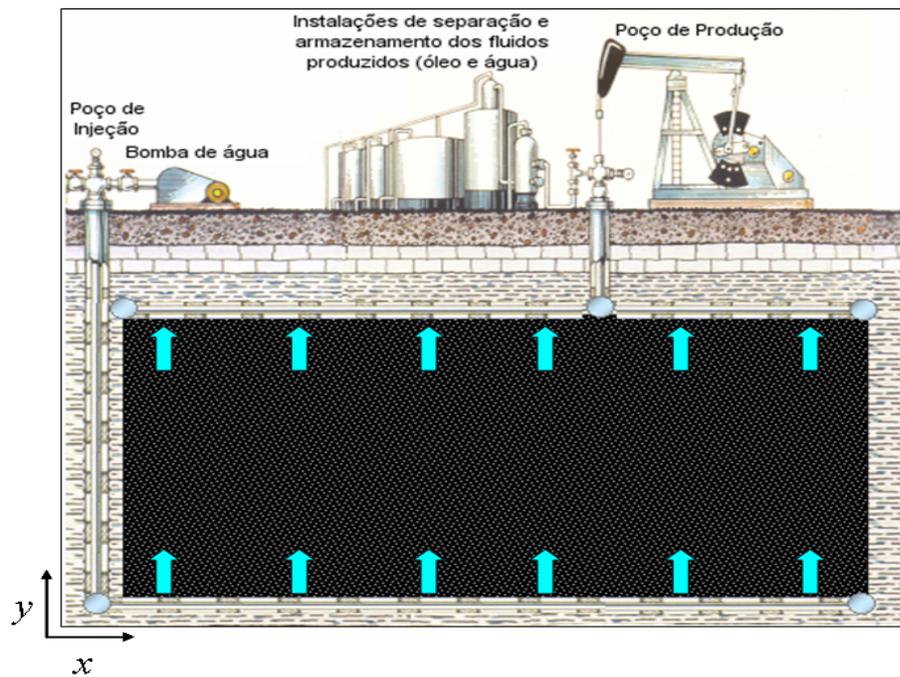


Figura 1.1: Recuperação secundária de um reservatório de petróleo.

- contaminação de um aquífero por poluentes;
- transporte de radionuclídeos no subsolo;
- etc.

Uma representação do processo de infiltração de água em um solo é mostrada na Figura 1.2. Esta água pode conter um contaminante que será transportado pelo interior do solo, ou poderá atingir uma determinada região que contém substâncias tóxicas que serão carregadas pela água quando da sua passagem.

1.3 Objetivos e Organização do Trabalho

O presente trabalho tem como objetivo principal o desenvolvimento de um simulador numérico bidimensional, para resolver o problema do escoamento bifásico no interior de um meio poroso, que seja eficiente e apresente uma boa acurácia. No desenvolvimento deste simulador, empregamos uma formulação semi-implícita para a resolução do problema do transporte bifásico. O método dos volumes finitos é utilizado na discretização das equações de balanço e diferentes esquemas do tipo TVD são empregados na aproximação dos termos de fluxo não-lineares.



Figura 1.2: Infiltração de água em um solo não saturado.

Este trabalho está organizado de forma que no Capítulo 2 mostramos uma possibilidade de derivação das equações macroscópicas que governam o transporte de massa e a quantidade de movimento, válidas na escala de Darcy (ou de laboratório), mediante a aplicação da técnica da média volumétrica. Ainda neste capítulo, apresentamos a forma final das equações da continuidade e de pressão-velocidade, que são efetivamente empregadas na simulação numérica do escoamento bifásico.

No Capítulo 3, apresentamos de forma detalhada o Método dos Volumes Finitos aplicado na discretização das equações diferenciais parciais parabólica e elíptica, em conjunto com o emprego dos limitadores de fluxo.

A seguir, no Capítulo 4, descrevemos os algoritmos numéricos TDMA (*Tri-Diagonal Matrix Algorithm*), SIP (*Strongly Implicit Procedure*), o método do Gradiente Biconjugado (BI-CG) e o método do Gradiente Biconjugado Estável (BI-CGSTAB), utilizados na resolução numérica iterativa do sistema algébrico de equações resultante do processo de discretização das equações diferenciais parciais que governam o escoamento bifásico.

O Capítulo 5 destina-se à validação numérica do nosso simulador, onde comparamos os nossos resultados com alguns resultados conhecidos das equações de Burgers e de Buckley-Leverett, para escoamentos unidimensionais.

No Capítulo 6 apresentamos algumas simulações numéricas de escoamentos bifásicos água-óleo em meios porosos heterogêneos bidimensionais. Nestes resultados estão incluídos um estudo de convergência numérica sob refinamento da malha computacional e a comparação dos nossos resultados numéricos com àqueles oriundos da utilização de um simulador numérico empregando uma formulação implícita para o problema elíptico de pressão-velocidade e uma formulação explícita, empregando um esquema central não-oscilatório com limitador de inclinação, na resolução da equação hiperbólica (não são considerados os efeitos difusivos) da saturação da fase água (NESSYAHU; TADMOR, 1990; BORGES, 2006).

Finalmente, no Capítulo 7, apresentamos as nossas principais conclusões e perspectivas para futuros trabalhos.

2 ESCOAMENTO BIFÁSICO DE DOIS FLUIDOS IMISCÍVEIS

Neste capítulo, estudaremos o processo do escoamento bifásico de dois fluidos incompressíveis e imiscíveis em um meio poroso. Este estudo encontra aplicações, conforme já mencionado na Introdução, na ciência do petróleo e no transporte de contaminantes em meios porosos não saturados.

Na Figura 2.1, ilustramos o que seria uma representação esquemática do escoamento de duas fases imiscíveis (β e γ) em um meio poroso rígido, cuja matriz sólida é representada pela fase σ .

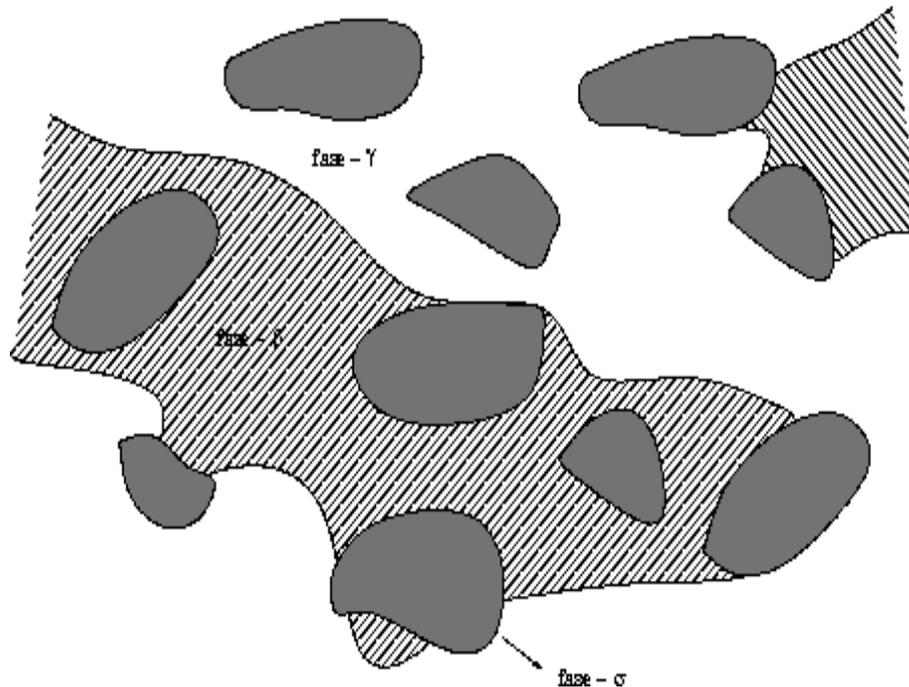


Figura 2.1: Escoamento bifásico num meio poroso.

2.1 Equações Microscópicas

O escoamento bifásico considerado pode ser descrito, na escala dos poros e para pequenos valores do número de Reynolds, pelo seguinte problema de valor de contorno (WHI-

TAKER, 1986, 1994):

Fase - β

$$\nabla \cdot \vec{v}_\beta = 0 \quad (2.1)$$

$$\mu_\beta \nabla^2 \vec{v}_\beta - \nabla p_\beta + \rho_\beta \vec{g} = 0 \quad (2.2)$$

Fase - γ

$$\nabla \cdot \vec{v}_\gamma = 0 \quad (2.3)$$

$$\mu_\gamma \nabla^2 \vec{v}_\gamma - \nabla p_\gamma + \rho_\gamma \vec{g} = 0 \quad (2.4)$$

mais as condições de contorno nas interfaces sólido-fluido:

Interface - $A_{\beta\sigma}$

$$\vec{v}_\beta = 0 \quad (2.5)$$

que implica na condição de não deslizamento do fluido na interface sólida,

Interface - $A_{\gamma\sigma}$

$$\vec{v}_\gamma = 0 \quad (2.6)$$

que reflete a condição de aderência na superfície sólida, acrescida das condições de contorno na interface fluido-fluido:

Interface - $A_{\beta\gamma}$

$$\overline{\overline{P}} \vec{v}_\beta = \overline{\overline{P}} \vec{v}_\gamma \quad (2.7)$$

$$\vec{n}_{\beta\gamma} \cdot \vec{v}_\beta = \vec{n}_{\beta\gamma} \cdot \vec{v}_\gamma = 0 \quad (2.8)$$

$$-p_\beta \vec{n}_{\beta\gamma} + \overline{\overline{S}}_\beta \vec{n}_{\beta\gamma} = -p_\gamma \vec{n}_{\beta\gamma} + \overline{\overline{S}}_\gamma \vec{n}_{\beta\gamma} + 2\sigma H \vec{n}_{\beta\gamma} \quad (2.9)$$

onde a primeira igualdade requer que a componente tangencial da velocidade seja contínua em $A_{\beta\gamma}$, a segunda implica no fato de que não há transferência de massa entre as fases β e γ e a terceira expressa o balanço interfacial de tensões.

Nestas equações e condições de contorno, $\vec{n}_{\alpha\beta}$ indica a normal unitária à superfície $\alpha\beta$ e apontando de α para β , $\overline{\overline{P}} = \overline{\overline{I}} - \vec{n}_{\beta\gamma} \otimes \vec{n}_{\beta\gamma}$ é o tensor projeção, $\overline{\overline{S}} = \mu (\nabla \vec{v} + \nabla^T \vec{v})$ é o tensor extra de tensões, σ representa a tensão interfacial e H a curvatura da interface considerada.

2.2 Obtenção da Equação Macroscópica

A fim de obtermos as equações macroscópicas, válidas na escala de Darcy ou de laboratório, faremos uso do teorema da média volumétrica para um sistema trifásico, ou seja (WHITAKER, 1994):

$$\langle \nabla \psi_\beta \rangle = \nabla \langle \psi_\beta \rangle + \frac{1}{V} \int_{A_{\beta\sigma}} \vec{n}_{\beta\sigma} \psi_\beta dA + \frac{1}{V} \int_{A_{\beta\gamma}} \vec{n}_{\beta\gamma} \psi_\beta dA \quad (2.10)$$

ou na sua forma vetorial,

$$\langle \nabla \cdot \psi_\beta \rangle = \nabla \cdot \langle \psi_\beta \rangle + \frac{1}{V} \int_{A_{\beta\sigma}} \vec{n}_{\beta\sigma} \cdot \psi_\beta dA + \frac{1}{V} \int_{A_{\beta\gamma}} \vec{n}_{\beta\gamma} \cdot \psi_\beta dA \quad (2.11)$$

Equações similares existem para a fase γ :

$$\langle \nabla \psi_\gamma \rangle = \nabla \langle \psi_\gamma \rangle + \frac{1}{V} \int_{A_{\gamma\sigma}} \vec{n}_{\gamma\sigma} \psi_\gamma dA + \frac{1}{V} \int_{A_{\gamma\beta}} \vec{n}_{\gamma\beta} \psi_\gamma dA \quad (2.12)$$

$$\langle \nabla \cdot \psi_\gamma \rangle = \nabla \cdot \langle \psi_\gamma \rangle + \frac{1}{V} \int_{A_{\gamma\sigma}} \vec{n}_{\gamma\sigma} \cdot \psi_\gamma dA + \frac{1}{V} \int_{A_{\gamma\beta}} \vec{n}_{\gamma\beta} \cdot \psi_\gamma dA \quad (2.13)$$

e nenhuma equação para a fase sólida σ se faz necessária uma vez que estamos considerando um meio poroso rígido (não deformável).

Nestas equações $\langle \psi_\beta \rangle$ representa a média volumétrica da função ψ_β :

$$\langle \psi_\beta \rangle = \frac{1}{V} \int_{V_\beta} \psi_\beta dV \quad (2.14)$$

onde V é o volume do Volume Elementar Representativo (VER). Uma outra média volumétrica pode ser definida:

$$\langle \psi_\beta \rangle^\beta = \frac{1}{V_\beta} \int_{V_\beta} \psi_\beta dV \quad (2.15)$$

que é conhecida como a média volumétrica intrínseca, de modo que

$$\langle \psi_\beta \rangle = \varepsilon_\beta \langle \psi_\beta \rangle^\beta \quad (2.16)$$

onde ε_β representa a porosidade do VER, $\varepsilon_\beta = V_\beta/V$.

Iniciaremos o nosso desenvolvimento pela aplicação do teorema da média volumétrica às equações da continuidade das fases β e γ :

$$\langle \nabla \cdot \vec{v}_\beta \rangle = \nabla \cdot \langle \vec{v}_\beta \rangle + \frac{1}{V} \int_{A_{\beta\sigma}} \vec{n}_{\beta\sigma} \cdot \vec{v}_\beta dA + \frac{1}{V} \int_{A_{\beta\gamma}} \vec{n}_{\beta\gamma} \cdot \vec{v}_\beta dA = 0 \quad (2.17)$$

$$\langle \nabla \cdot \vec{v}_\gamma \rangle = \nabla \cdot \langle \vec{v}_\gamma \rangle + \frac{1}{V} \int_{A_{\gamma\sigma}} \vec{n}_{\gamma\sigma} \cdot \vec{v}_\gamma dA + \frac{1}{V} \int_{A_{\gamma\beta}} \vec{n}_{\gamma\beta} \cdot \vec{v}_\gamma dA = 0 \quad (2.18)$$

Devido às condições de aderência do fluido na superfície da fase sólida, estas equações ficam reduzidas às seguintes formas:

$$\nabla \cdot \langle \vec{v}_\beta \rangle + \frac{1}{V} \int_{A_{\beta\gamma}} \vec{n}_{\beta\gamma} \cdot \vec{v}_\beta dA = 0 \quad (2.19)$$

$$\nabla \cdot \langle \vec{v}_\gamma \rangle + \frac{1}{V} \int_{A_{\gamma\beta}} \vec{n}_{\gamma\beta} \cdot \vec{v}_\gamma dA = 0 \quad (2.20)$$

Agora, do *Teorema Geral de Transporte* (QUINTARD; WHITAKER, 1988) obtemos para a fase β

$$\left\langle \frac{\partial \psi_\beta}{\partial t} \right\rangle = \frac{\partial \langle \psi_\beta \rangle}{\partial t} - \frac{1}{V} \int_{A_{\beta\gamma}} \psi_\beta \vec{n}_{\beta\gamma} \cdot \vec{w} dA \quad (2.21)$$

que para $\psi = 1$ resulta na seguinte igualdade:

$$\frac{\partial \varepsilon_\beta}{\partial t} = \frac{1}{V} \int_{A_{\beta\gamma}} \vec{n}_{\beta\gamma} \cdot \vec{w} dA \quad (2.22)$$

onde $\vec{n}_{\beta\gamma} \cdot \vec{w}$ representa a componente normal da velocidade da interface $\beta - \gamma$.

Finalmente, aplicando este resultado a ambas as fases, podemos obter as seguintes equações:

$$\frac{\partial \varepsilon_\beta}{\partial t} + \nabla \cdot \langle \vec{v}_\beta \rangle + \frac{1}{V} \int_{A_{\beta\gamma}} \vec{n}_{\beta\gamma} \cdot (\vec{v}_\beta - \vec{w}) dA = 0 \quad (2.23)$$

$$\frac{\partial \varepsilon_\gamma}{\partial t} + \nabla \cdot \langle \vec{v}_\gamma \rangle + \frac{1}{V} \int_{A_{\beta\gamma}} \vec{n}_{\beta\gamma} \cdot (\vec{v}_\gamma - \vec{w}) dA = 0 \quad (2.24)$$

Nestas equações, os últimos termos são importantes quando da existência de transferência de massa através das interfaces. Entretanto, no caso em questão os fluidos são imiscíveis e, portanto,

$$\vec{n}_{\beta\gamma} \cdot \vec{v}_\beta = \vec{n}_{\beta\gamma} \cdot \vec{w} = \vec{n}_{\beta\gamma} \cdot \vec{v}_\gamma \quad (2.25)$$

e estas equações assumem a seguinte forma simplificada:

$$\frac{\partial \varepsilon_\beta}{\partial t} + \nabla \cdot \langle \vec{v}_\beta \rangle = 0 \quad (2.26)$$

$$\frac{\partial \varepsilon_\gamma}{\partial t} + \nabla \cdot \langle \vec{v}_\gamma \rangle = 0 \quad (2.27)$$

Podemos também escrever estas equações em termos das saturações das fases β :

$S_\beta = \varepsilon_\beta/\varepsilon$ e $\gamma: S_\gamma = \varepsilon_\gamma/\varepsilon$, onde $\varepsilon = \varepsilon_\beta + \varepsilon_\gamma$ representa a porosidade local,

$$\frac{\partial(\varepsilon S_\beta)}{\partial t} + \nabla \cdot \langle \vec{v}_\beta \rangle = 0 \quad (2.28)$$

$$\frac{\partial(\varepsilon S_\gamma)}{\partial t} + \nabla \cdot \langle \vec{v}_\gamma \rangle = 0 \quad (2.29)$$

Dando prosseguimento ao processo de obtenção das equações macroscópicas, consideramos, agora, as equações do balanço da quantidade de movimento das fases β e γ . Tomando a média volumétrica da equação de momentum da fase β :

$$\begin{aligned} \mu_\beta \nabla \cdot \langle \nabla \vec{v}_\beta \rangle - \nabla \langle p_\beta \rangle + \varepsilon_\beta \rho_\beta \vec{g} + \frac{1}{V} \int_{A_{\beta\sigma}} \vec{n}_{\beta\sigma} \cdot \left(-p_\beta \bar{\bar{I}} + \mu_\beta \nabla \vec{v}_\beta \right) dA \\ + \frac{1}{V} \int_{A_{\beta\gamma}} \vec{n}_{\beta\gamma} \cdot \left(-p_\beta \bar{\bar{I}} + \mu_\beta \nabla \vec{v}_\beta \right) dA = 0 \end{aligned} \quad (2.30)$$

Aplicando novamente o teorema da média volumétrica:

$$\begin{aligned} \mu_\beta \nabla^2 \langle \vec{v}_\beta \rangle - \nabla \langle p_\beta \rangle + \varepsilon_\beta \rho_\beta \vec{g} + \frac{1}{V} \int_{A_{\beta\sigma}} \vec{n}_{\beta\sigma} \cdot \left(-p_\beta \bar{\bar{I}} + \mu_\beta \nabla \vec{v}_\beta \right) dA \\ + \frac{1}{V} \int_{A_{\beta\gamma}} \vec{n}_{\beta\gamma} \cdot \left(-p_\beta \bar{\bar{I}} + \mu_\beta \nabla \vec{v}_\beta \right) dA \\ + \mu_\beta \nabla \cdot \left(\frac{1}{V} \int_{A_{\beta\sigma}} \vec{n}_{\beta\sigma} \otimes \vec{v}_\beta dA + \frac{1}{V} \int_{A_{\beta\gamma}} \vec{n}_{\beta\gamma} \otimes \vec{v}_\beta dA \right) = 0 \end{aligned} \quad (2.31)$$

Devido à condição de não deslizamento, o termo de integral de superfície contendo $\vec{n}_{\beta\sigma} \otimes \vec{v}_\beta$ será nulo. Por outro lado, através de uma análise de ordem de grandeza podemos fazer as seguintes estimativas:

$$\mu_\beta \nabla \cdot \left(\frac{1}{V} \int_{A_{\beta\gamma}} \vec{n}_{\beta\gamma} \otimes \vec{v}_\beta dA \right) = \mathcal{O} \left(\frac{\mu_\beta \vec{v}_\beta}{L \ell_\beta} \right) \quad (2.32)$$

$$\frac{1}{V} \int_{A_{\beta\gamma}} \vec{n}_{\beta\gamma} \cdot (\mu_\beta \nabla \vec{v}_\beta) dA = \mathcal{O} \left(\frac{\mu_\beta \vec{v}_\beta}{\ell_\beta \ell_\beta} \right) \quad (2.33)$$

Da restrição devido à separação de escalas temos que:

$$\ell_\beta, \ell_\gamma \ll r_o \ll L \quad (2.34)$$

onde ℓ_β, ℓ_γ são os pequenos comprimentos de escala associados às fases β e γ , r_o é o raio do volume elementar representativo (VER) e L o menor comprimento de escala associado às grandezas médias (macroscópicas). Destas desigualdades vemos que a primeira integral pode ser desconsiderada com relação à segunda. Assim sendo, obtemos:

$$\begin{aligned} \mu_\beta \nabla^2 \langle \vec{v}_\beta \rangle - \nabla \langle p_\beta \rangle + \varepsilon_\beta \rho_\beta \vec{g} + \frac{1}{V} \int_{A_{\beta\sigma}} \vec{n}_{\beta\sigma} \cdot \left(-p_\beta \bar{\bar{I}} + \mu_\beta \nabla \vec{v}_\beta \right) dA \\ + \frac{1}{V} \int_{A_{\beta\gamma}} \vec{n}_{\beta\gamma} \cdot \left(-p_\beta \bar{\bar{I}} + \mu_\beta \nabla \vec{v}_\beta \right) dA = 0 \end{aligned} \quad (2.35)$$

Escrevendo, agora, esta equação em termos da média intrínseca e desenvolvendo este resultado:

$$\begin{aligned} -\varepsilon_\beta \nabla \langle p_\beta \rangle^\beta - \langle p_\beta \rangle^\beta \nabla \varepsilon_\beta + \varepsilon_\beta \rho_\beta \vec{g} + \varepsilon_\beta \mu_\beta \nabla^2 \langle \vec{v}_\beta \rangle^\beta \\ + \mu_\beta \left[2 (\nabla \varepsilon_\beta) \cdot \nabla \langle \vec{v}_\beta \rangle^\beta + \langle \vec{v}_\beta \rangle^\beta \nabla^2 \varepsilon_\beta \right] \\ + \frac{1}{V} \int_{A_{\beta\sigma}} \vec{n}_{\beta\sigma} \cdot \left(-p_\beta \bar{\bar{I}} + \mu_\beta \nabla \vec{v}_\beta \right) dA \\ + \frac{1}{V} \int_{A_{\beta\gamma}} \vec{n}_{\beta\gamma} \cdot \left(-p_\beta \bar{\bar{I}} + \mu_\beta \nabla \vec{v}_\beta \right) dA = 0 \end{aligned} \quad (2.36)$$

A fim de podermos obter uma forma fechada destas equações, unicamente em termos de grandezas médias, devemos introduzir as seguintes decomposições espaciais:

$$p_\beta = \langle p_\beta \rangle^\beta + \tilde{p}_\beta \quad (2.37)$$

$$\vec{v}_\beta = \langle \vec{v}_\beta \rangle^\beta + \tilde{\vec{v}}_\beta \quad (2.38)$$

onde \tilde{p}_β e \tilde{v}_β representam as flutuações destas grandezas com relação às suas médias intrínsecas.

Após substituição destas decomposições nos últimos dois termos integrais da Equação (2.36), temos:

$$\begin{aligned}
& -\varepsilon_\beta \nabla \langle p_\beta \rangle^\beta - \langle p_\beta \rangle^\beta \nabla \varepsilon_\beta + \varepsilon_\beta \rho_\beta \vec{g} + \varepsilon_\beta \mu_\beta \nabla^2 \langle \vec{v}_\beta \rangle^\beta \\
& + \mu_\beta \left[2 (\nabla \varepsilon_\beta) \cdot \nabla \langle \vec{v}_\beta \rangle^\beta + \langle \vec{v}_\beta \rangle^\beta \nabla^2 \varepsilon_\beta \right] \\
& + \left[\frac{1}{V} \left(\int_{A_{\beta\sigma}} \vec{n}_{\beta\sigma} dA + \int_{A_{\beta\gamma}} \vec{n}_{\beta\gamma} dA \right) \right] \cdot \left(-\langle p_\beta \rangle^\beta \bar{I} + \mu_\beta \nabla \langle \vec{v}_\beta \rangle^\beta \right) \\
& + \frac{1}{V} \int_{A_{\beta\sigma}} \vec{n}_{\beta\sigma} \cdot \left(-\tilde{p}_\beta \bar{I} + \mu_\beta \nabla \tilde{v}_\beta \right) dA \\
& + \frac{1}{V} \int_{A_{\beta\gamma}} \vec{n}_{\beta\gamma} \cdot \left(-\tilde{p}_\beta \bar{I} + \mu_\beta \nabla \tilde{v}_\beta \right) dA = 0
\end{aligned} \tag{2.39}$$

Do teorema da média volumétrica para $\psi_\beta = 1$, resulta em:

$$-\nabla \varepsilon_\beta = \int_{A_{\beta\sigma}} \vec{n}_{\beta\sigma} dA + \int_{A_{\beta\gamma}} \vec{n}_{\beta\gamma} dA \tag{2.40}$$

e este resultado permite que escrevamos:

$$\begin{aligned}
& -\varepsilon_\beta \nabla \langle p_\beta \rangle^\beta - \langle p_\beta \rangle^\beta \nabla \varepsilon_\beta + \varepsilon_\beta \rho_\beta \vec{g} + \varepsilon_\beta \mu_\beta \nabla^2 \langle \vec{v}_\beta \rangle^\beta \\
& + \mu_\beta \left[2 (\nabla \varepsilon_\beta) \cdot \nabla \langle \vec{v}_\beta \rangle^\beta + \langle \vec{v}_\beta \rangle^\beta \nabla^2 \varepsilon_\beta \right] \\
& - \nabla \varepsilon_\beta \cdot \left(-\langle p_\beta \rangle^\beta \bar{I} + \mu_\beta \nabla \langle \vec{v}_\beta \rangle^\beta \right) \\
& + \frac{1}{V} \int_{A_{\beta\sigma}} \vec{n}_{\beta\sigma} \cdot \left(-\tilde{p}_\beta \bar{I} + \mu_\beta \nabla \tilde{v}_\beta \right) dA
\end{aligned}$$

$$+\frac{1}{V} \int_{A_{\beta\gamma}} \vec{n}_{\beta\gamma} \cdot \left(-\tilde{p}_\beta \bar{I} + \mu_\beta \nabla \tilde{v}_\beta \right) dA = 0 \quad (2.41)$$

Feitas todas as simplificações chegamos à forma macroscópica da equação de Stokes para a fase β :

$$\begin{aligned} & -\nabla \langle p_\beta \rangle^\beta + \rho_\beta \vec{g} + \mu_\beta \nabla^2 \langle \vec{v}_\beta \rangle^\beta \\ & + \varepsilon_\beta^{-1} \mu_\beta \left[(\nabla \varepsilon_\beta) \cdot \nabla \langle \vec{v}_\beta \rangle^\beta + \langle \vec{v}_\beta \rangle^\beta \nabla^2 \varepsilon_\beta \right] \\ & + \frac{1}{V_\beta} \int_{A_{\beta\sigma}} \vec{n}_{\beta\sigma} \cdot \left(-\tilde{p}_\beta \bar{I} + \mu_\beta \nabla \tilde{v}_\beta \right) dA \\ & + \frac{1}{V_\beta} \int_{A_{\beta\gamma}} \vec{n}_{\beta\gamma} \cdot \left(-\tilde{p}_\beta \bar{I} + \mu_\beta \nabla \tilde{v}_\beta \right) dA = 0 \end{aligned} \quad (2.42)$$

Nesta equação, os termos envolvendo os gradientes de $\langle \vec{v}_\beta \rangle^\beta$ e ε_β são, algumas vezes, referidos como sendo os termos de correção de Brinkman (WHITAKER, 1994). Whitaker (1994) mostrou que estes termos podem ser negligenciados com relação aos termos integrais, exceto no caso no qual $1 - \varepsilon_\beta \ll 1$. Como esta restrição não apresenta interesse prático no caso de problemas envolvendo o escoamento bifásico em meios porosos (WHITAKER, 1994), a equação acima assume a forma simplificada **não-local**:

$$\begin{aligned} & -\nabla \langle p_\beta \rangle^\beta + \rho_\beta \vec{g} + \frac{1}{V_\beta} \int_{A_{\beta\sigma}} \vec{n}_{\beta\sigma} \cdot \left(-\tilde{p}_\beta \bar{I} + \mu_\beta \nabla \tilde{v}_\beta \right) dA \\ & + \frac{1}{V_\beta} \int_{A_{\beta\gamma}} \vec{n}_{\beta\gamma} \cdot \left(-\tilde{p}_\beta \bar{I} + \mu_\beta \nabla \tilde{v}_\beta \right) dA = 0 \end{aligned} \quad (2.43)$$

Esta simplificação é feita com base na estimativa da ordem de grandeza dos diferentes termos considerados:

$$\frac{1}{V_\beta} \int_{A_{\beta\sigma}} \vec{n}_{\beta\sigma} \cdot \left(-\tilde{p}_\beta \bar{I} + \mu_\beta \nabla \tilde{v}_\beta \right) dA = \mathcal{O} \left(\frac{\mu_\beta \langle \vec{v}_\beta \rangle^\beta}{\ell_\beta^2} \right) \quad (2.44)$$

$$\mu_\beta \nabla^2 \langle \vec{v}_\beta \rangle^\beta = \mathcal{O} \left(\frac{\mu_\beta \langle \vec{v}_\beta \rangle^\beta}{L_v^2} \right) \quad (2.45)$$

$$\varepsilon_\beta^{-1} \mu_\beta (\nabla \varepsilon_\beta) \cdot \nabla \langle \vec{v}_\beta \rangle^\beta = \mathcal{O} \left(\frac{\mu_\beta \langle \vec{v}_\beta \rangle^\beta}{L_\varepsilon L_v} \right) \quad (2.46)$$

$$\varepsilon_\beta^{-1} \mu_\beta \langle \vec{v}_\beta \rangle^\beta \nabla^2 \varepsilon_\beta = \mathcal{O} \left(\frac{\mu_\beta \langle \vec{v}_\beta \rangle^\beta}{L_\varepsilon^2} \right) \quad (2.47)$$

e na separação de escalas que implica em $\ell_\beta, \ell_\gamma \ll L$.

De modo análogo, obtemos uma equação **não-local** similar para a fase γ :

$$\begin{aligned} -\nabla \langle p_\gamma \rangle^\gamma + \rho_\gamma \vec{g} + \frac{1}{V_\gamma} \int_{A_{\gamma\sigma}} \vec{n}_{\gamma\sigma} \cdot \left(-\tilde{p}_\gamma \bar{I} + \mu_\gamma \nabla \tilde{v}_\gamma \right) dA \\ + \frac{1}{V_\gamma} \int_{A_{\gamma\beta}} \vec{n}_{\gamma\beta} \cdot \left(-\tilde{p}_\gamma \bar{I} + \mu_\gamma \nabla \tilde{v}_\gamma \right) dA = 0 \end{aligned} \quad (2.48)$$

A forma fechada destas equações será obtida mediante a proposição de representações para as flutuações espaciais de pressão e velocidade em termos de grandezas médias. Isto será feito a seguir, com a introdução do *Problema de Fechamento*.

2.2.1 O Problema de Fechamento

A fim de obtermos uma forma fechada para a equação macroscópica da fase β , precisamos desenvolver representações para as flutuações \tilde{p}_β e \tilde{v}_β . O nosso desenvolvimento terá como ponto de partida as formas microscópica e macroscópica da equação da continuidade

$$\nabla \cdot \vec{v}_\beta = 0 \quad (2.49)$$

e

$$\frac{\partial \varepsilon_\beta}{\partial t} + \nabla \cdot \langle \vec{v}_\beta \rangle = \frac{\partial \varepsilon_\beta}{\partial t} + \varepsilon_\beta \nabla \cdot \langle \vec{v}_\beta \rangle^\beta + \langle \vec{v}_\beta \rangle^\beta \cdot \nabla \varepsilon_\beta = 0 \quad (2.50)$$

onde a segunda equação pode ainda ser escrita como:

$$\nabla \cdot \langle \vec{v}_\beta \rangle^\beta = -\varepsilon_\beta^{-1} \left(\frac{\partial \varepsilon_\beta}{\partial t} + \langle \vec{v}_\beta \rangle^\beta \cdot \nabla \varepsilon_\beta \right) \quad (2.51)$$

Subtraindo as Equações (2.49) e (2.51) obtemos a equação da continuidade em termos da flutuação \tilde{v}_β :

$$\nabla \cdot \tilde{v}_\beta = \varepsilon_\beta^{-1} \left(\frac{\partial \varepsilon_\beta}{\partial t} + \langle \vec{v}_\beta \rangle^\beta \cdot \nabla \varepsilon_\beta \right) \quad (2.52)$$

onde o lado direito do sinal de igualdade representa um termo de fonte para esta equação. A análise da ordem de grandeza dos termos desta equação resulta em (WHITAKER, 1994):

$$\mathcal{O} \left(\frac{\tilde{v}_\beta}{\ell_\beta} \right) = \mathcal{O} \left(\frac{1}{t_\varepsilon} \right) + \mathcal{O} \left(\frac{\langle \vec{v}_\beta \rangle^\beta}{L_\varepsilon} \right) \quad (2.53)$$

onde t_ε define um tempo característico associado às variações temporais da porosidade. Da condição de não-deslizamento na interface sólida, podemos considerar que a flutuação \tilde{v}_β tenha a mesma ordem de grandeza de $\langle \vec{v}_\beta \rangle^\beta$, portanto:

$$\mathcal{O} \left(\frac{\langle \vec{v}_\beta \rangle^\beta}{\ell_\beta} \right) = \mathcal{O} \left(\frac{1}{t_\varepsilon} \right) + \mathcal{O} \left(\frac{\langle \vec{v}_\beta \rangle^\beta}{L_\varepsilon} \right) \quad (2.54)$$

Destas estimativas, vemos que o termo de fonte pode ser negligenciado, caso as seguintes duas restrições sejam verificadas:

$$\frac{\langle \vec{v}_\beta \rangle^\beta}{\ell_\beta} \gg \frac{1}{t_\varepsilon}, \quad \frac{\langle \vec{v}_\beta \rangle^\beta}{\ell_\beta} \gg \frac{\langle \vec{v}_\beta \rangle^\beta}{L_\varepsilon} \quad (2.55)$$

onde a segunda condição é sempre verificada devido à separação de escalas e da primeira condição, obtemos:

$$\frac{\langle \vec{v}_\beta \rangle^\beta t_\varepsilon}{\ell_\beta} \gg 1 \quad (2.56)$$

Assim, considerando que o tempo característico verifica esta restrição, a equação da continuidade em termos da flutuação pode ser escrita como:

$$\nabla \cdot \tilde{v}_\beta = 0 \quad (2.57)$$

e de modo similar obteríamos,

$$\nabla \cdot \tilde{\vec{v}}_\gamma = 0 \quad (2.58)$$

Por último, trataremos de obter uma equação de momentum para a flutuação espacial. Nosso ponto de partida será, mais uma vez, as versões microscópica e macroscópica da equação de Stokes:

$$\mu_\beta \nabla^2 \tilde{\vec{v}}_\beta - \nabla p_\beta + \rho_\beta \vec{g} = 0 \quad (2.59)$$

e

$$\begin{aligned} -\nabla \langle p_\beta \rangle^\beta + \rho_\beta \vec{g} + \frac{1}{V_\beta} \int_{A_{\beta\sigma}} \vec{n}_{\beta\sigma} \cdot \left(-\tilde{p}_\beta \bar{\bar{I}} + \mu_\beta \nabla \tilde{\vec{v}}_\beta \right) dA \\ + \frac{1}{V_\beta} \int_{A_{\beta\gamma}} \vec{n}_{\beta\gamma} \cdot \left(-\tilde{p}_\beta \bar{\bar{I}} + \mu_\beta \nabla \tilde{\vec{v}}_\beta \right) dA = 0 \end{aligned} \quad (2.60)$$

Após subtração da Equação (2.60) da Equação (2.59) e levando em consideração a decomposição espacial, obtemos:

$$\begin{aligned} -\nabla \tilde{p}_\beta + \mu_\beta \nabla^2 \tilde{\vec{v}}_\beta + \mu_\beta \nabla^2 \langle \tilde{\vec{v}}_\beta \rangle^\beta - \frac{1}{V_\beta} \int_{A_{\beta\sigma}} \vec{n}_{\beta\sigma} \cdot \left(-\tilde{p}_\beta \bar{\bar{I}} + \mu_\beta \nabla \tilde{\vec{v}}_\beta \right) dA \\ - \frac{1}{V_\beta} \int_{A_{\beta\gamma}} \vec{n}_{\beta\gamma} \cdot \left(-\tilde{p}_\beta \bar{\bar{I}} + \mu_\beta \nabla \tilde{\vec{v}}_\beta \right) dA = 0 \end{aligned} \quad (2.61)$$

e como sabemos que das estimativas de ordem de grandeza:

$$\mu_\beta \nabla^2 \tilde{\vec{v}}_\beta = \mathcal{O} \left(\frac{\mu_\beta \langle \tilde{\vec{v}}_\beta \rangle^\beta}{\ell_\beta^2} \right) \quad (2.62)$$

$$\mu_\beta \nabla^2 \langle \tilde{\vec{v}}_\beta \rangle^\beta = \mathcal{O} \left(\frac{\mu_\beta \langle \tilde{\vec{v}}_\beta \rangle^\beta}{L_v^2} \right) \quad (2.63)$$

a equação de momentum fica reduzida a

$$-\nabla \tilde{p}_\beta + \mu_\beta \nabla^2 \tilde{\vec{v}}_\beta - \frac{1}{V_\beta} \int_{A_{\beta\sigma}} \vec{n}_{\beta\sigma} \cdot \left(-\tilde{p}_\beta \bar{\bar{I}} + \mu_\beta \nabla \tilde{\vec{v}}_\beta \right) dA$$

$$-\frac{1}{V_\beta} \int_{A_{\beta\gamma}} \vec{n}_{\beta\gamma} \cdot \left(-\tilde{p}_\beta \bar{I} + \mu_\beta \nabla \tilde{v}_\beta \right) dA = 0 \quad (2.64)$$

Do mesmo modo, obtemos para a fase γ :

$$\begin{aligned} -\nabla \tilde{p}_\gamma + \mu_\gamma \nabla^2 \tilde{v}_\gamma - \frac{1}{V_\gamma} \int_{A_{\gamma\sigma}} \vec{n}_{\gamma\sigma} \cdot \left(-\tilde{p}_\gamma \bar{I} + \mu_\gamma \nabla \tilde{v}_\gamma \right) dA \\ - \frac{1}{V_\gamma} \int_{A_{\gamma\beta}} \vec{n}_{\gamma\beta} \cdot \left(-\tilde{p}_\gamma \bar{I} + \mu_\gamma \nabla \tilde{v}_\gamma \right) dA = 0 \end{aligned} \quad (2.65)$$

2.2.2 Condições de Contorno

A substituição das decomposições da pressão e da velocidade nas condições de contorno apresentadas, no início deste capítulo, permite-nos expressá-las na forma:

Interface - $A_{\beta\sigma}$

$$\tilde{v}_\beta = -\langle \vec{v}_\beta \rangle^\beta \quad (2.66)$$

Interface - $A_{\gamma\sigma}$

$$\tilde{v}_\gamma = -\langle \vec{v}_\gamma \rangle^\gamma \quad (2.67)$$

Interface - $A_{\beta\gamma}$

$$\bar{P} \tilde{v}_\beta = \bar{P} \tilde{v}_\gamma - \bar{P} \cdot \left(\langle \vec{v}_\beta \rangle^\beta - \langle \vec{v}_\gamma \rangle^\gamma \right) \quad (2.68)$$

$$-\vec{n}_{\beta\gamma} \tilde{p}_\beta = -\vec{n}_{\beta\gamma} \tilde{p}_\gamma + \vec{n}_{\beta\gamma} \left(\langle p_\beta \rangle^\beta - \langle p_\gamma \rangle^\gamma \right)$$

$$-\vec{n}_{\beta\gamma} \cdot \left[\mu_\beta \left(\nabla \tilde{v}_\beta + \nabla^T \tilde{v}_\beta \right) - \mu_\gamma \left(\nabla \tilde{v}_\gamma + \nabla^T \tilde{v}_\gamma \right) \right] + 2\sigma H \vec{n}_{\beta\gamma} \quad (2.69)$$

onde, nesta última condição de contorno, fizemos uso das estimativas prévias de ordem de grandeza para impormos as seguintes restrições (TORRES, 1987):

$$\mu_\beta \left(\nabla \tilde{v}_\beta + \nabla^T \tilde{v}_\beta \right) \gg \mu_\beta \left(\nabla \langle \vec{v}_\beta \rangle^\beta + \nabla^T \langle \vec{v}_\beta \rangle^\beta \right) \quad (2.70)$$

$$\mu_\gamma \left(\nabla \tilde{v}_\gamma + \nabla^T \tilde{v}_\gamma \right) \gg \mu_\gamma \left(\nabla \langle \vec{v}_\gamma \rangle^\gamma + \nabla^T \langle \vec{v}_\gamma \rangle^\gamma \right) \quad (2.71)$$

2.2.3 Pressão Capilar

Das condições de contorno para o problema em termos das flutuações, vemos que existem quatro termos de fonte não-homogêneos nestas equações: $\langle \vec{v}_\beta \rangle^\beta$, $\langle \vec{v}_\gamma \rangle^\gamma$, $\langle p_\beta \rangle^\beta - \langle p_\gamma \rangle^\gamma$ e $2\sigma H$. A presença destes termos de fonte acarretará numa representação complexa para as flutuações, a menos que o número de capilaridade, $Ca = \mu \langle \vec{v} \rangle / \sigma$, seja muito menor do que a unidade. A fim de mostrarmos estas simplificações vamos tomar o produto escalar da condição de contorno (2.69), que expressa o balanço interfacial de tensões, pela normal $\vec{n}_{\beta\gamma}$ e, em seguida, tomamos a média superficial deste resultado:

$$\begin{aligned} - \left\langle \langle p_\beta \rangle^\beta - \langle p_\gamma \rangle^\gamma \right\rangle_{\beta\gamma} &= 2\sigma \langle H \rangle_{\beta\gamma} + \langle \tilde{p}_\beta - \tilde{p}_\gamma \rangle_{\beta\gamma} \\ - \left\langle \vec{n}_{\beta\gamma} \cdot \left[\mu_\beta \left(\nabla \tilde{v}_\beta + \nabla^T \tilde{v}_\beta \right) - \mu_\gamma \left(\nabla \tilde{v}_\gamma + \nabla^T \tilde{v}_\gamma \right) \right] \cdot \vec{n}_{\beta\gamma} \right\rangle_{\beta\gamma} & \end{aligned} \quad (2.72)$$

onde $\langle \psi \rangle_{\beta\gamma} = \frac{1}{A_{\beta\gamma}} \int_{A_{\beta\gamma}} \psi dA$.

Devido à separação de escalas podemos considerar que as médias volumétricas das pressões são constantes com relação à integral de superfície. Portanto:

$$\begin{aligned} - \left(\langle p_\beta \rangle^\beta - \langle p_\gamma \rangle^\gamma \right) &= 2\sigma \langle H \rangle_{\beta\gamma} + \langle \tilde{p}_\beta - \tilde{p}_\gamma \rangle_{\beta\gamma} \\ - \left\langle \vec{n}_{\beta\gamma} \cdot \left[\mu_\beta \left(\nabla \tilde{v}_\beta + \nabla^T \tilde{v}_\beta \right) - \mu_\gamma \left(\nabla \tilde{v}_\gamma + \nabla^T \tilde{v}_\gamma \right) \right] \cdot \vec{n}_{\beta\gamma} \right\rangle_{\beta\gamma} & \end{aligned} \quad (2.73)$$

Da equação para a fase β em termos da flutuação de pressão, podemos obter uma estimativa da ordem de grandeza da flutuação de pressão:

$$\tilde{p}_\beta = \mathcal{O} \left(\frac{\mu_\beta \tilde{v}_\beta}{\ell_\beta} \right) \quad (2.74)$$

e, de modo semelhante, obteríamos para a fase γ :

$$\tilde{p}_\gamma = \mathcal{O} \left(\frac{\mu_\gamma \tilde{v}_\gamma}{\ell_\gamma} \right) \quad (2.75)$$

Estes resultados permitem que escrevamos:

$$- \left(\langle p_\beta \rangle^\beta - \langle p_\gamma \rangle^\gamma \right) = 2\sigma \langle H \rangle_{\beta\gamma} + \mathcal{O} \left(\left\langle \frac{\mu \nabla \tilde{v}}{\ell} \right\rangle_{\beta\gamma} \right) \quad (2.76)$$

onde $\mu \nabla \tilde{v}$ representa o maior valor levando em consideração ambas as fases. Vamos tomar também $\mu \langle \tilde{v} \rangle$ como sendo o maior valor entre $\mu_\beta \langle \tilde{v}_\beta \rangle^\beta$ e $\mu_\gamma \langle \tilde{v}_\gamma \rangle^\gamma$, de modo que o número de capilaridade seja definido como:

$$Ca = \frac{\mu \langle \tilde{v} \rangle}{\sigma} \quad (2.77)$$

e, finalmente,

$$\left(\langle p_\beta \rangle^\beta - \langle p_\gamma \rangle^\gamma \right) = 2\sigma \langle H \rangle_{\beta\gamma} \left[1 + \mathcal{O} \left(\frac{\left\langle \frac{\mu \nabla \tilde{v}}{\ell} \right\rangle_{\beta\gamma}}{\mu \langle \tilde{v} \rangle \langle H \rangle_{\beta\gamma}} \right) Ca \right] \quad (2.78)$$

Vamos impor, agora, duas restrições importantes:

$$\langle H \rangle_{\beta\gamma} = \mathcal{O} \left(\frac{1}{\ell} \right) \quad \text{e} \quad Ca \ll 1 \quad (2.79)$$

onde ℓ o diâmetro médio do poro do meio poroso. A primeira restrição implica no fato de que ou a fase β ou a fase γ molham a fase sólida σ . Como o comprimento de escala associado ao $\nabla \tilde{v}$ é da ordem de ℓ e desde que a média superficial de \tilde{v} deve ser pequena quando comparada com a flutuação propriamente dita (WHITAKER, 1994), temos que:

$$\left(\frac{\left\langle \frac{\mu \nabla \tilde{v}}{\ell} \right\rangle_{\beta\gamma}}{\mu \langle \tilde{v} \rangle \langle H \rangle_{\beta\gamma}} \right) = \mathcal{O} \left(\frac{\frac{\mu \langle \tilde{v} \rangle_{\beta\gamma}}{\ell}}{\frac{\mu \langle \tilde{v} \rangle}{\ell}} \right) \ll 1 \quad (2.80)$$

Assim sendo, com base nestas estimativas obtemos o seguinte resultado:

$$p_c = 2\sigma \langle H \rangle_{\beta\gamma} = \langle p_\gamma \rangle^\gamma - \langle p_\beta \rangle^\beta \quad (2.81)$$

Como os efeitos gravitacionais não estão presentes no problema de fechamento, podemos considerar que $\langle H \rangle_{\beta\gamma}$ depende somente do campo de velocidades e vamos expressar esta variação na forma (WHITAKER, 1994):

$$\langle p_\gamma \rangle^\gamma - \langle p_\beta \rangle^\beta = 2\sigma \left(\vec{h}_\beta \cdot \langle \vec{v}_\beta \rangle^\beta + \vec{h}_\gamma \cdot \langle \vec{v}_\gamma \rangle^\gamma \right) \quad (2.82)$$

Assim sendo, a equação de contorno que exprime o balanço superficial de tensões pode ser reescrita como:

$$p_c = \langle p_\gamma \rangle^\gamma - \langle p_\beta \rangle^\beta = 2\sigma \left(\vec{h}_\beta \cdot \langle \vec{v}_\beta \rangle^\beta + \vec{h}_\gamma \cdot \langle \vec{v}_\gamma \rangle^\gamma \right) \quad (2.83)$$

onde p_c é a pressão capilar, que expressa a diferença de pressão entre as duas fases fluidas.

