



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

*Gustavo Galindez Ramirez*

Método Espectral dos Volumes Finitos para a Simulação 1-D de Escoamentos Bifásicos  
em Reservatórios de Petróleo

Dissertação de Mestrado

Recife, 2014.

Gustavo Galindez Ramirez

# Método Espectral dos Volumes Finitos para a Simulação 1-D de Escoamentos Bifásicos em Reservatórios de Petróleo

Dissertação apresentada ao Programa de Pós-graduação em Engenharia Mecânica do Centro de Tecnologia e Geociências da Universidade Federal de Pernambuco, como requisito parcial para obtenção do grau de Mestre em Engenharia Mecânica.

Orientador: Paulo Roberto Maciel Lyra

Co-orientador: Darlan Karlo Elisiário de Carvalho

Recife, 2014.

R173m Ramirez, Gustavo Galindez.  
Método espectral dos volumes finitos para simulação 1-D de escoamentos bifásicos em reservatórios de petróleo / Gustavo Galindez Ramirez. - Recife: O Autor, 2014.  
99 folhas, il., gráfs., tabs.

Orientador: Prof. Dr. Paulo Roberto Maciel Lyra.  
Coorientador: Prof. Dr. Darlan Karlo Elisiário de Carvalho.  
Dissertação (Mestrado) – Universidade Federal de Pernambuco. CTG.  
Programa de Pós-Graduação em Engenharia Mecânica, 2014.  
Inclui Referências.

1. Engenharia Mecânica. 2. Reservatórios de petróleo. 3. Escoamentos bifásicos. 4. Método dos volumes finitos. 5. Método de alta ordem. 6. Método espectral. I. Lyra, Paulo Roberto Maciel. (Orientador). II. Carvalho, Darlan Karlo Elisiário de. (Coorientador). III. Título.

UFPE

621 CDD (22. ed.)

BCTG/2015-17

27 de janeiro de 2014

“MÉTODO ESPECTRAL DOS VOLUMES FINITOS PARA SIMULAÇÃO 1-D DE  
ESCOAMENTOS BIFÁSICOS EM RESERVATÓRIOS DE PETRÓLEO”

GUSTAVO GALINDEZ RAMIREZ

ESTA DISSERTAÇÃO FOI JULGADA ADEQUADA PARA OBTENÇÃO DO  
TÍTULO DE MESTRE EM ENGENHARIA MECÂNICA

ÁREA DE CONCENTRAÇÃO: MECÂNICA COMPUTACIONAL E PROJETO  
MECÂNICO

APROVADA EM SUA FORMA FINAL PELO  
PROGRAMA DE PÓS-GRADUAÇÃO EM ENGENHARIA  
MECÂNICA/CTG/EEP/UFPE

---

Prof. Dr. PAULO ROBERTO MACIEL LYRA  
ORIENTADOR/PRESIDENTE

---

Prof. Dr. DARLAN KARLO ELISIÁRIO DE CARVALHO  
CO-ORIENTADOR

---

Prof. Dr. JORGE RECARTE HENRÍQUEZ GUERRERO  
COORDENADOR DO PROGRAMA

BANCA EXAMINADORA:

---

Prof. Dr. PAULO ROBERTO MACIEL LYRA (UFPE)

---

Prof. Dr. DARLAN KARLO ELISIÁRIO DE CARVALHO (UFPE)

---

Prof. Dr. RAMIRO BRITO WILLMERSDORF (UFPE)

---

Prof. Dr. JOÃO LUIZ FILGUEIRAS DE AZEVEDO (IAE)

---

Prof. Dr. ALESSANDRO ROMARIO ECHEVARRIA ANTUNES (UFPE)

# Agradecimentos

À Fundação de Amparo à Ciência e Tecnologia do Estado de Pernambuco (FACEPE) e ao projeto SIGER, financiado pelo CEMPES-PETROBRAS, pelas bolsas concedidas durante o período de realização do mestrado.

Aos colegas do grupo PADMEC pela troca de ideias e o apoio recebido.

Ao aluno de mestrado Jan Sourek, da University of West Bohemia, Czech Republic pela ajuda recebida.

Aos Professores Paulo Lyra, Darlan Karlo Elisiário de Carvalho e Márcio Rodrigo de Araújo Souza, pela orientação e apoio na minha formação acadêmica.

A meus familiares e amigos, que me acompanharam desde o início desta jornada.

# Resumo

As técnicas de discretização de alta ordem podem ser vantajosas quando comparadas aos métodos upwind de primeira ordem (FOUM), para o modelamento do escoamento dos fluidos através dos reservatórios de petróleo, em que complexidades físicas, tais como heterogeneidade e anisotropia desempenham um papel importante, pois essas técnicas são capazes de produzir soluções muito menos difusivas. Este trabalho tem como objetivo aplicar o método espectral dos volumes finitos (SFVM), metodologia formulada por Z. J. Wang em 2002, para o modelamento 1D do escoamento de água e óleo em meios porosos. Este tipo de recuperação de óleo é conhecido como recuperação secundária. O modelo matemático, que caracteriza as equações de transporte em meios porosos, inclui os efeitos da gravidade e da pressão capilar, onde os fluidos são considerados imiscíveis. Neste modelo matemático, o termo advectivo é discretizado usando o SFVM de alta ordem, a capilaridade o termo difusivo é aproximada utilizando o método de diferenças finitas para os volumes de controle (CVFDM) de segunda ordem. A integração no tempo é feita utilizando o método de Runge-Kutta explícito de terceira ordem. Para satisfazer a condição tipo TVD (*Total Variation Diminishing*) e suprimir as oscilações perto das descontinuidades, um limitador de declividade é usado no estágio de reconstrução. Toda a formulação desenvolvida foi verificada numericamente através de uma variedade de problemas modelo. Sempre que possível, os resultados são comparados com a solução semi-analítica ou com outras soluções numéricas disponíveis na literatura. Os resultados obtidos no presente trabalho se comparam de maneira favorável com outras metodologias fornecidas por diferentes autores e apresentaram um bom desempenho, atingindo uma alta acurácia de forma eficiente. Os perfis de saturação para as ditas simulações mostram a correta captura da frente de saturação ou choque, e da onda de rarefação. Para o modelo simples analisado neste trabalho, o uso de métodos de alta ordem produz resultados acurados e eficientes, o que é ainda mais relevante se aplicações reais em grande escala são planejados.

Palavras chave: Reservatórios de Petróleo. Escoamentos Bifásicos. Método dos Volumes Finitos. Método de Alta Ordem. Método Espectral.

# Abstract

High order discretization techniques may offer advantages relative to standard FOUM (first order upwind methods) for the modeling of flows through petroleum reservoirs, in which physical complexities such as heterogeneity and anisotropy play an important role, because these techniques are capable of producing much less diffusive solutions. The purpose of this work is to apply a SFVM (spectral finite volume method) methodology formulated by Z. J. Wang in 2002, for the modeling 1D oil-water displacement through porous formations. This sort of oil recovery is known as secondary recovery. The mathematical model that characterizes the transport equations in porous media includes the effects of gravity and capillary pressure, where the fluids are considered immiscible. In this mathematical model the hyperbolic term is discretized using a high order SFVM, the capillary (diffusive term) is approximated using a second order CVFDM (control volume finite difference method). The integration in time is carried out using a third-order explicit Runge-Kutta method. In order to satisfy the TVD (total variation diminishing) condition and to suppress numerical oscillations near shocks, a slope limiter is used