Portanto, o problema de fechamento representa um conjunto de equações lineares que contém termos de fonte em $\langle \vec{v}_\beta \rangle^\beta$ e $\langle \vec{v}_\gamma \rangle^\gamma$. Assim, Whitaker (1986) mostrou que este problema admite uma representação única, para as flutuações de velocidade e pressão, que é dada por:

$$\tilde{\vec{v}}_\beta = \overline{\overline{A}}_{\beta\beta} \cdot \langle \vec{v}_\beta \rangle^\beta + \overline{\overline{A}}_{\beta\gamma} \cdot \langle \vec{v}_\gamma \rangle^\gamma \quad (2.84)$$

$$\tilde{\vec{v}}_\gamma = \overline{\overline{A}}_{\gamma\beta} \cdot \langle \vec{v}_\beta \rangle^\beta + \overline{\overline{A}}_{\gamma\gamma} \cdot \langle \vec{v}_\gamma \rangle^\gamma \quad (2.85)$$

$$\tilde{p}_\beta = \mu_\beta \left(\overline{\overline{a}}_{\beta\beta} \cdot \langle \vec{v}_\beta \rangle^\beta + \overline{\overline{a}}_{\beta\gamma} \cdot \langle \vec{v}_\gamma \rangle^\gamma \right) \quad (2.86)$$

$$\tilde{p}_\gamma = \mu_\gamma \left(\overline{\overline{a}}_{\gamma\beta} \cdot \langle \vec{v}_\beta \rangle^\beta + \overline{\overline{a}}_{\gamma\gamma} \cdot \langle \vec{v}_\gamma \rangle^\gamma \right) \quad (2.87)$$

Substituindo estas representações nas equações que definem os **problemas de valor de contorno em termos das flutuações**, Equações (2.57), (2.58), (2.64) e (2.65), obtemos dois problemas de valor de contorno em termos das variáveis de fechamento. A título de exemplo, vamos considerar o caso da fase β :

$$\left(\nabla \cdot \bar{\bar{A}}_{\beta\beta}\right) \cdot \langle \vec{v}_\beta \rangle^\beta + \left(\nabla \cdot \bar{\bar{A}}_{\beta\gamma}\right) \cdot \langle \vec{v}_\gamma \rangle^\gamma = 0 \quad (2.88)$$

e

$$\begin{aligned} & \left[-\nabla \bar{\bar{a}}_{\beta\beta} + \nabla^2 \bar{\bar{A}}_{\beta\beta} + \frac{1}{V_\beta} \int_{A_{\beta\sigma}} \bar{\bar{n}}_{\beta\sigma} \cdot \left(-\bar{\bar{a}}_{\beta\beta} \otimes \bar{\bar{I}} + \nabla \bar{\bar{A}}_{\beta\beta} \right) dA \right. \\ & \quad \left. + \frac{1}{V_\beta} \int_{A_{\beta\gamma}} \bar{\bar{n}}_{\beta\gamma} \cdot \left(-\bar{\bar{a}}_{\beta\beta} \otimes \bar{\bar{I}} + \nabla \bar{\bar{A}}_{\beta\beta} \right) dA \right] \cdot \langle \vec{v}_\beta \rangle^\beta \\ & + \left[-\nabla \bar{\bar{a}}_{\beta\gamma} + \nabla^2 \bar{\bar{A}}_{\beta\gamma} + \frac{1}{V_\beta} \int_{A_{\beta\sigma}} \bar{\bar{n}}_{\beta\sigma} \cdot \left(-\bar{\bar{a}}_{\beta\gamma} \otimes \bar{\bar{I}} + \nabla \bar{\bar{A}}_{\beta\gamma} \right) dA \right. \\ & \quad \left. + \frac{1}{V_\beta} \int_{A_{\beta\gamma}} \bar{\bar{n}}_{\beta\gamma} \cdot \left(-\bar{\bar{a}}_{\beta\gamma} \otimes \bar{\bar{I}} + \nabla \bar{\bar{A}}_{\beta\gamma} \right) dA \right] \cdot \langle \vec{v}_\gamma \rangle^\gamma = 0 \end{aligned} \quad (2.89)$$

Na obtenção destes resultados, levamos em consideração o fato de que os termos $\langle \vec{v}_\beta \rangle^\beta$ e $\langle \vec{v}_\gamma \rangle^\gamma$ são constantes no interior do VER e que os operadores diferenciais se aplicam às variáveis que sofrem variações na pequena escala ℓ .

Aplicando este mesmo raciocínio às condições de contorno, obtemos:

Interface - $A_{\beta\sigma}$

$$\left(\bar{\bar{A}}_{\beta\beta} + \bar{\bar{I}} \right) \cdot \langle \vec{v}_\beta \rangle^\beta + \bar{\bar{A}}_{\beta\gamma} \cdot \langle \vec{v}_\gamma \rangle^\gamma = \vec{0} \quad (2.90)$$

Interface - $A_{\gamma\sigma}$

$$\bar{\bar{A}}_{\gamma\beta} \cdot \langle \vec{v}_\beta \rangle^\beta + \left(\bar{\bar{A}}_{\gamma\gamma} + \bar{\bar{I}} \right) \cdot \langle \vec{v}_\gamma \rangle^\gamma = \vec{0} \quad (2.91)$$

Interface - $A_{\beta\gamma}$

$$\left(\bar{\bar{A}}_{\beta\beta} - \bar{\bar{A}}_{\gamma\beta} + \bar{\bar{I}} \right) \cdot \langle \vec{v}_\beta \rangle^\beta + \left(\bar{\bar{A}}_{\beta\gamma} - \bar{\bar{A}}_{\gamma\gamma} - \bar{\bar{I}} \right) \cdot \langle \vec{v}_\gamma \rangle^\gamma = \vec{0} \quad (2.92)$$

$$p_c = \langle p_\gamma \rangle^\gamma - \langle p_\beta \rangle^\beta \quad (2.93)$$

Uma vez especificadas as soluções dos problemas de fechamento e as definições dos tensores de permeabilidade e arrasto viscoso:

$$\begin{aligned}
-\varepsilon_\beta \overline{\overline{K}}_\beta^{-1} &= \frac{1}{V_\beta} \int_{A_{\beta\sigma}} \vec{n}_{\beta\sigma} \cdot \left(-\vec{a}_{\beta\beta} \otimes \overline{\overline{I}} + \nabla \overline{\overline{A}}_{\beta\beta} \right) dA \\
&+ \frac{1}{V_\beta} \int_{A_{\beta\gamma}} \vec{n}_{\beta\gamma} \cdot \left(-\vec{a}_{\beta\beta} \otimes \overline{\overline{I}} + \nabla \overline{\overline{A}}_{\beta\beta} \right) dA \\
-\varepsilon_\beta \overline{\overline{K}}_\gamma^{-1} \cdot \overline{\overline{K}}_{\gamma\beta} &= \frac{1}{V_\gamma} \int_{A_{\gamma\sigma}} \vec{n}_{\gamma\sigma} \cdot \left(-\vec{a}_{\gamma\beta} \otimes \overline{\overline{I}} + \nabla \overline{\overline{A}}_{\gamma\beta} \right) dA \\
&+ \frac{1}{V_\gamma} \int_{A_{\gamma\beta}} \vec{n}_{\gamma\beta} \cdot \left(-\vec{a}_{\gamma\beta} \otimes \overline{\overline{I}} + \nabla \overline{\overline{A}}_{\gamma\beta} \right) dA
\end{aligned} \tag{2.94}$$

e

$$\begin{aligned}
-\varepsilon_\gamma \overline{\overline{K}}_\beta^{-1} \cdot \overline{\overline{K}}_{\beta\gamma} &= \frac{1}{V_\beta} \int_{A_{\beta\sigma}} \vec{n}_{\beta\sigma} \cdot \left(-\vec{a}_{\beta\gamma} \otimes \overline{\overline{I}} + \nabla \overline{\overline{A}}_{\beta\gamma} \right) dA \\
&+ \frac{1}{V_\beta} \int_{A_{\beta\gamma}} \vec{n}_{\beta\gamma} \cdot \left(-\vec{a}_{\beta\gamma} \otimes \overline{\overline{I}} + \nabla \overline{\overline{A}}_{\beta\gamma} \right) dA \\
-\varepsilon_\gamma \overline{\overline{K}}_\gamma^{-1} &= \frac{1}{V_\gamma} \int_{A_{\gamma\sigma}} \vec{n}_{\gamma\sigma} \cdot \left(-\vec{a}_{\gamma\gamma} \otimes \overline{\overline{I}} + \nabla \overline{\overline{A}}_{\gamma\gamma} \right) dA \\
&+ \frac{1}{V_\gamma} \int_{A_{\gamma\beta}} \vec{n}_{\gamma\beta} \cdot \left(-\vec{a}_{\gamma\gamma} \otimes \overline{\overline{I}} + \nabla \overline{\overline{A}}_{\gamma\gamma} \right) dA
\end{aligned} \tag{2.95}$$

podemos obter a forma final das equações macroscópicas, em termos das variáveis médias, após substituição destes resultados nas **formas não-local** das equações de Stokes, Equações (2.43) e (2.48),

$$0 = -\nabla \langle p_\beta \rangle^\beta + \rho_\beta \vec{g} - \mu_\beta \overline{\overline{K}}_\beta^{-1} \cdot \varepsilon_\beta \langle \vec{v}_\beta \rangle^\beta + \mu_\beta \overline{\overline{K}}_\beta^{-1} \cdot \overline{\overline{K}}_{\beta\gamma} \cdot \varepsilon_\gamma \langle \vec{v}_\gamma \rangle^\gamma \tag{2.96}$$

$$0 = -\nabla \langle p_\gamma \rangle^\gamma + \rho_\gamma \vec{g} - \mu_\gamma \overline{\overline{K}}_\gamma^{-1} \cdot \varepsilon_\gamma \langle \vec{v}_\gamma \rangle^\gamma + \mu_\gamma \overline{\overline{K}}_\gamma^{-1} \cdot \overline{\overline{K}}_{\gamma\beta} \cdot \varepsilon_\beta \langle \vec{v}_\beta \rangle^\beta \tag{2.97}$$

Portanto,

$$\langle \vec{v}_\beta \rangle = -\frac{\overline{\overline{K}}_\beta}{\mu_\beta} \cdot (\nabla \langle p_\beta \rangle^\beta - \rho_\beta \vec{g}) + \overline{\overline{K}}_{\beta\gamma} \cdot \langle \vec{v}_\gamma \rangle \quad (2.98)$$

$$\langle \vec{v}_\gamma \rangle = -\frac{\overline{\overline{K}}_\gamma}{\mu_\gamma} \cdot (\nabla \langle p_\gamma \rangle^\gamma - \rho_\gamma \vec{g}) + \overline{\overline{K}}_{\gamma\beta} \cdot \langle \vec{v}_\beta \rangle \quad (2.99)$$

Como conclusão, vemos que o processo de tomada da média volumétrica das equações de balanço e a proposição das soluções dos problemas de fechamento permitiram a obtenção das equações de balanço macroscópicas que governam os processos de transporte de massa e quantidade de movimento na escala de Darcy:

Fase - β

$$\frac{\partial}{\partial t}(\varepsilon S_\beta) + \nabla \cdot \langle \vec{v}_\beta \rangle = 0 \quad (2.100)$$

$$\langle \vec{v}_\beta \rangle = -\frac{\overline{\overline{K}}_\beta}{\mu_\beta} \cdot (\nabla \langle p_\beta \rangle^\beta - \rho_\beta \vec{g}) + \overline{\overline{K}}_{\beta\gamma} \cdot \langle \vec{v}_\gamma \rangle \quad (2.101)$$

Fase - γ

$$\frac{\partial}{\partial t}(\varepsilon S_\gamma) + \nabla \cdot \langle \vec{v}_\gamma \rangle = 0 \quad (2.102)$$

$$\langle \vec{v}_\gamma \rangle = -\frac{\overline{\overline{K}}_\gamma}{\mu_\gamma} \cdot (\nabla \langle p_\gamma \rangle^\gamma - \rho_\gamma \vec{g}) + \overline{\overline{K}}_{\gamma\beta} \cdot \langle \vec{v}_\beta \rangle \quad (2.103)$$

onde os termos em $\overline{\overline{K}}_{\beta\gamma}$ e $\overline{\overline{K}}_{\gamma\beta}$ representam a influência do escoamento das fases γ e β no escoamento das fases β e γ , respectivamente.

A fim de simplificarmos a notação, daqui por diante empregaremos \vec{v}_α ao invés de $\langle \vec{v}_\alpha \rangle^\alpha$, e p_α no lugar de $\langle p_\alpha \rangle^\alpha$. Empregaremos também $\beta = w$ (água) e $\gamma = o$ (óleo).

2.3 As Equações Governantes

Na Seção 2.2 derivamos em detalhes as equações da continuidade e a lei de Darcy para o escoamento bifásico. Nesta seção, faremos algumas considerações que irão alterar

a forma final das equações que iremos efetivamente empregar na resolução numérica. Ao invés de considerarmos um campo de permeabilidades tensorial $\overline{\overline{K}}$, empregaremos um campo escalar $K(\vec{x})$. Introduziremos também o conceito de permeabilidade relativa no lugar dos termos de arrasto viscoso, $\overline{\overline{K}}_{\beta\gamma}$ e $\overline{\overline{K}}_{\gamma\beta}$, para levarmos em consideração o fato de que uma fase interfere no escoamento da outra fase. A permeabilidade relativa de cada fase, $k_{r\alpha}(S_\alpha)$, é definida pela relação (PEACEMAN, 1977):

$$k_{r\alpha} = k_{r\alpha}(S_\alpha) \quad (\alpha = w, o) \quad (2.104)$$

Portanto, podemos reescrever a lei de Darcy para o problema bifásico na seguinte forma (PEACEMAN, 1977):

$$\vec{v}_\alpha = -K(\vec{x}) \frac{k_{r\alpha}(S_\alpha)}{\mu_\alpha} (\nabla p_\alpha - \rho_\alpha \vec{g}) \quad (2.105)$$

onde $K(\vec{x})$ é um campo de permeabilidades escalar bidimensional, \vec{g} é o vetor aceleração da gravidade, e as seguintes definições para as mobilidades relativas λ_α (ou funções fracionárias de fluxo) de cada fase α e para a mobilidade total λ são empregadas:

$$\lambda_\alpha = f_\alpha(S_\alpha) = \frac{k_{r\alpha}(S_\alpha)}{\mu_\alpha \lambda(S_\alpha)} \quad (2.106)$$

e

$$\lambda(S_\alpha) = \frac{k_{ro}(S_\alpha)}{\mu_o} + \frac{k_{rw}(S_\alpha)}{\mu_w} \quad (2.107)$$

sendo que devemos fornecer as funções de permeabilidade relativa associadas ao escoamento bifásico que estamos interessados em descrever.

Assim, a lei de Darcy é reescrita da seguinte forma:

$$\vec{v}_\alpha = -K(\mathbf{x}) \lambda \lambda_\alpha (\nabla p_\alpha - \rho_\alpha \vec{g}) \quad (2.108)$$

Substituindo a Equação (2.108) na equação de conservação de massa da fase α , ela pode ser escrita como:

$$\varepsilon \frac{\partial S_\alpha}{\partial t} + \nabla \cdot [-K(\mathbf{x}) \lambda \lambda_\alpha (\nabla p_\alpha - \rho_\alpha \vec{g})] = 0 \quad (2.109)$$

onde consideramos que a porosidade ε não depende do tempo.

2.3.1 Formulação do Problema de Pressão-Velocidade

A natureza matemática da Equação (2.109) fica melhor entendida se realizarmos uma mudança de variáveis, mediante a introdução da pressão global (CHAVENT; JAFFRÉ, 1986) dada por:

$$p = \frac{1}{2} \left\{ p_o + p_w + \int_0^{p_c} [\lambda_o(p_c^{-1}(\zeta)) - \lambda_w(p_c^{-1}(\zeta))] d\zeta \right\} \quad (2.110)$$

O nosso intuito é o de reescrevermos a equação da velocidade em termos da pressão global. Dos resultados obtidos anteriormente, podemos escrever, sem perda de generalidade, a pressão capilar da seguinte forma:

$$p_c(S_w) = p_o(S_w) - p_w(S_w) \quad (2.111)$$

Primeiramente, vamos relembrar a aplicação do *Teorema Fundamental do Cálculo* em funções com a seguinte forma funcional,

$$g(x) = \int_{\gamma(x)}^{\delta(x)} h(x, y) dy \quad (2.112)$$

Segue, então, que

$$\frac{dg(x)}{dx} = \int_{\gamma(x)}^{\delta(x)} \frac{\partial h(x, y)}{\partial x} dy + \delta'(x)h(x, \delta(x)) - \gamma'(x)h(x, \gamma(x)) \quad (2.113)$$

Estamos assumindo que o integrando é suficientemente suave de modo que a troca de operadores faça sentido. Aplicando o operador gradiente na Equação (2.110), temos que:

$$\nabla p(S_w) = \frac{1}{2} [\nabla p_o(S_w) + \nabla p_w(S_w)] + \frac{1}{2} \nabla p_c(S_w) [\lambda_o - \lambda_w] \quad (2.114)$$

A partir das Equações (2.111) e (2.114) e observando que $\lambda_o + \lambda_w = 1$, podemos ainda derivar as seguintes relações entre a pressão total e as pressões individuais das fases o e w :

$$\nabla p(S_w) = \lambda_o \nabla p_o(S_w) + \lambda_w \nabla p_w(S_w) \quad (2.115)$$

e

$$\nabla p(S_w) = \nabla p_w(S_w) + \lambda_o \nabla p_c(S_w) \quad (2.116)$$

Somando as leis de conservação (2.109) para as fases o e w e levando em conta a hipótese de que o meio poroso está completamente saturado, obtemos:

$$-\nabla \cdot \{K(\mathbf{x})\lambda[\lambda_o \nabla p_o(S_w) + \lambda_w \nabla p_w(S_w) - (\lambda_o \rho_o + \lambda_w \rho_w)\vec{g}]\} = 0 \quad (2.117)$$

Devemos lembrar que a porosidade ε é assumida ser uma função somente da posição em todo o reservatório.

Substituindo a Equação (2.115) na Equação (2.117), obtemos:

$$-\nabla \cdot \{K(\mathbf{x})\lambda[\nabla p(S_w) - (\lambda_o \rho_o + \lambda_w \rho_w)\vec{g}]\} = 0 \quad (2.118)$$

Definamos agora a velocidade total $\vec{u} = \vec{v}_o + \vec{v}_w$

$$\vec{u} \equiv -K(\mathbf{x})\lambda[\nabla p(S_w) - (\lambda_o \rho_o + \lambda_w \rho_w)\vec{g}] \quad (2.119)$$

de modo que podemos reescrever a Equação (2.118) em termos da velocidade total:

$$\nabla \cdot \vec{u} = 0 \quad (2.120)$$

Note que essa última equação reflete a hipótese de incompressibilidade dos fluidos.

Portanto, as Equações (2.119) e (2.120) definem o problema para a pressão-velocidade em termos da pressão global. De fato, essas equações devem ser suplementadas por uma condição de contorno de modo que o problema seja matematicamente bem posto.

2.3.2 Reformulação da Equação de Transporte de Massa

Vamos reescrever, agora, a equação de conservação de massa em função da saturação da fase água levando em conta a velocidade total (2.119), que está expressa em termos da pressão global.

Combinando as Equações (2.109) (para $\alpha = w$) e (2.116) podemos reescrever a equação de conservação de massa para a fase w como:

$$\varepsilon \frac{\partial S_w}{\partial t} + \nabla \cdot [-K(\mathbf{x})\lambda\lambda_w (\nabla p(S_w) - \lambda_o \nabla p_c(S_w) - \rho_w \vec{g})] = 0 \quad (2.121)$$

Podemos ainda reescrever a Equação (2.121) utilizando a definição da velocidade total (2.119) na seguinte forma:

$$\varepsilon \frac{\partial S_w}{\partial t} + \nabla \cdot \{\lambda_w [\vec{u} + K\lambda\lambda_o(\rho_w - \rho_o)\vec{g}]\} = \nabla \cdot \vec{d} \quad (2.122)$$

onde:

$$\vec{d} = d(x, S_w)\nabla S_w \quad (2.123)$$

e

$$d(x, S_w) = -\lambda\lambda_w\lambda_o p'_c K \quad (2.124)$$

sendo que:

$$p'_c = \frac{dp_c}{dS_w} \quad (2.125)$$

Neste trabalho vamos considerar que a pressão capilar pode ser expressa como (DOUGLAS; PEREIRA; YEH, 1997):

$$p_c(S_w) = \eta \left\{ \frac{1}{(S_w - S_{rw})^2} - \frac{S_{ro}^2}{(1 - S_w)^2 [(1 - S_{ro}) - S_{rw}]^2} \right\} \quad (2.126)$$

Então,

$$p'_c(S_w) = -\eta \left\{ \frac{2}{(S_w - S_{rw})^3} + \frac{S_{ro}^2}{(1 - S_w)^3 [(1 - S_{ro}) - S_{rw}]^2} \right\} \quad (2.127)$$

onde η é o coeficiente para a função de pressão capilar, S_{ro} é a saturação residual do óleo e S_{rw} a saturação residual da água.

A Equação (2.122) deve ser suplementada por condições iniciais e de contorno de modo que o problema seja matematicamente bem posto.

3 APROXIMAÇÃO NUMÉRICA

Da literatura sabemos que esquemas de aproximação de primeira ordem, como por exemplo o *upwind*, apresentam, em geral, forte difusão numérica. Portanto, devemos procurar representações de mais alta ordem para os termos advectivos. Uma primeira alternativa seria a aproximação por diferenças centradas, empregada com sucesso na discretização dos termos difusivos. Entretanto, esta aproximação pode apresentar soluções oscilatórias para valores do número de Reynolds (ou Péclet) de célula superior a 2 para problemas lineares. Uma alternativa à aproximação por diferenças centradas poderia ser, por exemplo, o método de *upwind* de segunda ordem. Esta aproximação introduz menos difusão numérica que o *upwind* de primeira ordem, mas pode apresentar soluções oscilatórias.

As aproximações mencionadas acima, dependem linearmente das propriedades adjacentes ao volume de controle considerado. Entretanto, Godunov (1959) mostrou que nenhuma função de interpolação linear de ordem maior do que a unidade é monotônica. Neste caso, na ausência de termos de fonte, não podemos garantir que a solução numérica estacionária de uma equação do tipo advecção-difusão não desenvolva oscilações. A fim de superar esta dificuldade, foram desenvolvidas funções de interpolação não-lineares que utilizam, em geral, *limitadores de fluxo* (DARWISH; MOUKALLED, 2003). Neste trabalho, iremos implementar uma aproximação de segunda ordem para os termos advectivos em conjunto com limitadores de fluxo, a fim de tentarmos evitar o surgimento de oscilações na solução numérica.

Neste capítulo, apresentaremos as aproximações numéricas das equações diferenciais parciais parabólica, associada ao problema do transporte de massa do escoamento água-óleo, e elíptica, associada ao problema de velocidade-pressão. Procuramos desenvolver uma formulação numérica para o caso não-linear, que vem a ser a aplicação do método dos volumes finitos seguindo a mesma idéia básica da metodologia utilizada por Patankar (1980) e Versteeg e Malalasekera (1995).

3.1 O Método dos Volumes Finitos

De uma maneira geral, a equação não-linear que governa o transporte de um escalar em um escoamento bifásico transiente, incompressível, pode ser escrita na forma:

$$\frac{\partial}{\partial t}(\varphi) + \nabla \cdot [\vec{j}(\varphi)] = \nabla \cdot [\Gamma(\varphi)\nabla\varphi] + S_\varphi \quad (3.1)$$

acrescida das condições de contorno na fronteira do domínio e inicial apropriadas. Nesta equação, φ é a variável dependente, \vec{j} o vetor de fluxo advectivo, Γ o coeficiente de difusão para o transporte de φ , S_φ o termo de fonte de φ e t o tempo.

Esta equação de balanço, com as suas condições de contorno e inicial, deve ser resolvida após ter sido discretizada adequadamente. Utilizaremos, aqui, o método dos volumes finitos (PATANKAR, 1980; VERSTEEG; MALALASEKERA, 1995) com esta finalidade. A característica mais atrativa desta formulação é a de que a solução obtida deve verificar a *integral da conservação* de todas as quantidades (massa e momentum) em qualquer grupo de volumes de controle e, obviamente, sobre todo o domínio de resolução. Esta característica existe para qualquer número de volumes de controle e não somente no caso onde este número torna-se elevado.

O domínio de resolução é constituído de vários volumes de controle. Os valores das variáveis dependentes φ são determinados nos nós que encontram-se no centro de cada volume de controle, enquanto que as componentes do vetor de fluxo são determinadas nas faces do volume de controle. Os volumes de controle que se encontram nos limites do domínio têm as suas faces coincidentes com a fronteira e possuem, portanto, um volume nulo. Na Figura 3.1 é representado de forma esquemática o volume de controle. Nesta figura, as letras maiúsculas (P , W , E , S e N) indicam os nós e as minúsculas as faces do volume de controle (w , e , s e n).

A fim de que possamos escolher o tipo do esquema de integração no tempo, vamos reescrever a equação de balanço na seguinte forma:

$$\frac{\partial \varphi}{\partial t} = \nabla \cdot \left(-\vec{j} + \Gamma \nabla \varphi \right) + S_\varphi = L\varphi + S_\varphi \quad (3.2)$$

Após termos procedido à discretização no espaço, obtemos:

$$\frac{\partial \phi}{\partial t} = L_a \phi + \bar{S} \quad (3.3)$$

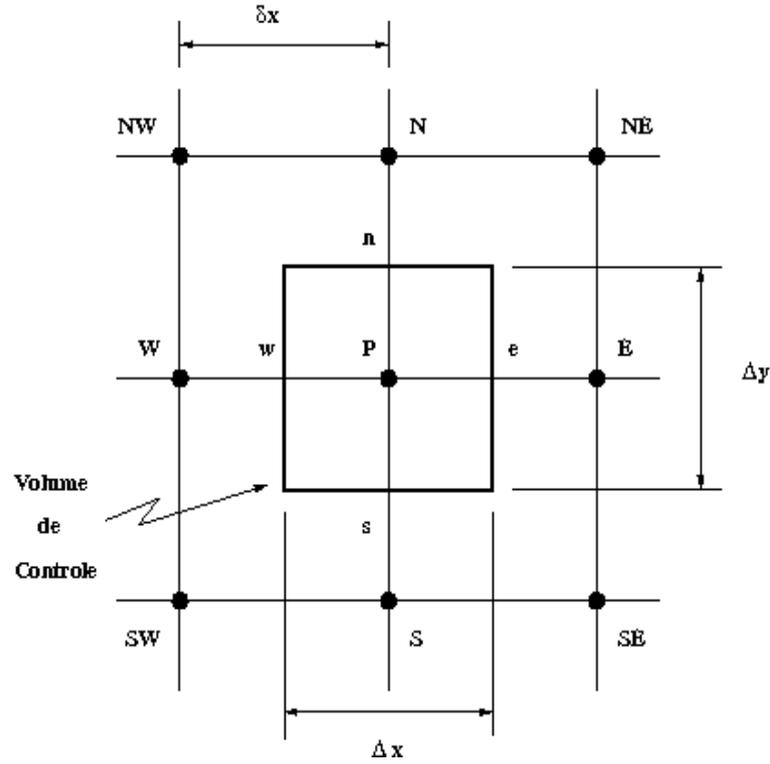


Figura 3.1: Volume de controle.

onde L_a é um operador algébrico proveniente da discretização espacial, ϕ é o valor numérico da variável dependente e \bar{S} é o valor médio do termo de fonte. Procedendo à integração no tempo, escolhendo um esquema a três níveis de tempo, obtemos

$$(1 + \gamma) [(\phi_{ij})^{m+1} - (\phi_{ij})^m] - \gamma [(\phi_{ij})^m - (\phi_{ij})^{m-1}] = \int_t^{t+\Delta t} (L_a \phi + \bar{S}) dt \quad (3.4)$$

onde a integral será avaliada por um esquema de integração do tipo trapezoidal:

$$\int_t^{t+\Delta t} (L_a \phi + \bar{S}) dt = [\beta (L_a \phi + \bar{S})^{m+1} + (1 - \beta) (L_a \phi + \bar{S})^m] \Delta t \quad (3.5)$$

De acordo com a escolha dos parâmetros γ e β , podemos recuperar diferentes esquemas de discretização no tempo: totalmente explícito ($\gamma = 0$ e $\beta = 0$); Crank-Nicolson ($\gamma = 0$ e $\beta = 0,5$); totalmente implícito ($\gamma = 0$ e $\beta = 1$) e totalmente implícito a três níveis de tempo ($\gamma = 0,5$ e $\beta = 1$).

Integrando, em seguida, esta equação sobre um volume de controle

$$\begin{aligned}
& \int_V \left[(1 + \gamma) \frac{(\phi_{ij})^{m+1} - (\phi_{ij})^m}{\Delta t} - \gamma \frac{(\phi_{ij})^m - (\phi_{ij})^{m-1}}{\Delta t} \right] dV \\
&= \beta \left\{ \int_V \left[\nabla \cdot \left(-\vec{j} + \Gamma \nabla \varphi \right) + S_\varphi \right] dV \right\}^{m+1} \\
&+ (1 - \beta) \left\{ \int_V \left[\nabla \cdot \left(-\vec{j} + \Gamma \nabla \varphi \right) + S_\varphi \right] dV \right\}^m
\end{aligned} \tag{3.6}$$

obtemos,

$$\begin{aligned}
& (1 + \gamma) \left[\frac{\phi_P|_m^{m+1}}{\Delta t} \right] \Delta x \Delta y - \gamma \left[\frac{\phi_P|_{m-1}^m}{\Delta t} \right] \Delta x \Delta y \\
&= \beta \left[\left(f - \Gamma \frac{\partial \phi}{\partial x} \right)_w - \left(f - \Gamma \frac{\partial \phi}{\partial x} \right)_e \right]^{m+1} \Delta y \\
&+ \beta \left[\left(g - \Gamma \frac{\partial \phi}{\partial y} \right)_s - \left(g - \Gamma \frac{\partial \phi}{\partial y} \right)_n \right]^{m+1} \Delta x \\
&+ (1 - \beta) \left[\left(f - \Gamma \frac{\partial \phi}{\partial x} \right)_w - \left(f - \Gamma \frac{\partial \phi}{\partial x} \right)_e \right]^m \Delta y \\
&+ (1 - \beta) \left[\left(g - \Gamma \frac{\partial \phi}{\partial y} \right)_s - \left(g - \Gamma \frac{\partial \phi}{\partial y} \right)_n \right]^m \Delta x \\
&+ \beta \bar{S}^{m+1} \Delta x \Delta y + (1 - \beta) \bar{S}^m \Delta x \Delta y
\end{aligned} \tag{3.7}$$

onde o vetor de fluxo não-linear é dado, em termos das suas componentes, por $\vec{j} = f\vec{i} + g\vec{j}$.

3.2 Formulação Semi-implícita

Na Equação (3.7), os valores de f^{m+1} e g^{m+1} serão linearizados a partir de uma expansão em série de Taylor no tempo (HIRSCH, 1988; FLETCHER, 1991):

$$\begin{aligned}
f^{m+1} &= f^m + \left(\frac{\partial f}{\partial t}\right)^m \Delta t + \dots = f^m + \left(\frac{\partial f}{\partial \phi} \frac{\partial \phi}{\partial t}\right)^m \Delta t + \dots \\
&= f^m + \left(\frac{\partial f}{\partial \phi}\right)^m (\phi^{m+1} - \phi^m) + \dots
\end{aligned} \tag{3.8}$$

e

$$g^{m+1} = g^m + \left(\frac{\partial g}{\partial \phi}\right)^m (\phi^{m+1} - \phi^m) + \dots \tag{3.9}$$

onde empregamos uma aproximação do tipo diferença avançada no tempo na obtenção do resultado final.

Portanto, após substituição das expansões em série de Taylor na equação discretizada (3.7):

$$\begin{aligned}
&(1 + \gamma) \left[\frac{\phi_P|_m^{m+1}}{\Delta t} \right] \Delta x \Delta y - \gamma \left[\frac{\phi_P|_{m-1}^m}{\Delta t} \right] \Delta x \Delta y \\
&= \beta \left[\left(\frac{\partial f}{\partial \phi}\right)_w^m \Delta \phi_w^m - \left(\Gamma \frac{\partial \phi}{\partial x}\right)_w^{m+1} - \left(\frac{\partial f}{\partial \phi}\right)_e^m \Delta \phi_e^m + \left(\Gamma \frac{\partial \phi}{\partial x}\right)_e^{m+1} \right] \Delta y \\
&+ \beta \left[\left(\frac{\partial g}{\partial \phi}\right)_s^m \Delta \phi_s^m - \left(\Gamma \frac{\partial \phi}{\partial y}\right)_s^{m+1} - \left(\frac{\partial g}{\partial \phi}\right)_n^m \Delta \phi_n^m + \left(\Gamma \frac{\partial \phi}{\partial y}\right)_n^{m+1} \right] \Delta x \\
&+ (1 - \beta) \left\{ \left[\left(\Gamma \frac{\partial \phi}{\partial x}\right)_e - \left(\Gamma \frac{\partial \phi}{\partial x}\right)_w \right]^m \Delta y + \left[\left(\Gamma \frac{\partial \phi}{\partial y}\right)_n - \left(\Gamma \frac{\partial \phi}{\partial y}\right)_s \right]^m \Delta x \right\} \\
&+ (f_w - f_e)^m \Delta y + (g_s - g_n)^m \Delta x + \beta \bar{S}^{m+1} \Delta x \Delta y + (1 - \beta) \bar{S}^m \Delta x \Delta y
\end{aligned} \tag{3.10}$$

onde $\Delta \phi_i^m = \phi_i^{m+1} - \phi_i^m$.

Podemos mostrar, através da análise de **estabilidade linear** (HIRSCH, 1988; FLETCHER, 1991), que o esquema de discretização no tempo é incondicionalmente es-

tável para $\beta \geq 0,5$. O esquema totalmente implícito é empregado com frequência, devido à sua estabilidade, simplicidade e seu comportamento físico (PATANKAR, 1980). Cabe destacar que, daqui em diante, iremos nos concentrar somente no esquema de discretização no tempo totalmente implícito a três níveis com $\gamma \neq 0$ e $\beta = 1$, que fornece o seguinte equação:

$$\begin{aligned}
& (1 + \gamma) \left[\frac{\phi_P|_m^{m+1}}{\Delta t} \right] \Delta x \Delta y - \gamma \left[\frac{\phi_P|_{m-1}^m}{\Delta t} \right] \Delta x \Delta y \\
& = \left[\left(\frac{\partial f}{\partial \phi} \right)_w^m \Delta \phi_w^m - \left(\Gamma \frac{\partial \phi}{\partial x} \right)_w^{m+1} - \left(\frac{\partial f}{\partial \phi} \right)_e^m \Delta \phi_e^m + \left(\Gamma \frac{\partial \phi}{\partial x} \right)_e^{m+1} \right] \Delta y \\
& + \left[\left(\frac{\partial g}{\partial \phi} \right)_s^m \Delta \phi_s^m - \left(\Gamma \frac{\partial \phi}{\partial y} \right)_s^{m+1} - \left(\frac{\partial g}{\partial \phi} \right)_n^m \Delta \phi_n^m + \left(\Gamma \frac{\partial \phi}{\partial y} \right)_n^{m+1} \right] \Delta x \\
& + (f_w - f_e)^m \Delta y + (g_s - g_n)^m \Delta x + \bar{S}^{m+1} \Delta x \Delta y \tag{3.11}
\end{aligned}$$

Uma primeira possibilidade de discretização dos termos de fluxo advectivo e difusivo seria uma formulação a três pontos. O desenvolvimento que será feito, a seguir, irá considerar somente uma direção do espaço, admitindo que o mesmo tratamento pode ser aplicado igualmente nas demais direções.

3.2.1 Esquemas TVD

Nesta seção, serão apresentados os esquemas TVD (*Total Variational Diminishing*) adaptados para a sua implementação em malhas estruturadas. O desenvolvimento será feito segundo o diagrama r - ψ de Sweby e a representação do valor, por exemplo, de $f_{i+1/2}$ e $\phi_{i+1/2}$, na face do volume de controle, será escrita como sendo a soma de uma aproximação do tipo *upwind* de primeira ordem mais um termo anti-difusivo (DARWISH; MOUKALLED, 2003). A parte anti-difusiva aparece multiplicada por uma função limitadora de fluxo, $\psi(r)$, que representa uma função não-linear em r :

$$\phi_f = \phi_M + \frac{1}{2} \psi(r_f) [\phi_J - \phi_M] \tag{3.12}$$

$$f_f = f_M + \frac{1}{2}\psi(r_f)[f_J - f_M] \quad (3.13)$$

onde, nestas equações, os nós M e J representam os nós que se encontram à montante e à jusante da face f do volume de controle e U representa o nó *upwind*, conforme esquematizado na Figura 3.2 para o caso da velocidade positiva. Para o caso trivial, onde $\psi(r) = 0$, recuperamos o esquema *upwind* de primeira ordem.

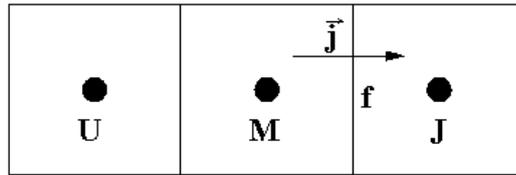


Figura 3.2: Notação para a correção advectiva.

Nas Equações (3.12) e (3.13), as relações r_f são calculadas, respectivamente, por:

$$r_f = \frac{\phi_M - \phi_U}{\phi_J - \phi_M} \quad (3.14)$$

$$r_f = \frac{f_M - f_U}{f_J - f_M} \quad (3.15)$$

De acordo com a função $\psi(r)$ diferentes esquemas TVD podem ser recuperados. A seguir, fornecemos alguns destes esquemas com os respectivos valores da função $\psi(r)$ (DARWISH; MOUKALLED, 2003; LIE; NOELLE, 2003). Como exemplo, temos o limitador da família *superbee*,

$$\psi_{SB}(r) = \max \left[0, \min \left(\theta r, \frac{1+r}{2}, \theta \right) \right] \quad (3.16)$$

o MINMOD,

$$\psi_{MM}(r) = \max [0, \min (1, r)] \quad (3.17)$$

o limitador do tipo Osher,

$$\psi_{OS}(r) = \max [0, \min (2, r)] \quad (3.18)$$

o MUSCL,

$$\psi_{MU}(r) = \frac{r + |r|}{1 + |r|} \quad (3.19)$$

a família dos limitadores *monotonized central-difference* (MC),

$$\psi_{MC}(r) = \max \left[0, \min \left(\theta r, \frac{1+r}{2}, \theta \right) \right] \quad (3.20)$$

e, finalmente, a família do *artificial compression method* (ACM),

$$\psi_{ACM}(r) = \max \left[0, \frac{r(\sigma + 1) - r^2(\sigma - 1)}{r + 1}, \frac{r(\sigma + 1) - (\sigma - 1)}{r + 1} \right] \quad (3.21)$$

nestes esquemas, vamos considerar os seguintes limites para θ e σ : $1 \leq \theta \leq 2$ e $\sigma \leq 2$ (LIE; NOELLE, 2003).

Devemos notar que para todos estes limitadores de fluxo $\psi(1) = 1$. Tal fato implica que, na ausência de fortes gradientes, a aproximação do fluxo na face dos volumes de controle empregará um esquema de diferenças centradas de segunda ordem.

3.2.2 Diferenças Centradas

Em se tratando dos termos difusivos e considerando uma representação de segunda ordem para a derivada primeira, obtemos:

$$\left(\frac{\partial \phi}{\partial x} \right)_{i+1/2} = \frac{\phi_{i+1} - \phi_i}{\delta x} + \mathcal{O}(\delta x^2) \quad (3.22)$$

e

$$\left(\frac{\partial \phi}{\partial x} \right)_{i-1/2} = \frac{\phi_i - \phi_{i-1}}{\delta x} + \mathcal{O}(\delta x^2) \quad (3.23)$$

onde δx representa a distância entre dois nós consecutivos.

Estas equações representam o esquema clássico de diferenças centradas para os termos difusivos. Neste estudo, vamos considerar que este esquema de discretização é adequado para a representação dos termos em derivada primeira e, como é sabido da literatura (PATANKAR, 1980; FLETCHER, 1991; VERSTEEG; MALALASEKERA, 1995),

ele não representa uma fonte de instabilidade.

3.2.3 Forma Final Discretizada

Considerando as aproximações propostas para a representação do fluxo difusivo, obtemos a seguinte forma discretizada para a equação de balanço:

$$\begin{aligned}
& (1 + \gamma) \left[\frac{\phi_P|_m^{m+1}}{\Delta t} \right] \Delta x \Delta y - \gamma \left[\frac{\phi_P|_{m-1}^m}{\Delta t} \right] \Delta x \Delta y \\
&= \left[\left(\frac{\partial f}{\partial \phi} \right)_w^m (\phi_w^{m+1} - \phi_w^m) - \Gamma_w \frac{\phi_P^{m+1} - \phi_W^{m+1}}{\delta x_w} \right] \Delta y \\
&+ \left[- \left(\frac{\partial f}{\partial \phi} \right)_e^m (\phi_e^{m+1} - \phi_e^m) + \Gamma_e \frac{\phi_E^{m+1} - \phi_P^{m+1}}{\delta x_e} \right] \Delta y \\
&+ \left[\left(\frac{\partial g}{\partial \phi} \right)_s^m (\phi_s^{m+1} - \phi_s^m) - \Gamma_s \frac{\phi_P^{m+1} - \phi_S^{m+1}}{\delta y_s} \right] \Delta x \\
&+ \left[- \left(\frac{\partial g}{\partial \phi} \right)_n^m (\phi_n^{m+1} - \phi_n^m) + \Gamma_n \frac{\phi_N^{m+1} - \phi_P^{m+1}}{\delta y_n} \right] \Delta x \\
&+ (f_w - f_e)^m \Delta y + (g_s - g_n)^m \Delta x + \bar{S}^{m+1} \Delta x \Delta y
\end{aligned} \tag{3.24}$$

Esta equação pode ainda ser reescrita como:

$$\begin{aligned}
& (1 + \gamma) a_P^m \phi_P^{m+1} - (1 + 2\gamma) a_P^m \phi_P^m + \gamma a_P^m \phi_P^{m-1} \\
&= (F_w \phi_w^{m+1} - F_w \phi_w^m - D_w \phi_P^{m+1} + D_w \phi_W^{m+1} - F_e \phi_e^{m+1} + F_e \phi_e^m + D_e \phi_E^{m+1} - D_e \phi_P^{m+1}) \\
&+ (F_s \phi_s^{m+1} - F_s \phi_s^m - D_s \phi_P^{m+1} + D_s \phi_S^{m+1} - F_n \phi_n^{m+1} + F_n \phi_n^m + D_n \phi_N^{m+1} - D_n \phi_P^{m+1})
\end{aligned}$$

$$+(f_w - f_e)^m \Delta y + (g_s - g_n)^m \Delta x + (S_C + S_P \phi_P^{m+1}) \Delta x \Delta y \quad (3.25)$$

onde introduzimos as seguintes novas variáveis:

$$a_P^m = \frac{\Delta x \Delta y}{\Delta t} \quad (3.26)$$

$$D_i = \frac{\Gamma_i^{m+1} A_i}{\delta x_i} \quad (3.27)$$

$$F_i = \left(\frac{\partial f}{\partial \phi} \right)_i^m \Delta y \quad i = w, e \quad (3.28)$$

$$F_i = \left(\frac{\partial g}{\partial \phi} \right)_i^m \Delta x \quad i = s, n \quad (3.29)$$

e A_i é a área da face do volume de controle.

O termo de fonte foi linearizado na forma:

$$\bar{S}^{m+1} = S_C + S_P \phi_P^{m+1} \quad (3.30)$$

Empregando a Equação (3.13) e reagrupando os diferentes termos da Equação (3.25):

$$\begin{aligned} & \left[(1 + \gamma) a_P^m + \left(F_w - \frac{1}{2} F_w \psi_w^+ + D_w \right) + \left(D_e - \frac{1}{2} F_e \psi_e^+ \right) + \left(F_s - \frac{1}{2} F_s \psi_s^+ + D_s \right) \right. \\ & \quad \left. + \left(D_n - \frac{1}{2} F_n \psi_n^+ \right) + (F_e - F_w + F_n - F_s) - S_P \Delta x \Delta y \right] \phi_P^{m+1} \\ & = \left[F_w \left(1 - \frac{1}{2} \psi_w^+ \right) + D_w \right] \phi_W^{m+1} + \left[D_e - \frac{1}{2} F_e \psi_e^+ \right] \phi_E^{m+1} \\ & \quad + \left[F_s \left(1 - \frac{1}{2} \psi_s^+ \right) + D_s \right] \phi_S^{m+1} + \left[D_n - \frac{1}{2} F_n \psi_n^+ \right] \phi_N^{m+1} \end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
& + \left[(1 + 2\gamma)a_P^m + F_e \left(1 - \frac{1}{2}\psi_e^+ \right) - \frac{1}{2}F_w\psi_w^+ + F_n \left(1 - \frac{1}{2}\psi_n^+ \right) - \frac{1}{2}F_s\psi_s^+ \right] \phi_P^m \\
& + \frac{1}{2}F_e\psi_e^+\phi_E^m - F_w \left(1 - \frac{1}{2}\psi_w^+ \right) \phi_W^m + \frac{1}{2}F_n\psi_n^+\phi_N^m - F_s \left(1 - \frac{1}{2}\psi_s^+ \right) \phi_S^m \\
& + (f_w - f_e)^m \Delta y + (g_s - g_n)^m \Delta x + S_C \Delta x \Delta y - \gamma a_P^m \phi_P^{m-1}
\end{aligned} \tag{3.31}$$

A Equação (3.31) pode ser, finalmente, escrita na forma:

$$a_P \phi_P^{m+1} = a_W \phi_W^{m+1} + a_E \phi_E^{m+1} + a_S \phi_S^{m+1} + a_N \phi_N^{m+1} + b \tag{3.32}$$

onde,

$$a_W = \left[F_w \left(1 - \frac{1}{2}\psi_w^+ \right) + D_w \right] \tag{3.33}$$

$$a_E = \left(D_e - \frac{1}{2}F_e\psi_e^+ \right) \tag{3.34}$$

$$a_S = \left[F_s \left(1 - \frac{1}{2}\psi_s^+ \right) + D_s \right] \tag{3.35}$$

$$a_N = \left(D_n - \frac{1}{2}F_n\psi_n^+ \right) \tag{3.36}$$

$$a_P = a_W + a_E + a_S + a_N + (F_e - F_w + F_n - F_s) + (1 + \gamma)a_P^m - S_P \Delta x \Delta y \tag{3.37}$$

$$b = [(1 + 2\gamma)a_P^m + a_W + a_E + a_S + a_N + (F_e - F_w + F_n - F_s) - (D_w + D_e + D_s + D_n)] \phi_P^m$$

$$+(D_w - a_W)\phi_W^m + (D_e - a_E)\phi_E^m + (D_s - a_S)\phi_S^m + (D_n - a_N)\phi_N^m$$

$$+ (f_w - f_e)^m \Delta y + (g_s - g_n)^m \Delta x - \gamma a_P^m \phi_P^{m-1} + S_C \Delta x \Delta y \quad (3.38)$$

O sistema algébrico de equações representado pela Equação (3.32) pode ser resolvido, neste trabalho, mediante o emprego do algoritmo TDMA (Tri-Diagonal Matrix Algorithm), SIP (Strongly Implicit Procedure) (FERZIGER; PERIC, 1999), adaptados para a sua aplicação ao caso bidimensional, ou pelo método do Gradiente Biconjugado (FERZIGER; PERIC, 1999), conforme apresentado no Capítulo 4.

As equações anteriores foram obtidas considerando que os fluxos advectivos eram positivos. O mesmo procedimento pode ser empregado para os fluxos negativos:

$$\begin{aligned} & \left[(1 + \gamma) a_P^m + \left(-F_e + \frac{1}{2} F_e \psi_e^- + D_e \right) + \left(D_w + \frac{1}{2} F_w \psi_w^- \right) + \left(-F_n + \frac{1}{2} F_n \psi_n^- + D_n \right) \right. \\ & \quad \left. + \left(D_s + \frac{1}{2} F_s \psi_s^- \right) + (F_e - F_w + F_n - F_s) - S_P \Delta x \Delta y \right] \phi_P^{m+1} \\ & = \left[-F_e \left(1 - \frac{1}{2} \psi_e^- \right) + D_e \right] \phi_E^{m+1} + \left[D_w + \frac{1}{2} F_w \psi_w^- \right] \phi_W^{m+1} \\ & \quad + \left[-F_n \left(1 - \frac{1}{2} \psi_n^- \right) + D_n \right] \phi_N^{m+1} + \left[D_s + \frac{1}{2} F_s \psi_s^- \right] \phi_S^{m+1} \\ & + \left[(1 + 2\gamma) a_P^m - F_w \left(1 - \frac{1}{2} \psi_w^- \right) + \frac{1}{2} F_e \psi_e^- - F_s \left(1 - \frac{1}{2} \psi_s^- \right) + \frac{1}{2} F_n \psi_n^- \right] \phi_P^m \\ & \quad - \frac{1}{2} F_w \psi_w^- \phi_W^m + F_e \left(1 - \frac{1}{2} \psi_e^- \right) \phi_E^m - \frac{1}{2} F_s \psi_s^- \phi_S^m + F_n \left(1 - \frac{1}{2} \psi_n^- \right) \phi_N^m \\ & + (f_w - f_e)^m \Delta y + (g_s - g_n)^m \Delta x + S_C \Delta x \Delta y - \gamma a_P^m \phi_P^{m-1} \quad (3.39) \end{aligned}$$

A Equação (3.39) também pode ser escrita numa forma compacta:

$$a_P \phi_P^{m+1} = a_W \phi_W^{m+1} + a_E \phi_E^{m+1} + a_S \phi_S^{m+1} + a_N \phi_N^{m+1} + b \quad (3.40)$$

onde,

$$a_W = \left(D_w + \frac{1}{2} F_w \psi_w^- \right) \quad (3.41)$$

$$a_E = \left[-F_e \left(1 - \frac{1}{2} \psi_e^- \right) + D_e \right] \quad (3.42)$$

$$a_S = \left(D_s + \frac{1}{2} F_s \psi_s^- \right) \quad (3.43)$$

$$a_N = \left[-F_n \left(1 - \frac{1}{2} \psi_n^- \right) + D_n \right] \quad (3.44)$$

$$a_P = a_W + a_E + a_S + a_N + (F_e - F_w + F_n - F_s) + (1 + \gamma) a_P^m - S_P \Delta x \Delta y \quad (3.45)$$

$$\begin{aligned} b = & [(1 + 2\gamma) a_P^m + a_W + a_E + a_S + a_N + (F_e - F_w + F_n - F_s) - (D_w + D_e + D_s + D_n)] \phi_P^m \\ & + (D_w - a_W) \phi_W^m + (D_e - a_E) \phi_E^m + (D_s - a_S) \phi_S^m + (D_n - a_N) \phi_N^m \\ & + (f_w - f_e)^m \Delta y + (g_s - g_n)^m \Delta x - \gamma a_P^m \phi_P^{m-1} + S_C \Delta x \Delta y \end{aligned} \quad (3.46)$$

A partir deste dois desenvolvimentos, podemos pensar numa representação que se aplique tanto ao caso do fluxo positivo quanto negativo:

$$a_P \phi_P^{m+1} = a_W \phi_W^{m+1} + a_E \phi_E^{m+1} + a_S \phi_S^{m+1} + a_N \phi_N^{m+1} + b \quad (3.47)$$

onde,

$$a_W = \left[\left(1 - \frac{1}{2} \psi_w^+ \right) \llbracket F_w, 0 \rrbracket - \frac{1}{2} \psi_w^- \llbracket -F_w, 0 \rrbracket + D_w \right] \quad (3.48)$$

$$a_E = \left[-\frac{1}{2}\psi_e^+ \llbracket F_e, 0 \rrbracket + \left(1 - \frac{1}{2}\psi_e^- \right) \llbracket -F_e, 0 \rrbracket + D_e \right] \quad (3.49)$$

$$a_S = \left[\left(1 - \frac{1}{2}\psi_s^+ \right) \llbracket F_s, 0 \rrbracket - \frac{1}{2}\psi_s^- \llbracket -F_s, 0 \rrbracket + D_s \right] \quad (3.50)$$

$$a_N = \left[-\frac{1}{2}\psi_n^+ \llbracket F_n, 0 \rrbracket + \left(1 - \frac{1}{2}\psi_n^- \right) \llbracket -F_n, 0 \rrbracket + D_n \right] \quad (3.51)$$

$$a_P = a_W + a_E + a_S + a_N + (F_e - F_w + F_n - F_s) + (1 + \gamma)a_P^m - S_P \Delta x \Delta y \quad (3.52)$$

$$b = [a_W + a_E + a_S + a_N + (F_e - F_w + F_n - F_s) - (D_w + D_e + D_s + D_n)] \phi_P^m$$

$$+(D_w - a_W)\phi_W^m + (D_e - a_E)\phi_E^m + (D_s - a_S)\phi_S^m + (D_n - a_N)\phi_N^m$$

$$+(f_w - f_e)^m \Delta y + (g_s - g_n)^m \Delta x + (1 + 2\gamma)a_P^m \phi_P^m - \gamma a_P^m \phi_P^{m-1} + S_C \Delta x \Delta y \quad (3.53)$$

onde o operador $\llbracket a, b \rrbracket$ retorna o maior valor entre a e b .

Escrevendo os fluxos em termos dos limitadores de fluxo, Equação (3.13), obtemos:

$$b = [a_W + a_E + a_S + a_N + (F_e - F_w + F_n - F_s) - (D_w + D_e + D_s + D_n)] \phi_P^m$$

$$+(D_w - a_W)\phi_W^m + (D_e - a_E)\phi_E^m + (D_s - a_S)\phi_S^m + (D_n - a_N)\phi_N^m$$

$$\begin{aligned}
& + \left[f_W^m + \frac{1}{2}(f_P^m - f_W^m)\psi_w^+ \right] \Delta y \left[\left[\frac{F_w}{|F_w|}, 0 \right] \right] + \left[f_P^m + \frac{1}{2}(f_W^m - f_P^m)\psi_w^- \right] \Delta y \left[\left[\frac{-F_w}{|F_w|}, 0 \right] \right] \\
& - \left[f_P^m + \frac{1}{2}(f_E^m - f_P^m)\psi_e^+ \right] \Delta y \left[\left[\frac{F_e}{|F_e|}, 0 \right] \right] - \left[f_E^m + \frac{1}{2}(f_P^m - f_E^m)\psi_e^- \right] \Delta y \left[\left[\frac{-F_e}{|F_e|}, 0 \right] \right] \\
& + \left[g_S^m + \frac{1}{2}(g_P^m - g_S^m)\psi_s^+ \right] \Delta x \left[\left[\frac{F_s}{|F_s|}, 0 \right] \right] + \left[g_P^m + \frac{1}{2}(g_S^m - g_P^m)\psi_s^- \right] \Delta x \left[\left[\frac{-F_s}{|F_s|}, 0 \right] \right] \\
& - \left[g_P^m + \frac{1}{2}(g_N^m - g_P^m)\psi_n^+ \right] \Delta x \left[\left[\frac{F_n}{|F_n|}, 0 \right] \right] - \left[g_N^m + \frac{1}{2}(g_P^m - g_N^m)\psi_n^- \right] \Delta x \left[\left[\frac{-F_n}{|F_n|}, 0 \right] \right] \\
& + (1 + 2\gamma)a_P^m \phi_P^m - \gamma a_P^m \phi_P^{m-1} + S_C \Delta x \Delta y \tag{3.54}
\end{aligned}$$

Portanto, a forma final discretizada que será implementada e que se aplica tanto para valores do fluxo positivo quanto negativo é:

$$a_P \phi_P^{m+1} = a_W \phi_W^{m+1} + a_E \phi_E^{m+1} + a_S \phi_S^{m+1} + a_N \phi_N^{m+1} + b \tag{3.55}$$

onde,

$$a_W = \left[\left(1 - \frac{1}{2}\psi_w^+ \right) \llbracket F_w, 0 \rrbracket - \frac{1}{2}\psi_w^- \llbracket -F_w, 0 \rrbracket + D_w \right] \tag{3.56}$$

$$a_E = \left[-\frac{1}{2}\psi_e^+ \llbracket F_e, 0 \rrbracket + \left(1 - \frac{1}{2}\psi_e^- \right) \llbracket -F_e, 0 \rrbracket + D_e \right] \tag{3.57}$$

$$a_S = \left[\left(1 - \frac{1}{2}\psi_s^+ \right) \llbracket F_s, 0 \rrbracket - \frac{1}{2}\psi_s^- \llbracket -F_s, 0 \rrbracket + D_s \right] \tag{3.58}$$

$$a_N = \left[-\frac{1}{2}\psi_n^+ \llbracket F_n, 0 \rrbracket + \left(1 - \frac{1}{2}\psi_n^- \right) \llbracket -F_n, 0 \rrbracket + D_n \right] \tag{3.59}$$

$$a_P = a_W + a_E + a_S + a_N + (F_e - F_w + F_n - F_s) + (1 + \gamma)a_P^m - S_P \Delta x \Delta y \quad (3.60)$$

$$\begin{aligned} b = & [a_W + a_E + a_S + a_N + (F_e - F_w + F_n - F_s) - (D_w + D_e + D_s + D_n)] \phi_P^m \\ & + (D_w - a_W) \phi_W^m + (D_e - a_E) \phi_E^m + (D_s - a_S) \phi_S^m + (D_n - a_N) \phi_N^m \\ & + \left[f_W^m + \frac{1}{2}(f_P^m - f_W^m) \psi_w^+ \right] \Delta y \left[\frac{F_w}{|F_w|}, 0 \right] + \left[f_P^m + \frac{1}{2}(f_W^m - f_P^m) \psi_w^- \right] \Delta y \left[\frac{-F_w}{|F_w|}, 0 \right] \\ & - \left[f_P^m + \frac{1}{2}(f_E^m - f_P^m) \psi_e^+ \right] \Delta y \left[\frac{F_e}{|F_e|}, 0 \right] - \left[f_E^m + \frac{1}{2}(f_P^m - f_E^m) \psi_e^- \right] \Delta y \left[\frac{-F_e}{|F_e|}, 0 \right] \\ & + \left[g_S^m + \frac{1}{2}(g_P^m - g_S^m) \psi_s^+ \right] \Delta x \left[\frac{F_s}{|F_s|}, 0 \right] + \left[g_P^m + \frac{1}{2}(g_S^m - g_P^m) \psi_s^- \right] \Delta x \left[\frac{-F_s}{|F_s|}, 0 \right] \\ & - \left[g_P^m + \frac{1}{2}(g_N^m - g_P^m) \psi_n^+ \right] \Delta x \left[\frac{F_n}{|F_n|}, 0 \right] - \left[g_N^m + \frac{1}{2}(g_P^m - g_N^m) \psi_n^- \right] \Delta x \left[\frac{-F_n}{|F_n|}, 0 \right] \\ & + (1 + 2\gamma)a_P^m \phi_P^m - \gamma a_P^m \phi_P^{m-1} + S_C \Delta x \Delta y \quad (3.61) \end{aligned}$$

3.2.4 Primeira Formulação Alternativa (FSTAB)

As regras básicas, nem sempre suficientes, para que tenhamos uma formulação estável para um algoritmo empregando o método dos volumes finitos são (HAYASE; HUMPRHREY; GREIF, 1992):

- consistência do cálculo do fluxo nas faces dos volumes de controle;

- todos os coeficientes devem ser positivos na forma final discretizada;
- inclinação negativa na linearização do termo de fonte;
- coeficiente nodal igual à soma dos coeficientes vizinhos.

A forma atual discretizada permite que os coeficientes a_W , a_E , a_S e a_N sejam negativos. Portanto, formulações alternativas devem ser propostas de tal modo que as regras básicas para que tenhamos uma formulação estável sejam verificadas.

A primeira forma alternativa é obtida mediante a substituição dos coeficientes que podem resultar em valores negativos:

$$a_P \phi_P^{m+1} = a_W \phi_W^{m+1} + a_E \phi_E^{m+1} + a_S \phi_S^{m+1} + a_N \phi_N^{m+1} + b \quad (3.62)$$

onde,

$$a_W = \left[\left(1 - \frac{1}{2} \psi_w^+ \right) \llbracket F_w, 0 \rrbracket + \left(1 - \frac{1}{2} \psi_w^- \right) \llbracket -F_w, 0 \rrbracket + D_w \right] \quad (3.63)$$

$$a_E = \left[\left(1 - \frac{1}{2} \psi_e^+ \right) \llbracket F_e, 0 \rrbracket + \left(1 - \frac{1}{2} \psi_e^- \right) \llbracket -F_e, 0 \rrbracket + D_e \right] \quad (3.64)$$

$$a_S = \left[\left(1 - \frac{1}{2} \psi_s^+ \right) \llbracket F_s, 0 \rrbracket + \left(1 - \frac{1}{2} \psi_s^- \right) \llbracket -F_s, 0 \rrbracket + D_s \right] \quad (3.65)$$

$$a_N = \left[\left(1 - \frac{1}{2} \psi_n^+ \right) \llbracket F_n, 0 \rrbracket + \left(1 - \frac{1}{2} \psi_n^- \right) \llbracket -F_n, 0 \rrbracket + D_n \right] \quad (3.66)$$

$$a_P = a_W + a_E + a_S + a_N + (F_e - F_w + F_n - F_s) + (1 + \gamma) a_P^m - S_P \Delta x \Delta y \quad (3.67)$$

$$b = \left[a_W + a_E + a_S + a_N + (F_e - F_w + F_n - F_s) - (D_w + D_e + D_s + D_n) \right] \phi_P^m$$

$$+(D_w - a_W) \phi_W^m + (D_e - a_E) \phi_E^m + (D_s - a_S) \phi_S^m + (D_n - a_N) \phi_N^m$$

$$\begin{aligned}
& + (\llbracket -F_w, 0 \rrbracket + \llbracket -F_s, 0 \rrbracket + \llbracket F_e, 0 \rrbracket + \llbracket F_n, 0 \rrbracket) (\phi_P^{m+1} - \phi_P^m) \\
& - \llbracket -F_w, 0 \rrbracket (\phi_W^{m+1} - \phi_W^m) - \llbracket F_e, 0 \rrbracket (\phi_E^{m+1} - \phi_E^m) \\
& - \llbracket -F_s, 0 \rrbracket (\phi_S^{m+1} - \phi_S^m) - \llbracket F_n, 0 \rrbracket (\phi_N^{m+1} - \phi_N^m) \\
& + (f_w - f_e)^m \Delta y + (g_s - g_n)^m \Delta x \\
& + (1 + 2\gamma)a_P^m \phi_P^m - \gamma a_P^m \phi_P^{m-1} + S_C \Delta x \Delta y
\end{aligned} \tag{3.68}$$

onde os termos do tipo $\Delta \phi_i^m = \phi_i^{m+1} - \phi_i^m$ são aproximados por $\phi_i^m - \phi_i^{m-1}$.

3.2.5 Segunda Formulação Alternativa (FSTAB_S)

A segunda forma alternativa é obtida mediante o emprego da seguinte aproximação $\Delta \phi_i^m = \phi_i^{m+1} - \phi_i^m \approx \phi_i^m - \phi_i^{m-1}$:

$$a_P \phi_P^{m+1} = a_W \phi_W^{m+1} + a_E \phi_E^{m+1} + a_S \phi_S^{m+1} + a_N \phi_N^{m+1} + b \tag{3.69}$$

onde,

$$a_W = \left[\left(1 - \frac{1}{2}\psi_w^+\right) \llbracket F_w, 0 \rrbracket + \left(1 - \frac{1}{2}\psi_w^-\right) \llbracket -F_w, 0 \rrbracket + D_w \right] \tag{3.70}$$

$$a_E = \left[\left(1 - \frac{1}{2}\psi_e^+\right) \llbracket F_e, 0 \rrbracket + \left(1 - \frac{1}{2}\psi_e^-\right) \llbracket -F_e, 0 \rrbracket + D_e \right] \tag{3.71}$$

$$a_S = \left[\left(1 - \frac{1}{2}\psi_s^+\right) \llbracket F_s, 0 \rrbracket + \left(1 - \frac{1}{2}\psi_s^-\right) \llbracket -F_s, 0 \rrbracket + D_s \right] \tag{3.72}$$

$$a_N = \left[\left(1 - \frac{1}{2}\psi_n^+\right) \llbracket F_n, 0 \rrbracket + \left(1 - \frac{1}{2}\psi_n^-\right) \llbracket -F_n, 0 \rrbracket + D_n \right] \tag{3.73}$$

$$a_P = a_W + a_E + a_S + a_N + (F_e - F_w + F_n - F_s) + (1 + \gamma)a_P^m - S_P \Delta x \Delta y \quad (3.74)$$

$$b = \left[a_W + a_E + a_S + a_N + (F_e - F_w + F_n - F_s) - (D_w + D_e + D_s + D_n) \right] \phi_P^m$$

$$+ (D_w - a_W) \phi_W^m + (D_e - a_E) \phi_E^m + (D_s - a_S) \phi_S^m + (D_n - a_N) \phi_N^m$$

$$+ (f_w - f_e)^m \Delta y + (g_s - g_n)^m \Delta x$$

$$+ (1 + 2\gamma)a_P^m \phi_P^m - \gamma a_P^m \phi_P^{m-1} + S_C \Delta x \Delta y \quad (3.75)$$

a qual, embora de implementação mais simples, só deverá fornecer bons resultados para pequenos valores de Δt .

3.2.6 Terceira Formulação Alternativa (FUPW)

A terceira forma alternativa é obtida mediante a escritura dos coeficientes como se tratasse do método de *upwind* de primeira ordem:

$$a_P \phi_P^{m+1} = a_W \phi_W^{m+1} + a_E \phi_E^{m+1} + a_S \phi_S^{m+1} + a_N \phi_N^{m+1} + b \quad (3.76)$$

onde

$$a_W = \llbracket F_w, 0 \rrbracket + D_w \quad (3.77)$$

$$a_E = \llbracket -F_e, 0 \rrbracket + D_e \quad (3.78)$$

$$a_S = \llbracket F_s, 0 \rrbracket + D_s \quad (3.79)$$

$$a_N = \llbracket -F_n, 0 \rrbracket + D_n \quad (3.80)$$

e

$$a_P = a_W + a_E + a_S + a_N + (F_e - F_w + F_n - F_s) + (1 + \gamma)a_P^m - S_P \Delta x \Delta y \quad (3.81)$$

$$\begin{aligned}
b = & \left[a_W + a_E + a_S + a_N + (F_e - F_w + F_n - F_s) - (D_w + D_e + D_s + D_n) \right] \phi_P^m \\
& + (D_w - a_W) \phi_W^m + (D_e - a_E) \phi_E^m + (D_s - a_S) \phi_S^m + (D_n - a_N) \phi_N^m \\
& + \frac{1}{2} (\llbracket F_w, 0 \rrbracket \psi_w^+ + \llbracket -F_w, 0 \rrbracket \psi_w^-) (\Delta \phi_P^m - \Delta \phi_W^m) \\
& + \frac{1}{2} (\llbracket F_e, 0 \rrbracket \psi_e^+ + \llbracket -F_e, 0 \rrbracket \psi_e^-) (\Delta \phi_P^m - \Delta \phi_E^m) \\
& + \frac{1}{2} (\llbracket F_s, 0 \rrbracket \psi_s^+ + \llbracket -F_s, 0 \rrbracket \psi_s^-) (\Delta \phi_P^m - \Delta \phi_S^m) \\
& + \frac{1}{2} (\llbracket F_n, 0 \rrbracket \psi_n^+ + \llbracket -F_n, 0 \rrbracket \psi_n^-) (\Delta \phi_P^m - \Delta \phi_N^m) \\
& + (f_w - f_e)^m \Delta y + (g_s - g_n)^m \Delta x \\
& + (1 + 2\gamma)a_P^m \phi_P^m - \gamma a_P^m \phi_P^{m-1} + S_C \Delta x \Delta y \quad (3.82)
\end{aligned}$$

onde os termos do tipo $\Delta \phi_i^m = \phi_i^{m+1} - \phi_i^m$ são aproximados por $\phi_i^m - \phi_i^{m-1}$.

3.2.7 Quarta Formulação Alternativa (FUPW_S)

Como no caso da segunda formulação alternativa, podemos também obter uma forma simplificada se considerarmos que $\Delta\phi_i^m = \phi_i^{m+1} - \phi_i^m \approx \phi_i^m - \phi_i^m$:

$$a_P\phi_P^{m+1} = a_W\phi_W^{m+1} + a_E\phi_E^{m+1} + a_S\phi_S^{m+1} + a_N\phi_N^{m+1} + b \quad (3.83)$$

onde

$$a_W = \llbracket F_w, 0 \rrbracket + D_w \quad (3.84)$$

$$a_E = \llbracket -F_e, 0 \rrbracket + D_e \quad (3.85)$$

$$a_S = \llbracket F_s, 0 \rrbracket + D_s \quad (3.86)$$

$$a_N = \llbracket -F_n, 0 \rrbracket + D_n \quad (3.87)$$

e

$$a_P = a_W + a_E + a_S + a_N + (F_e - F_w + F_n - F_s) + (1 + \gamma)a_P^m - S_P\Delta x\Delta y \quad (3.88)$$

$$b = \left[a_W + a_E + a_S + a_N + (F_e - F_w + F_n - F_s) - (D_w + D_e + D_s + D_n) \right] \phi_P^m$$

$$+(D_w - a_W)\phi_W^m + (D_e - a_E)\phi_E^m + (D_s - a_S)\phi_S^m + (D_n - a_N)\phi_N^m$$

$$+(f_w - f_e)^m \Delta y + (g_s - g_n)^m \Delta x$$

$$+(1 + 2\gamma)a_P^m\phi_P^m - \gamma a_P^m\phi_P^{m-1} + S_C\Delta x\Delta y \quad (3.89)$$

3.2.8 Quinta Formulação Alternativa (FSADV)

A última formulação alternativa é obtida se fizermos $f^{m+1} = f^m$ e $g^{m+1} = g^m$ no desenvolvimento em série de Taylor:

$$a_P \phi_P^{m+1} = a_W \phi_W^{m+1} + a_E \phi_E^{m+1} + a_S \phi_S^{m+1} + a_N \phi_N^{m+1} + b \quad (3.90)$$

onde

$$a_W = D_w \quad (3.91)$$

$$a_E = D_e \quad (3.92)$$

$$a_S = D_s \quad (3.93)$$

$$a_N = D_n \quad (3.94)$$

e

$$a_P = a_W + a_E + a_S + a_N + (1 + \gamma)a_P^m - S_P \Delta x \Delta y \quad (3.95)$$

$$b = (f_w - f_e)^m \Delta y + (g_s - g_n)^m \Delta x + (1 + 2\gamma)a_P^m \phi_P^m - \gamma a_P^m \phi_P^{m-1} + S_C \Delta x \Delta y \quad (3.96)$$

que não deve fornecer resultados acurados a menos que o incremento de tempo Δt seja muito pequeno.

3.2.9 Função de Fluxo Linear

No caso da equação de transporte advectivo-difusivo linear, temos que $f = \rho u \phi$, $g = \rho v \phi$, $\partial f / \partial \phi = \rho u$ e $\partial g / \partial \phi = \rho v$ em se tratando do caso bidimensional.

Vamos, em seguida, recuperar a forma discretizada para a equação de transporte linear para o esquema totalmente implícito ($\gamma = 0$) e para o esquema do tipo diferenças

centradas $\psi(r) = 1$, embora ele seja sabidamente instável para um número de Péclet de célula superior a dois. Isto será feito somente para mostrarmos que recuperamos a forma correta discretizada para o problema linear. Por questão de simplicidade, vamos considerar que os fluxos são positivos:

$$a_P \phi_P^{m+1} = a_W \phi_W^{m+1} + a_E \phi_E^{m+1} + a_S \phi_S^{m+1} + a_N \phi_N^{m+1} + b \quad (3.97)$$

onde,

$$a_W = \left(\frac{F_w}{2} + D_w \right) \quad (3.98)$$

$$a_E = \left(D_e - \frac{F_e}{2} \right) \quad (3.99)$$

$$a_S = \left(\frac{F_s}{2} + D_s \right) \quad (3.100)$$

$$a_N = \left(D_n - \frac{F_n}{2} \right) \quad (3.101)$$

$$a_P = a_W + a_E + a_S + a_N + (F_e - F_w + F_n - F_s) + a_P^m - S_P \Delta x \Delta y \quad (3.102)$$

$$\begin{aligned} b = & a_P^m \phi_P^m + \frac{1}{2} (F_e - F_w + F_n - F_s) \phi_P^m + \frac{1}{2} (F_e \phi_E^m - F_w \phi_W^m + F_n \phi_N^m - F_s \phi_S^m) \\ & + \left(\frac{f_W^m + f_P^m}{2} - \frac{f_E^m + f_P^m}{2} \right) \Delta y + \left(\frac{g_S^m + g_P^m}{2} - \frac{g_N^m + g_P^m}{2} \right) \Delta x + S_C \Delta x \Delta y \end{aligned} \quad (3.103)$$

Como na aproximação por diferenças centradas, temos que:

$$f_w = \frac{f_P + f_W}{2}; \quad f_e = \frac{f_P + f_E}{2}; \quad g_s = \frac{g_P + g_S}{2}; \quad g_n = \frac{g_P + g_N}{2} \quad (3.104)$$

$$\phi_w = \frac{\phi_P + \phi_W}{2}; \quad \phi_e = \frac{\phi_P + \phi_E}{2}; \quad \phi_s = \frac{\phi_P + \phi_S}{2}; \quad \phi_n = \frac{\phi_P + \phi_N}{2} \quad (3.105)$$

obtemos,

$$b = a_P^m \phi_P^m + \frac{1}{2} (F_e - F_w + F_n - F_s) \phi_P^m + \frac{1}{2} (F_e \phi_E^m - F_w \phi_W^m + F_n \phi_N^m - F_s \phi_S^m) \\ + \frac{1}{2} (F_w - F_e + F_s - F_n) \phi_P^m + \frac{1}{2} (F_w \phi_W^m - F_e \phi_E^m + F_s \phi_S^m - F_n \phi_N^m) + S_C \Delta x \Delta y \quad (3.106)$$

ou seja,

$$b = a_P^m \phi_P^m + S_C \Delta x \Delta y \quad (3.107)$$

que representa a forma tradicional para esta implementação.

Vamos considerar, agora, o caso do esquema *upwind* para os fluxos advectivos positivos. Neste caso, $\psi(r) = 0$:

$$a_P \phi_P^{m+1} = a_W \phi_W^{m+1} + a_E \phi_E^{m+1} + a_S \phi_S^{m+1} + a_N \phi_N^{m+1} + b \quad (3.108)$$

onde,

$$a_W = D_w + F_w \quad (3.109)$$

$$a_E = D_e \quad (3.110)$$

$$a_S = D_s + F_s \quad (3.111)$$

$$a_N = D_n \quad (3.112)$$

$$a_P = a_W + a_E + a_S + a_N + (F_e - F_w + F_n - F_s) + a_P^m - S_P \Delta x \Delta y \quad (3.113)$$

$$\begin{aligned} b = & a_P^m \phi_P^m + (F_e + F_n) \phi_P^m - F_w \phi_W^m - F_s \phi_S^m + (f_W - f_P)^m \Delta y \\ & + (g_S - g_P)^m \Delta x + S_C \Delta x \Delta y \end{aligned} \quad (3.114)$$

Em se tratando do esquema *upwind*, as seguintes aproximações são empregadas:

$$f_w = f_W; \quad f_e = f_P; \quad g_s = g_S; \quad g_n = g_P \quad (3.115)$$

e

$$\phi_w = \phi_W; \quad \phi_e = \phi_P; \quad \phi_s = \phi_S; \quad \phi_n = \phi_P \quad (3.116)$$

Portanto,

$$\begin{aligned} b = & a_P^m \phi_P^m + (F_e + F_n) \phi_P^m - F_w \phi_W^m - F_s \phi_S^m + F_w \phi_W^m - F_e \phi_P^m \\ & + F_s \phi_S^m - F_n \phi_P^m + S_C \Delta x \Delta y \end{aligned} \quad (3.117)$$

e, finalmente,

$$b = a_P^m \phi_P^m + S_C \Delta x \Delta y \quad (3.118)$$

que corresponde, também, a forma usual obtida para o problema linear.

3.3 Formulação Totalmente Explícita

De forma análoga ao desenvolvimento empregado na obtenção da formulação implícita, também podemos propor uma formulação explícita a três níveis de tempo:

$$\begin{aligned}
& (1 + \gamma) \left[\frac{\phi_P|_m^{m+1}}{\Delta t} \right] \Delta x \Delta y - \gamma \left[\frac{\phi_P|_{m-1}^m}{\Delta t} \right] \Delta x \Delta y \\
&= (1 - \beta) \left[\left(f - \Gamma \frac{\partial \phi}{\partial x} \right)_w - \left(f - \Gamma \frac{\partial \phi}{\partial x} \right)_e \right]^m \Delta y \\
&+ (1 - \beta) \left[\left(g - \Gamma \frac{\partial \phi}{\partial y} \right)_s - \left(g - \Gamma \frac{\partial \phi}{\partial y} \right)_n \right]^m \Delta x \\
&+ \beta \left[\left(f - \Gamma \frac{\partial \phi}{\partial x} \right)_w - \left(f - \Gamma \frac{\partial \phi}{\partial x} \right)_e \right]^{m-1} \Delta y \\
&+ \beta \left[\left(g - \Gamma \frac{\partial \phi}{\partial y} \right)_s - \left(g - \Gamma \frac{\partial \phi}{\partial y} \right)_n \right]^{m-1} \Delta x \\
&+ (1 - \beta) \bar{S}^m \Delta x \Delta y + \beta \bar{S}^{m-1} \Delta x \Delta y \tag{3.119}
\end{aligned}$$

No desenvolvimento que será feito a seguir, tomando por base a equação discretizada (3.119), consideramos somente o caso do esquema de discretização no tempo explícito a três níveis no qual $\gamma \neq 0$ e $\beta = 0$:

$$\begin{aligned}
& (1 + \gamma) \left[\frac{\phi_P|_m^{m+1}}{\Delta t} \right] \Delta x \Delta y - \gamma \left[\frac{\phi_P|_{m-1}^m}{\Delta t} \right] \Delta x \Delta y \\
&= \left[f_w - \left(\Gamma \frac{\partial \phi}{\partial x} \right)_w - f_e + \left(\Gamma \frac{\partial \phi}{\partial x} \right)_e \right]^m \Delta y \\
&+ \left[g_s - \left(\Gamma \frac{\partial \phi}{\partial y} \right)_s - g_n + \left(\Gamma \frac{\partial \phi}{\partial y} \right)_n \right]^m \Delta x \\
&+ \bar{S}^m \Delta x \Delta y \tag{3.120}
\end{aligned}$$

Assim, como no caso da formulação implícita, também empregaremos os esquemas TVD com limitadores de fluxo e a aproximação por diferenças centradas na representação dos termos advectivos e difusivos, respetivamente.

3.3.1 Forma Final Discretizada

Considerando as aproximações propostas para a representação do fluxo difusivo, nós obtemos a seguinte forma discretizada para a equação de balanço:

$$\begin{aligned}
& (1 + \gamma) \left[\frac{\phi_P|_m^{m+1}}{\Delta t} \right] \Delta x \Delta y + \gamma \left[\frac{\phi_P|_{m-1}^m}{\Delta t} \right] \Delta x \Delta y \\
&= \left[f_w - \Gamma_w \frac{\phi_P - \phi_W}{\delta x_w} \right]^m \Delta y - \left[f_e - \Gamma_e \frac{\phi_E - \phi_P}{\delta x_e} \right]^m \Delta y \\
&+ \left[g_s - \Gamma_s \frac{\phi_P - \phi_S}{\delta y_s} \right]^m \Delta x - \left[g_n - \Gamma_n \frac{\phi_N - \phi_P}{\delta y_n} \right]^m \Delta x \\
&\quad + \bar{S}^m \Delta x \Delta y
\end{aligned} \tag{3.121}$$

Esta equação pode ainda ser reescrita como:

$$\begin{aligned}
& (1 + \gamma) a_P^m \phi_P^{m+1} - (1 + 2\gamma) a_P^m \phi_P^m + \gamma a_P^m \phi_P^{m-1} \\
&= (f_w \Delta y - D_w \phi_P^m + D_w \phi_W^m - f_e \Delta y + D_e \phi_E^m - D_e \phi_P^m) \\
&+ (g_s \Delta x - D_s \phi_P^m + D_s \phi_S^m - g_n \Delta x + D_n \phi_N^m - D_n \phi_P^m) \\
&\quad + (S_C + S_P \phi_P^m) \Delta x \Delta y
\end{aligned} \tag{3.122}$$

onde introduzimos as seguintes novas variáveis:

$$a_P^m = \frac{\Delta x \Delta y}{\Delta t}; \tag{3.123}$$

$$D_w = \frac{\Gamma_w^m \Delta y}{\delta x_w}; \quad D_e = \frac{\Gamma_e^m \Delta y}{\delta x_e}; \quad D_s = \frac{\Gamma_s^m \Delta x}{\delta y_s}; \quad D_n = \frac{\Gamma_n^m \Delta x}{\delta y_n} \tag{3.124}$$

e o termo de fonte foi linearizado na forma:

$$\bar{S}^m = S_C + S_P \phi_P^m \quad (3.125)$$

Empregando a Equação (3.13) e reagrupando os diferentes termos da Equação (3.122):

$$\begin{aligned} (1 + \gamma)a_P^m \phi_P^{m+1} &= \left[\left(1 - \frac{1}{2} \psi_w^+ \right) \Delta y \right] f_W^m + D_w \phi_W^m - \left[\left(\frac{1}{2} \psi_e^+ \right) \Delta y \right] f_E^m + D_e \phi_E^m \\ &+ \left[\left(1 - \frac{1}{2} \psi_s^+ \right) \Delta x \right] g_S^m + D_s \phi_S^m - \left[\left(\frac{1}{2} \psi_n^+ \right) \Delta x \right] g_N^m + D_n \phi_N^m \\ &+ \left\{ \left[\frac{1}{2} \psi_w^+ - \left(1 - \frac{1}{2} \psi_e^+ \right) \right] \Delta y \right\} f_P^m + \left\{ \left[\frac{1}{2} \psi_s^+ - \left(1 - \frac{1}{2} \psi_n^+ \right) \right] \Delta x \right\} g_P^m \\ &+ [(1 + 2\gamma)a_P^m + S_P \Delta x \Delta y - (D_w + D_e + D_s + D_n)] \phi_P^m \\ &+ S_C \Delta x \Delta y - \gamma a_P^m \phi_P^{m-1} \end{aligned} \quad (3.126)$$

A Equação (3.126) pode ser, finalmente, escrita na forma:

$$\begin{aligned} a_P \phi_P^{m+1} &= a_W f_W^m + D_w \phi_W^m + a_E f_E^m + D_e \phi_E^m + a_S g_S^m + D_s \phi_S^m \\ &+ a_N g_N^m + D_n \phi_N^m + b_P \phi_P^m + c_P f_P^m + d_P g_P^m + e \end{aligned} \quad (3.127)$$

onde,

$$a_W = \left(1 - \frac{1}{2} \psi_w^+ \right) \Delta y \quad (3.128)$$

$$a_E = \left(-\frac{1}{2} \psi_e^+ \right) \Delta y \quad (3.129)$$

$$a_S = \left(1 - \frac{1}{2}\psi_s^+\right) \Delta x \quad (3.130)$$

$$a_N = \left(-\frac{1}{2}\psi_n^+\right) \Delta x \quad (3.131)$$

$$a_P = (1 + \gamma)a_P^m \quad (3.132)$$

$$b_P = [(1 + 2\gamma)a_P^m + S_P\Delta x\Delta y - (D_w + D_e + D_s + D_n)] \quad (3.133)$$

$$c_P = -(a_W + a_E) \quad (3.134)$$

$$d_P = -(a_S + a_N) \quad (3.135)$$

$$e = S_C\Delta x\Delta y - \gamma a_P^m \phi_P^{m-1} \quad (3.136)$$

Portanto, os valores de ϕ_P^{m+1} podem ser obtidos diretamente da Equação (3.127).

As equações anteriores foram obtidas considerando que os fluxos advectivos eram positivos. O mesmo procedimento pode ser empregado para os fluxos negativos:

$$\begin{aligned} (1 + \gamma)a_P^m \phi_P^{m+1} &= \left[\left(\frac{1}{2}\psi_w^-\right) \Delta y\right] f_W^m + D_w \phi_W^m - \left[\left(1 - \frac{1}{2}\psi_e^-\right) \Delta y\right] f_E^m + D_e \phi_E^m \\ &+ \left[\left(\frac{1}{2}\psi_s^-\right) \Delta x\right] g_S^m + D_s \phi_S^m - \left[\left(1 - \frac{1}{2}\psi_n^-\right) \Delta x\right] g_N^m + D_n \phi_N^m \\ &\left\{\left[-\frac{1}{2}\psi_e^- + \left(1 - \frac{1}{2}\psi_w^-\right)\right] \Delta y\right\} f_P^m + \left\{\left[-\frac{1}{2}\psi_n^- + \left(1 - \frac{1}{2}\psi_s^-\right)\right] \Delta x\right\} g_P^m \\ &+ [(1 + 2\gamma)a_P^m + S_P\Delta x\Delta y - (D_w + D_e + D_s + D_n)] \phi_P^m \end{aligned}$$

$$+S_C\Delta x\Delta y - \gamma a_P^m \phi_P^{m-1} \quad (3.137)$$

A Equação (3.137) também pode ser escrita numa forma compacta:

$$\begin{aligned} a_P \phi_P^{m+1} = & a_W f_W^m + D_w \phi_W^m + a_E f_E^m + D_e \phi_E^m + a_S g_S^m + D_s \phi_S^m \\ & + a_N g_N^m + D_n \phi_N^m + b_P \phi_P^m + c_P f_P^m + d_P g_P^m + e \end{aligned} \quad (3.138)$$

onde,

$$a_W = \left(\frac{1}{2} \psi_w^- \right) \Delta y \quad (3.139)$$

$$a_E = \left(1 - \frac{1}{2} \psi_e^- \right) \Delta y \quad (3.140)$$

$$a_S = \left(\frac{1}{2} v_s \psi_s^- \right) \Delta x \quad (3.141)$$

$$a_N = \left(1 - \frac{1}{2} \psi_n^- \right) \Delta x \quad (3.142)$$

$$a_P = (1 + \gamma) a_P^m \quad (3.143)$$

$$b_P = [(1 + 2\gamma) a_P^m + S_P \Delta x \Delta y - (D_w + D_e + D_s + D_n)] \quad (3.144)$$

$$c_P = -(a_W + a_E) \quad (3.145)$$

$$d_P = -(a_S + a_N) \quad (3.146)$$

$$e = S_C \Delta x \Delta y - \gamma a_P^m \phi_P^{m-1} \quad (3.147)$$

A partir deste dois desenvolvimentos, podemos pensar numa representação que se aplique tanto ao caso do fluxo positivo quanto negativo:

$$\begin{aligned}
 a_P \phi_P^{m+1} &= a_W f_W^m + D_w \phi_W^m + a_E f_E^m + D_e \phi_E^m + a_S g_S^m + D_s \phi_S^m \\
 &+ a_N g_N^m + D_n \phi_N^m + b_P \phi_P^m + c_P f_P^m + d_P g_P^m + e
 \end{aligned} \tag{3.148}$$

onde,

$$a_W = \left[\left(1 - \frac{1}{2} \psi_w^+ \right) \left[\left[\frac{f_w}{|f_w|}, 0 \right] \right] - \frac{1}{2} \psi_w^- \left[\left[\frac{-f_w}{|f_w|}, 0 \right] \right] \right] \Delta y \tag{3.149}$$

$$a_E = \left[-\frac{1}{2} \psi_e^+ \left[\left[\frac{f_e}{|f_e|}, 0 \right] \right] + \left(1 - \frac{1}{2} \psi_e^- \right) \left[\left[\frac{-f_e}{|f_e|}, 0 \right] \right] \right] \Delta y \tag{3.150}$$

$$a_S = \left[\left(1 - \frac{1}{2} \psi_s^+ \right) \left[\left[\frac{g_s}{|g_s|}, 0 \right] \right] - \frac{1}{2} \psi_s^- \left[\left[\frac{-g_s}{|g_s|}, 0 \right] \right] \right] \Delta x \tag{3.151}$$

$$a_N = \left[-\frac{1}{2} \psi_n^+ \left[\left[\frac{g_n}{|g_n|}, 0 \right] \right] + \left(1 - \frac{1}{2} \psi_n^- \right) \left[\left[\frac{-g_n}{|g_n|}, 0 \right] \right] \right] \Delta x \tag{3.152}$$

$$a_P = (1 + \gamma) a_P^m \tag{3.153}$$

$$b_P = [(1 + 2\gamma) a_P^m + S_P \Delta x \Delta y - (D_w + D_e + D_s + D_n)] \tag{3.154}$$

$$c_P = -(a_W + a_E) \tag{3.155}$$

$$d_P = -(a_S + a_N) \tag{3.156}$$

$$e = S_C \Delta x \Delta y - \gamma a_P^m \phi_P^{m-1} \tag{3.157}$$

3.4 O Problema Elíptico

Vamos propor, agora, a formulação implícita para a resolução das equações elípticas que governam o escoamento bifásico no interior do meio poroso. Sabemos que este escoamento é governado na sua forma geral por uma equação que fornece o fluxo total:

$$\vec{J} = \Gamma \nabla p - \vec{k} \quad (3.158)$$

onde $\vec{k} = (G_i + G_j)$ e por uma equação que expressa a conservação deste fluxo:

$$\nabla \cdot \vec{J} = 0 \quad (3.159)$$

Após substituição da Equação (3.158) na equação da continuidade (3.159), obtemos o seguinte problema elíptico:

$$\nabla \cdot (\Gamma \nabla p) = \nabla \cdot \vec{k} \quad (3.160)$$

que deve ser discretizado mediante a sua integração sobre o volume de controle esquematizado na Figura 3.1,

$$\int_V \frac{\partial}{\partial x} \left(\Gamma \frac{\partial p}{\partial x} \right) dV + \int_V \frac{\partial}{\partial y} \left(\Gamma \frac{\partial p}{\partial y} \right) dV = \int_V \frac{\partial}{\partial x} (G) dV + \int_V \frac{\partial}{\partial y} (G) dV \quad (3.161)$$

Desta integração, resulta a seguinte forma discretizada:

$$\left[\left(\Gamma \frac{\partial p}{\partial x} \right)_e - \left(\Gamma \frac{\partial p}{\partial x} \right)_w \right] \Delta y + \left[\left(\Gamma \frac{\partial p}{\partial y} \right)_n - \left(\Gamma \frac{\partial p}{\partial y} \right)_s \right] \Delta x = [G_e - G_w] \Delta y + [G_n - G_s] \Delta x \quad (3.162)$$

onde empregaremos aproximações do tipo diferenças centradas para as derivadas oriundas do termo difusivo:

$$\left(\frac{\Gamma_e \Delta y}{\delta x_e} \right) (p_E - p_P) - \left(\frac{\Gamma_w \Delta y}{\delta x_w} \right) (p_P - p_W) + \left(\frac{\Gamma_n \Delta x}{\delta y_n} \right) (p_N - p_P)$$

$$-\left(\frac{\Gamma_n \Delta x}{\delta y_n}\right)(p_N - p_P) = [G_e - G_w] \Delta y + [G_n - G_s] \Delta x \quad (3.163)$$

Reagrupando os diferentes termos podemos reescrever esta equação como:

$$a_P p_P = a_E p_E + a_W p_W + a_N p_N + a_S p_S + b \quad (3.164)$$

onde os diferentes coeficientes e o termo b são dados por:

$$a_E = \frac{\Gamma_e \Delta y}{\delta x_e}; \quad a_W = \frac{\Gamma_w \Delta y}{\delta x_w}; \quad a_N = \frac{\Gamma_n \Delta x}{\delta y_n}; \quad a_S = \frac{\Gamma_s \Delta x}{\delta y_s}; \quad (3.165)$$

$$g_e = G_e \Delta y; \quad g_w = G_w \Delta y; \quad g_n = G_n \Delta x; \quad g_s = G_s \Delta x; \quad (3.166)$$

$$a_P = a_E + a_W + a_N + a_S; \quad b = g_e - g_w + g_n - g_s \quad (3.167)$$

O sistema algébrico de equações representado pela Equação (3.164) também pode ser resolvido mediante o emprego do algoritmo TDMA (VERSTEEG; MALALASEKERA, 1995), SIP (FERZIGER; PERIC, 1999), adaptados para a sua aplicação ao caso bidimensional, ou pelo método do Gradiente Conjugado (FERZIGER; PERIC, 1999), os quais são descritos em detalhes no próximo capítulo.

4 MÉTODOS ITERATIVOS

Neste capítulo vamos apresentar algumas alternativas de métodos iterativos que podem ser aplicados na resolução numérica do sistema de equações algébricas oriundo da discretização das equações de balanço. Estes métodos são o algoritmo de Thomas (TDMA), a decomposição LU Incompleta, o método do Gradiente Biconjugado e o método do Gradiente Biconjugado Estável.

No decorrer deste trabalho, discutimos sobre algumas das possibilidades de discretização empregando o método dos volumes finitos. Da aplicação destas técnicas de discretização obtemos um sistema algébrico de equações que necessita ser resolvido. Existem duas famílias de técnicas de resolução de sistemas algébricos, que são os *métodos diretos* e os *indiretos*, ou *iterativos*. Como simples exemplos, de métodos diretos, temos o método de Cramer de inversão de matrizes e o método de Gauss. A principal desvantagem destes métodos é o grande número de informações que devemos armazenar na memória do computador.

Os métodos iterativos baseiam-se na aplicação repetitiva de algoritmos relativamente simples. A convergência, nem sempre garantida, é obtida após um grande número de iterações. Exemplos bem conhecidos destes métodos são o método de Jacobi e o método de Gauss-Seidel ponto a ponto. A principal vantagem destes métodos é que somente os coeficientes não-nulos do sistema de equações precisam ser armazenados.

Os métodos de Jacobi e Gauss-Seidel são fáceis de serem implementados, mas podem apresentar uma convergência lenta quando os sistemas de equações forem muito grandes. Por este motivo, eles não são os mais apropriados para a resolução destes sistemas.

4.1 O Algoritmo de Thomas

Em 1949, Thomas desenvolveu uma técnica para resolver rapidamente sistemas tridiagonais. Este algoritmo é chamado de algoritmo de Thomas ou TDMA (*Tri-Diagonal*

caso tenhamos P_i e Q_i na forma:

$$P_i = \frac{b_i}{a_i - c_i P_{i-1}} \quad (4.4)$$

$$Q_i = \frac{d_i + c_i Q_{i-1}}{a_i - c_i P_{i-1}} \quad (4.5)$$

Estas são relações de recorrência para P e Q . Lembrando que $c_1 = 0$, podemos determinar os valores de P_1 e Q_1 ,

$$P_1 = \frac{b_1}{a_1} \quad (4.6)$$

$$Q_1 = \frac{d_1}{a_1} \quad (4.7)$$

Para $i = 1$, fazemos $a_1 = 1$, $b_1 = 0$ e $d_1 = \phi_1^{m+1}$.

A segunda etapa do algoritmo resume-se na resolução do sistema de equações algébricas, de maneira recursiva para $i = I$ até $i = 1$. Como $b_I = 0$, temos que:

$$P_I = 0 \quad \text{e} \quad Q_I = \phi_I^{m+1} \quad (4.8)$$

A fim de que o algoritmo seja convergente, a matriz $\overline{\overline{A}}$ não deve ser mal-condicionada. Para tanto, basta que ela seja diagonal dominante (FLETCHER, 1991):

$$|a_i| > |c_i| + |b_i| \quad (4.9)$$

O algoritmo para aplicar a TDMA pode ser resumido por:

1. Estimar o campo de variáveis iniciais;
2. Calcular P_1 e Q_1 através das suas relações;
3. Calcular todos os P_i e Q_i com $i = 2$ até $i = I$;
4. Fazer $Q_I = \phi_I^{m+1}$;
5. Calcular as variáveis para os pontos $I - 1$ até 1 com $\phi_i^{m+1} = P_i \phi_{i+1}^{m+1} + Q_i$.

4.1.1 O Método TDMA Linha por Linha

No caso da resolução de problemas bidimensionais, uma combinação conveniente do método direto TDMA com o método iterativo de Gauss-Seidel pode ser formada. Consideremos a malha mostrada na Figura 4.1 e a forma geral bidimensional da equação de transporte discretizada,

$$a_P\phi_P = a_W\phi_W + a_E\phi_E + a_S\phi_S + a_N\phi_N + b \quad (4.10)$$

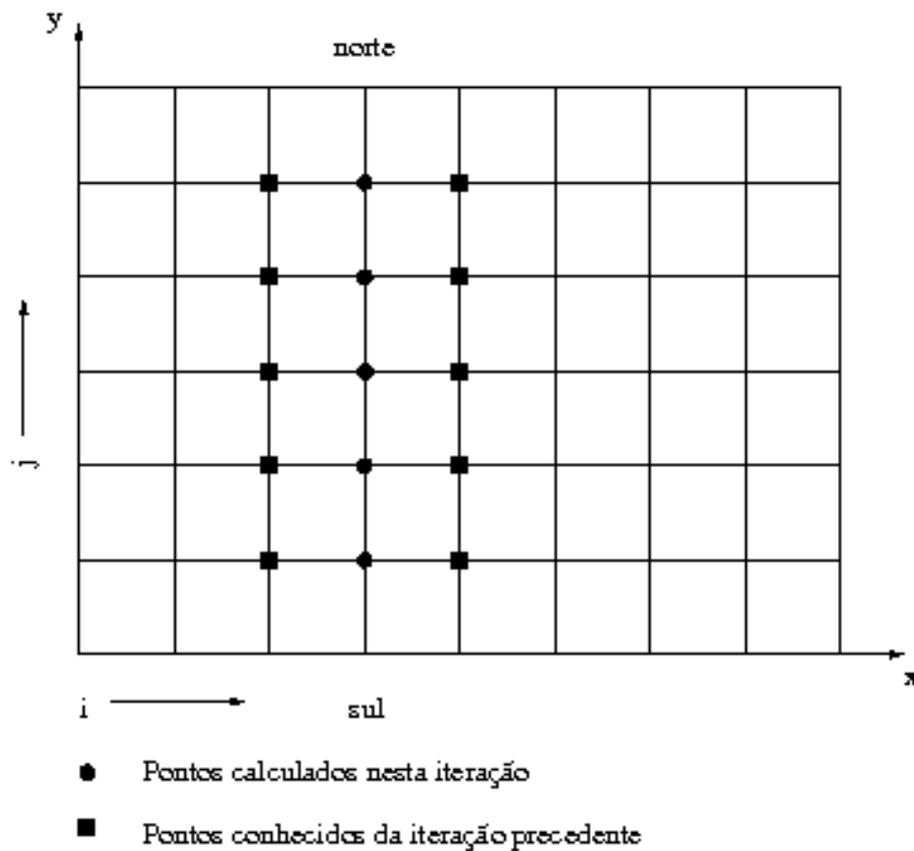


Figura 4.1: Método TDMA linha por linha.

Para que possamos resolver este sistema, o método TDMA é aplicado ao longo de uma linha escolhida, digamos, por exemplo, a linha norte-sul ($n - s$). Com esta finalidade, a equação discretizada é reescrita na forma:

$$-a_S\phi_S + a_P\phi_P - a_N\phi_N = a_W\phi_W + a_E\phi_E + b \quad (4.11)$$

onde o lado direito desta equação é assumido ser temporariamente conhecido, a partir

dos valores determinados na iteração precedente. Esta equação encontra-se na forma da equação apresentada quando da introdução do algoritmo de Thomas, com $c_i \equiv a_S$, $a_i \equiv a_P$, $b_i \equiv a_N$ e $d_i \equiv a_W\phi_W + a_E\phi_E + b$. Desta maneira, podemos resolver o sistema de equações ao longo da direção $n - s$ para a linha escolhida e para valores de $i = 2, 3, 4, \dots, I - 1$, conforme mostrado na Figura 4.1. Este procedimento prosseguirá com a sua aplicação às demais linhas na mesma direção e, caso desejado, o mesmo procedimento poderá ser aplicado à direção leste-oeste.

A convergência do método linha por linha é rápida, uma vez que as informações provenientes das condições de contorno são transmitidas para o interior do domínio numa única vez, não importando a quantidade de nós existentes ao longo da linha considerada. Entretanto, a velocidade de transmissão na outra direção do espaço será a mesma do método ponto por ponto. Para evitarmos este inconveniente, o método é aplicado às duas direções do espaço de maneira alternada (PATANKAR, 1980). Associado a este fato, a direção de varredura (isto é, a seqüência na qual as linhas são escolhidas) pode ser importante em alguns casos (PATANKAR, 1980). Nas nossas aplicações, usaremos o método TDMA alternadamente nas duas direções do espaço e a varredura será feita de cima para baixo e de baixo para cima no caso da direção y e da esquerda para direita e vice-versa no caso da direção x do espaço.

4.1.2 Correção por Blocos

Veremos, em seguida, uma última técnica que visa a acelerar a convergência do algoritmo TDMA linha por linha. Trata-se da correção por blocos, conforme descrita por Patankar (1981). A idéia principal consiste em corrigirmos a solução ϕ^* obtida pela resolução do sistema algébrico de equações, adicionando-se a esta solução uma correção uniforme ϕ' . Esta correção é feita ao longo de uma linha constante. Tomemos como exemplo o caso da correção segundo uma linha para i constante,

$$\phi_{ij} = \phi_{ij}^* + \phi'_i \quad (4.12)$$

Substituindo esta decomposição na equação discretizada:

$$a_P\phi_P = a_W\phi_W + a_E\phi_E + a_S\phi_S + a_N\phi_N + b \quad (4.13)$$

podemos deduzir um sistema de equações para a correção ϕ' :

$$A_i \phi'_i = B_i \phi'_{i+1} + C_i \phi'_{i-1} + D_i \quad (4.14)$$

onde os diferentes coeficientes são dados por:

$$A_i = \sum_j (a_P - a_N - a_S) \quad (4.15)$$

$$B_i = \sum_j a_E \quad (4.16)$$

$$C_i = \sum_j a_W \quad (4.17)$$

$$D_i = \sum_j (a_N \phi_{i(j+1)}^* + a_S \phi_{i(j-1)}^* + a_E \phi_{(i+1)j}^* + a_W \phi_{(i-1)j}^* + b_{ij} - a_P \phi_{ij}^*) \quad (4.18)$$

Devemos notar que D_i representa a soma dos resíduos para o bloco em questão. Portanto, a correção ϕ' deste sistema de equações deverá reduzir este resíduo a zero. O mesmo procedimento deve ser adotado para que possamos realizar a correção ao longo de uma linha j constante. O algoritmo empregado na resolução destes sistemas de equações é o mesmo que o empregado na resolução do sistema algébrico de equações, proveniente da discretização da equação de transporte, ou seja, o método TDMA linha por linha.

4.2 Decomposição LU Incompleta

Este método foi proposto por Stone em 1968 (FERZIGER; PERIC, 1999), também conhecido como o método iterativo SIP (*Strongly Implicit Procedure*). O método SIP foi, especialmente, designado para resolver sistemas de equações algébricas resultante da discretização de equações diferenciais parciais.

O método proposto por Stone é um método baseado na decomposição LU incompleta (ILU). Este método requer, em muitos casos, menor esforço computacional que outros métodos, como por exemplo, o método do gradiente conjugado (CG). Diferentemente de outros métodos, o SIP é um bom método iterativo por si só e pode ser usado com sucesso em conjunção com métodos do tipo gradiente conjugado com pré-condicionador (FERZIGER; PERIC, 1999).

Conforme já mencionado na seção anterior, a formulação implícita nos leva à resolução de um sistema de equações algébricas, que pode ser representado na forma matricial como $\overline{\overline{A}}\vec{\phi} = \vec{d}$. Em se tratando de um método iterativo para a resolução de um sistema algébrico, tal esquema pode ser posto na seguinte forma matricial (FERZIGER; PERIC, 1999):

$$\overline{\overline{M}}\vec{\phi}^{m+1} = \overline{\overline{N}}\vec{\phi}^m + \vec{d} \quad (4.19)$$

e como no caso da convergência ser alcançada $\vec{\phi}^{m+1} = \vec{\phi}^m$, vemos que $\overline{\overline{A}} = \overline{\overline{M}} - \overline{\overline{N}}$. Uma forma alternativa desta representação pode ser obtida, se subtrairmos $\overline{\overline{M}}\vec{\phi}^m$ de ambos os lados desta equação:

$$\overline{\overline{M}}(\vec{\phi}^{m+1} - \vec{\phi}^m) = \vec{d} - (\overline{\overline{M}} - \overline{\overline{N}})\vec{\phi}^m \quad (4.20)$$

ou ainda,

$$\overline{\overline{M}}\vec{\delta}^{m+1} = \vec{\rho}^m \quad (4.21)$$

onde $\vec{\delta}^{m+1} = \vec{\phi}^{m+1} - \vec{\phi}^m$ e $\vec{\rho}^m = \vec{d} - (\overline{\overline{M}} - \overline{\overline{N}})\vec{\phi}^m$.

Sendo $\overline{\overline{L}}\overline{\overline{U}}$ uma aproximação da matriz $\overline{\overline{A}}$, temos que a matriz iteração $\overline{\overline{M}}$ será dada por:

$$\overline{\overline{M}} = \overline{\overline{L}}\overline{\overline{U}} = \overline{\overline{A}} + \overline{\overline{N}} \quad (4.22)$$

onde $\overline{\overline{L}}$ e $\overline{\overline{U}}$ são ambas matrizes esparsas triangulares inferior e superior, respectivamente.

Devemos obter $\overline{\overline{L}}$ e $\overline{\overline{U}}$ tal que $\overline{\overline{L}}\overline{\overline{U}} = \overline{\overline{M}}$ se aproxime o mais possível de $\overline{\overline{A}}$. O método SIP será descrito para matrizes que apresentam a estrutura mostrada na Figura 4.2.

Como na decomposição LU incompleta, as matrizes $\overline{\overline{L}}$ e $\overline{\overline{U}}$ tem elementos não-nulos apenas nas diagonais onde $\overline{\overline{A}}$ tem elementos não-nulos. Entretanto, o produto das matrizes triangular inferior $\overline{\overline{L}}$ e triangular superior $\overline{\overline{U}}$, com estas estruturas, resulta em uma matriz com mais diagonais não-nulas que as da matriz $\overline{\overline{A}}$. Para problemas bidimensionais passam a existir mais duas diagonais, correspondendo aos nós *NW* e *SE* ou *NE* e *SW*, dependendo da ordenação dos nós no vetor $\vec{\phi}$.

Para tornarmos estas matrizes únicas, todos os elementos da diagonal principal de

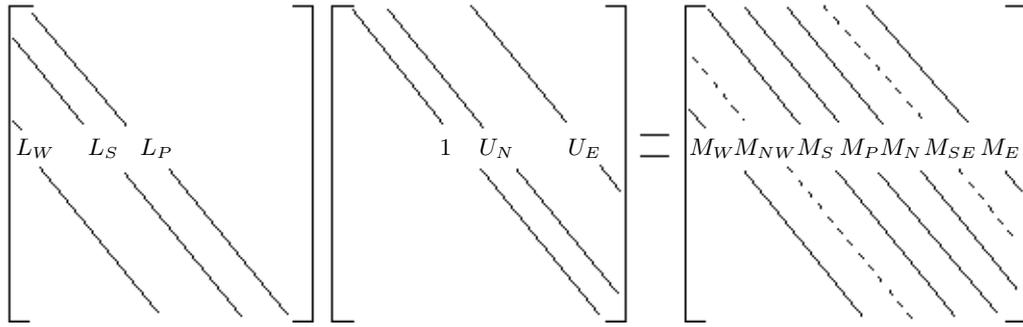


Figura 4.2: Apresentação esquemática da decomposição LU.

$\bar{\bar{U}}$ são reduzidos a unidade. Assim, torna-se necessário determinarmos os cinco conjuntos de elementos (três em $\bar{\bar{L}}$, dois em $\bar{\bar{U}}$). Para matrizes da forma mostrada na Figura 4.2, as regras da multiplicação de matrizes nos fornece os elementos do produto de $\bar{\bar{L}}$ e $\bar{\bar{U}}$, $\bar{\bar{M}} = \bar{\bar{L}}\bar{\bar{U}}$:

$$M_W^{i,j} = L_W^{i,j}$$

$$M_{NW}^{i,j} = L_W^{i,j} U_N^{i-1,j}$$

$$M_S^{i,j} = L_S^{i,j}$$

$$M_P^{i,j} = L_W^{i,j} U_E^{i-1,j} + L_S^{i,j} U_N^{i,j-1} + L_P^{i,j} \quad (4.23)$$

$$M_N^{i,j} = U_N^{i,j} L_P^{i,j}$$

$$M_{SE}^{i,j} = L_S^{i,j} U_E^{i,j-1}$$

$$M_E^{i,j} = U_E^{i,j} L_P^{i,j}$$

As matrizes $\bar{\bar{L}}$ e $\bar{\bar{U}}$ devem ser selecionadas tal que $\bar{\bar{M}}$ seja, tanto quanto possível, uma boa aproximação para a matriz $\bar{\bar{A}}$. No mínimo, $\bar{\bar{M}}$ deve conter as duas diagonais de $\bar{\bar{M}}$ que correspondem às diagonais nulas de $\bar{\bar{A}}$ (ver as Equações (4.23)).

A convergência do método iterativo pode ser melhorada permitindo que $\overline{\overline{N}}$ tenha elementos não-nulos nas diagonais correspondentes às sete diagonais não-nulas de $\overline{\overline{L\overline{U}}}$ (FERZIGER; PERIC, 1999). O método iterativo pode ser facilmente derivado a partir da introdução do vetor $\overline{\overline{M\vec{\phi}}}$:

$$(M\phi)_P = M_P\phi_P + M_S\phi_S + M_N\phi_N + M_E\phi_E + M_W\phi_W + M_{NW}\phi_{NW} + M_{SE}\phi_{SE} \quad (4.24)$$

Cada termo nesta equação corresponde a uma diagonal de $\overline{\overline{M}} = \overline{\overline{L\overline{U}}}$, sendo os dois últimos termos chamados de “extra”.

A matriz $\overline{\overline{N}}$ deve conter as duas diagonais “extra” de $\overline{\overline{M}}$, e precisamos escolher os elementos das diagonais restantes tal que $\overline{\overline{N\vec{\phi}}} \cong \vec{0}$:

$$N_P\phi_P + N_N\phi_N + N_S\phi_S + N_E\phi_E + N_W\phi_W + M_{NW}\phi_{NW} + M_{SE}\phi_{SE} \cong 0 \quad (4.25)$$

Isto requer que a contribuição dos dois termos “extra” na Equação (4.25) seja anulada pela contribuição das outras diagonais. Em outras palavras, a Equação (4.25) deve reduzir-se à seguinte expressão:

$$M_{NW}(\phi_{NW} - \phi_{NW}^*) + M_{SE}(\phi_{SE} - \phi_{SE}^*) \cong 0 \quad (4.26)$$

onde ϕ_{NW}^* e ϕ_{SE}^* são aproximações de ϕ_{NW} e ϕ_{SE} .

Uma aproximação possível consiste nas seguintes expressões:

$$\phi_{NW}^* \cong \alpha(\phi_W + \phi_N - \phi_P) \quad (4.27)$$

$$\phi_{SE}^* \cong \alpha(\phi_S + \phi_E - \phi_P) \quad (4.28)$$

Para $\alpha = 1$ temos que estas são aproximações de segunda ordem, mas a estabilidade do método requer que $\alpha < 1$ (FERZIGER; PERIC, 1999).

Ao substituírmos estas aproximações na Equação (4.26) e igualarmos o resultado à Equação (4.25), obtemos todos os elementos de $\overline{\overline{N}}$ como combinações lineares de M_{NW}

e M_{SE} . Os elementos de $\overline{\overline{M}}$, Equação (4.23), podem agora ser igualados à soma dos elementos de $\overline{\overline{A}}$ e $\overline{\overline{N}}$. As equações resultantes não são suficientes para determinarmos todos os elementos de $\overline{\overline{L}}$ e $\overline{\overline{U}}$, mas elas podem ser resolvidas seqüencialmente:

$$\begin{aligned}
L_W^{i,j} &= A_W^{i,j}/(1 + \alpha U_N^{i-1,j}) \\
L_S^{i,j} &= A_S^{i,j}/(1 + \alpha U_E^{i,j-1}) \\
L_P^{i,j} &= A_P^{i,j} + \alpha(L_W^l U_N^{i-1,j} + L_S^{i,j} U_E^{i,j-1}) - L_W^{i,j} U_E^{i-1,j} - L_S^{i,j} U_N^{i,j-1} \\
U_N^{i,j} &= (A_N^{i,j} - \alpha L_W^{i,j} U_N^{i-1,j})/L_P^{i,j} \\
U_E^{i,j} &= (A_E^{i,j} - \alpha L_S^{i,j} U_E^{i,j-1})/L_P^{i,j}
\end{aligned} \tag{4.29}$$

Os coeficientes devem ser calculados nesta ordem. Para os nós próximos à fronteira, todos os elementos da matriz correspondentes à fronteira são considerados nulos. Assim, ao longo da fronteira oeste ($i = 2$), elementos com índice $(i - 1, j)$ são nulos; ao longo da fronteira sul ($j = 2$), elementos com índice $(i, j - 1)$ são nulos; o mesmo raciocínio se aplica ao longo das fronteiras norte e leste.

Em seguida, nos concentraremos na resolução do sistema de equações mediante a aplicação da fatorização apresentada. Conforme visto na introdução desta seção, a equação resultante da atualização do resíduo é dada pela Equação (4.21):

$$\overline{\overline{L}} \overline{\overline{U}} \vec{\delta}^{m+1} = \vec{\rho}^m \tag{4.30}$$

Estas equações são resolvidas como na decomposição LU tradicional. A multiplicação da Equação (4.30) por $\overline{\overline{L}}^{-1}$ nos conduz a:

$$\overline{\overline{U}} \vec{\delta}^{m+1} = \overline{\overline{L}}^{-1} \vec{\rho}^m = \vec{R}^m \tag{4.31}$$

sendo os valores de \vec{R}^m dados pela seguinte expressão:

$$R^{i,j} = (\rho^{i,j} - L_S^{i,j} R^{i,j-1} - L_W^{i,j} R^{i-1,j})/L_P^{i,j} \tag{4.32}$$

e esta equação deve ser resolvida no sentido da ordem crescente de (i, j) . Terminada a determinação da computação de \vec{R}^m , o próximo passo consiste na resolução da Equação (4.31):

$$\delta^{i,j} = R^{i,j} - U_N^{i,j} \delta^{i,j+1} - U_E^{i,j} \delta^{i+1,j} \quad (4.33)$$

na ordem decrescente de (i, j) .

No método SIP, os elementos das matrizes $\bar{\bar{L}}$ e $\bar{\bar{U}}$ precisam ser calculados apenas uma vez, antes da primeira iteração. Nas iterações seguintes é necessário apenas calcular o resíduo $\vec{\rho}$, depois \vec{R} e finalmente $\vec{\delta}$, através da resolução dos dois sistemas triangulares.

O método de Stones converge geralmente em um número pequeno de iterações. A taxa de convergência pode ser melhorada, variando α de iteração a iteração (e ponto a ponto). Mas isto requer que a decomposição LU seja refeita cada vez que α é mudado. Portanto, na prática o valor de α é mantido constante durante todo o processo iterativo.

4.3 O Método do Gradiente Biconjugado

O sistema de equações lineares $\bar{\bar{A}}\vec{\phi} = \vec{d}$, onde a matriz $\bar{\bar{A}}$ é não-simétrica, pode ser resolvido pelo método do Gradiente Biconjugado (BI-CG). Neste caso, precisamos converter o problema não-simétrico em um problema simétrico. Portanto, esse método é uma generalização do método do Gradiente Conjugado Pré-Condicionado (CG) (GOLUB; LOAN, 1985), onde trabalhamos tanto com a matriz $\bar{\bar{A}}$ como com a sua transposta $\bar{\bar{A}}^T$. Existem algumas maneiras de fazermos isto e talvez a mais fácil é a de considerarmos o seguinte sistema de equações (FERZIGER; PERIC, 1999):

$$\begin{pmatrix} \bar{\bar{0}} & \bar{\bar{A}} \\ \bar{\bar{A}}^T & \bar{\bar{0}} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \vec{\psi} \\ \vec{\phi} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \vec{d} \\ \vec{0} \end{pmatrix}$$

Conforme podemos observar, este sistema de equações pode ser decomposto em dois subsistemas. O primeiro representa o problema original que queremos resolver, enquanto que o segundo envolve a matriz transposta e é irrelevante para os nossos propósitos. O algoritmo para a solução do sistema de equações algébricas, utilizando o Método do Gradiente Biconjugado, pode ser obtido a partir da aplicação do método do gradiente conjugado pré-condicionado a este sistema (FERZIGER; PERIC, 1999):

1. Estimar o campo de variáveis iniciais:

$$k = 0, \vec{\phi}^0 = \vec{\phi}_{in}, \vec{\rho}^0 = \vec{d} - \overline{\overline{A}}\vec{\phi}_{in}, \vec{\rho}^0 = \vec{d} - \overline{\overline{A}}^T \vec{\phi}_{in}, \vec{p}^0 = \vec{p}^0 = \vec{0}, s_0 = 10^{30}$$

2. Fazer:

$$k = k + 1$$

3. Resolver os sistemas:

$$\overline{\overline{M}}\vec{z}^k = \vec{\rho}^{k-1}$$

$$\overline{\overline{M}}^T \vec{z}^k = \vec{\rho}^{k-1}$$

4. Calcular:

$$s^k = \vec{z}^k \cdot \vec{\rho}^{k-1}$$

$$\beta^k = s^k / s^{k-1}$$

$$\vec{p}^k = \vec{z}^k + \beta^k \vec{p}^{k-1}$$

$$\vec{\bar{p}}^k = \vec{\bar{z}}^k + \beta^k \vec{\bar{p}}^{k-1}$$

$$\alpha^k = s^k / (\vec{\bar{p}}^k \cdot \overline{\overline{A}}\vec{p}^k)$$

$$\vec{\phi}^k = \vec{\phi}^{k-1} + \alpha^k \vec{p}^k$$

$$\vec{\rho}^k = \vec{\rho}^{k-1} - \alpha^k \overline{\overline{A}}\vec{p}^k$$

$$\vec{\bar{\rho}}^k = \vec{\bar{\rho}}^{k-1} - \alpha^k \overline{\overline{A}}^T \vec{\bar{p}}^k$$

5. Repetir até a convergência.

Este método requer um esforço computacional por iteração duas vezes maior que o do método padrão do gradiente conjugado pré-condicionado, mas converge em um número de iterações aproximadamente igual (FERZIGER; PERIC, 1999).

O método do Gradiente Biconjugado (BI-CG) pode apresentar boa convergência, mas, às vezes, também podemos observar uma convergência muito irregular e existe a possibilidade do método falhar. Com o objetivo de evitar esse padrão irregular de convergência, foi desenvolvido o método do Gradiente Biconjugado Estável (BI-CGSTAB).

4.4 O Método do Gradiente Biconjugado Estável

O método do Gradiente Biconjugado Estável (BI-CGSTAB) foi desenvolvido para resolver sistemas algébricos não-simétricos e é capaz de evitar o comportamento irregular

apresentado em alguns casos, no que diz respeito à convergência, inerente ao método do Gradiente Biconjugado.

Este método converge tão rápido quanto o método do Gradiente Conjugado, algumas vezes mais rápido e em outras vezes menos rápido. Entretanto, o método do Gradiente Biconjugado Estável (BI-CGSTAB) apresenta uma convergência mais suave.

O algoritmo para a solução do sistema de equações algébricas, utilizando o método do Gradiente Biconjugado Estável, se apresenta da seguinte forma (FERZIGER; PERIC, 1999):

1. Estimar o campo de variáveis iniciais:

$$k = 0, \vec{\phi}^0 = \vec{\phi}_{in}, \vec{\rho}^0 = \vec{D} - A\vec{\phi}_{in}, \vec{u}^0 = \vec{p}^0 = \vec{0}$$

2. Fazer $k = k + 1$ e calcular:

$$\beta^k = \vec{\rho}^0 \cdot \vec{\rho}^{k-1}$$

$$\omega^k = (\beta^k \gamma^{k-1}) / (\alpha^{k-1} \beta^{k-1})$$

$$\vec{p}^k = \vec{\rho}^{k-1} + \omega^k (\vec{p}^{k-1} - \alpha^{k-1} \vec{u}^{k-1})$$

3. Resolver o sistema:

$$\overline{\overline{M}} \vec{z} = \vec{p}^k$$

4. Calcular:

$$\vec{u}^k = \overline{\overline{A}} \vec{z}$$

$$\gamma^k = \beta^k / (\vec{u}^k \cdot \vec{\rho}^0)$$

$$\vec{w} = \vec{\rho}^{k-1} - \gamma^k \vec{u}^k$$

5. Resolver o sistema:

$$\overline{\overline{M}} \vec{y} = \vec{w}$$

6. Calcular:

$$\vec{v} = \overline{\overline{A}} \vec{y}$$

$$\alpha^k = (\vec{v} \cdot \vec{\rho}^k) / (\vec{v} \cdot \vec{v})$$

$$\vec{\phi}^k = \vec{\phi}^{k-1} + \gamma^k \vec{z} + \alpha^k \vec{y}$$

$$\vec{\rho}^k = \vec{w} - \alpha^k \vec{v}$$

7. Repetir até a convergência.

Devemos observar que neste algoritmo os vetores \vec{u} , \vec{v} , \vec{w} , \vec{y} e \vec{z} são meramente vetores auxiliares e não apresentam nenhum significado físico para os problemas tratados neste trabalho.

5 VALIDAÇÃO NUMÉRICA

Antes de podermos empregar os nossos simuladores a problemas não-lineares, devemos ter certeza de que eles são capazes de apresentar resultados acurados na resolução de alguns problemas clássicos. Dentre as várias possibilidades, decidimos empregar na sua validação numérica a resolução da equação de Burgers com dissipação e a equação de Buckley-Leverett. No primeiro caso, temos uma função de fluxo convexa, isto é, a derivada segunda desta função com relação à variável dependente não troca de sinal, enquanto que, no segundo caso, temos uma função de fluxo não-convexa e a derivada segunda troca de sinal. Em se tratando de problemas estritamente hiperbólicos (sem dissipação), a resolução da equação de Burgers permite o aparecimento de um choque, enquanto que a solução da equação de Buckley-Leverett apresenta uma rarefação e um choque (LEVEQUE, 2002).

5.1 Equação de Burgers

A equação de Burgers é um exemplo conhecido de uma equação diferencial parcial não-linear, cuja solução pode ser obtida mediante a resolução de uma equação diferencial parcial linear, graças ao emprego da transformação de Cole-Hopf (FLETCHER, 1991; LEWANDOWSKI, 2006).

A equação de Burgers com dissipação, escrita na sua forma conservativa, é dada no caso unidimensional por:

$$\frac{\partial \phi}{\partial t} + \frac{\partial}{\partial x} f(\phi) = \alpha \frac{\partial^2 \phi}{\partial x^2} \quad (5.1)$$

onde $\alpha > 0$ é o coeficiente de dissipação (ou difusão) e a função de fluxo é dada por $f(\phi) = \phi^2/2$. Da forma da função de fluxo, verificamos facilmente que $f''(\phi) = 1$ e, portanto, ela não troca de sinal.

O primeiro passo na obtenção de uma solução para esta equação consiste na proposição da seguinte transformação:

$$\phi = \frac{\partial \varphi}{\partial x}, \quad \varphi = \varphi(x, t) \quad (5.2)$$

Após substituição desta transformação na equação de Burgers e sua posterior integração com relação a x , obtemos:

$$\frac{\partial \varphi}{\partial t} + \frac{1}{2} \left(\frac{\partial \varphi}{\partial x} \right)^2 = \alpha \frac{\partial^2 \varphi}{\partial x^2} \quad (5.3)$$

Em seguida, introduzimos uma segunda transformação dada por:

$$\varphi = -2\alpha \ln \theta \quad (5.4)$$

de modo que a equação diferencial parcial em φ pode ser reescrita, em termos de θ , como:

$$\frac{\partial \theta}{\partial t} = \alpha \frac{\partial^2 \theta}{\partial x^2} \quad (5.5)$$

e a solução da equação de Burgers pode ser obtida a partir da solução (θ) desta equação na forma:

$$\phi = \frac{\partial \varphi}{\partial x} = -2\alpha \frac{\partial}{\partial x} (\ln \theta) = -\frac{2\alpha}{\theta} \frac{\partial \theta}{\partial x} \quad (5.6)$$

e, por outro lado, podemos expressar θ em função de ϕ :

$$\theta(x, t) = \exp \left(-\frac{1}{2\alpha} \int \phi(x, t) dx \right) \quad (5.7)$$

Vamos considerar, agora, a solução desta equação no caso de um meio infinito. Da teoria das equações diferenciais parciais sabemos que esta solução será dada em termos da função de Green e da condição inicial:

$$\theta(x, t) = \int_{-\infty}^{+\infty} G(\xi, x, t) \theta(\xi, 0) d\xi \quad (5.8)$$

onde a função de Green, para este caso específico, é dada por (ÖZISIK, 1980):

$$G(\xi, x, t) = \frac{1}{\sqrt{4\pi\alpha t}} \exp \left[-\frac{(x - \xi)^2}{4\alpha t} \right] \quad (5.9)$$

5.1.1 Primeiro Problema Teste

No primeiro problema teste, a equação de Burgers foi resolvida numericamente para uma condição inicial do tipo Riemann:

$$\phi(x, 0) = \begin{cases} 1 & x \leq 0 \\ 0 & x > 0 \end{cases} \quad (5.10)$$

Para esta condição inicial a solução da equação de Burgers com dissipação é fornecida a partir do emprego das Equações (5.6)-(5.9) (FLETCHER, 1991):

$$\phi(x, t) = \frac{\int_{-\infty}^{+\infty} \frac{(x-t)}{t} \exp\left[-\frac{1}{2\alpha} \int \phi_0(\xi') d\xi'\right] \exp\left[-\frac{(x-\xi)^2}{4\alpha t}\right] d\xi}{\int_{-\infty}^{+\infty} \exp\left[-\frac{1}{2\alpha} \int \phi_0(\xi') d\xi'\right] \exp\left[-\frac{(x-\xi)^2}{4\alpha t}\right] d\xi} \quad (5.11)$$

A solução analítica (5.11) será utilizada no estudo da convergência numérica mediante o refinamento de malha e, a seguir, na validação dos resultados numéricos obtidos com o emprego do nosso simulador com um limitador de fluxo do tipo *monotonized central-difference* (LEVEQUE, 2002).

Nas Figuras 5.1 e 5.2 são apresentados os valores de ϕ , para um tempo $t = 2, 0$, obtidos com cinco malhas uniformes diferentes: 30, 60, 120, 240 e 480 volumes de controle. Empregamos, inicialmente, um incremento de tempo $\Delta t = 2, 0 \cdot 10^{-2}$ e de espaço $\Delta x = 0, 2$ e dois valores do coeficiente de dissipação $\alpha = 1, 0 \cdot 10^{-5}$ e $\alpha = 1, 0 \cdot 10^{-1}$, respectivamente. A razão $\Delta t/\Delta x$ é mantida constante para as diferentes malhas utilizadas.

Os resultados mostram que os valores numéricos convergem para a solução analítica à medida que a malha é refinada e que, para o problema predominantemente hiperbólico, devemos empregar uma malha mais refinada. Portanto, nas nossas validações vamos empregar uma malha de 240 volumes de controle para os problemas dissipativos e de 480 volumes de controle quando os efeitos difusivos forem desprezados.

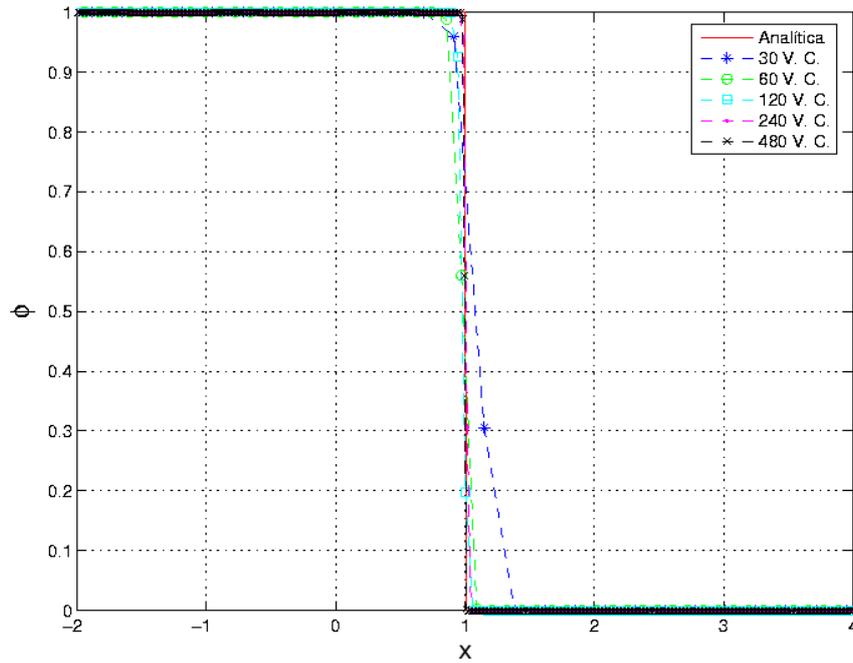


Figura 5.1: Estudo do refinamento de malha para a equação de Burgers para $\alpha = 1, 0.10^{-5}$ e $t = 2, 0$, empregando um limitador de fluxo do tipo *monotonized central-difference*.

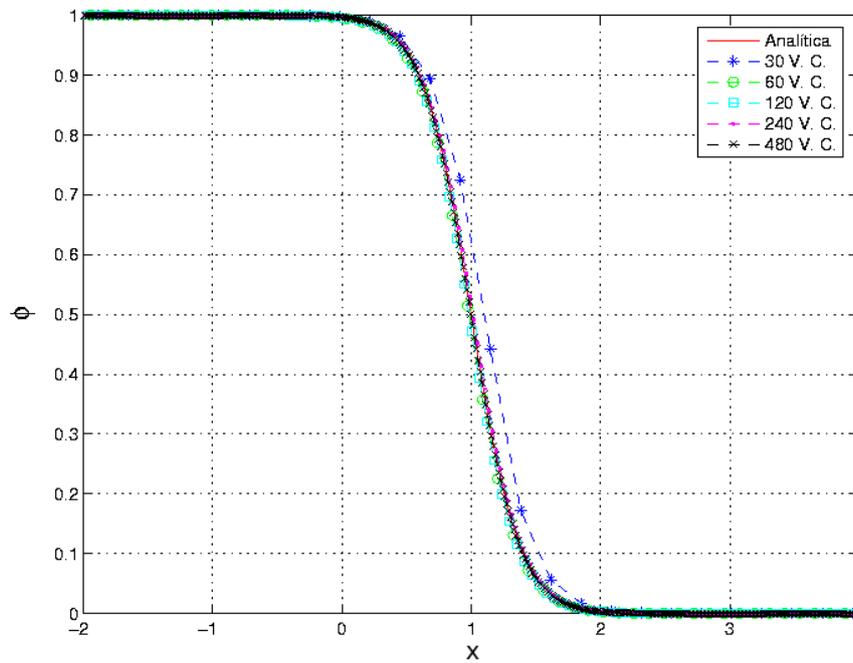


Figura 5.2: Estudo do refinamento de malha para a equação de Burgers para $\alpha = 1, 0.10^{-1}$ e $t = 2, 0$, empregando um limitador de fluxo do tipo *monotonized central-difference*.

A fim de validarmos o nosso simulador numérico, na Figura 5.3 estão representadas as soluções analíticas e numéricas da equação de Burgers com difusão ($\alpha = 1,0 \cdot 10^{-1}$) para três instantes de tempo: $t = 1,0; 2,0; 3,0$. Desta figura, podemos comprovar a acurácia dos resultados obtidos com a nossa formulação implícita para o problema parabólico não-linear unidimensional.

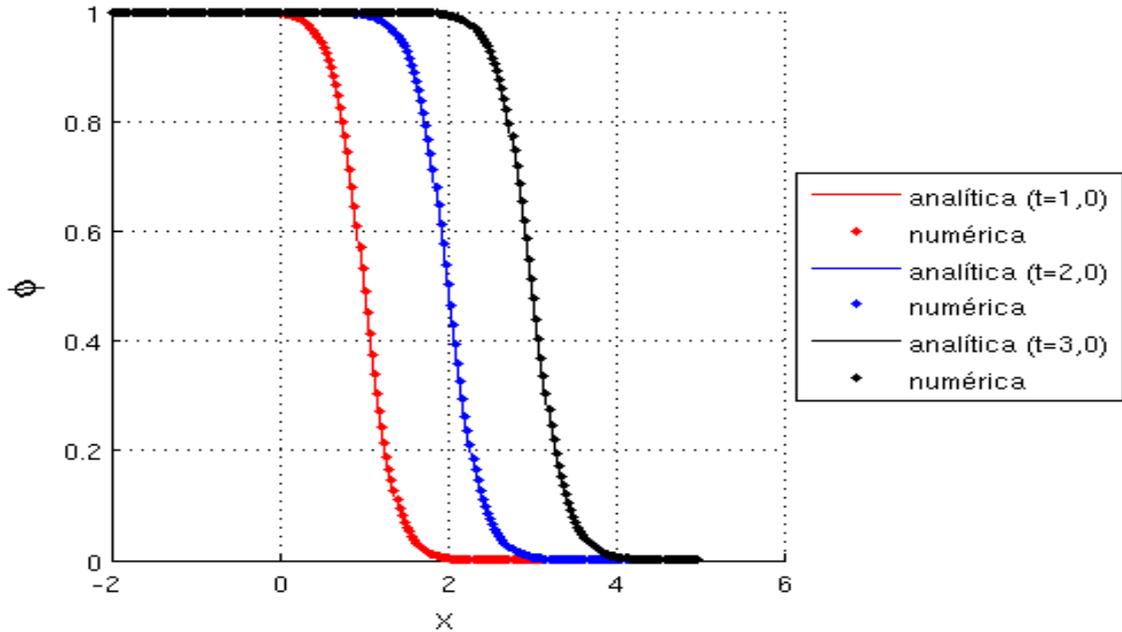


Figura 5.3: Solução da equação de Burgers para $\alpha = 0,1$, $\Delta t = 1,0 \cdot 10^{-3}$ e $t = 1,0; 2,0; 3,0$, empregando um limitador de fluxo do tipo *monotonized central-difference*.

Nas Figuras 5.4 e 5.5 estão representados os resultados numéricos da equação de Burgers e são feitas comparações entre as soluções analíticas e numéricas, utilizando esquemas não-TVD e esquemas TVD para cinco instantes de tempo $t = 1,0; 2,0; 3,0; 4,0; 5,0$; empregando uma malha computacional de comprimento $L = 6,0$; incremento de tempo $\Delta t = 2,0 \cdot 10^{-2}$ e de espaço $\Delta x = 0,2$; um esquema de discretização no tempo totalmente implícito $\gamma = 0,0$; coeficiente de difusão $\alpha = 1,0 \cdot 10^{-4}$ e uma malha de 480 volumes de controle.

Na Figura 5.4, os esquemas não-TVD utilizados foram o *upwind* de primeira ordem, diferenças centradas e o *upwind* de segunda ordem. Os resultados obtidos com o esquema de diferenças centradas apresentaram oscilações espúrias bastante acentuadas.

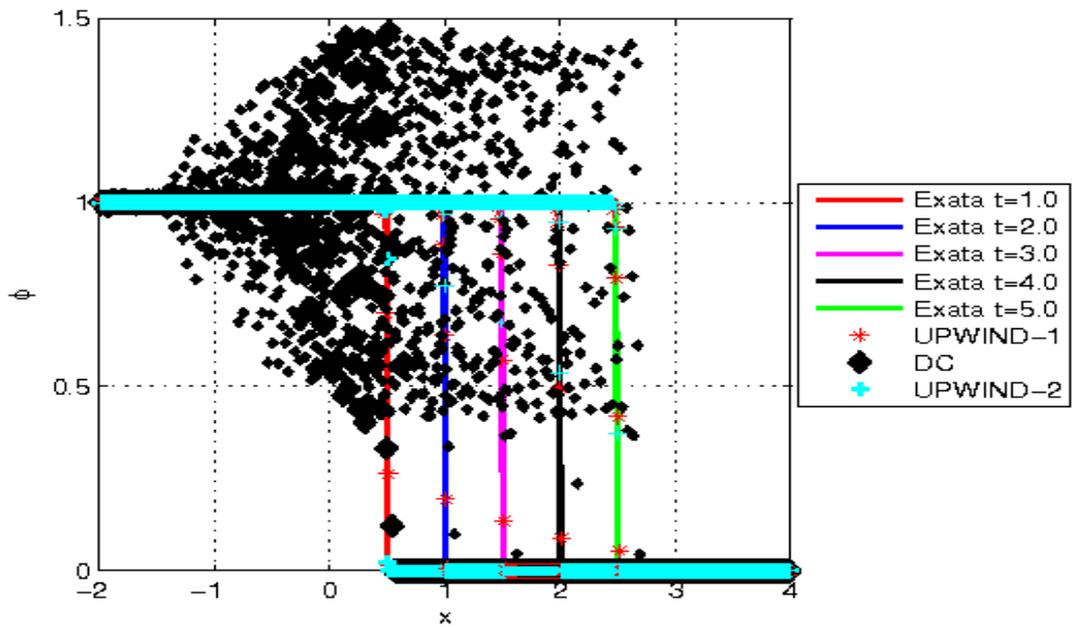


Figura 5.4: Solução numérica da equação de Burgers, esquemas não-TVD.

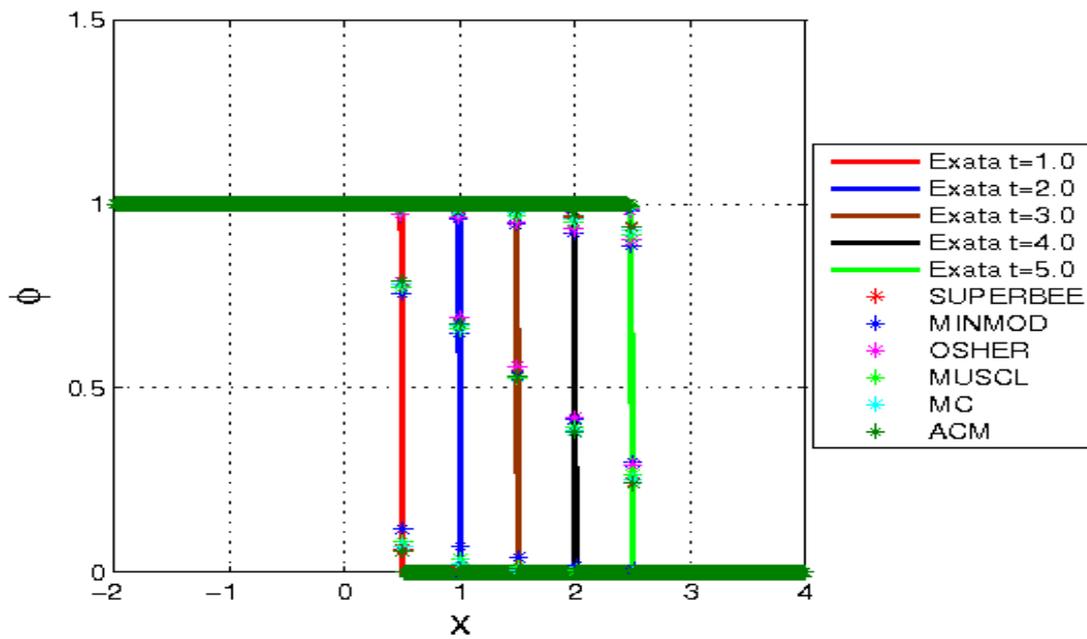


Figura 5.5: Solução numérica da equação de Burgers, esquemas TVD.

Já na Figura 5.5, os esquemas TVD utilizados foram o *superbee*, o MINMOD, o Osher, o MUSCL, o *monotonized central-difference* (MC) e o *artificial compression method* (ACM). Os resultados apresentados mostram que os valores numéricos convergem para a solução exata. Podemos observar também que as soluções numéricas apresentaram resultados mais acurados que os dos esquemas não-TVD e não apresentaram oscilações espúrias, o que comprova a eficiência dos esquemas TVD na resolução deste tipo de problema.

5.1.2 Segundo Problema Teste

No segundo problema teste, a equação de Burgers é resolvida numericamente para uma condição inicial do tipo Riemann:

$$\phi(x, 0) = \begin{cases} 0 & x \leq 0 \\ 1 & x > 0 \end{cases} \quad (5.12)$$

Neste caso a solução analítica deste problema não apresenta mais um choque, mas sim uma rarefação.

As simulações foram realizadas usando os mesmos parâmetros que os empregados na resolução dos problemas mostrados nas Figuras 5.4 e 5.5.

A Figura 5.6 apresenta os resultados dos esquemas não-TVD. As simulações foram feitas com os esquemas *upwind* de primeira ordem e diferenças centradas, não sendo possível realizar a simulação com o método *upwind* de segunda ordem, pois este divergiu.

Na Figura 5.7 os esquemas TVD utilizados foram o *superbee*, o MINMOD, o Osher, o MUSCL, o *monotonized central-difference* (MC) e o *artificial compression method* (ACM). Podemos observar que os resultados obtidos para os esquemas não-TVD se mostraram mais difusivos que para os esquemas TVD, conforme podemos observar na parte superior destes gráficos. Uma vez mais pudemos constatar a superioridade dos esquemas do tipo TVD com relação aos esquemas clássicos considerados.

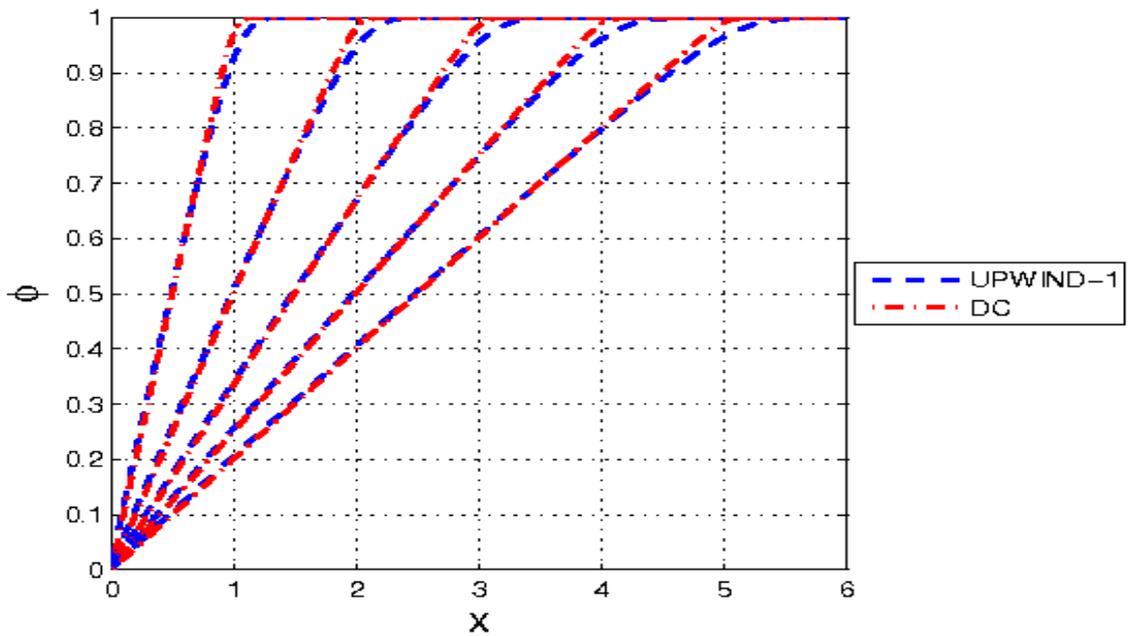


Figura 5.6: Solução numérica da equação de Burgers do tipo rarefação, esquemas não-TVD.

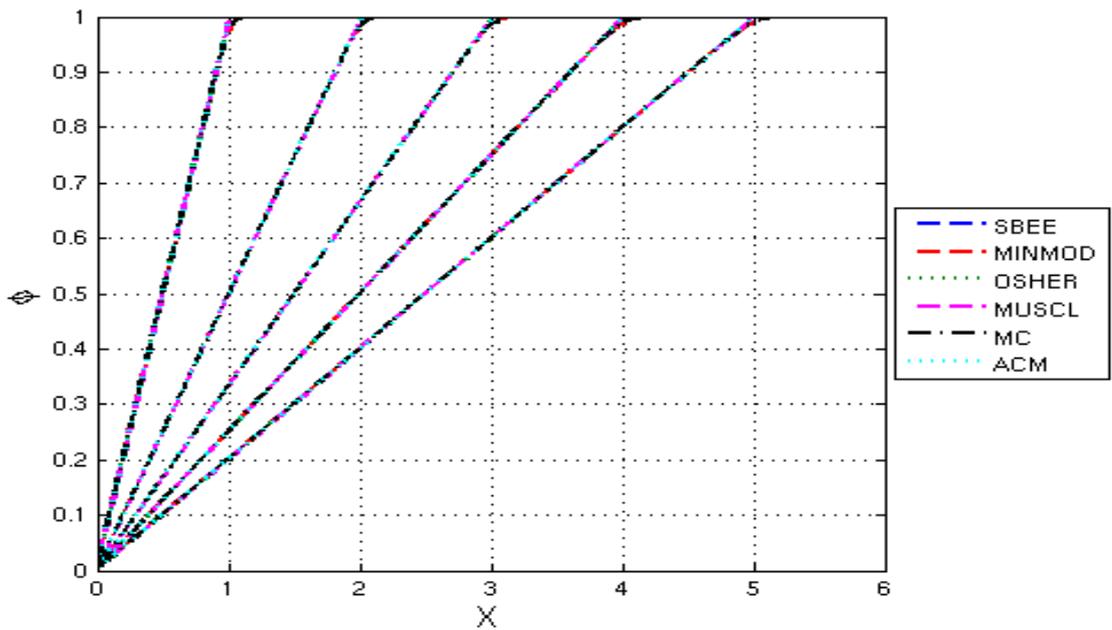


Figura 5.7: Solução numérica da equação de Burgers do tipo rarefação, esquemas TVD.

5.1.3 Terceiro Problema Teste

O terceiro problema teste resume-se na resolução da equação de Burgers com dissipação, num meio infinito, sujeita à seguinte condição inicial:

$$\phi(x, 0) = \frac{\alpha}{B} [A - 4 \tanh(x/B)] \quad (5.13)$$

onde A e B são constantes.

Para esta condição inicial, podemos mostrar que a solução da equação de Burgers fornecida pelas Equações (5.6) e (5.8) é dada por (LEWANDOWSKI, 2006):

$$\phi(x, t) = 2\alpha \frac{2ae^{(\alpha ta^2 - ax)} + be^{(\alpha tb^2 - bx)} + ce^{(\alpha tc^2 - cx)}}{2e^{(\alpha ta^2 - ax)} + e^{(\alpha tb^2 - bx)} + e^{(\alpha tc^2 - cx)}} \quad (5.14)$$

onde $a = A/2B$, $b = a + 2/B$ e $c = a - 2/B$.

Os resultados numéricos reproduzidos neste trabalho, e apresentados na Figura 5.8, foram obtidos para $\alpha = 1, 0.10^{-1}$, $A = 4$ e $B = 7$. Estes valores são os mesmos que os empregados em Lewandowski (2006) e os perfis de $\phi(x, t)$ foram determinados para três valores do tempo ($t = 100, 200$ e 300). O número de volumes finitos empregados foi de 240, todos os resultados foram determinados para um $\Delta t = 1, 0.10^{-1}$ e empregamos um limitador de fluxo do tipo *superbee* (LIE; NOELLE, 2003). Neste caso, também, a solução numérica é acurada o suficiente e apresenta uma concordância muito boa com a solução analítica.

5.2 Equação de Buckley-Leverett

Neste trabalho, estamos nos concentrando na resolução de problemas parabólicos e, por este motivo, a equação de Buckley-Leverett será apresentada como sendo dada pela seguinte equação diferencial parcial:

$$\frac{\partial \phi}{\partial t} + \frac{\partial}{\partial x} f(\phi) = \Gamma \frac{\partial^2 \phi}{\partial x^2} \quad (5.15)$$

onde Γ representa um valor infinitesimal não-nulo e positivo. Para este problema iremos considerar que a função de fluxo não-linear e não-convexa, usualmente empregada na simulação de escoamentos bifásicos (LEVEQUE, 2002), é dada por:

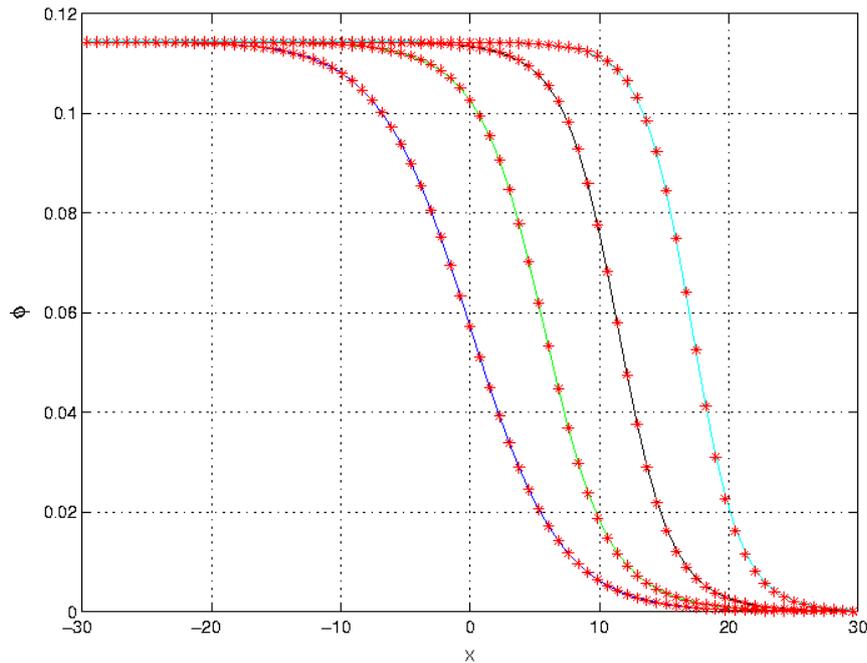


Figura 5.8: Comparação entre as soluções analítica (linhas contínuas) e numérica (*) da equação de Burgers unidimensional com dissipação.

$$f(\phi) = \frac{\phi^2}{\phi^2 + a(1 - \phi)^2} \quad (5.16)$$

onde a é uma constante (relação entre as viscosidades das duas fases no problema físico) e podemos mostrar sem maiores dificuldades que:

$$f'(\phi) = \frac{2\phi a(1 - \phi)}{[\phi^2 + a(1 - \phi)^2]^2} \quad (5.17)$$

resultando numa derivada segunda, $f''(\phi)$, que troca de sinal em função dos valores de ϕ (LEVEQUE, 2002).

Na introdução deste capítulo, dissemos que a solução da equação de Buckley-Leverett, devido à função de fluxo ser não-convexa, apresenta uma rarefação e um choque. Da teoria das equações diferenciais hiperbólicas (LEVEQUE, 2002), podemos determinar analiticamente o valor da variável ϕ que determina o final da rarefação e o início do choque. Este procedimento será exemplificado com base na Figura 5.9. Da figura, podemos escrever que a inclinação da reta tangente à função de fluxo que passa pelos pontos $(\phi_0, f(\phi_0))$ e $(\phi^*, f(\phi^*))$ é dada por:

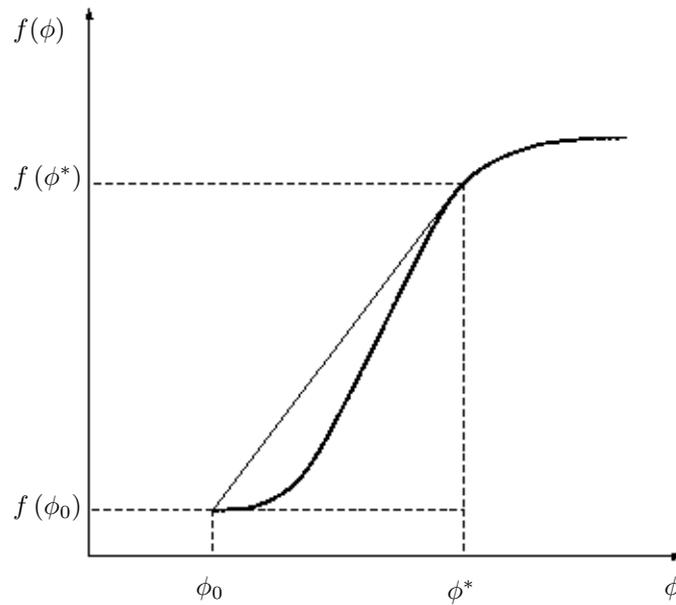


Figura 5.9: Envelope convexo para a função de fluxo.

$$f'(\phi^*) = \frac{f(\phi^*) - f(\phi_0)}{\phi^* - \phi_0} \quad (5.18)$$

ou ainda,

$$g(\phi^*) \equiv f'(\phi^*) (\phi^* - \phi_0) + f(\phi_0) - f(\phi^*) = 0 \quad (5.19)$$

e o valor de ϕ^* que verifica esta igualdade define a altura do salto da solução da equação de Buckley-Leverett para uma função de fluxo não-convexa (LEVEQUE, 2002).

5.2.1 Primeiro Problema Teste

Para o problema de Buckley-Leverett, o nosso primeiro problema teste irá obter a solução numérica desta equação diferencial parcial para uma função de fluxo dada pela Equação (5.16), para $a = 0,05$ e considerando a seguinte condição inicial:

$$\phi(x, t) = \begin{cases} 1 & x \leq 0 \\ 0 & x > 0 \end{cases} \quad (5.20)$$

Do envelope convexo desta função sabemos que o valor teórico do salto é dado

para $\phi^* = 0,22$. Conforme explanado anteriormente, este valor de ϕ determina o final da rarefação e o início do salto da função $\phi(x, t)$. Na Figura 5.10 vemos que as soluções obtidas, para diferentes valores do tempo, partem do valor inicial $\phi = 1,0$ e apresentam uma rarefação até o valor previsto para o salto, de acordo com a previsão teórica.

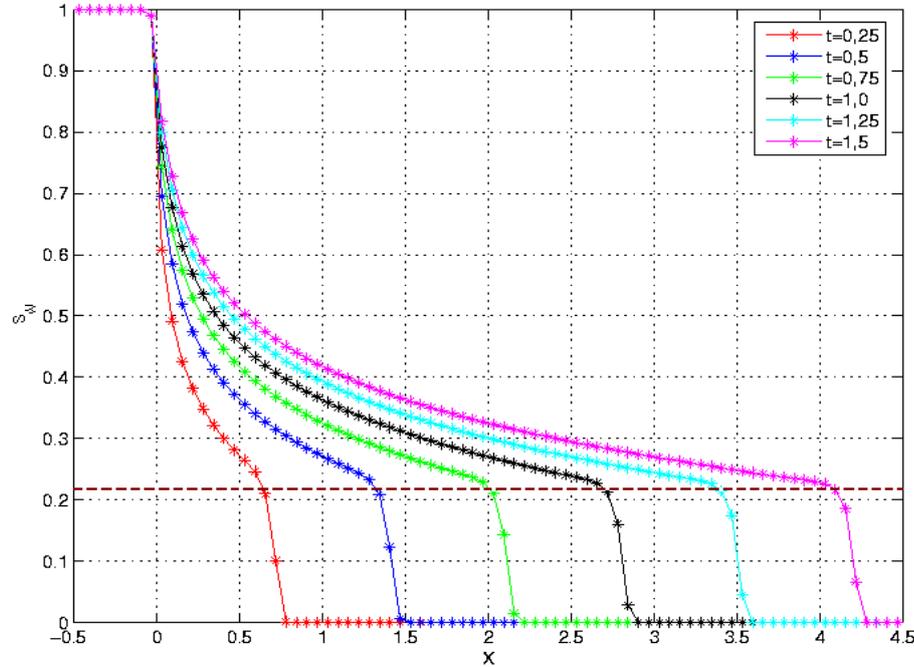


Figura 5.10: Comparação entre a previsão analítica para o salto (linha tracejada) e a solução numérica da equação de Buckley-Leverett unidimensional.

5.2.2 Segundo Problema Teste

Como estamos interessados no escoamento multifásico em um meio poroso, no segundo problema teste vamos considerar a forma da equação de Buckley-Leverett que governa o escoamento bifásico água-óleo em um meio poroso:

$$\frac{\partial(\epsilon s_w)}{\partial t} + \frac{\partial}{\partial x} [\lambda_w(s_w)U] = \Gamma \frac{\partial^2 s_w}{\partial x^2} \quad (5.21)$$

onde ϵ é a porosidade do meio, s_w a saturação da fase água, U a velocidade total do escoamento e Γ representa um valor infinitesimal não-nulo e positivo (coeficiente de difusão devido à existência do gradiente da pressão capilar).

Para este problema, a função de fluxo não-linear e não-convexa é dada por (CHEN; HOPMANS; GRISMER, 1999; KEWEN, 2004):

$$\lambda_w(s_w) = \frac{(s_w - s_{rw})^2}{(s_w - s_{rw})^2 + \left(\frac{\mu_w}{\mu_o}\right) \left[(1 - s_{rw}) - s_w \left(\frac{1 - s_{rw}}{1 - s_{ro}} \right) \right]^2} \quad (5.22)$$

onde s_{rw} , s_{ro} , μ_w e μ_o representam, respectivamente, as saturações residuais e as viscosidades dinâmica das fases água e óleo, e podemos mostrar sem maiores dificuldades que:

$$\begin{aligned} \lambda'_w(s_w) = & \frac{2(s_w - s_{rw}) \left(\frac{\mu_w}{\mu_o}\right) \left\{ \left[s_o^{max} - s_w \left(\frac{s_o^{max}}{s_w^{max}} \right) \right]^2 \right\}}{\left\{ (s_w - s_{rw})^2 + \left(\frac{\mu_w}{\mu_o}\right) \left[s_o^{max} - s_w \left(\frac{s_o^{max}}{s_w^{max}} \right) \right]^2 \right\}^2} \\ & + \frac{2(s_w - s_{rw}) \left(\frac{\mu_w}{\mu_o}\right) \left\{ (s_w - s_{rw}) \left(\frac{s_o^{max}}{s_w^{max}} \right) \left[s_o^{max} - s_w \left(\frac{s_o^{max}}{s_w^{max}} \right) \right] \right\}}{\left\{ (s_w - s_{rw})^2 + \left(\frac{\mu_w}{\mu_o}\right) \left[s_o^{max} - s_w \left(\frac{s_o^{max}}{s_w^{max}} \right) \right]^2 \right\}^2} \end{aligned} \quad (5.23)$$

onde $s_o^{max} = 1 - s_{rw}$ e $s_w^{max} = 1 - s_{ro}$, resultando numa derivada segunda $f''(s_w)$ que troca de sinal em função dos valores de s_w (LEVEQUE, 2002).

A construção da solução analítica da equação de Buckley-Leverett é mostrada esquematicamente na Figura 5.11, onde s_w^* determina o final da rarefação e o início do choque. A representação gráfica é feita a partir da determinação das funções $F(s_w)$ e $t F'(s_w)$, onde t representa o tempo e $F'(s_w)$ a velocidade característica do escoamento, com

$$F(s_w) = \lambda_w(s_w)U/\epsilon \quad (5.24)$$

e

$$F'(s_w) = \lambda'(s_w)U/\epsilon \quad (5.25)$$

onde para este caso específico, não consideramos os efeitos difusivos ($\Gamma = 0$) e os efeitos gravitacionais ($\vec{g} = \vec{0}$). Portanto, a solução analítica é construída se nós representarmos, num gráfico da saturação em função da distância percorrida, a função $t F'(s_w)$ até que o

valor da saturação seja igual a s_w^* . Para este valor específico teremos o final da rarefação e o início do choque, até que o valor da saturação atinja o valor residual da saturação da fase água (linha tracejada na figura).

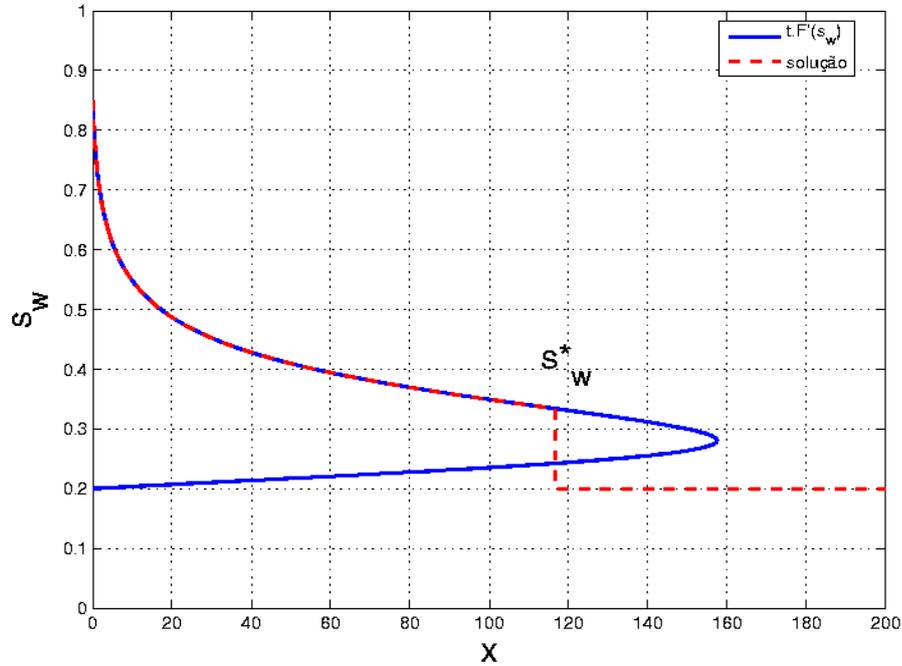


Figura 5.11: Construção da solução analítica da equação de Buckley-Leverett sem o termo dissipativo.

No caso em que $\Gamma = 0$ e $\vec{g} \neq \vec{0}$, a determinação da solução analítica também é obtida a partir das funções $F(s_w)$ e $tF'(s_w)$, de modo análogo à construção anterior. Entretanto, para este problema temos que

$$F'(s_w) = \lambda'(s_w)U/\epsilon + \lambda(s_w)U'/\epsilon \quad (5.26)$$

e a forma não-conservativa da equação de transporte é dada por:

$$\frac{\partial(\epsilon s_w)}{\partial t} + [\lambda'_w U + \lambda_w U'] \frac{\partial(s_w)}{\partial x} = 0 \quad (5.27)$$

sendo que,

$$U' = \frac{(\rho_w - \rho_o)Kg}{\mu_o} k'_{ro} \quad (5.28)$$

e

$$k'_{ro} = \frac{2s_w}{(1-s_{ro})^2} - \frac{2}{(1-s_{ro})} \quad (5.29)$$

Os resultados que serão apresentados, a seguir, foram obtidos com uma malha de 480 volumes de controle; com uma condição de contorno do tipo Dirichlet para a saturação da fase água em $x = 0,0$ m; e para os seguintes valores: $\Delta t = 1,0$ dia, $U = 1,0 \cdot 10^{-7}$ m/s, $\epsilon = 0,3$, $s_{rw} = 0,2$, $s_{ro} = 0,15$ e $\Gamma = 1,0 \cdot 10^{-7}$ m²/s. Para estes valores a teoria ($\Gamma = 0$) prevê que o salto ocorrerá para um valor da saturação igual a 0,33. A linha contínua (preto) representa a altura do salto. A Figura 5.12 contém os valores numéricos calculados, empregando um limitador de fluxo do tipo *superbee*, da saturação da fase água para seis diferentes instantes de tempo: 200, 400, 600, 800, 1000 e 1200 dias. Os resultados apresentam, conforme previsto pela teoria (LEVEQUE, 2002), uma rarefação seguida de um salto para o valor de saturação da fase água igual a 0,33. Conforme podemos comprovar, os valores numéricos apresentam uma boa concordância com a previsão teórica para o início do salto. Devemos ressaltar também que o choque é representado por 2 ou 3 pontos, lembrando que a representação ideal conteria somente um único ponto.

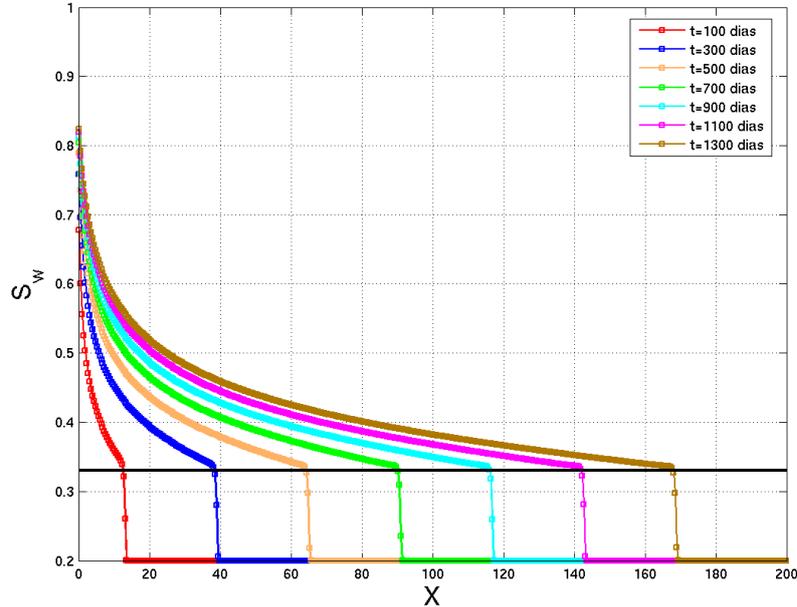


Figura 5.12: Comparação entre a solução numérica da equação de Buckley-Leverett unidimensional e a previsão analítica da altura do salto.

As Figuras 5.13-5.22 contém os valores calculados da saturação da fase água, para quatro diferentes instantes de tempo: 300, 600, 900 e 1200 dias. Os parâmetros empregados na resolução da equação de Buckley-Leverett para estas figuras foram uma

malha computacional de comprimento $L = 200,0$ m; $\Delta x = 0,4167$ m; porosidade $\epsilon = 0,3$; $s_{rw} = 0,2$; $s_{ro} = 0,15$; $U = 1,0 \cdot 10^{-7}$ m/s; viscosidade da fase água $\mu_w = 0,0005$ Pa.s; viscosidade da fase óleo $\mu_o = 0,01$ Pa.s; $\Gamma = 1,0 \cdot 10^{-9}$ m²/s; e uma malha computacional com 480 volumes de controle.

Estes resultados numéricos são comparados com a solução analítica da equação de Buckley-Leverett, obtida seguindo a metodologia explicada anteriormente nesta seção. Foram empregadas diferentes formulações alternativas: FSTAB, FSTAB-S, FUPW, FUPW-S, FSADV e a formulação explícita FEXP. Estes experimentos numéricos servirão para nos fornecer subsídios para que possamos escolher quais formulações deveremos considerar quando das simulações numéricas bidimensionais.

Nas Figuras 5.13 e 5.14 são mostrados os resultados obtidos com $\Delta t = 0,125$ dia e $\Delta t = 0,25$ dia, respectivamente, e $\gamma = 0,0$. Podemos observar que para estes incrementos de tempo os perfis tendem a estar sobrepostos à solução exata, exceto para a formulação FSTAB-S, na qual a solução numérica não está convergindo para a solução exata.

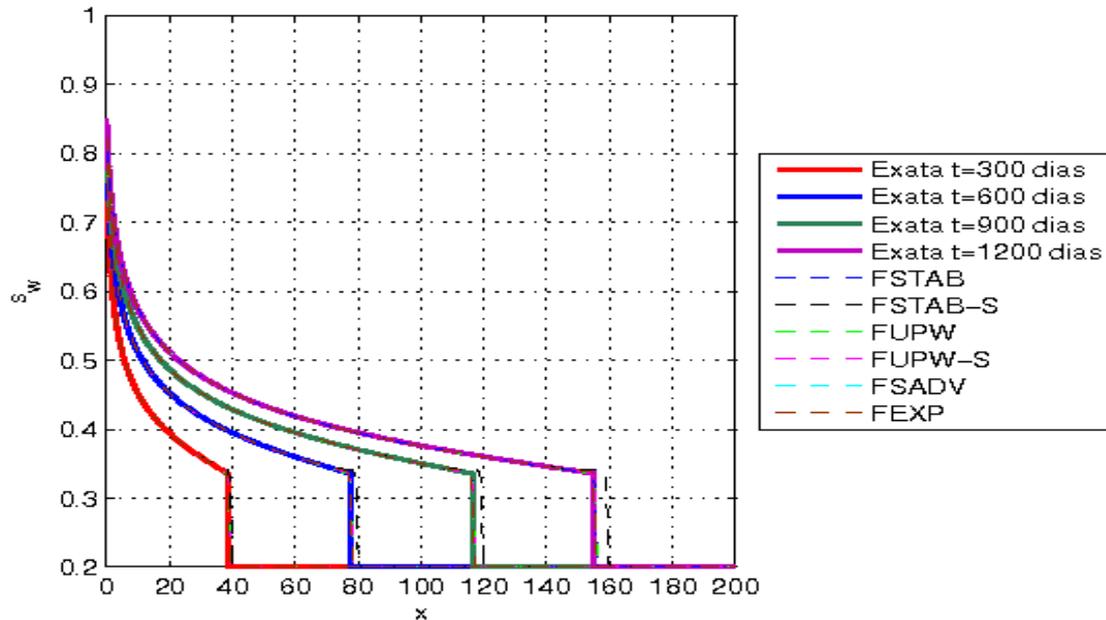


Figura 5.13: Solução numérica da equação de Buckley-Leverett, $\gamma = 0,0$ e $\Delta t = 0,125$ dia.

A Figura 5.15 apresenta os resultados obtidos com $\gamma = 0,0$ e $\Delta t = 0,5$ dia. Para esta figura, percebemos visivelmente que a solução numérica, quando utilizamos a formulação FSTAB-S, não converge para a solução exata. Podemos notar também uma pequena diferença entre a solução numérica e a solução exata nos resultados obtidos com

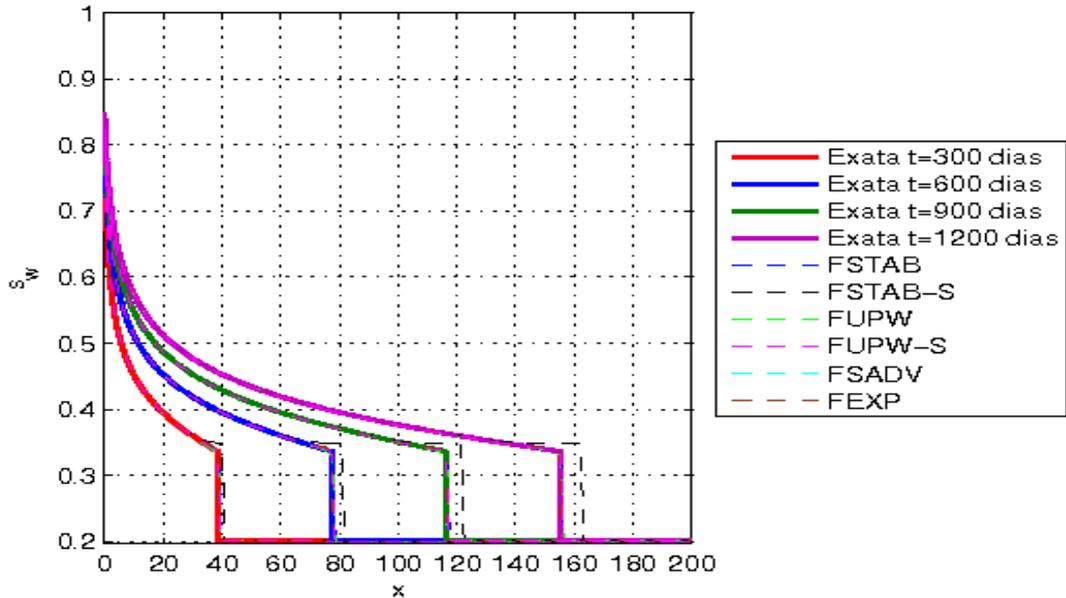


Figura 5.14: Solução numérica da equação de Buckley-Leverett, $\gamma = 0,0$ e $\Delta t = 0,25$ dia.

a formulação explícita (FEXP).

Os resultados obtidos para $\gamma = 0,0$ e $\Delta t = 1,0$ dia são apresentados na Figura 5.16. A figura mostra que para este Δt duas formulações apresentam resultados que diferem significativamente da solução analítica, são eles o FSTAB-S e o FEXP. Para os demais os resultados apresentaram alguma diferença entre a solução numérica e a solução exata, embora, podemos observar que nas formulações FUPW e FUPW-S os perfis destas formulações estão mais próximos da solução analítica.

Na Figura 5.17 encontram-se os resultados obtidos com $\gamma = 0,5$ e $\Delta t = 0,125$ dia. Neste caso, $\gamma = 0,5$, estamos empregando uma aproximação de segunda ordem para o termo transiente. Observamos que para este pequeno incremento de tempo, os perfis também tendem a estar sobrepostos à solução exata, exceto para a formulação FSTAB-S.

A Figura 5.18 apresenta os resultados obtidos com $\gamma = 0,5$ e $\Delta t = 0,25$ dia. Podemos observar, assim como verificado na figura anterior, que a solução numérica obtida com este valor de Δt , quando utilizamos a formulação FSTAB-S, não converge para a solução exata. Percebemos também que há uma pequena diferença entre as soluções numérica e exata em se tratando da formulação explícita (FEXP).

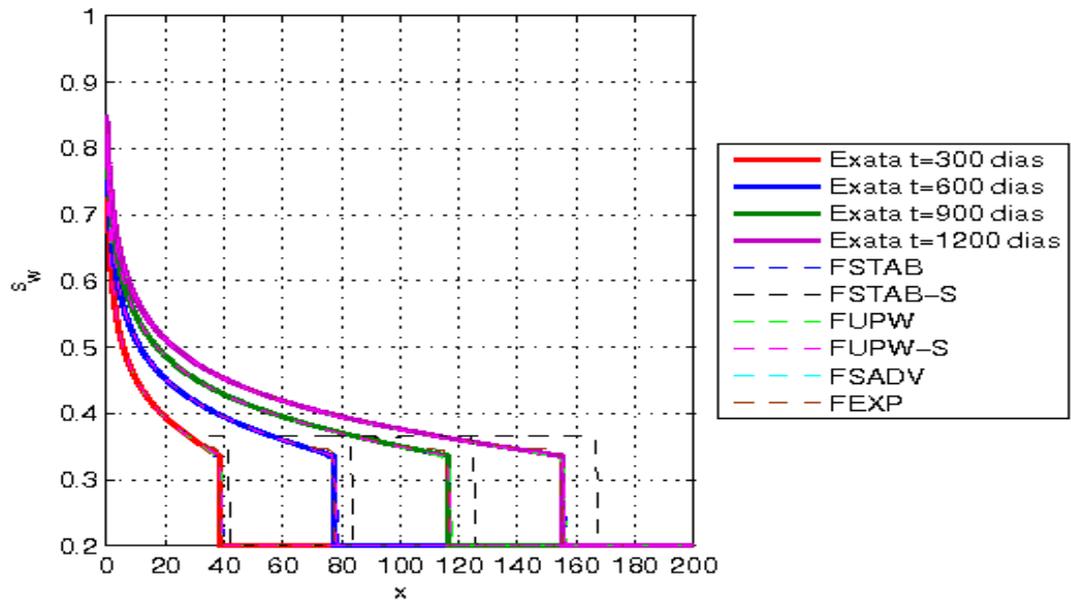


Figura 5.15: Solução numérica da equação de Buckley-Leverett, $\gamma = 0,0$ e $\Delta t = 0,5$ dia.

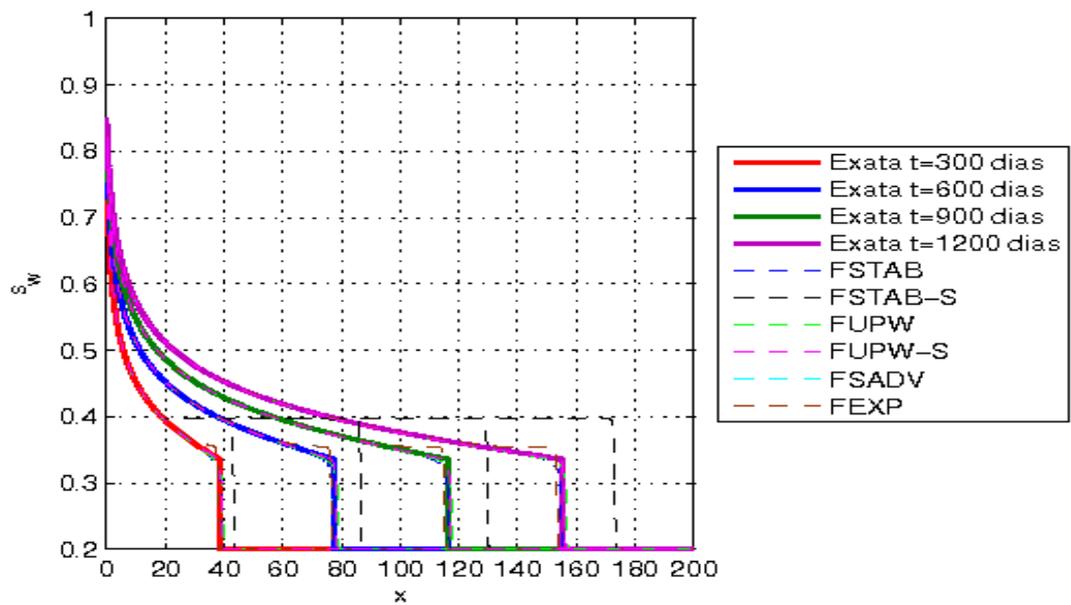


Figura 5.16: Solução numérica da equação de Buckley-Leverett, $\gamma = 0,0$ e $\Delta t = 1,0$ dia.

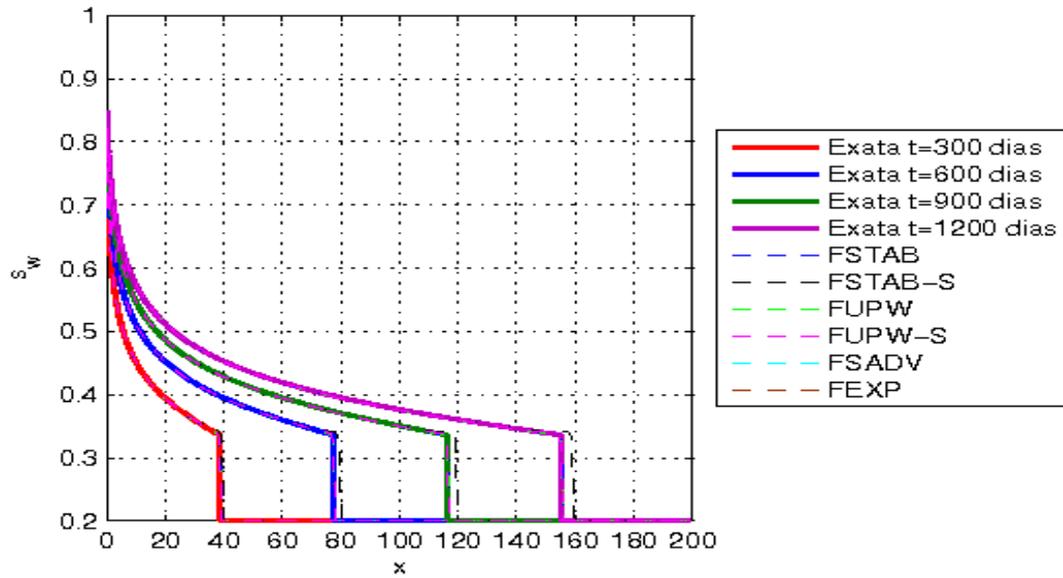


Figura 5.17: Solução numérica da equação de Buckley-Leverett, $\gamma = 0,5$ e $\Delta t = 0,125$ dia.

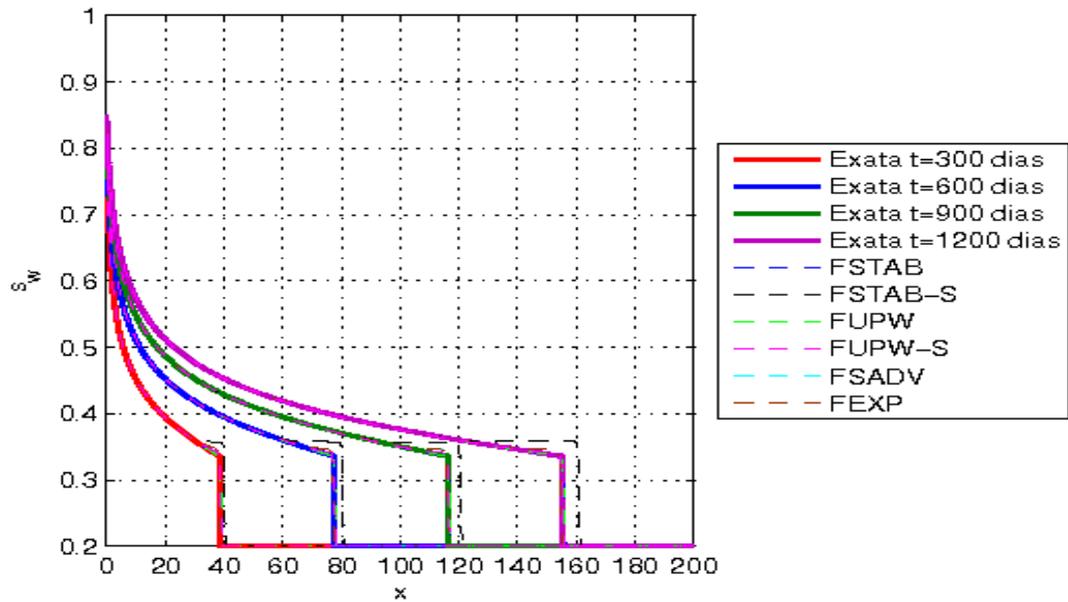


Figura 5.18: Solução numérica da equação de Buckley-Leverett, $\gamma = 0,5$ e $\Delta t = 0,25$ dia.

A Figura 5.19 mostra os resultados obtidos com $\gamma = 0,5$ e $\Delta t = 0,5$ dia. Nesta figura podemos notar que os resultados numéricos apresentaram perfis que indicam que para as formulações FSTAB-S, FUPW-S, FSADV e FEXP, a solução numérica não apresenta uma boa concordância com a solução analítica. Este resultado é muito importante, uma vez que ele mostra claramente a vantagem em utilizarmos uma formulação do tipo implícita. Vimos que apesar da formulação explícita não ter apresentado resultados satisfatórios para este valor de Δt , as formulações implícitas FSTAB e FUPW foram ainda capazes de reproduzir corretamente a solução exata.

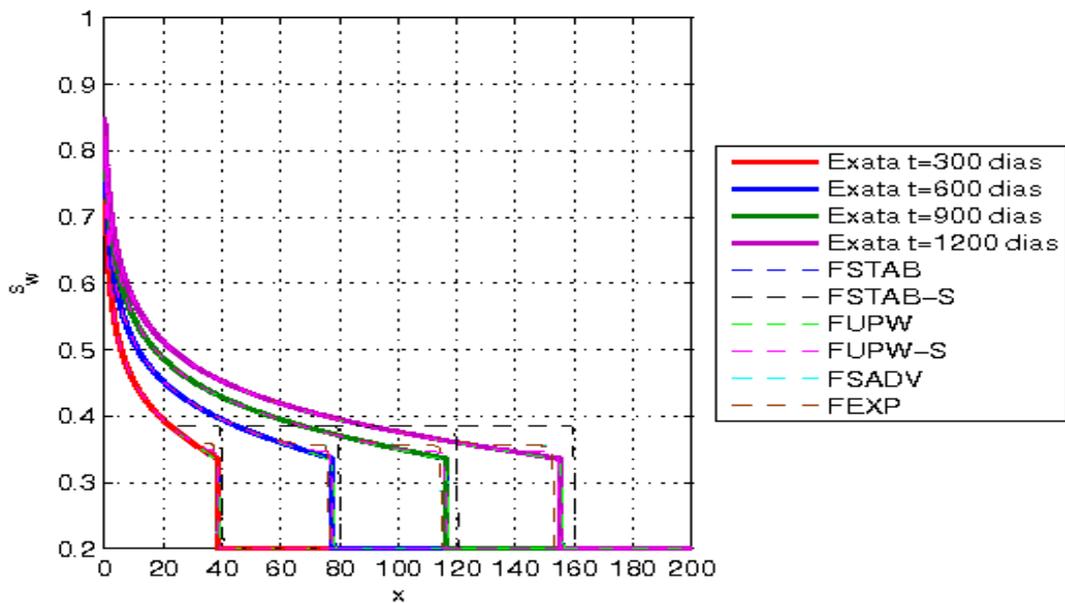


Figura 5.19: Solução numérica da equação de Buckley-Leverett, $\gamma = 0,5$ e $\Delta t = 0,5$ dia.

Na Figura 5.20, estão os resultados obtidos com $\gamma = 0,5$ e $\Delta t = 1,0$ dia. Podemos observar que para este valor de Δt todas as formulações apresentaram soluções numéricas que não convergiram para a solução exata, embora resultados satisfatórios tenham sido obtidos para este mesmo Δt empregando um esquema de discretização de primeira ordem no tempo ($\gamma=0,0$).

Analisando as soluções numéricas apresentadas pelas formulações alternativas: FSTAB, FSTAB-S, FUPW, FUPW-S, FSADV e a formulação explícita FEXP, concluímos que, no geral, as formulações FSTAB e FUPW apresentaram os melhores resultados para uma escolha do parâmetro γ igual a zero, encorajando a sua utilização na simulação dos escoamentos bifásicos em meios porosos bidimensionais.

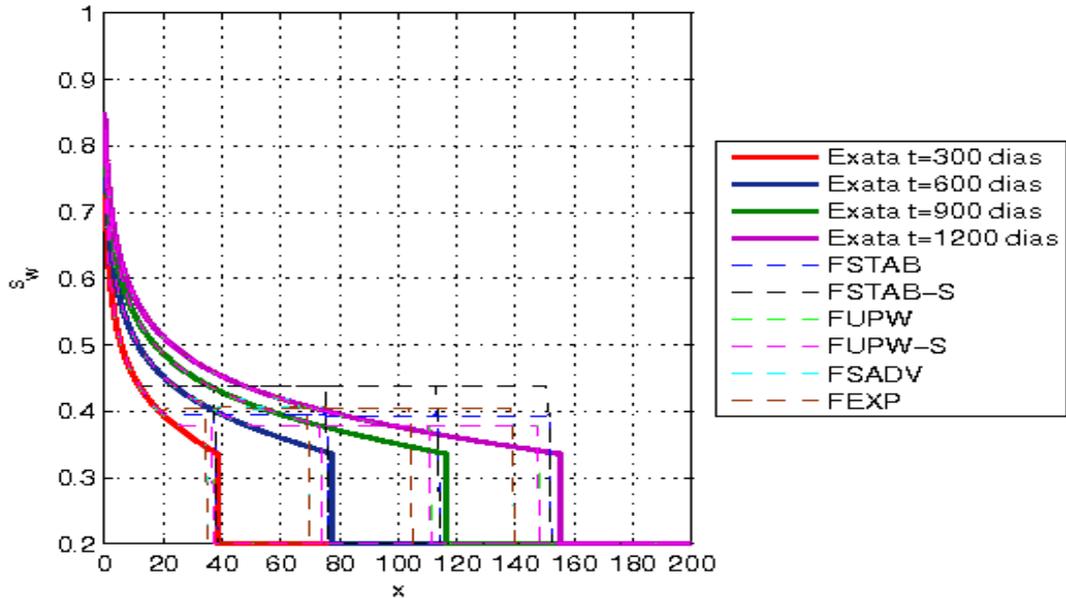


Figura 5.20: Solução numérica da equação de Buckley-Leverett, $\gamma = 0,5$ e $\Delta t = 1,0$ dia.

Na Figura 5.21 são apresentados os resultados obtidos para $\gamma = 0,5$ e $\Delta t = 0,125$ dia, usando uma formulação do tipo FSTAB e os esquemas não-TVD do tipo *upwind* de primeira ordem e diferenças centradas. As soluções numéricas obtidas quando utilizamos uma discretização do tipo *upwind* de primeira ordem mostraram que elas convergem para a solução analítica, embora possamos perceber a presença de difusão numérica na região do salto. Por outro lado, no caso dos resultados apresentados empregando um esquema do tipo diferenças centradas, podemos constatar que não há convergência entre a solução numérica e a solução exata.

A Figura 5.22 mostra os mesmos resultados obtidos com $\gamma = 0,5$ e $\Delta t = 0,125$ dia para uma formulação do tipo FSTAB e para os esquemas TVD do tipo MINMOD, OSHER e MC. Nesta figura, notamos claramente que os perfis numéricos tendem a estar mais sobrepostos à solução exata que quando utilizamos os esquemas não-TVD. Além disso, temos um salto bem resolvido, o que demonstra que os resultados obtidos com os esquemas TVD são mais acurados que os dos esquemas não-TVD, nos casos considerados nestes experimentos numéricos.

Visto todos estes resultados, podemos concluir que as formulações implícitas FSTAB e FUPW, combinadas com os esquemas do tipo TVD, devem ser a escolha adequada para a resolução do problema do escoamento bifásico em meios porosos.

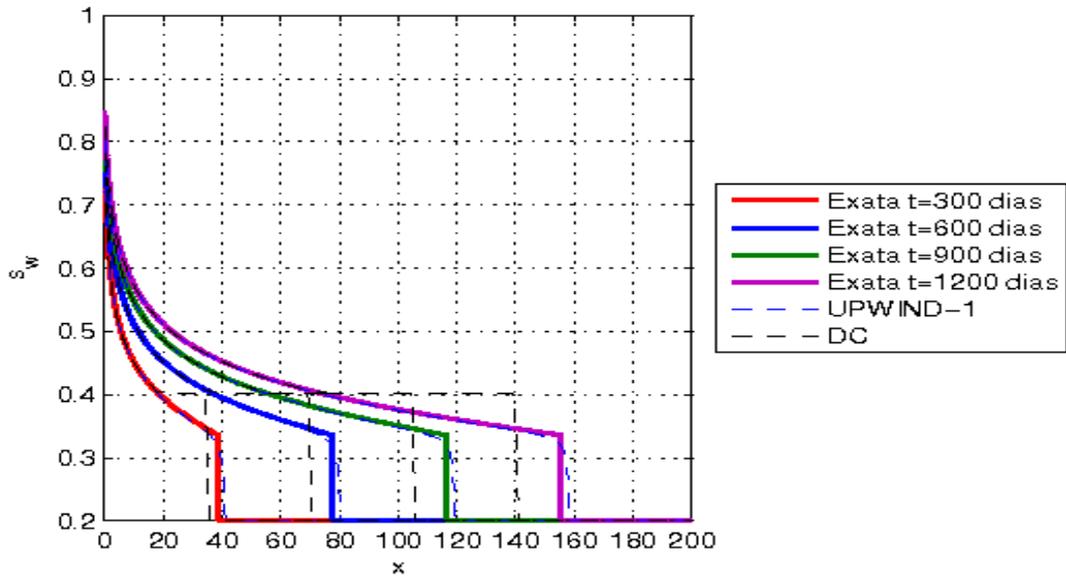


Figura 5.21: Solução numérica da equação de Buckley-Leverett, $\gamma = 0,5$ e $\Delta t = 0,125$ dia, esquemas não-TVD (*upwind* de primeira ordem e diferenças centradas) e a formulação FSTAB.

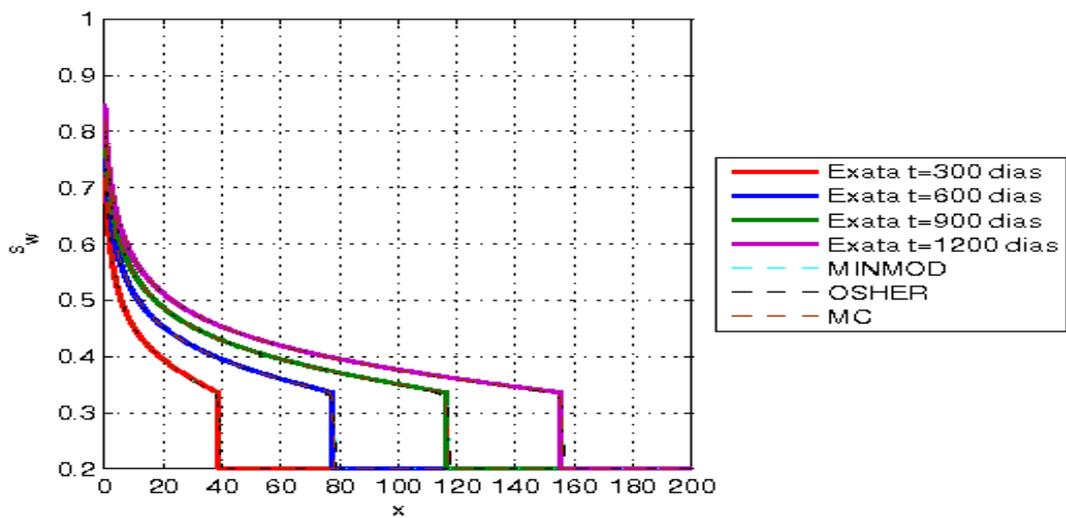


Figura 5.22: Solução numérica da equação de Buckley-Leverett, $\gamma = 0,5$ e $\Delta t = 0,125$ dia, esquemas TVD (MINMOD, OSHER e MC) e a formulação FSTAB.

5.2.3 Terceiro Problema Teste

No terceiro problema teste, iremos considerar o problema de Buckley-Leverett conforme descrito em Durlofsky (1993), onde os resultados numéricos levam em conta, também, os efeitos gravitacionais. Os parâmetros empregados na resolução deste problema foram uma malha computacional de comprimento $L = 100,0$ m, fixamos $s_w = 1$ em $x = 0$ e usamos um $\Delta t = 0,5$ dia. As permeabilidades relativas são dadas por $k_{rw} = s_w^2$ e $k_{ro} = (1 - s_w)^2$. A porosidade é $\epsilon = 0,3$, $s_{rw} = 0$, $s_{ro} = 0$, $U = 1,0 \cdot 10^{-7}$ m/s, a massa específica da água e do óleo são, respectivamente, $\rho_w = 1000$ kg/m³ e $\rho_o = 700$ kg/m³, $\Gamma = 1,0 \cdot 10^{-9}$ m²/s e a razão entre as viscosidades das fases água e óleo é igual a 5. Para os casos que serão apresentados, a seguir, foi introduzido um número adimensional, denominado G_d , que quantifica a razão entre os efeitos gravitacionais e os efeitos advectivos, o qual é dado por (DURLLOFSKY, 1993):

$$G_d = \frac{K(\rho_w - \rho_o)g}{\mu_o U} \quad (5.30)$$

onde K é a permeabilidade absoluta, ρ_w e ρ_o representam a massa específica da água e do óleo, g o módulo da aceleração da gravidade, μ_o a viscosidade do óleo e U a velocidade do escoamento.

Iremos considerar duas situações, na primeira faremos $G_d = 0$, ou seja, os efeitos gravitacionais não estarão presentes. Na segunda, as soluções numéricas serão obtidas para $G_d=0,5$; 1,0; 1,5; e 2,0.

Nas Figuras 5.23-5.27 são apresentados os resultados numéricos da equação de Buckley-Leverett para uma formulação do tipo FUPW; utilizando os esquemas não-TVD do tipo *upwind* de primeira ordem e diferenças centradas; TVD do tipo MINMOD, OSHER e o *monotonized central-difference* (MC); bem como as soluções analíticas para diferentes instantes de tempo. As soluções analíticas foram construídas seguindo a metodologia apresentada na Subseção 5.2.2.

A Figura 5.23 apresenta os perfis de saturação obtidos para o caso onde os efeitos gravitacionais não são considerados ($G_d=0$). Conforme Durlofsky (1993), a altura teórica para o início do choque, no caso sem gravidade, é dada por $s_w=0,41$ (linha tracejada na figura) para os parâmetros considerados na simulação numérica. Neste problema, os perfis de saturação foram determinados para quatro instantes de tempo, $t= 450, 900, 1350$ e 1800 dias. Os resultados mostram que o esquema não-TVD do tipo diferenças centradas não convergiu para a solução exata. Por sua vez, os esquemas *upwind* e *monotonized*

central-difference (MC) convergiram para a solução teórica, embora tenham apresentado uma difusão numérica apreciável no salto. Os resultados numéricos obtidos com os outros esquemas TVD apresentaram uma boa concordância com os resultados previstos pela teoria.

A Figura 5.24 mostra os perfis de saturação da água para $G_d=0,5$, sendo que para este valor de G_d o valor teórico da saturação para o início do choque é 0,27. Os valores numéricos foram calculados para os instantes de tempo $t= 400, 800, 1200$ e 1600 dias. Nesta figura podemos observar que, mais uma vez, o esquema de diferenças centradas não foi capaz de reproduzir a solução exata. O mesmo podemos dizer com relação ao esquema TVD MIMMOD. O esquema TVD do tipo OSHER convergiu de modo satisfatório para a solução analítica, enquanto que os esquemas *upwind* e *monotonized central-difference* (MC) apresentam soluções numéricas difusivas.

Para o problema com $G_d = 1,0$, a altura teórica do início do salto é de $s_w=0,51$ e de $s_w=0,67$ para $G_d = 1,5$. No caso apresentado na Figura 5.25 ($G_d = 1,0$), os tempos de simulação foram $t= 500, 1000, 1500$ e 2000 dias. Já para o $G_d = 1,5$, os perfis de saturação foram determinados para $t= 600, 1200, 1800$ e 2400 dias e os resultados são apresentados na Figura 5.26. Nestas figuras constatamos que há uma pequena diferença entre a solução numérica e a solução exata nos resultados obtidos com os esquemas *upwind* de primeira ordem e *monotonized central-difference* (MC). Para os demais casos podemos observar que a rarefação e o choque, presentes na solução, são bem resolvidos e a altura do choque está em concordância com o valor teórico.

Na Figura 5.27 são mostrados os resultados obtidos para $G_d=2,0$, a altura teórica para o início do choque vale $s_w=0,76$. Esta figura apresenta os perfis de saturação da fase água para os instantes de tempo $t= 650, 1300, 1950$ e 2600 dias. Neste caso, podemos observar que as soluções numéricas obtidas com os esquemas *upwind* de primeira ordem, diferenças centradas e *monotonized central-difference* (MC) convergiram para a solução exata, mas apresentaram uma difusão numérica excessiva. Para os demais esquemas, MIMMOD e OSHER, os resultados numéricos mostram uma boa concordância entre os resultados numéricos e os previstos pela teoria para os perfis de saturação e altura teórica do início do salto.

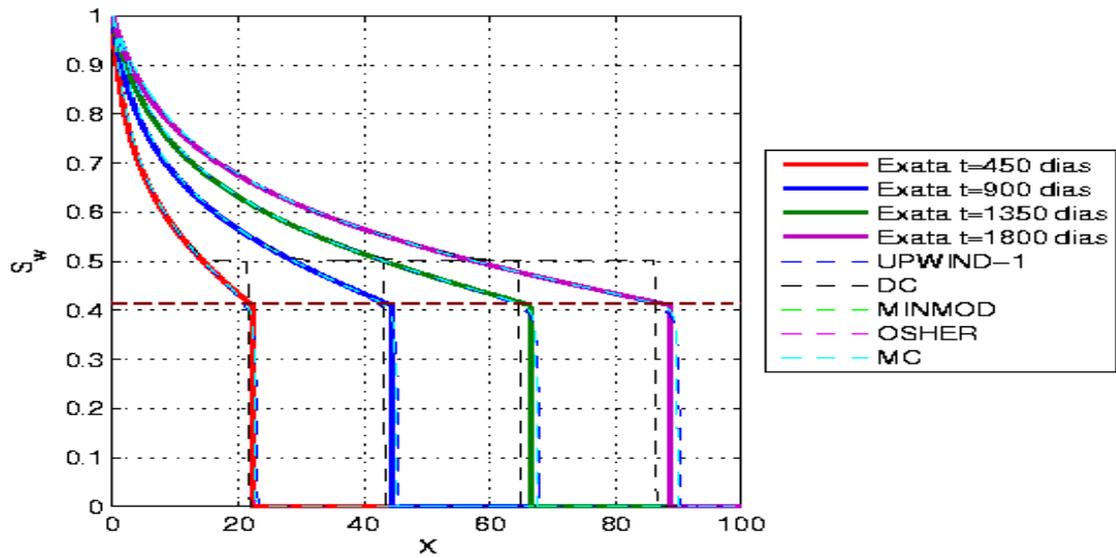


Figura 5.23: Solução numérica da equação de Buckley-Leverett com $G_d = 0$, sem gravidade.

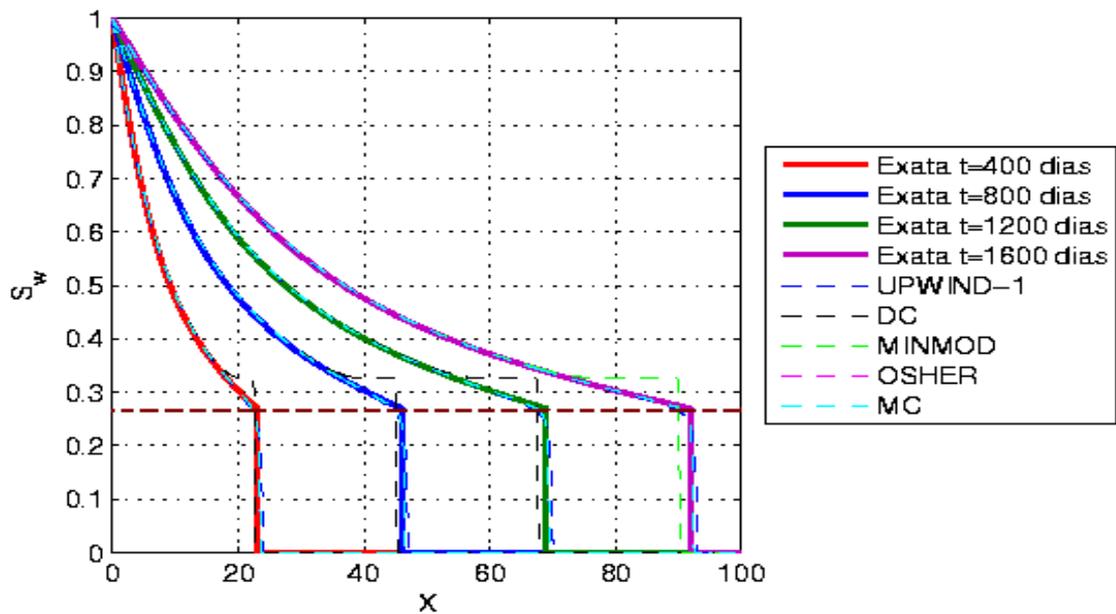


Figura 5.24: Solução numérica da equação de Buckley-Leverett com $G_d = 0,5$, com gravidade.

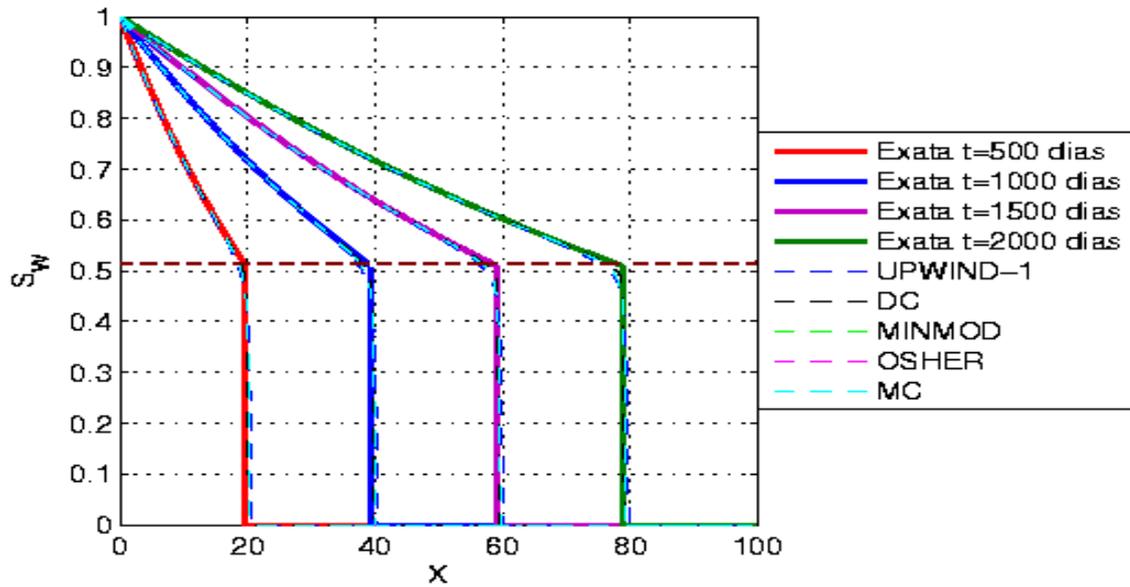


Figura 5.25: Solução numérica da equação de Buckley-Leverett com $G_d = 1$, com gravidade.

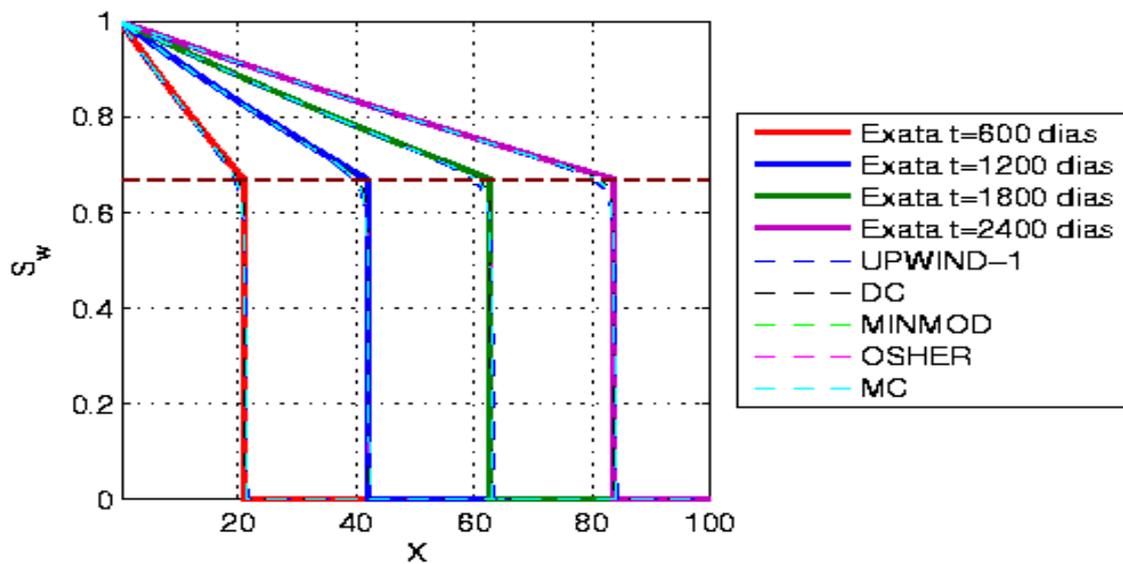


Figura 5.26: Solução numérica da equação de Buckley-Leverett com $G_d = 1,5$, com gravidade.

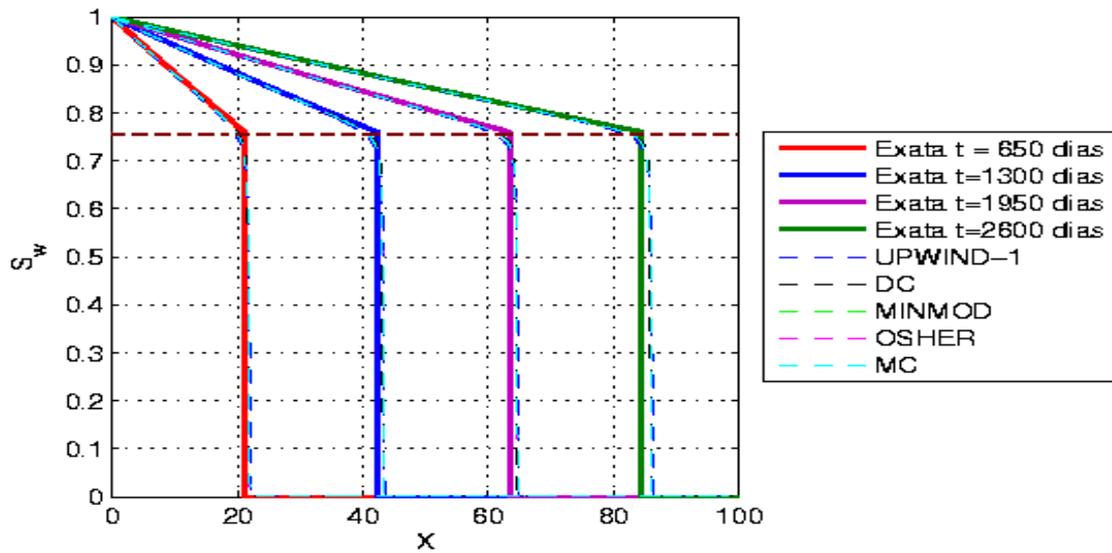


Figura 5.27: Solução numérica da equação de Buckley-Leverett com $G_d = 2$, com gravidade.

Estes resultados mostram que quando os efeitos gravitacionais são levados em consideração, não existe um predomínio claro dos esquemas TVD, embora o esquema TVD do tipo OSHER tenha apresentado resultados bastante satisfatórios para todos os valores de G_d considerados. Com relação aos demais esquemas, em alguns casos alguns esquemas TVD apresentaram convergência e difusão numérica não negligenciável, assim como o esquema não-TVD *upwind* de primeira ordem. Já o esquema não-TVD do tipo diferenças centradas não apresentou convergência numérica para os valores de $G_d=0$ e $0,5$, e convergiu nos demais casos com perfis que evidenciaram a presença de difusão numérica.

6 SIMULAÇÕES NUMÉRICAS BIDIMENSIONAIS EM MEIOS POROSOS HETEROGÊNEOS

Neste capítulo, consideramos a simulação bidimensional do escoamento bifásico água-óleo em um meio poroso heterogêneo. Num primeiro momento, fazemos um estudo da convergência numérica das soluções sob refinamento da malha computacional em reservatórios bidimensionais heterogêneos. Posteriormente, realizamos um estudo numérico comparativo entre os nossos resultados numéricos e os oriundos do uso de um simulador desenvolvido mediante o emprego do método dos elementos finitos misto e do método do gradiente conjugado pré-condicionado na resolução do problema elíptico de pressão-velocidade; e do método dos volumes finitos empregando um esquema de diferenças centrais de segunda ordem, não-oscilatório e conservativo, com limitador de inclinação, proposto por Nessyahu e Tadmor (1990), na resolução explícita do problema de saturação da fase água (BORGES, 2006; AQUINO et al., 2007; AQUINO, 2008). Chamaremos este simulador doravante de NT. Neste estudo levamos em conta a variação do campo de permeabilidade decorrente da variabilidade do meio geológico.

6.1 Campos de Permeabilidade

Os campos de permeabilidade escalares utilizados nas simulações numéricas possuem distribuição do tipo log-normal,

$$K(x) = k_0 e^{\varphi \xi(x)} \quad (6.1)$$

onde k_0 e φ são constantes, $\xi(x)$ é um campo gaussiano aleatório, estacionário com média $\langle \xi(x) \rangle = 0$ (o operador $\langle \cdot \rangle$ representa a média estatística) e sua função de covariância é definida por

$$\mathcal{C}(\mathbf{x}, \mathbf{y}) = \langle \xi(\mathbf{x}), \xi(\mathbf{y}) \rangle \quad (6.2)$$

A média estatística $\langle K(x) \rangle$ e o desvio padrão σ do campo de permeabilidades são

caracterizados pelos coeficientes k_0 e φ . Modificações no valor de k_0 e φ alteram o grau de heterogeneidade do campo.

O grau de variabilidade no campo de permeabilidades é medido pelo coeficiente de variação definido por

$$CV = \frac{\sigma}{\langle K(\mathbf{x}) \rangle} \quad (6.3)$$

O campo Gaussiano $\xi(x)$ é considerado isotrópico. Para introduzir a variabilidade em todas as escalas de comprimento, consideramos campos fractais, ou auto-similares, cuja função de covariância é definida por uma lei de potência

$$\mathcal{C}(\mathbf{x}, \mathbf{y}) = |\mathbf{x} - \mathbf{y}|^{-\beta}, \quad \beta > 0 \quad (6.4)$$

O expoente β , chamado de coeficiente de Hurst, controla o grau da heterogeneidade multi-escala do reservatório. À medida que β decresce as heterogeneidades das grandes escalas de comprimento são enfatizadas e o campo se torna mais regular. No caso de $\beta = 0$, o campo apresenta uma mesma correlação (constante) para todas as escalas de comprimento. Para $\beta \rightarrow \infty$ temos o caso no qual as variáveis aleatórias são independentes.

A utilização desses campos de permeabilidades deve-se à dificuldade em se obter, de forma direta, os valores das heterogeneidades multi-escala da rocha porosa que constitui o reservatório. Dessa forma, utilizamos uma caracterização estatística para o campo de permeabilidades $K(\mathbf{x})$ de tal forma que ele reproduza, de forma razoável, a distribuição estatística dos valores do campo de permeabilidades do meio real (FURTADO; PEREIRA, 2003; BORGES, 2006; BORGES; PEREIRA; SOUTO, 2008; AQUINO, 2008).

Recomendamos ao leitor consultar os trabalhos de Glimm et al. (1993), Gelhar (1993) e Dagan (1989) para uma discussão a respeito da utilização de campos de permeabilidade aleatórios fractais como modelos para a variabilidade de propriedades geológicas em estudos de escoamentos em meios porosos naturais. Recomendamos também, os trabalhos de Borges (2006) e Borges, Pereira e Souto (2008) para uma descrição detalhada sobre a geração destes campos de permeabilidade empregando diferentes métodos.

Nas Figuras 6.1 e 6.2, a título de ilustração, temos a representação de dois campos de permeabilidade cujo coeficiente de variação é igual a 0,5. Os campos de permeabilidade estão definidos para as malhas geológicas de 32 x 16 elementos e 64 x 32 elementos,

respectivamente.

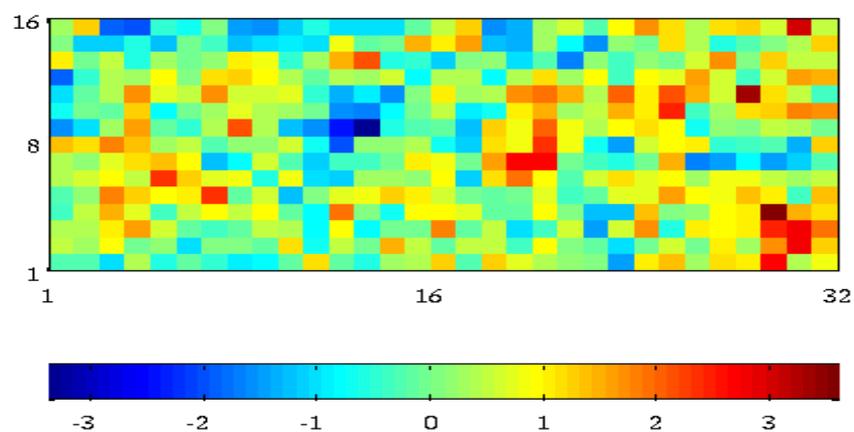


Figura 6.1: Campo de permeabilidade fractal usado nas simulações numéricas. Malha geológica de 32 x 16 elementos e $CV=0,5$.

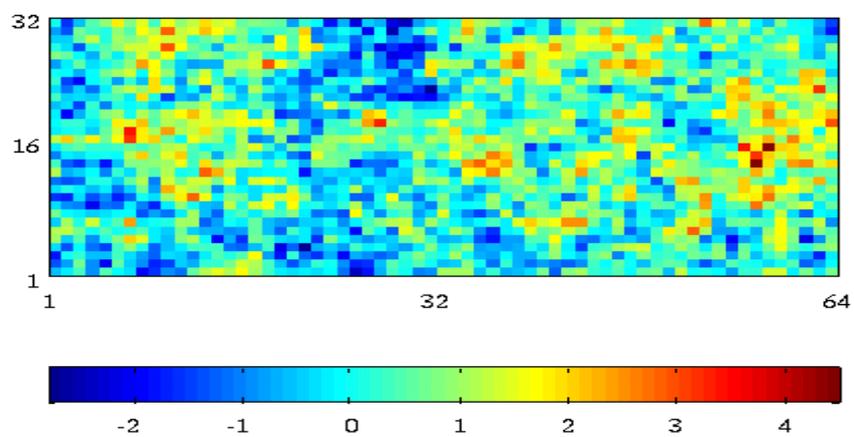


Figura 6.2: Campo de permeabilidade fractal usado nas simulações numéricas. Malha geológica de 64 x 32 elementos e $CV=0,5$.

6.2 Condições de Contorno e Inicial

A Figura 6.3 representa esquematicamente as condições de contorno e inicial empregadas na simulação numérica do escoamento bifásico em um domínio bidimensional retangular $\Omega = [0, L_x] \times [0, L_y]$. Assim, as condições de contorno para o problema elíptico de pressão-velocidade são dadas por:

$$\begin{aligned} \mathbf{u} \cdot \mathbf{n} &= -u_0, & \text{em } x = 0, \\ p &= 0, & \text{em } x = L_x, \\ \mathbf{u} \cdot \mathbf{n} &= 0, & \text{em } y = 0, L_y \end{aligned} \quad (6.5)$$

onde u_0 é a taxa de injeção e \mathbf{n} é o vetor normal unitário apontando para o exterior da fronteira $\partial\Omega$ do domínio. As condições de contorno para o problema parabólico são do tipo Dirichlet, de modo que:

$$\begin{aligned} s_w &= s_0, & \text{em } x = 0, \\ s_w &= s_{rw}, & \text{em } x = L_x. \end{aligned} \quad (6.6)$$

e a condição inicial para o problema do transporte de massa é $s_w(x, y, 0) = s_{rw}$.

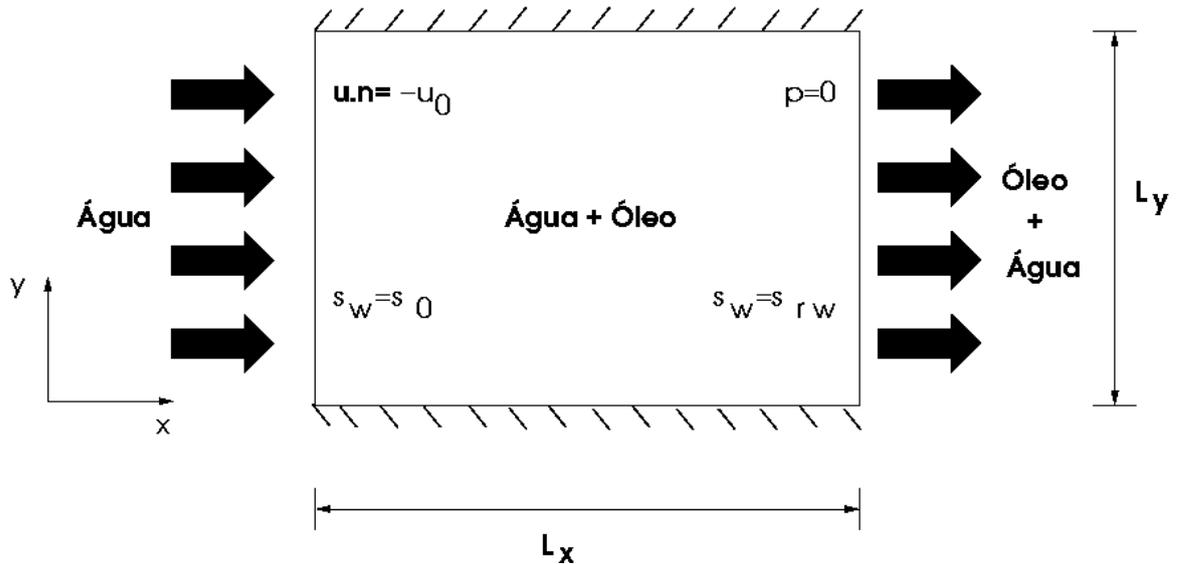


Figura 6.3: Domínio computacional para o escoamento bifásico bidimensional.

As condições de contorno representadas na Equação (6.5) simulam a injeção de água, estabelecendo um escoamento da esquerda para a direita na região bidimensional

retangular $\Omega = [0, L_x] \times [0, L_y]$. A água é injetada a uma taxa constante através da fronteira vertical à esquerda ($x = 0$) de Ω . Água e óleo são produzidos ao longo da fronteira vertical à direita ($x = L_x$). Nas fronteiras horizontais ($y = 0$ e L_y) são impostas condições de escoamento nulo.

6.3 Verificação da Eficiência Computacional

Apresentamos nesta seção uma verificação da eficiência computacional do nosso simulador numérico, em função dos diferentes métodos iterativos de resolução dos sistemas algébricos resultantes do processo de discretização das equações diferenciais parciais que governam o escoamento bifásico. Conforme já mencionado, temos à nossa disposição quatro métodos iterativos de resolução que são o TDMA (*Tri-Diagonal Matrix Algorithm*), o SPI (*Strongly Implicit Procedure*), o BICG (Gradiente Biconjugado) e o BICGS (Gradiente Biconjugado Estável). Como a maior parte do esforço computacional é despendida na resolução do problema elíptico de pressão-velocidade, fizemos dois estudos de eficiência computacional considerando diferentes critérios de convergência para este problema. O critério de parada empregado é a norma l_2 do resíduo (r_{pv}) da forma discretizada do problema de pressão-velocidade e as comparações foram feitas considerando que a convergência é alcançada com $r_{pv}=1,0.10^{-8}$ ou $1,0.10^{-7}$.

Nestas comparações consideramos um campo de permeabilidades heterogêneo com 32×16 elementos e $CV=0,5$. O meio poroso possui dimensões físicas de $128 \text{ m} \times 64 \text{ m}$ e as simulações foram realizadas empregando malhas computacionais de 128×64 e 256×128 volumes de controle e um tempo final de 350 dias. O coeficiente Γ foi mantido constante e igual a $1,0.10^{-6}$.

O método TDMA empregado fez uso, em todas as simulações, da técnica de correção por blocos. Os métodos BICG e BICGS utilizaram como matriz pré-condicionadora a forma diagonal da matriz dos coeficientes, o que está longe de ser a melhor opção de matriz pré-condicionadora para que a convergência seja acelerada.

Observamos nos resultados apresentados pelas Tabelas 6.1 e 6.2 que obtivemos uma expressiva redução no tempo de execução, para todos os métodos, quando usamos um critério de parada de $r_{pv} = 1,0.10^{-7}$. No caso da malha mais refinada esta diferença gira em torno de três vezes o valor de tempo de execução empregando como critério $r_{pv} = 1,0.10^{-8}$. O método SPI foi o que apresentou os melhores resultados, mas, infelizmente, ele apresentou problemas de convergência para malhas ainda mais refinadas. Como os

tempos de execução para os demais métodos (TDMA, BICG e BICGS), na malha refinada, encontram-se muito próximos uns dos outros, resolvemos empregar nas simulações que serão apresentadas, no restante deste capítulo, o método TDMA com correção por blocos, uma vez que ele foi o método mais testado durante o desenvolvimento do nosso simulador numérico.

Tabela 6.1: Tempo de execução para os diferentes métodos iterativos e para um critério de parada $r_{pv} = 1,0 \cdot 10^{-8}$.

| Métodos | Malhas Computacionais | |
|---------|-----------------------|---------|
| | 128x64 | 256x128 |
| | Tempo (segundos) | |
| TDMA | 374.13 | 2205.35 |
| SPI | 279.29 | 1547.72 |
| BICG | 340.29 | 1876.26 |
| BICGS | 343.52 | 1832.51 |

Tabela 6.2: Tempo de execução para os diferentes métodos iterativos e para um critério de parada $r_{pv} = 1,0 \cdot 10^{-7}$.

| Métodos | Malhas Computacionais | |
|---------|-----------------------|---------|
| | 128x64 | 256x128 |
| | Tempo (segundos) | |
| TDMA | 152.45 | 673.03 |
| SPI | 148.12 | 633.02 |
| BICG | 150.26 | 679.39 |
| BICGS | 151.74 | 675.15 |

Nas Figuras 6.4 e 6.5 são apresentados os gráficos das superfícies de saturação da água obtidos com o emprego dos diferentes métodos iterativos para os critérios de parada de $1,0 \cdot 10^{-8}$ e $1,0 \cdot 10^{-7}$ e uma malha computacional de 128 x 64 volumes de controle. Os gráficos sobrepostos mostram que os perfis dos campos de saturações coincidem entre si. Qualitativamente não existe uma diferença significativa entre os campos de saturações obtidos com os quatro métodos iterativos.

As Figuras 6.6 e 6.7 mostram a sobreposição dos gráficos dos campos de saturações para os métodos iterativos, para os dois critérios de convergência e uma malha computacional de 256 x 128 volumes de controle. Novamente podemos comprovar que os métodos iterativos TDMA, SPI, BICG e BICGS fornecem perfis de saturações praticamente idênticos. Estes resultados indicam uma excelente concordância entre os resultados obtidos por todos os métodos iterativos considerados neste estudo.

Por último, a fim de verificarmos quantitativamente a qualidade da solução numérica obtida com os dois diferentes critérios de parada e com os diferentes métodos iterativos, calculamos o erro médio quadrático entre as soluções numéricas obtidas com cada método iterativo empregando os critérios de parada de $r_{pv} = 1,0 \cdot 10^{-8}$ e $r_{pv} = 1,0 \cdot 10^{-7}$. O erro médio quadrático entre as soluções obtidas com o menor critério de parada, s_{w1} , e o maior critério, s_{w2} , é dado por:

$$EMQ = \sqrt{\frac{\sum^N (s_{w1} - s_{w2})^2}{N}} \quad (6.7)$$

onde N representa o número de volumes de controle, na direção transversal, que definem a frente de saturação.

Para a malha computacional de 128 x 64 volumes de controle o maior valor do erro médio quadrático obtido considerando todos os métodos iterativos foi de $1,2 \cdot 10^{-2}$. Por outro lado, em se tratando da malha computacional composta de 256 x 128 volumes de controle, o maior valor do erro médio quadrático foi de $7,8 \cdot 10^{-2}$, o que indica mais uma vez a concordância entre os resultados obtidos pelos diferentes métodos iterativos empregando os dois diferentes critérios de convergência.

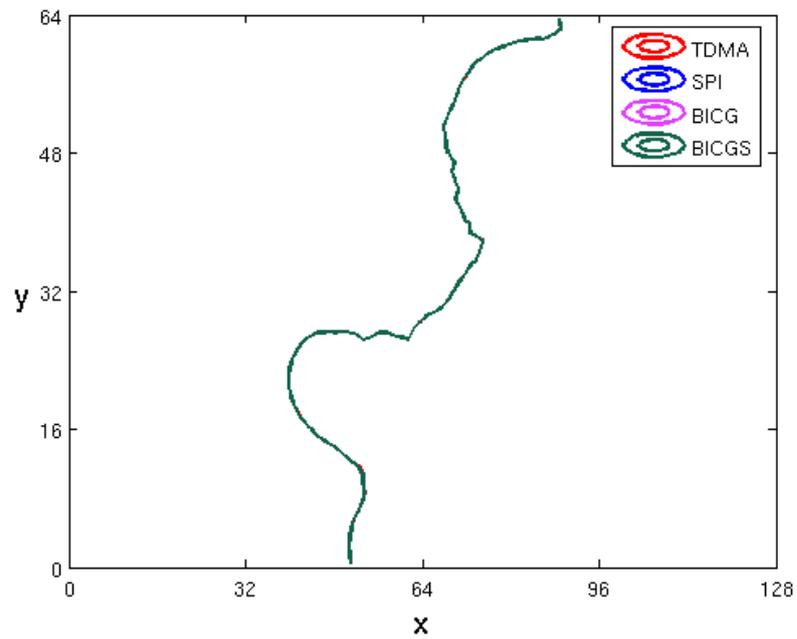


Figura 6.4: Gráficos das superfícies de saturação das frentes de propagação de água, obtidos com os diferentes métodos iterativos para um critério de parada igual a $1,0 \cdot 10^{-8}$ e malha computacional de 128 x 64 volumes de controle.

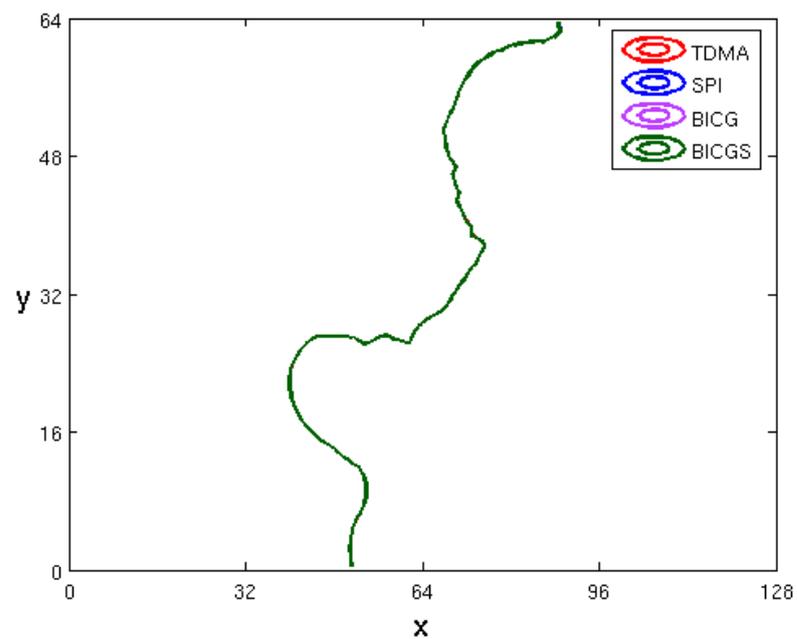


Figura 6.5: Gráficos das superfícies de saturação das frentes de propagação de água, obtidos com os diferentes métodos iterativos para um critério de parada igual a $1,0 \cdot 10^{-7}$ e malha computacional de 128 x 64 volumes de controle.

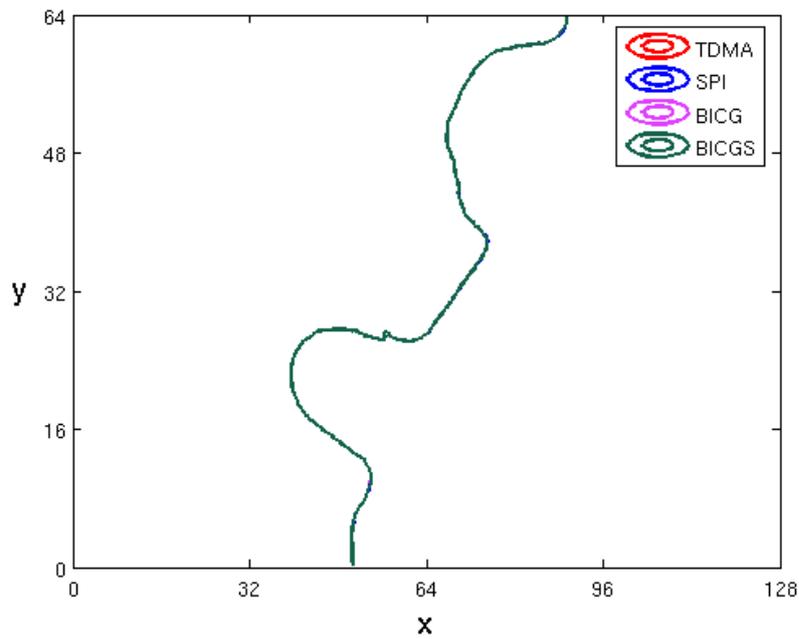


Figura 6.6: Gráficos das superfícies de saturação das frentes de propagação de água, obtidos com os diferentes métodos iterativos para um critério de parada igual a $1,0 \cdot 10^{-8}$ e malha computacional de 256 x 128 volumes de controle.

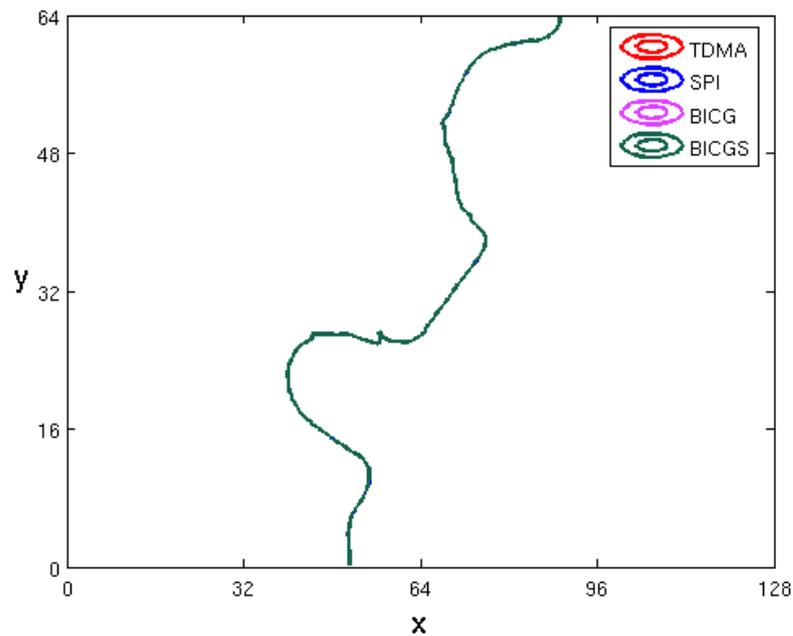


Figura 6.7: Gráficos das superfícies de saturação das frentes de propagação de água, obtidos com os diferentes métodos iterativos para um critério de parada igual a $1,0 \cdot 10^{-7}$ e malha computacional de 256 x 128 volumes de controle.

6.4 Estudo da Convergência Numérica

Uma questão importante, antes de passarmos à apresentação dos resultados das simulações do escoamento bifásico bidimensional, diz respeito à convergência numérica. Nesta seção iremos mostrar que os nossos resultados numéricos convergem para os mesmos valores à medida que refinamos a malha computacional.

O estudo de convergência foi realizado considerando o caso do escoamento bifásico água-óleo em um meio poroso heterogêneo. A razão de viscosidades entre o fluido não-molhante (óleo) e o molhante (água) é igual a 20 e o campo de permeabilidades possui um grau de heterogeneidade dado pelo coeficiente de variação $CV=0,5$. O escoamento ocorre, da esquerda para a direita, em um reservatório retangular de dimensão física de 1024 m x 512 m. Usamos nestes experimentos campos de permeabilidade definidos em duas malhas geológicas, uma com 32 x 16 elementos e outra com 64 x 32 elementos.

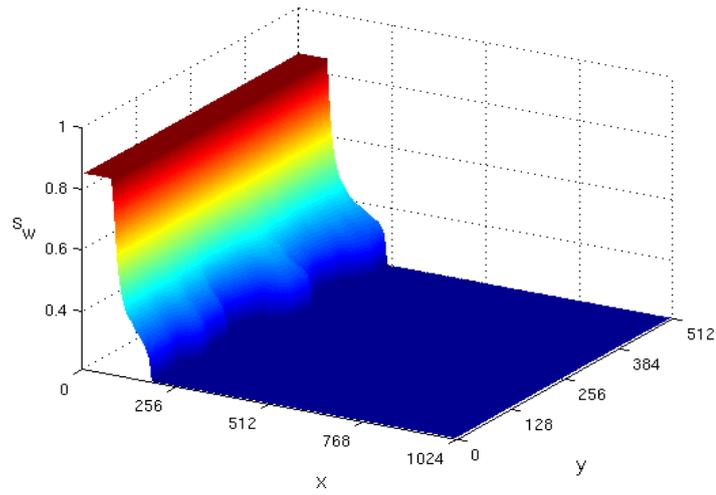
Destacamos que todas as soluções numéricas apresentadas neste capítulo foram obtidas com uma formulação do tipo FSTAB e com um limitador de fluxo do tipo MC (*monotonized central-difference*). Os seguintes parâmetros físicos foram empregados nestas simulações: $\epsilon = 0,3$; $s_{rw} = 0,2$; $s_{ro} = 0,15$; $U = 1,0 \cdot 10^{-7}$ m/s; viscosidade da fase água $\mu_w = 0,0005$ Pa.s; viscosidade da fase óleo $\mu_o = 0,01$ Pa.s; $\Gamma = 1,0 \cdot 10^{-6}$ m²/s; e $\Delta t = 0,125$ dia.

6.4.1 Campo Geológico com 32 x 16 Elementos

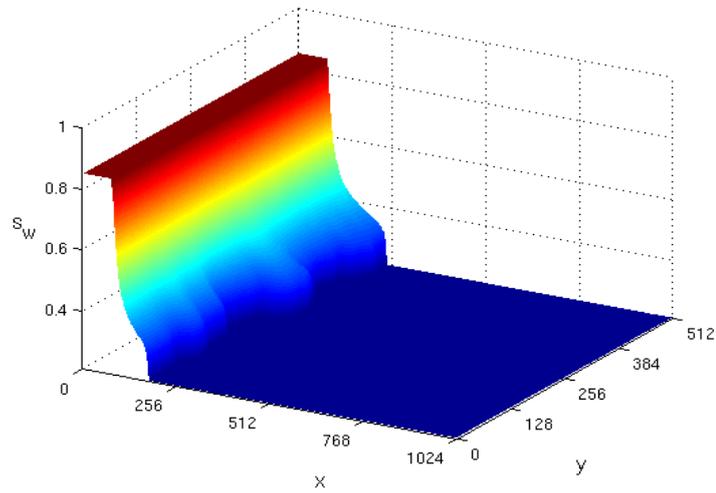
As Figuras 6.8-6.10 mostram os gráficos das superfícies de saturação da água para o escoamento bifásico água-óleo, considerando um campo de permeabilidades constituído de 32 x 16 elementos. Os valores dos campos de saturação para a fase água foram obtidos mediante o emprego de três malhas computacionais: 256 x 128, 512 x 256 e 1024 x 512 volumes de controle. Estes campos são apresentados na forma de superfícies tridimensionais para três instantes de tempo distintos: 750, 1500 e 3000 dias.

Conforme podemos observar nestas figuras, à medida que refinamos as malhas computacionais os resultados numéricos convergem para os mesmos valores da saturação da fase água. Praticamente não há diferenças entre os campos de saturações obtidos com as malhas de 512 x 256 e 1024 x 512 volumes de controle.

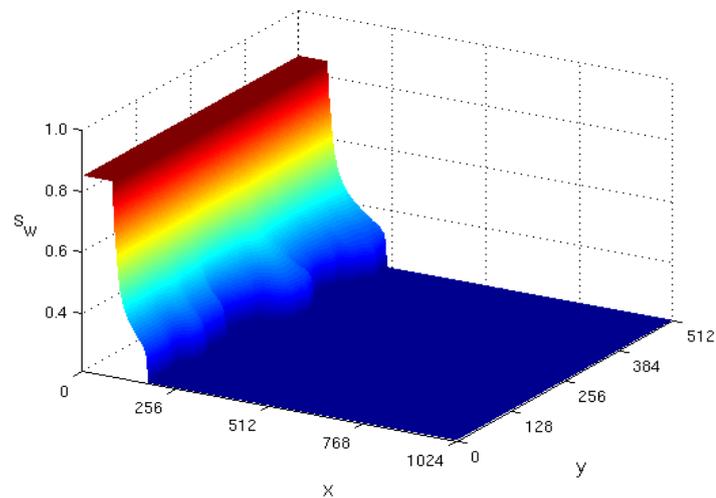
A fim de verificarmos visualmente a convergência dos resultados numéricos, na Figura 6.11 são mostrados novamente os resultados obtidos para as duas malhas mais



(a) 256 x 128 volumes de controle.

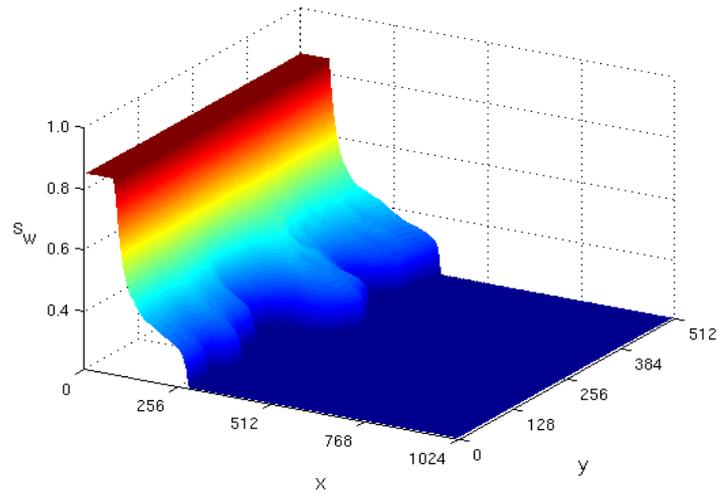


(b) 512 x 256 volumes de controle.

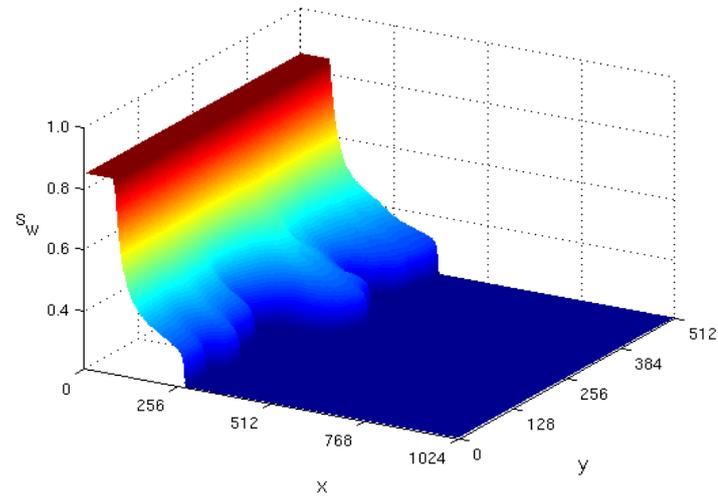


(c) 1024 x 512 volumes de controle.

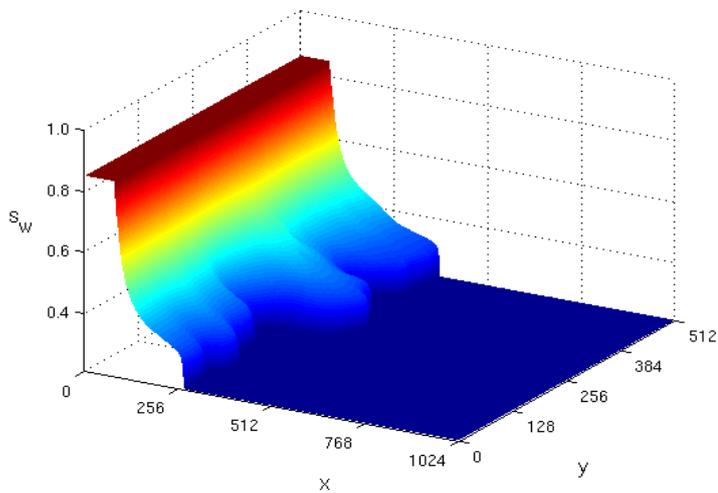
Figura 6.8: Gráficos das superfícies de saturação da água para o estudo de refinamento de malha após transcorridos 750 dias. Campo de permeabilidades com 32 x 16 elementos.



(a) 256 x 128 volumes de controle.

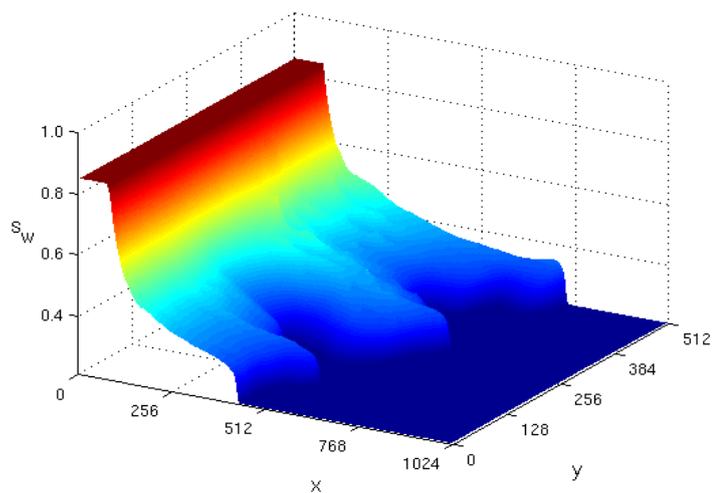


(b) 512 x 256 volumes de controle.

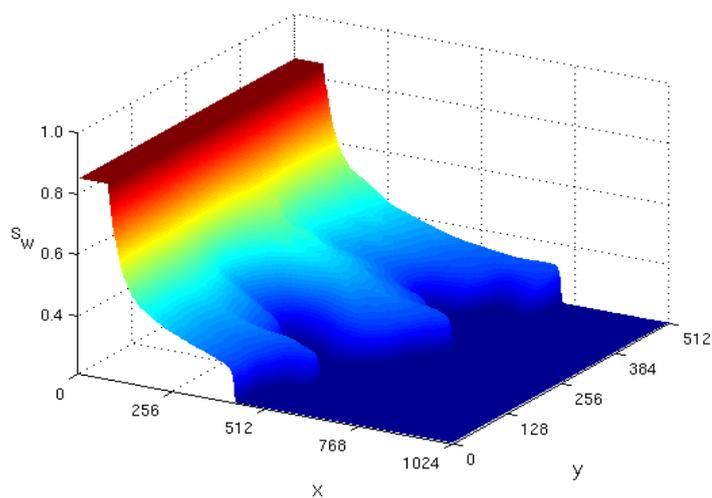


(c) 1024 x 512 volumes de controle.

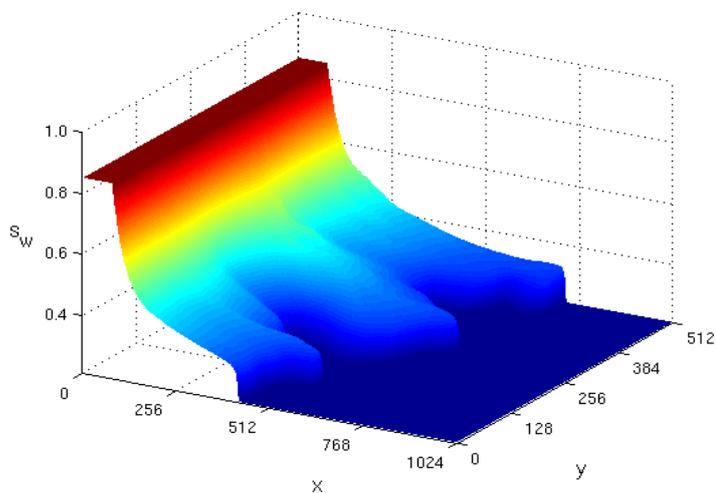
Figura 6.9: Gráficos das superfícies de saturação da água para o estudo de refinamento de malha após transcorridos 1500 dias. Campo de permeabilidades com 32 x 16 elementos.



(a) 256 x 128 volumes de controle.

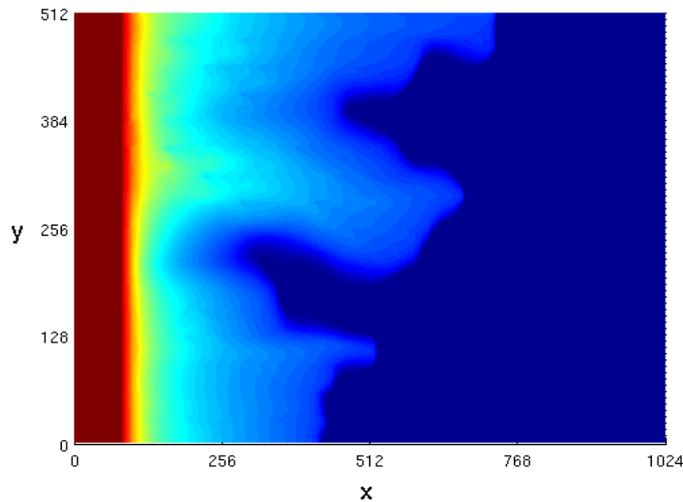


(b) 512 x 256 volumes de controle.

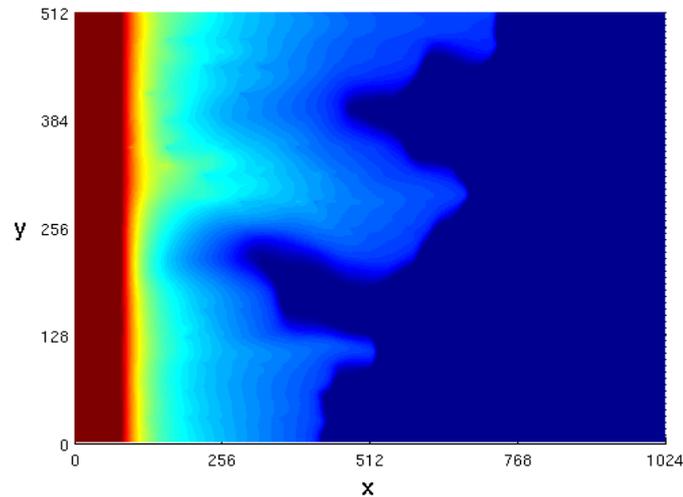


(c) 1024 x 512 volumes de controle.

Figura 6.10: Gráficos das superfícies de saturação da água para o estudo de refinamento de malha após transcorridos 3000 dias. Campo de permeabilidades com 32 x 16 elementos.



(a) 512 x 256 volumes de controle.



(b) 1024 x 512 volumes de controle.

Figura 6.11: Gráficos das superfícies de saturação da água para o estudo de refinamento de malha após transcorridos 3000 dias. Campo de permeabilidades com 32 x 16 elementos.

refinadas e para o último instante de tempo, ou seja, para as malhas 512 x 256 e 1024 x 512 volumes de controle e 3000 dias de simulação. Entretanto, desta vez os perfis dos campos de saturações são apresentados no plano, de modo a que possamos constatar a identidade entre estes dois campos. Portanto, destes resultados podemos concluir que a convergência numérica é alcançada para uma malha de 1024 x 512 volumes de controle, de modo que esta malha será utilizada quando das simulações empregando malhas geológicas de 32 x 16 elementos.

Uma melhor comparação entre as frentes de avanço da fase água pode ser vista na Figura 6.12, que apresenta os mesmos resultados da Figura 6.11. Porém, neste caso,

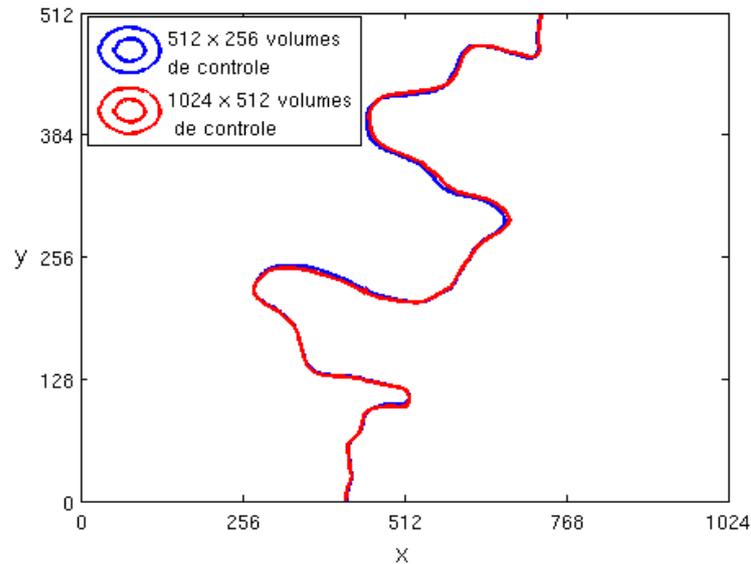


Figura 6.12: Gráfico das superfícies da frente de propagação da fase água com as malhas computacionais de 512×256 e 1024×512 volumes de controle sobrepostas para um campo de permeabilidades com 32×16 elementos.

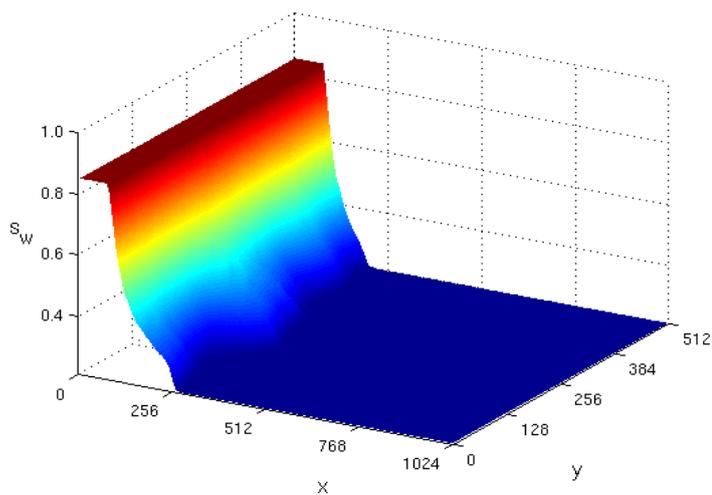
os perfis dos campos de saturações para as duas malhas encontram-se sobrepostos. Estes resultados mostram que os perfis de saturações são praticamente coincidentes. Portanto, fomos levados, mais uma vez, a concluir que a convergência numérica é alcançada para uma malha de 1024×512 volumes de controle.

6.4.2 Campo Geológico com 64×32 Elementos

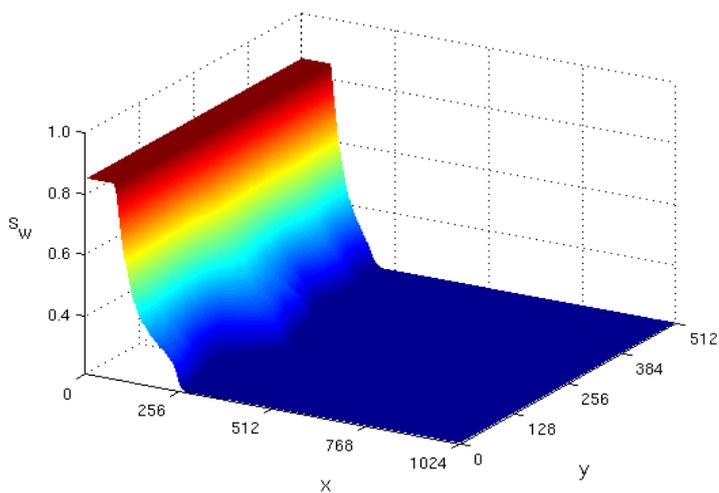
De modo análogo ao que foi feito na subseção anterior, um estudo de convergência numérica também foi realizado para um campo geológico de 64×32 elementos. As simulações foram realizadas considerando o mesmo escoamento bifásico água-óleo, as mesmas dimensões físicas e os mesmos parâmetros físicos que os empregados para o campo de permeabilidades de 32×16 elementos.

Também foram empregadas as mesmas três malhas computacionais, 256×128 , 512×256 e 1024×512 volumes de controle, e os resultados apresentados nas Figuras 6.13-6.15 são para os mesmos três instantes de tempo: 750, 1500 e 3000 dias de simulação.

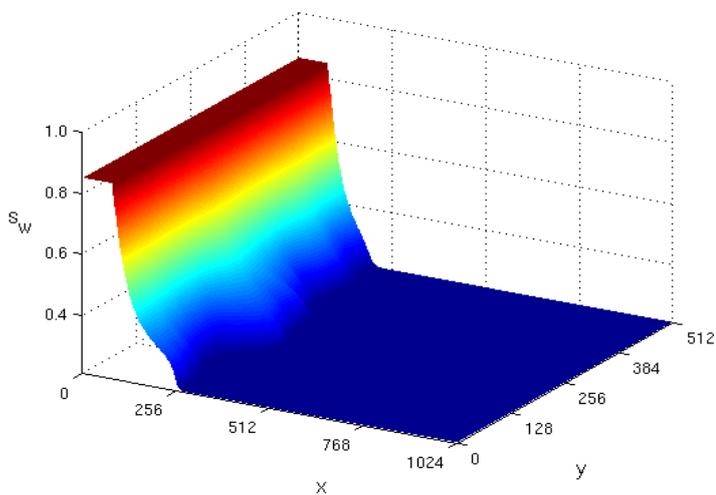
Os resultados indicam que a convergência numérica também foi atingida para uma malha de 1024×512 volumes de controle. Podemos observar, também, que para esta malha geológica mais refinada os resultados numéricos são mais difusivos e não conseguimos capturar os detalhes do escoamento como no caso do campo de permeabilidades composto de 32×16 elementos. Neste caso, o ideal seria empregarmos um valor mais



(a) 256 x 128 volumes de controle.

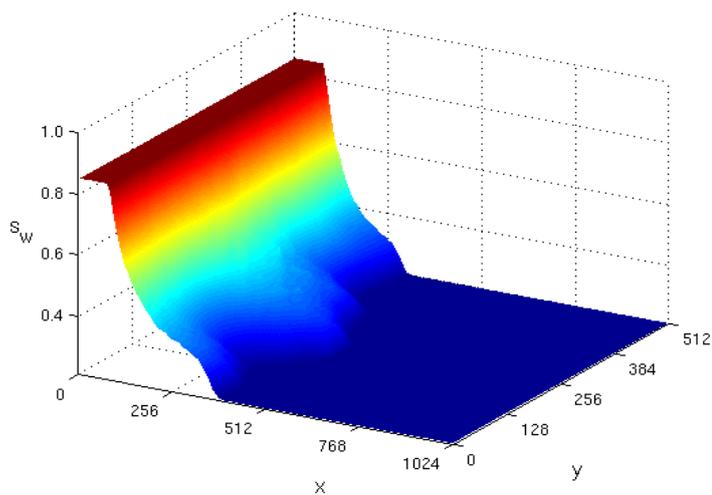


(b) 512 x 256 volumes de controle.

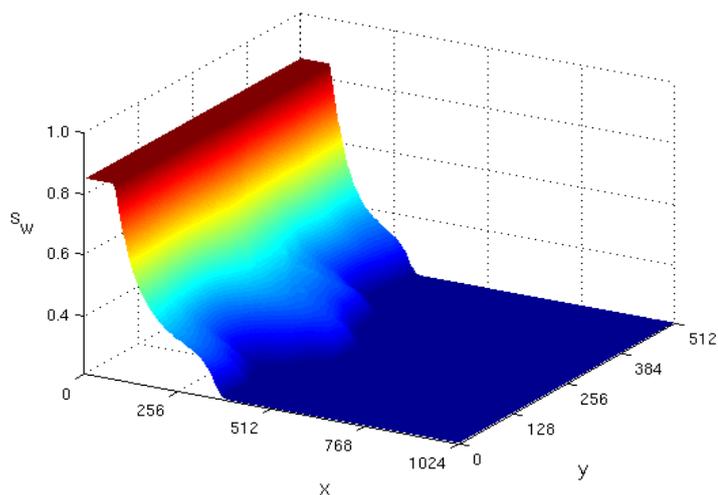


(c) 1024 x 512 volumes de controle.

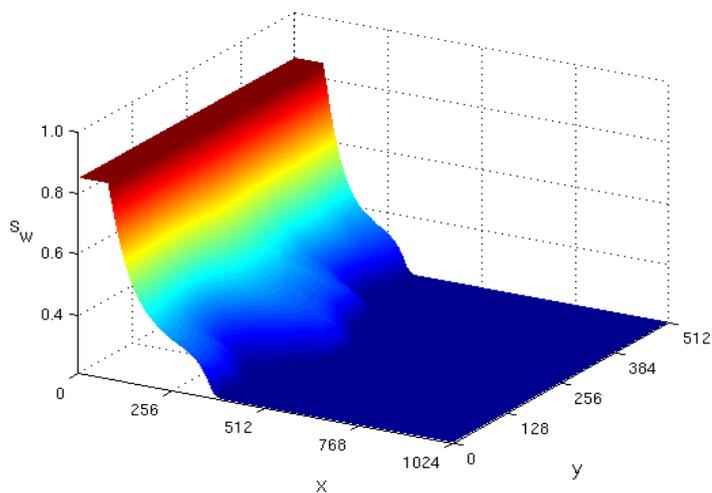
Figura 6.13: Gráficos das superfícies de saturação da água para o estudo de refinamento de malha após transcorridos 750 dias. Campo de permeabilidades com 64 x 32 elementos.



(a) 256 x 128 volumes de controle.

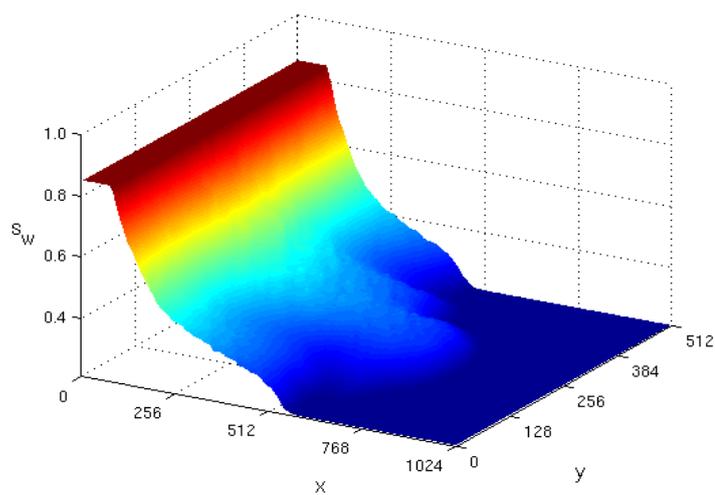


(b) 512 x 256 volumes de controle.

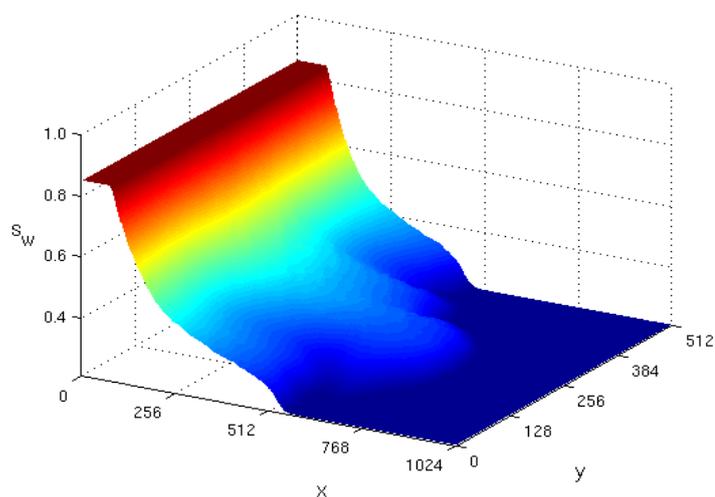


(c) 1024 x 512 volumes de controle.

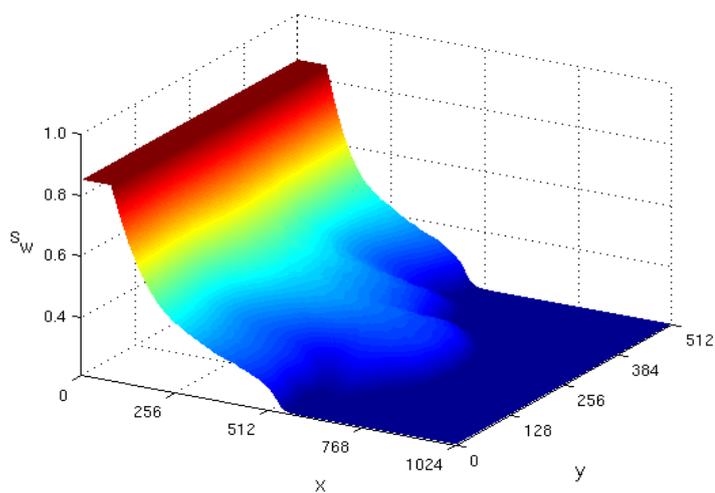
Figura 6.14: Gráficos das superfícies de saturação da água para o estudo de refinamento de malha após transcorridos 1500 dias. Campo de permeabilidades com 64 x 32 elementos.



(a) 256 x 128 volumes de controle.

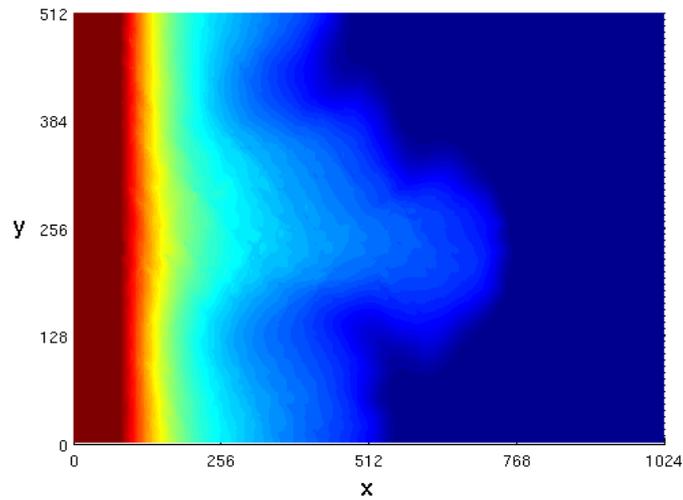


(b) 512 x 256 volumes de controle.

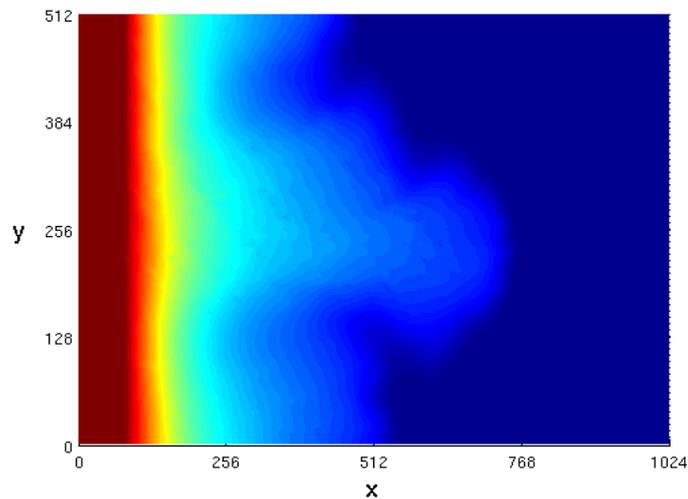


(c) 1024 x 512 volumes de controle.

Figura 6.15: Gráficos das superfícies de saturação da água para o estudo de refinamento de malha após transcorridos 3000 dias. Campo de permeabilidades com 64 x 32 elementos.



(a) 512 x 256 volumes de controle.



(b) 1024 x 512 volumes de controle.

Figura 6.16: Gráficos das superfícies de saturação da água para o estudo de refinamento de malha após transcorridos 3000 dias. Campo de permeabilidades com 64×32 elementos.

baixo para o coeficiente de difusão Γ mas, conforme veremos mais adiante, apesar da melhora dos resultados, notamos o aparecimento de pequenas oscilações espúrias na campo de saturações!

Assim como havíamos feito anteriormente, os últimos resultados calculados para 3000 dias e com as malhas computacionais de 512×256 e 1024×512 volumes de controle são reproduzidos, no plano, na Figura 6.16. Desta figura, verificamos facilmente que os campos de saturação são praticamente idênticos para as duas malhas computacionais consideradas.

Na Figura 6.17 apresentamos os perfis dos campos de saturações sobrepostas

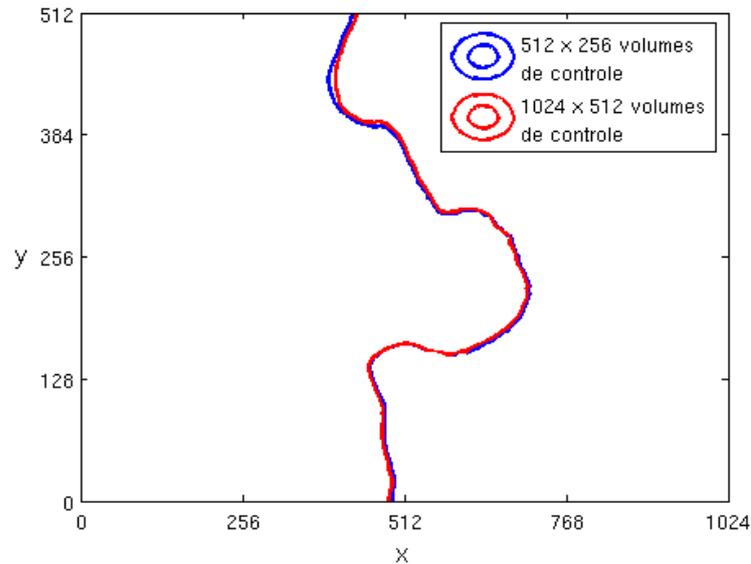


Figura 6.17: Gráfico das superfícies da frente de propagação da fase água com as malhas computacionais de 512×256 e 1024×512 volumes de controle sobrepostas para um campo de permeabilidades com 64×32 elementos.

para as malhas computacionais de 512×256 e 1024×512 volumes de controle e para um tempo final de simulação igual a 3000 dias. Nesta última figura podemos comparar mais facilmente a forma da frente de propagação da fase água determinada mediante o emprego das malhas computacionais mais refinadas. A menos de pequenas variações nos perfis de saturações, podemos considerar que obtemos a convergência numérica com a malha de 1024×512 volumes de controle.

Terminado o estudo de convergência numérica, podemos considerar (pelo menos visualmente) que os resultados numéricos convergiram sobre refinamento de malha em se tratando dos dois campos de permeabilidades considerados. Nos dois casos o emprego de uma malha computacional de 1024×512 volumes de controle foi suficiente para que considerássemos que a convergência numérica foi alcançada. Portanto, esta malha computacional será utilizada nas demais simulações a serem apresentadas.

6.5 Escoamento Bifásico Água-Óleo Bidimensional

Apresentamos, agora, algumas simulações para o problema do escoamento bifásico água-óleo em um meio poroso heterogêneo. Em todos os casos mostrados o escoamento se dá da esquerda para a direita, com uma condição de fluxo prescrito na fronteira esquerda e de fluxo nulo nas fronteiras laterais. O domínio físico representa um reservatório de dimensões 1024 m x 512 m que contém inicialmente óleo e uma pequena quantidade residual de água.

Assim como no estudo de convergência numérica, os nossos resultados são obtidos com uma formulação do tipo FSTAB e com um limitador de fluxo do tipo MC (*monotonized central-difference*). As seguintes grandezas físicas são consideradas: $\epsilon = 0,3$; $s_{rw} = 0,2$; $s_{ro} = 0,15$; $U = 1,0 \cdot 10^{-7}$ m/s; viscosidade da fase água $\mu_w = 0,0005$ Pa.s; viscosidade da fase óleo $\mu_o = 0,01$ Pa.s; $\Delta t = 0,125$ dia e $\gamma = 0,0$.

Dois campos geológicos são usados na definição dos campos de permeabilidades, 32 x 16 elementos e 64 x 32 elementos, e a variabilidade da heterogeneidade do meio poroso é assegurada mediante o uso de dois coeficientes de variação, $CV=0,3$ e $0,5$, para cada campo geológico considerado. As simulações foram determinadas para três instantes de tempo: 1500 dias, 2250 dias e 3000 dias.

Os nossos resultados são confrontados com os resultados fornecidos pelo simulador NT, que não considera os efeitos difusivos físicos provenientes da existência do gradiente de pressão capilar, embora seja sabido que este simulador apresenta resultados com elevada difusão numérica para pequenos valores do incremento de tempo (RIBEIRO, 2007).

6.5.1 Campo Geológico com 32 x 16 Elementos e $CV=0,3$

Um conjunto de resultados é apresentado nas Figuras 6.18-6.20, que correspondem aos nossos resultados, obtidos para três valores do coeficiente de difusão $\Gamma = 1,0 \cdot 10^{-6}$, $0,5 \cdot 10^{-6}$ e $0,25 \cdot 10^{-6}$, e os resultados correspondentes obtidos com o simulador NT ($\Gamma = 0$, uma vez que ele não leva em consideração os efeitos difusivos). Na seqüência são apresentados os resultados para 1500, 2250 e 3000 dias e todos eles foram obtidos para uma malha geológica de 32 x 16 elementos e um coeficiente de variação igual 0,3.

Uma primeira constatação que podemos fazer diz respeito à diferença de resultados do campo de saturações quando empregamos um coeficiente de difusão menor. Neste caso vemos que capturamos alguns dedos que não estavam presentes na simulação com

$\Gamma = 1,0 \cdot 10^{-6}$ e $0,5 \cdot 10^{-6}$. Entretanto, este menor coeficiente de difusão ainda não foi baixo o suficiente para que tenhamos a mesma riqueza de detalhes apresentada pelos resultados do simulador NT, embora os dedos principais também tenham sido capturados pelo nosso simulador.

A segunda observação pode ser feita com relação ao avanço da frente de água no interior do domínio de resolução. Como os resultados do NT apresentam dedos mais pronunciados e finos dos que os do nosso simulador, a conservação da massa implica numa maior velocidade de propagação da frente de saturação. Tal fato pode ser percebido mais claramente para um tempo de simulação igual a 3000 dias.

Concluindo, temos que poder reduzir ainda mais o valor do coeficiente de difusão se quisermos obter resultados que capturem com uma riqueza de detalhes maior a propagação da frente de saturação, uma vez que é extremamente importante determinarmos corretamente o momento em que a frente de água chegará à fronteira de produção do reservatório. Conforme já destacado, uma difusão física excessiva pode comprometer tal resultado. Entretanto, a obtenção de valores com menores coeficientes de difusão está condicionada ao controle do aparecimento das oscilações espúrias. Embora os esquemas empregados na aproximação dos valores do fluxo nas faces dos volumes de controle sejam do tipo TVD, aparentemente a implementação final não resultou num método numérico que seja livre do aparecimento destas oscilações para qualquer valores do fluxo inicial, incrementos de espaço e tempo e coeficiente de difusão.

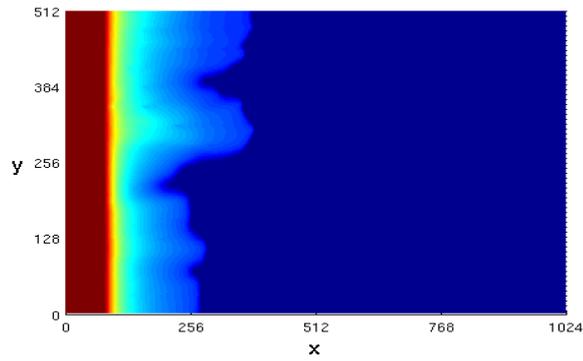
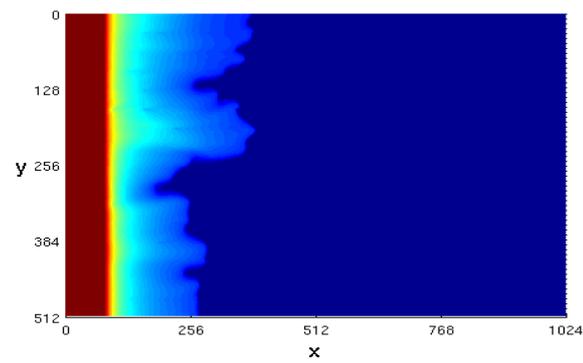
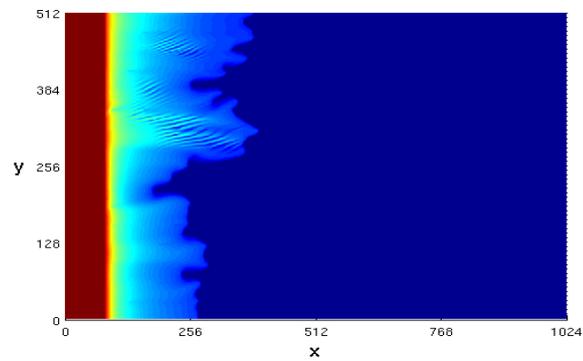
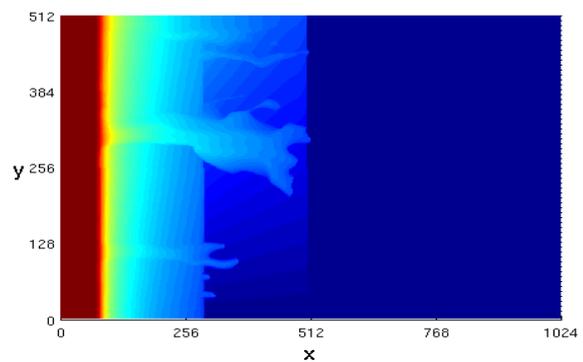
(a) FSTAB com $\Gamma = 1,0 \cdot 10^{-6}$.(b) FSTAB com $\Gamma = 0,5 \cdot 10^{-6}$.(c) FSTAB com $\Gamma = 0,25 \cdot 10^{-6}$.(d) NT com $\Gamma = 0,0$.

Figura 6.18: Superfícies de saturação da água após transcorridos 1500 dias. Campo de permeabilidades com 32×16 elementos e $CV=0,3$.

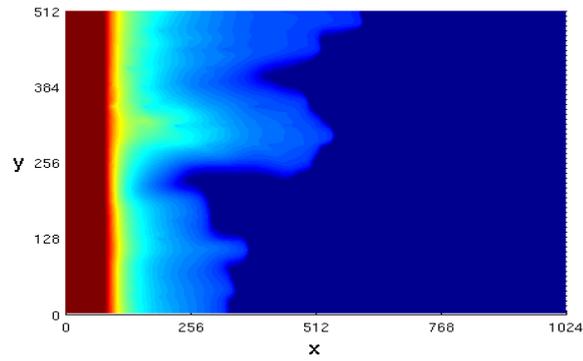
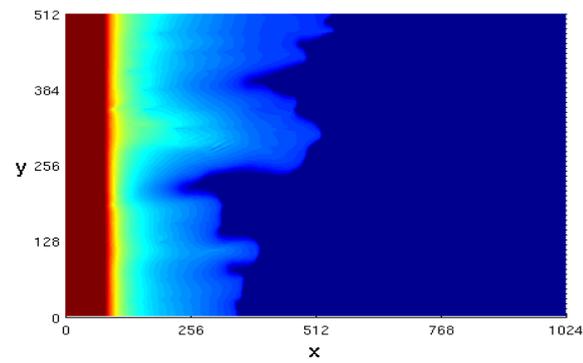
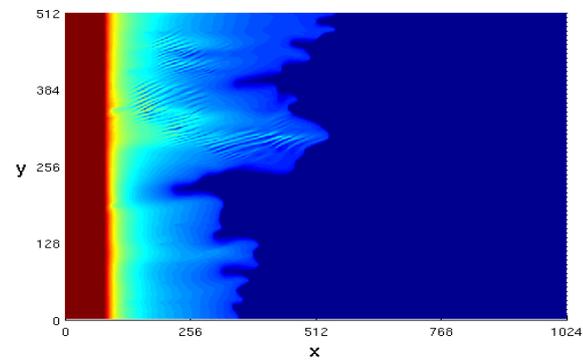
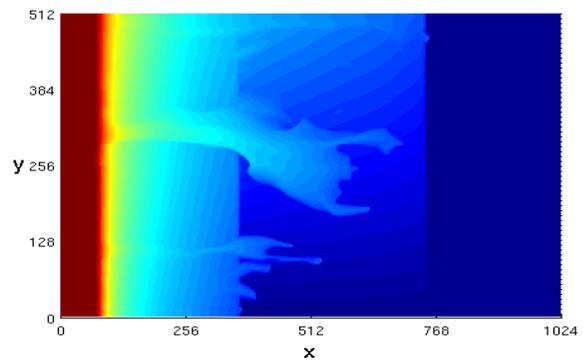
(a) FSTAB com $\Gamma = 1,0 \cdot 10^{-6}$.(b) FSTAB com $\Gamma = 0,5 \cdot 10^{-6}$.(c) FSTAB com $\Gamma = 0,25 \cdot 10^{-6}$.(d) NT com $\Gamma = 0,0$.

Figura 6.19: Superfícies de saturação da água após transcorridos 2250 dias. Campo de permeabilidades com 32×16 elementos e $CV=0,3$.

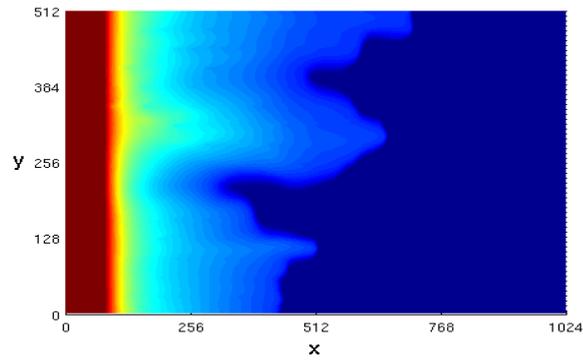
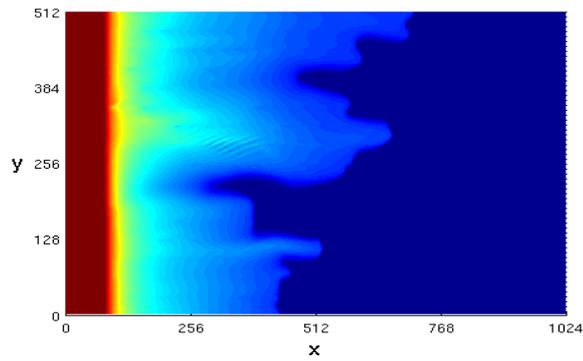
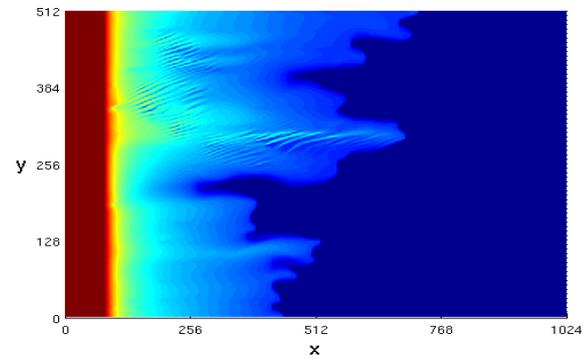
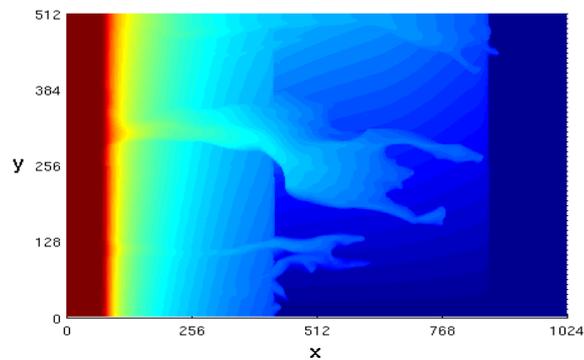
(a) FSTAB com $\Gamma = 1,0 \cdot 10^{-6}$.(b) FSTAB com $\Gamma = 0,5 \cdot 10^{-6}$.(c) FSTAB com $\Gamma = 0,25 \cdot 10^{-6}$.(d) NT com $\Gamma = 0,0$.

Figura 6.20: Superfícies de saturação da água após transcorridos 3000 dias. Campo de permeabilidades com 32×16 elementos e $CV=0,3$.

6.5.2 Campo Geológico com 32 x 16 Elementos e $CV=0,5$

Novos conjuntos de simulações foram realizados agora para um campo de permeabilidades com um coeficiente de variação igual a 0,5. Portanto, este campo apresenta um grau de heterogeneidade maior que o do campo com $CV=0,3$. Não obstante, ressalvamos que mesmo assim este valor do coeficiente de variação não é representativo de um meio poroso altamente heterogêneo, como é o caso de alguns meios reais.

Estes resultados foram obtidos, conforme já mencionado, para as mesmas condições físicas e os mesmos parâmetros que os empregados nas simulações realizadas com um campo de permeabilidades de 32 x 16 elementos e $CV=0,3$.

Nas Figuras 6.21 a 6.23 podemos ver os campos de saturação correspondentes a estas novas simulações. Apesar deste novo campo de permeabilidades apresentar uma maior heterogeneidade, percebemos que existem somente pequenas diferenças entre estes resultados e aqueles referentes ao mesmo campo geológico e para um $CV=0,3$. Mais uma vez tal fato se deve à difusão física (acrescida de difusão numérica) em decorrência do valor elevado do coeficiente de difusão empregado.

Por outro lado, conforme anteriormente, os resultados provenientes do simulador NT apresentam um maior número de dedos (pequenos e grandes) e apresenta uma frente de propagação que encontra-se adiantada com relação aos nossos resultados. Estes resultados foram mais sensíveis à mudança do coeficiente de variação e podemos notar que os padrões apresentam mudanças perceptíveis com relação aos resultados determinados para um $CV=0,3$.

As mesmas observações feitas com relação aos resultados calculados para um $CV=0,3$ também se aplicam aqui e percebemos que a variação do coeficiente de variação não foi significativa no caso da malha geológica de 32 x 16 elementos em se tratando dos nossos resultados.

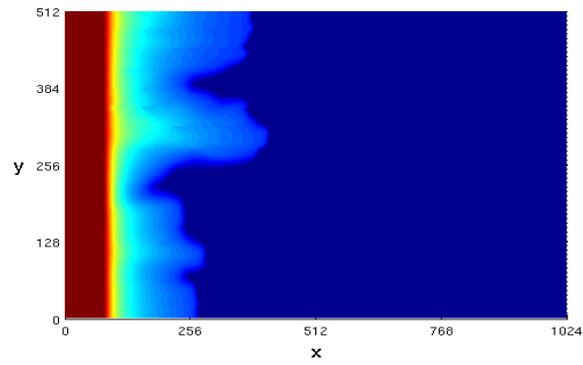
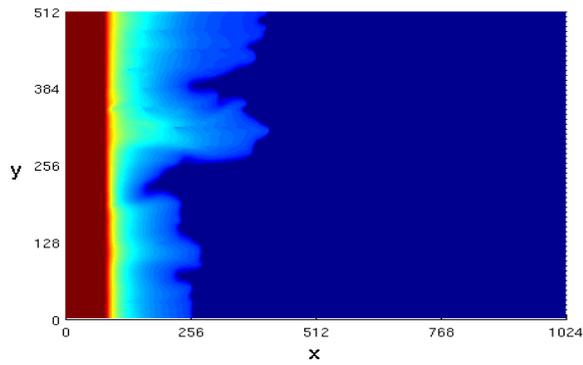
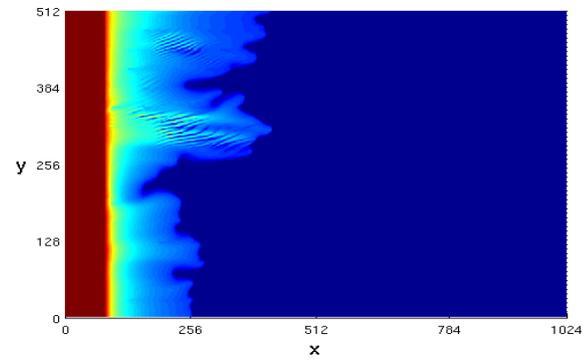
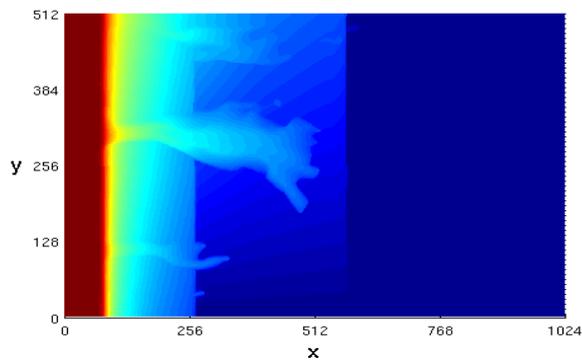
(a) FSTAB com $\Gamma = 1,0 \cdot 10^{-6}$.(b) FSTAB com $\Gamma = 0,5 \cdot 10^{-6}$.(c) FSTAB com $\Gamma = 0,25 \cdot 10^{-6}$.(d) NT com $\Gamma = 0,0$.

Figura 6.21: Superfícies de saturação da água após transcorridos 1500 dias. Campo de permeabilidades com 32×16 elementos e $CV=0,5$.

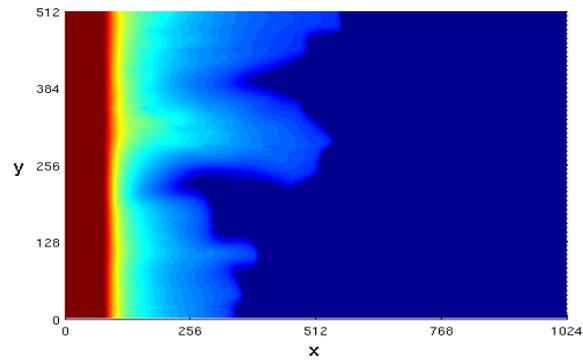
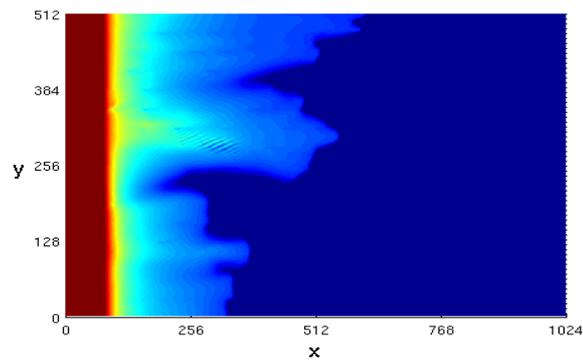
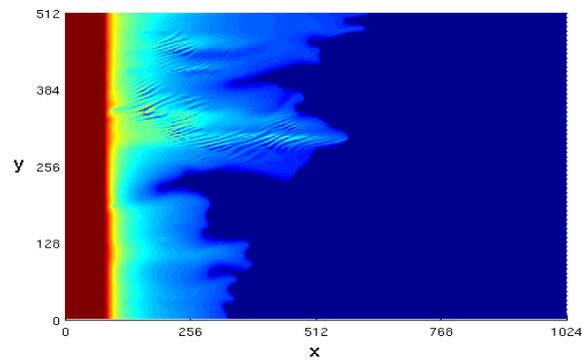
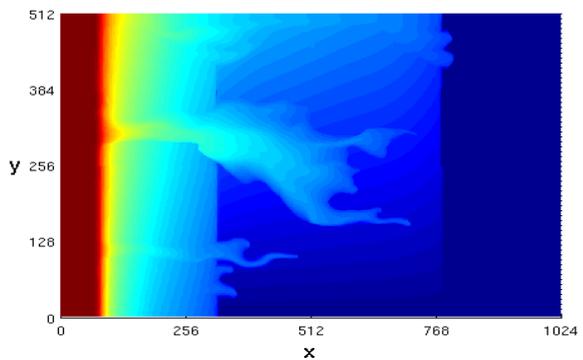
(a) FSTAB com $\Gamma = 1,0 \cdot 10^{-6}$.(b) FSTAB com $\Gamma = 0,5 \cdot 10^{-6}$.(c) FSTAB com $\Gamma = 0,25 \cdot 10^{-6}$.(d) NT com $\Gamma = 0,0$.

Figura 6.22: Superfícies de saturação da água após transcorridos 2250 dias. Campo de permeabilidades com 32×16 elementos e $CV=0,5$.

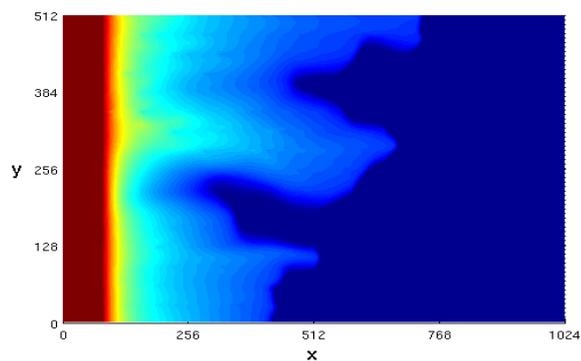
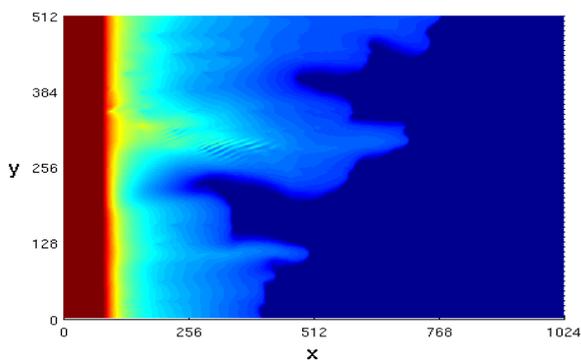
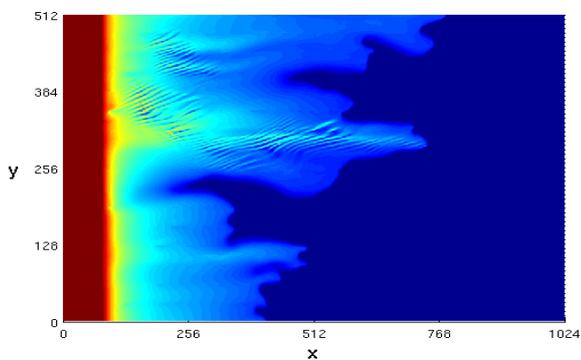
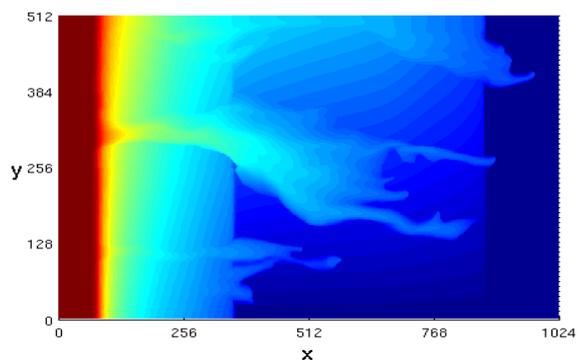
(a) FSTAB com $\Gamma = 1,0 \cdot 10^{-6}$.(b) FSTAB com $\Gamma = 0,5 \cdot 10^{-6}$.(c) FSTAB com $\Gamma = 0,25 \cdot 10^{-6}$.(d) NT com $\Gamma = 0,0$.

Figura 6.23: Superfícies de saturação da água após transcorridos 3000 dias. Campo de permeabilidades com 32×16 elementos e $CV=0,5$.

6.5.3 Campo Geológico com 64 x 32 Elementos e $CV=0,3$

Diferentemente do caso do meio geológico com 32 x 16 elementos, os efeitos da difusão física são ainda mais significativos quando consideramos um campo com 64 x 32 elementos.

Nas Figuras 6.24 a 6.26 percebemos o quão os perfis da frente de saturação da fase água são alterados em função do coeficiente de difusão. Para valores do coeficiente de difusão iguais a $1, 0 \cdot 10^{-6}$, praticamente não percebemos a formação de um dedo principal que se forma na região central do reservatório. Em função deste efeito físico, vemos que a frente calculada com valores de $\Gamma = 0, 5 \cdot 10^{-6}$ e $0, 25 \cdot 10^{-6}$ apresentam-se adiantadas com relação aos resultados mais difusivos, embora bem atrás da frente do simulador NT. A explicação para tal fato já foi apresentada na subseção anterior.

Estes resultados são significativos no sentido de mostrar que mesmo pequenas variações, que não alteram a ordem de grandeza, nos valores do coeficiente de difusão podem levar a resultados com diferenças fundamentais. O dedo que dispara na região central, bem exemplificado nos resultados do simulador NT, dão uma idéia de quão rápido a frente d'água pode chegar ao final do reservatório. Ela praticamente já alcançou o final do reservatório para um tempo de simulação igual a 2250 dias, enquanto que a frente correspondente aos valores de $\Gamma = 0, 5 \cdot 10^{-6}$ e $0, 25 \cdot 10^{-6}$ aproximam-se apenas dos 3/4 do reservatório.

Também nestes casos, percebemos que os nossos resultados são capazes de capturar os caminhos preferenciais que se formam no interior do reservatório e que darão origem à formação de dedos que irão avançar com relação ao restante da frente de saturação. Entretanto, para os valores do coeficiente de difusão utilizados, não somos capazes de reproduzir os detalhes e a multiplicidade de dedos encontrados nos resultados provenientes do NT.

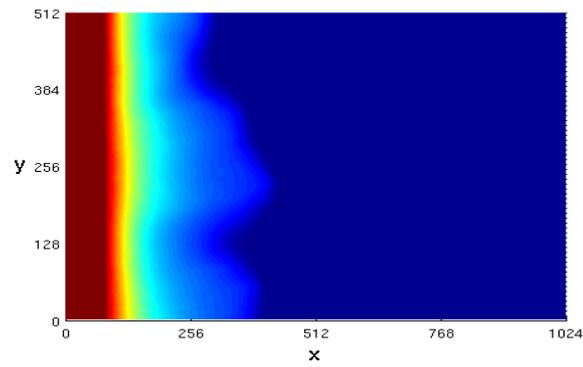
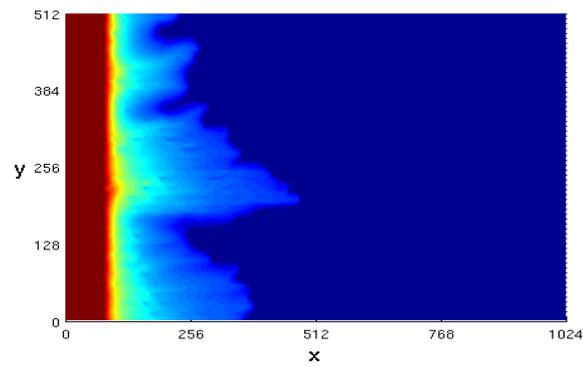
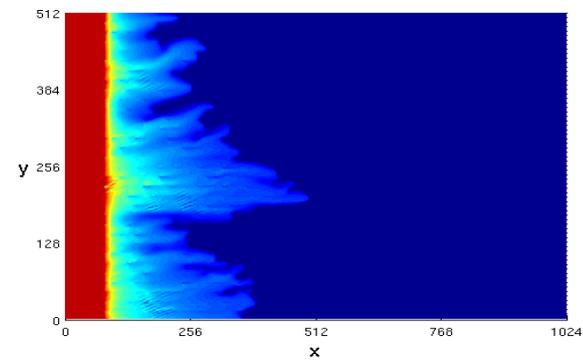
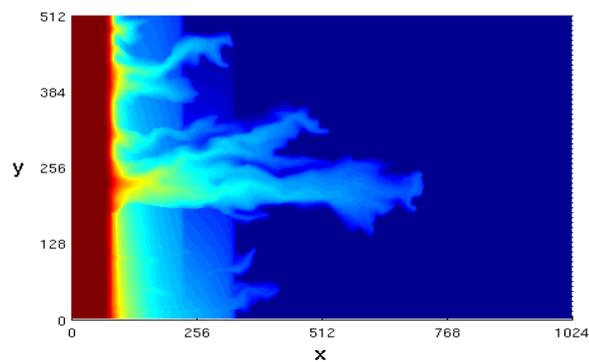
(a) FSTAB com $\Gamma = 1,0 \cdot 10^{-6}$.(b) FSTAB com $\Gamma = 0,5 \cdot 10^{-6}$.(c) FSTAB com $\Gamma = 0,25 \cdot 10^{-6}$.(d) NT com $\Gamma = 0,0$.

Figura 6.24: Superfícies de saturação da água após transcorridos 1500 dias. Campo de permeabilidades com 64×32 elementos e $CV=0,3$.

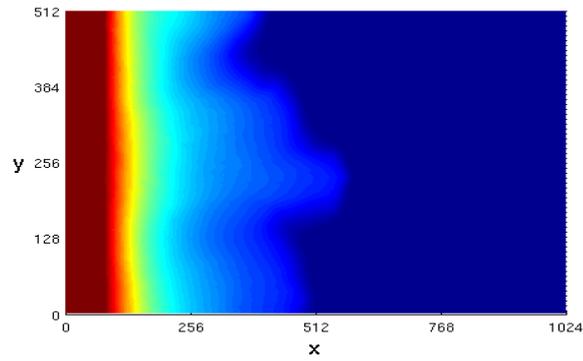
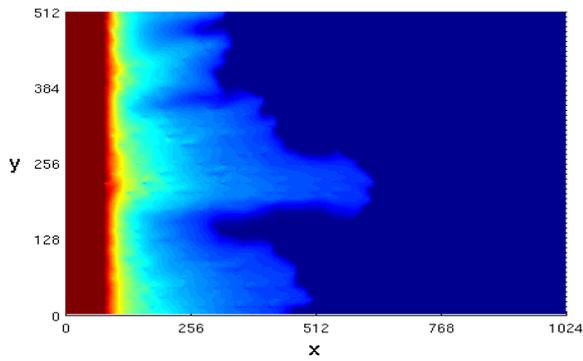
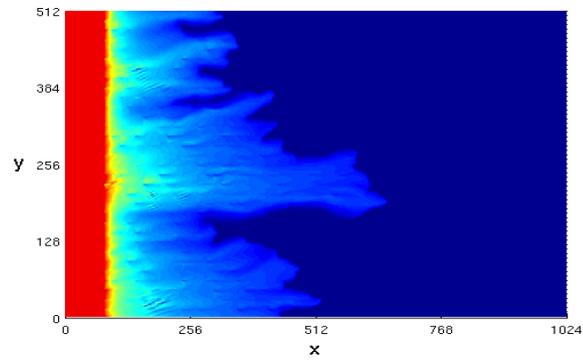
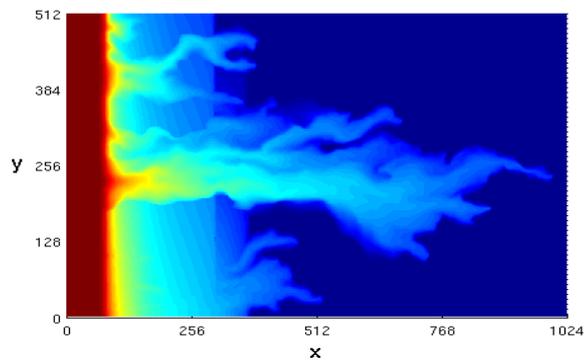
(a) FSTAB com $\Gamma = 1,0 \cdot 10^{-6}$.(b) FSTAB com $\Gamma = 0,5 \cdot 10^{-6}$.(c) FSTAB com $\Gamma = 0,25 \cdot 10^{-6}$.(d) NT com $\Gamma = 0,0$.

Figura 6.25: Superfícies de saturação da água após transcorridos 2250 dias. Campo de permeabilidades com 64×32 elementos e $CV=0,3$.

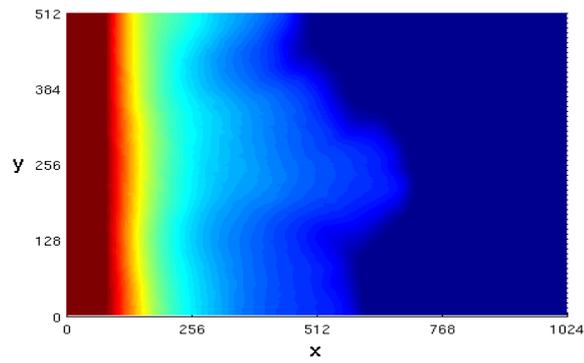
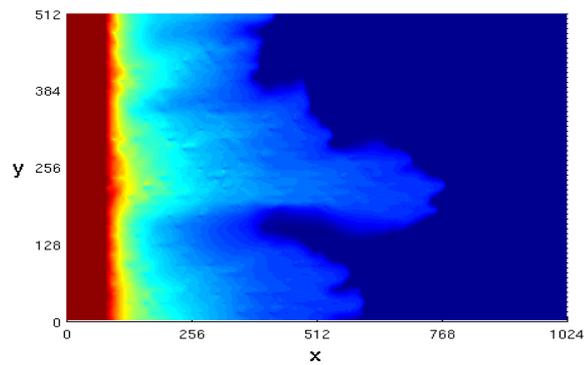
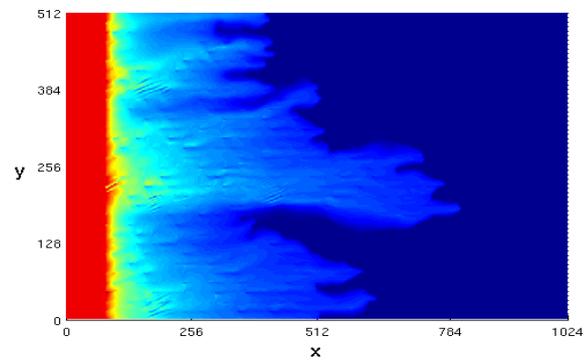
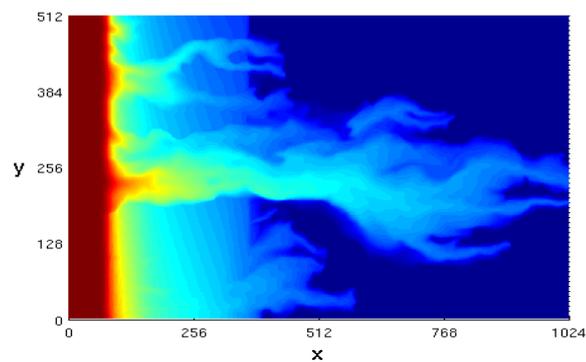
(a) FSTAB com $\Gamma = 1,0 \cdot 10^{-6}$.(b) FSTAB com $\Gamma = 0,5 \cdot 10^{-6}$.(c) FSTAB com $\Gamma = 0,25 \cdot 10^{-6}$.(d) NT com $\Gamma = 0,0$.

Figura 6.26: Superfícies de saturação da água após transcorridos 3000 dias. Campo de permeabilidades com 64×32 elementos e $CV=0,3$.

6.5.4 Campo Geológico com 64 x 32 Elementos e $CV=0,5$

Para um campo de permeabilidades mais refinado, 64 x 32 elementos, a influência da variação do coeficiente de variação é percebida claramente quando comparamos os resultados, para os respectivos tempos de simulação, com os mesmos valores obtidos com um CV igual a 0,3.

Os perfis de saturação encontram-se nas Figuras 6.27-6.29 para os mesmos três instantes de tempo simulados. Para este coeficiente de variação podemos perceber o aparecimento de uma bifurcação na extremidade do dedo principal que encontra-se mais avançado com relação ao restante da frente de saturação. A variabilidade do campo de permeabilidades acarretou no surgimento de novos caminhos preferenciais para a frente que se desloca.

De modo geral, os mesmos comentários feitos anteriormente para os campos de saturação obtidos com as malhas geológicas de 32 x 16 elementos e $CV=0,3$ e 0,5 e 64 x 32 elementos e $CV=0,3$, também se aplicam ao caso do $CV=0,5$. Um valor elevado do coeficiente de difusão impede o surgimento de caminhos preferenciais que podem levar à formação de dedos que avançam com velocidade superior à velocidade média da frente de saturação. Este efeito leva a um deslocamento da frente como um todo e ela precisará de um tempo significativamente maior para chegar à fronteira de produção do reservatório, quando comparada com uma frente que se desloca devido ao transporte unicamente advectivo. Embora os efeitos difusivos modifiquem significativamente os resultados, notamos que os nossos resultados foram capazes de prever o aparecimento dos três dedos principais que estão presentes nos resultados oriundos do simulador NT.

Finalizando, ficou claro que a possibilidade de realizarmos simulações com menores valores do coeficiente de difusão é essencial para podermos simularmos o transporte predominantemente advectivo. Um outro ponto importante diz respeito ao emprego de malhas geológicas mais refinadas, uma vez que as equações empregadas nas simulações são válidas na escala de Darcy (ou de laboratório). Assim sendo, a questão do surgimento de oscilações espúrias representa um empecilho para que resultados mais realistas possam ser obtidos com o nosso simulador.

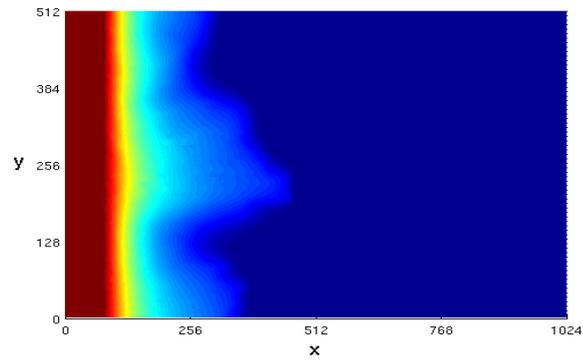
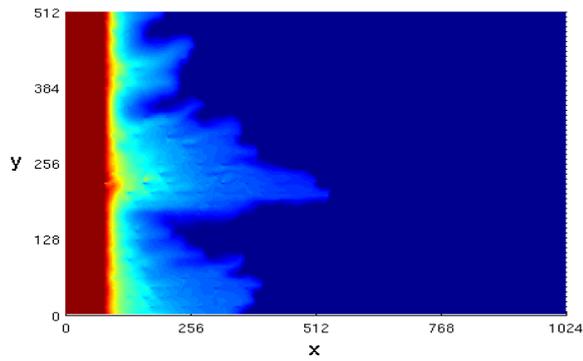
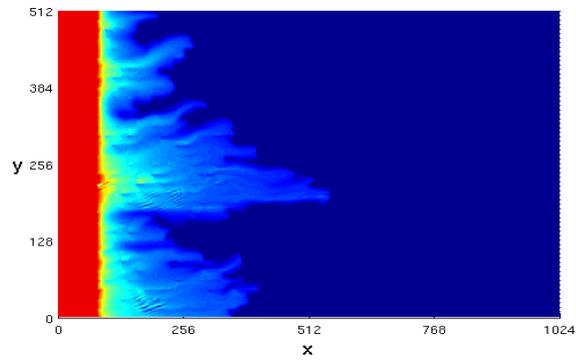
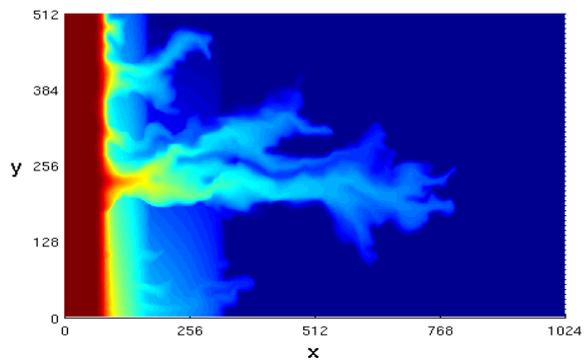
(a) FSTAB com $\Gamma = 1,0 \cdot 10^{-6}$.(b) FSTAB com $\Gamma = 0,5 \cdot 10^{-6}$.(c) FSTAB com $\Gamma = 0,25 \cdot 10^{-6}$.(d) NT com $\Gamma = 0,0$.

Figura 6.27: Superfícies de saturação da água após transcorridos 1500 dias. Campo de permeabilidades com 64×32 elementos e $CV=0,5$.

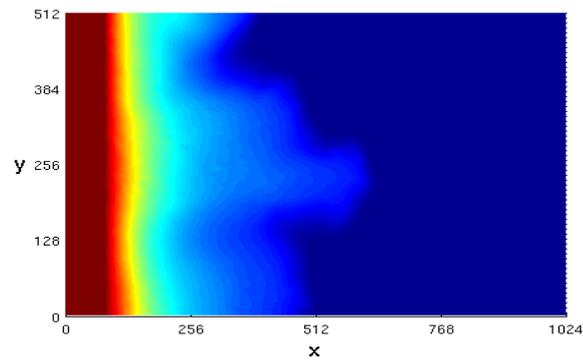
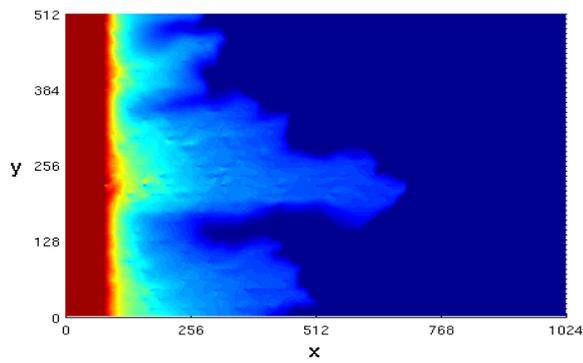
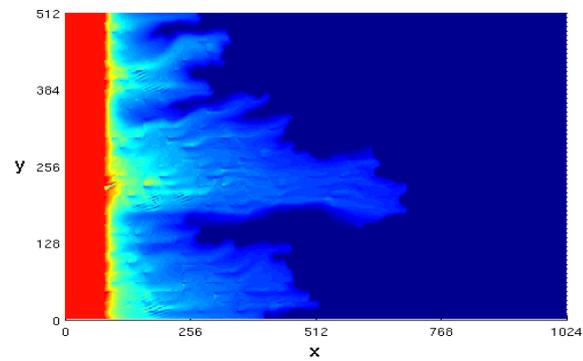
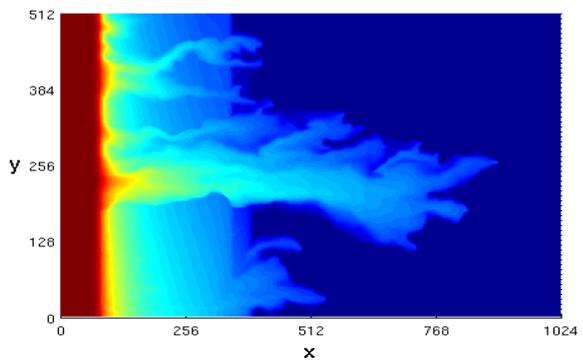
(a) FSTAB com $\Gamma = 1,0 \cdot 10^{-6}$.(b) FSTAB com $\Gamma = 0,5 \cdot 10^{-6}$.(c) FSTAB com $\Gamma = 0,25 \cdot 10^{-6}$.(d) NT com $\Gamma = 0,0$.

Figura 6.28: Superfícies de saturação da água após transcorridos 2250 dias. Campo de permeabilidades com 64×32 elementos e $CV=0,5$.

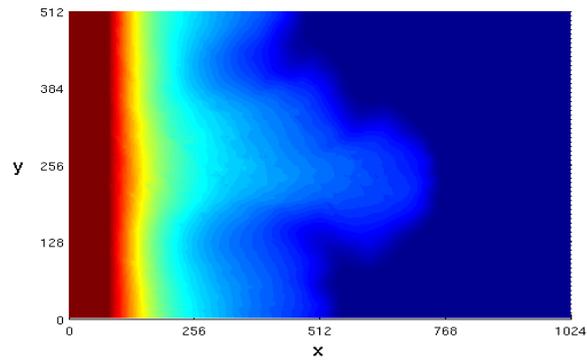
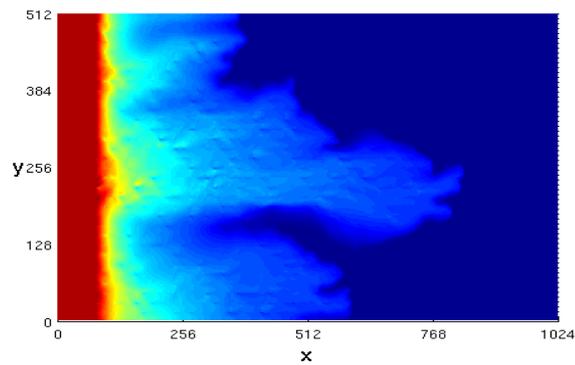
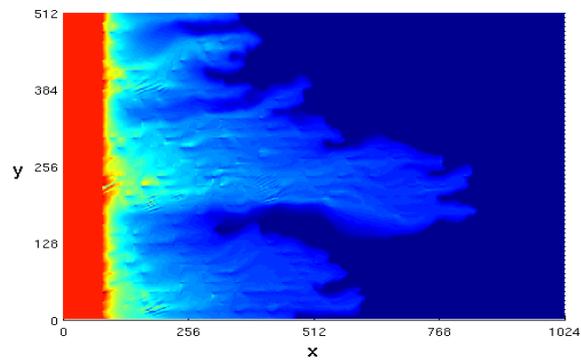
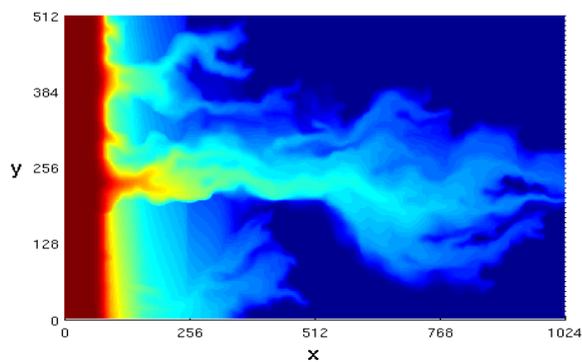
(a) FSTAB com $\Gamma = 1,0 \cdot 10^{-6}$.(b) FSTAB com $\Gamma = 0,5 \cdot 10^{-6}$.(c) FSTAB com $\Gamma = 0,25 \cdot 10^{-6}$.(d) NT com $\Gamma = 0,0$.

Figura 6.29: Superfícies de saturação da água após transcorridos 3000 dias. Campo de permeabilidades com 64×32 elementos e $CV=0,5$.

7 CONCLUSÕES E PERSPECTIVAS

7.1 Conclusões

Neste trabalho desenvolvemos um simulador numérico empregando o método dos volumes finitos, com uma formulação semi-implícita, para o problema parabólico não-linear do transporte de massa. Diferentes esquemas do tipo TVD (*Total Variation Diminishing*) foram empregados na aproximação do termo de fluxo advectivo não-linear. Cinco formulações semi-implícitas alternativas foram propostas a fim de satisfazer a algumas regras básicas para obtermos um método numérico estável, e quatro métodos iterativos de resolução de sistemas algébricos foram implementados: o TDMA (Tri-Diagonal Matrix Algorithm), o SIP (Strongly Implicit Procedure), o Gradiente Biconjugado (BI-CG) e o Gradiente Biconjugado Estável (BI-CGSTAB).

O nosso simulador foi testado e validado a partir da comparação dos seus resultados numéricos com os valores oriundos da solução analítica da equação de Burgers unidimensional com e sem dissipação. Esta comparação mostrou que os resultados numéricos foram capazes de reproduzir os valores teóricos em todos os casos considerados.

A equação de Buckley-Leverett, que governa o escoamento bifásico unidimensional, também foi empregada a fim de validarmos os nossos resultados no caso de um problema apresentando uma função de fluxo não-convexa. Os valores numéricos foram capazes de simular corretamente a rarefação e o choque que aparecem no escoamento bifásico imiscível, reproduzindo corretamente a previsão teórica para o valor da saturação da fase água que determina o final da rarefação e início do choque. A título de verificação dos nossos resultados numéricos, apresentamos alguns simulações unidimensionais para o problema do escoamento bifásico água-óleo no interior de um meio poroso com porosidade constante. Estes resultados foram confrontados com a solução analítica da equação de Buckley-Leverett unidimensional que governa este tipo de escoamento bifásico. Nestas validações também foram levados em consideração os efeitos gravitacionais. As simulações realizadas mostraram que foi possível reproduzir de forma satisfatória a solução analítica da equação de Buckley-Leverett.

Resultados numéricos bidimensionais foram obtidos para o escoamento bifásico água-óleo em meios porosos com baixo grau de heterogeneidade e para valores fixos do coeficiente de difusão. Estes resultados foram comparados com os perfis de saturações obtidos com a utilização do simulador denominado NT, que emprega uma estratégia do tipo IMPES e não considera os efeitos difusivos provenientes da existência do gradiente da pressão capilar. Ao final destas comparações concluímos que os nossos resultados eram muito difusivos quando comparados com os resultados similares provenientes do simulador NT. Tal fato se deve, em princípio, ao valor do coeficiente de difusão utilizado nas simulações. Este valor não pôde ser reduzido significativamente devido ao aparecimento de oscilações espúrias no campo de saturações.

Este último problema deve ser prioritariamente resolvido, antes que o nosso simulador possa ser empregado na simulação numérica do escoamento bifásico em meios porosos com elevados graus de heterogeneidades e no qual o transporte de massa seja fortemente advectivo, ou seja, governado por equações diferenciais parciais com comportamento predominantemente hiperbólico.

7.2 Perspectivas

Muito ainda precisa ser feito para que possamos utilizar o nosso simulador em situações próximas das aplicações práticas. Dentre as ações futuras que podem ser pensadas, no sentido que melhorarmos o simulador numérico, podemos citar:

- A possibilidade de tratarmos o termo de fluxo advectivo sem a necessidade do desenvolvimento em série de Taylor;
- A escritura das equações governantes nas suas formas adimensionais, de modo a podermos correlacionar o aparecimento das oscilações espúrias com os números adimensionais que governam o escoamento bifásico em um meio poroso;
- Um estudo aprofundado para a verificação das condições que devem ser impostas a fim de que os métodos numéricos sejam TVD como um todo e não apresentem oscilações espúrias;
- A comparação dos nossos resultados com os resultados numéricos do simulador NT com o módulo de difusão física implementado;
- Uma comparação mais aprofundada das diferentes formulações alternativas para diferentes condições de escoamento e para diferentes valores do incremento de tempo;

- A implementação de um pré-condicionador mais eficiente para os métodos do tipo Gradiente Biconjugado;
- Uma comparação mais extensiva da eficiência computacional dos diferentes métodos iterativos.

REFERÊNCIAS

- AFIF, M.; AMAZINE, B. On convergence of finite volume schemes for one-dimensional two-phase flow in porous media. *Journal of Computational and Applied Mathematics*, n. 145, p. 31–48, 2002.
- AFIF, M.; AMAZINE, B. Numerical simulation of two-phase flow through heterogenous porous media. *Numerical Algorithms*, n. 34, p. 117–125, 2003.
- AQUINO, J. *Simulação numérica do transporte de contaminantes em escoamentos bifásicos água-ar em meios porosos heterogêneos*. Tese (Doutorado) — Instituto Politécnico, Universidade do Estado do Rio de Janeiro, Nova Friburgo, 2008.
- AQUINO, J. et al. Numerical simulation of transient water infiltration in heterogeneous soils combining central schemes and mixed finite elements. *Communications in Numerical Methods in Engineering*, n. 6, p. 491–505, 2007.
- BASTIAN, P.; HELMIG, R. Efficient fully-coupled solution techniques for two-phase flow in porous media - parallel multigrid solution and large scale computations. *Advances in Water Resources*, n. 23, p. 199–216, 1999.
- BORGES, M. R. *Injeção de traçadores em reservatórios de petróleo: modelagem multi-escala e simulação numérica*. Tese (Doutorado) — Instituto Politécnico, Universidade do Estado do Rio de Janeiro, Nova Friburgo, 2006.
- BORGES, M. R.; PEREIRA, F.; SOUTO, H. P. A. Efficient generation of multi-scale random fields: a hierarchical approach. *Communications in Numerical Methods in Engineering*, 2008. Doi:10.1002/cnm.1134.
- BÜRKLE, D.; OHLBERGER, M. Adaptive finite volume methods for displacement problems in porous media. *Computing and Visualization in Science*, n. 5, p. 95–106, 2002.
- CARVALHO, D. K. E.; WILLMERSDORF, R. B.; LYRA, P. R. M. A node centered finite volume formulation for the solution of oil - water displacements in non-homogeneous porous media. *3 Congresso Brasileiro de Petróleo e Gas*, n. 7, p. 31–40, 2004.
- CHAVENT, G.; JAFFRÉ, J. *Mathematical Models and Finite Elements for Reservoir Simulation*. [S.l.]: North-Holland, Amsterdam, 1986.
- CHEN, J.; HOPMANS, J. W.; GRISMER, M. E. Parameter estimation of two-fluid capillary pressure-saturation and permeability functions. *Advances in Water Resources*, v. 46, n. 5, p. 479–493, 1999.
- CORDAZZO, J. *Simulação de Reservatórios de Petróleo Utilizando o Método EbFVM e Multigrid Algébrico*. Tese (Doutorado) — Universidade Federal de Santa Catarina, 2006.
- DAGAN, G. *Flow and transport in porous formations*. New York: Springer, 1989.

- DARWISH, M. S.; MOUKALLED, F. Tvd schemes for unstructured grids. *International Journal of Heat and Mass Transfer*, v. 46, p. 599–611, 2003.
- DOUGLAS, J. J.; PEREIRA, F.; YEH, L. A parallelizable method for two-phase flows in naturally-fractured reservoirs. *Computational Geosciences*, v. 1, p. 333–368, 1997.
- DURLOFSKY, L. A triangle based mixed finite element - finite volume technique for modeling two phase flow through porous media. *Journal of Computational Physics*, n. 105, p. 252–266, 1993.
- EDWARDS, M. G. Cross flow tensors and finite volume approximation with by deferred correction. *Computer methods in applied mechanics and engineering*, n. 151, p. 143–161, 1998.
- EDWARDS, M. G. Control-volume distributed sub-cell flux schemes for unstructured and flow based grids. In: *SPE paper 79710*. February 3-5, Texas: [s.n.], 2003. (presented at the Reservoir Simulation Symposium).
- EYMARD, R.; GALLOUET, T. Finite volume schemes for two-phase in porous media. *Computing and Visualization in Science*, n. 7, p. 31–40, 2004.
- FERZIGER, J. H.; PERIC, M. *Computational Methods for Fluid Dynamics*. [S.l.]: Springer, 1999.
- FLETCHER, C. A. J. *Computational Techniques for Fluid Dynamics*. [S.l.]: Springer-Verlag, 1991.
- FURTADO, F.; PEREIRA, F. Crossover from nonlinearity controled to heterogeneity controlled mixing in two-phase porous media flows. *Computational Geosciences*, v. 7, n. 2, p. 115–135, 2003.
- GEIGER, S. et al. Cobining finite element and finite volume methods for efficient maultiphase flow simulations in highly heterogeneous and structurally complex geologic media. *Geofluids*, n. 4, p. 284–299, 2004.
- GELHAR, L. W. *Stochastic subsurface hydrology*. Englewood Cliffs: Prentice Hall, 1993.
- GLIMM, J. et al. A theory of macrodispersion for the scale up problem. *Transport In Porous Media*, n. 13, p. 97–122, 1993.
- GODUNOV, S. K. A difference method for numerical calculation of discontinuous solutions of the equations of hydrodynamics. *Mat. Sb.*, v. 47, p. 271–306, 1959.
- GOLUB, G. B.; LOAN, C. H. V. *Matrix Computations*. [S.l.]: The Johns Hopkins University Press, 1985. (Mathematical Sciences).
- GRANET, S. et al. A two-phase flow simulation of a structured reservoir using a new fissure element method. *Journal of Petroleum Science and Engineering*, n. 32, p. 35–52, 2001.
- HAYASE, T.; HUMPRHREY, J. A. C.; GREIF, R. A consistently formulated quick scheme for fast and stable convergence using finite-volume iterative calculation procedures. *Journal of Computational Physics*, n. 98, p. 108–118, 1992.

- HIRSCH, C. *Numerical Computation of Internal and External Flows*. [S.l.]: John Wiley & Sons, 1988.
- HUBER, R.; HELMIG, R. Node-centered finite volume discretizations for the numerical simulation of multiphase flow in heterogeneous porous media. *Computational Geosciences*, n. 4, p. 141–164, 2000.
- KEWEN, L. Generalized capillary pressure and relative permeability model inferred from fractal characterization of porous media. *SPE International*, p. 1–10, 2004.
- LEE, S. H.; JENNY, P.; TCHELEPI, H. A. A finite-volume method with hexahedral multiblock grids for modeling flow in porous media. *Computational Geosciences*, n. 6, p. 353–379, 2002.
- LEVEQUE, R. J. *Finite Volume Methods for Hyperbolic Problems*. [S.l.]: Cambridge University Press, 2002. (Cambridge Texts in Applied Mathematics).
- LEWANDOWSKI, J. L. V. Solution of burgers' equation using the marker method. *International Journal of Numerical Analysis and Modeling*, v. 3, n. 1, p. 80–93, 2006.
- LIE, K. A.; NOELLE, S. On the artificial compression method for second-order nonoscillatory central difference schemes for systems of conservation laws. *SIAM J. Sci. Comput.*, v. 24, n. 4, p. 1157–1174, 2003.
- NESSYAHU, N.; TADMOR, E. Non-oscillatory central differencing for hyperbolic conservation law. *Journal of Computational Physics*, v. 87, n. 2, p. 408–463, 1990.
- NIESSNER, J. et al. Interface condition and linearization schemes in the newton iterations for two-phase flow in heterogeneous porous media. *Advances in Water Resources*, n. 28, p. 671–687, 2005.
- OLDENBURG, C.; PRUESS, K. Simulation of propagating fronts in geothermal reservoirs with the implicit leonard total variation diminishing scheme. *Geothermics*, n. 29, p. 1–25, 2000.
- ÖZISIK, M. N. *Heat Conduction*. [S.l.]: John Wiley & Sons, 1980.
- PATANKAR, S. V. *Numerical Heat Transfer and Fluid Flow*. [S.l.]: Hemisphere Publishing Corporation, 1980.
- PATANKAR, S. V. A calculation procedure for two-dimensional elliptic situations. *Numerical Heat Transfer*, v. 4, p. 409–425, 1981.
- PEACEMAN, D. W. *Fundamentals of Numerical Reservoir Simulation*. Amsterdam: Elsevier, 1977.
- QUINTARD, M.; WHITAKER, S. Two-phase flow in heterogeneous porous media: The method of large-scale averaging. *Transport in Porous Media*, v. 3, p. 357–413, 1988.
- REES, I. et al. An edge-based finite volume scheme for saturated-unsaturated groundwater flow. *Computer Methods in Applied Mechanics Engineering*, n. 193, p. 4741–4759, 2004.

RIBEIRO, S. *Novos esquemas centrais de diferenças finitas para a simulação de escoamentos multifásicos em reservatórios de petróleo*. Tese (Doutorado) — Instituto Politécnico, Universidade do Estado do Rio de Janeiro, Nova Friburgo, 2007.

SOUADNIA, A.; LATIFI, M. A. Analysis of two-phase flow distribution in trickle-bed reactors. *Chemical Engineering Science*, n. 56, p. 5977–5985, 2001.

TORRES, F. E. Closure of the governing equations for immiscible, two-phase flow: a research comment. *Transport in Porous Media*, v. 2, p. 383–393, 1987.

VERDIÈRE, S.; VIGNAL, M. H. Numerical and theoretical study of a dual mesh method using finite volume schemes for two phase flow problems in porous media. *Numerische Mathematik*, n. 80, p. 601–639, 1998.

VERSTEEG, H. K.; MALALASEKERA, W. *An Introduction to Computational Fluid Dynamics*. [S.l.]: Longman, 1995.

WENDLAND, E.; FLENSBERG, D. Numerical solution of two-phase flow for the advection-dominated and non-linear case. *Advances in Water Resources*, n. 28, p. 643–660, 2005.

WHITAKER, S. Flow in porous media 2: The governing equations for immiscible, two-phase flow. *Transport in Porous Media*, v. 1, p. 105–125, 1986.

WHITAKER, S. The closure problem for two-phase flow in homogeneous porous media. *Chemical Engineering Science*, v. 49, n. 5, p. 765–780, 1994.

Livros Grátis

(<http://www.livrosgratis.com.br>)

Milhares de Livros para Download:

[Baixar livros de Administração](#)

[Baixar livros de Agronomia](#)

[Baixar livros de Arquitetura](#)

[Baixar livros de Artes](#)

[Baixar livros de Astronomia](#)

[Baixar livros de Biologia Geral](#)

[Baixar livros de Ciência da Computação](#)

[Baixar livros de Ciência da Informação](#)

[Baixar livros de Ciência Política](#)

[Baixar livros de Ciências da Saúde](#)

[Baixar livros de Comunicação](#)

[Baixar livros do Conselho Nacional de Educação - CNE](#)

[Baixar livros de Defesa civil](#)

[Baixar livros de Direito](#)

[Baixar livros de Direitos humanos](#)

[Baixar livros de Economia](#)

[Baixar livros de Economia Doméstica](#)

[Baixar livros de Educação](#)

[Baixar livros de Educação - Trânsito](#)

[Baixar livros de Educação Física](#)

[Baixar livros de Engenharia Aeroespacial](#)

[Baixar livros de Farmácia](#)

[Baixar livros de Filosofia](#)

[Baixar livros de Física](#)

[Baixar livros de Geociências](#)

[Baixar livros de Geografia](#)

[Baixar livros de História](#)

[Baixar livros de Línguas](#)

[Baixar livros de Literatura](#)
[Baixar livros de Literatura de Cordel](#)
[Baixar livros de Literatura Infantil](#)
[Baixar livros de Matemática](#)
[Baixar livros de Medicina](#)
[Baixar livros de Medicina Veterinária](#)
[Baixar livros de Meio Ambiente](#)
[Baixar livros de Meteorologia](#)
[Baixar Monografias e TCC](#)
[Baixar livros Multidisciplinar](#)
[Baixar livros de Música](#)
[Baixar livros de Psicologia](#)
[Baixar livros de Química](#)
[Baixar livros de Saúde Coletiva](#)
[Baixar livros de Serviço Social](#)
[Baixar livros de Sociologia](#)
[Baixar livros de Teologia](#)
[Baixar livros de Trabalho](#)
[Baixar livros de Turismo](#)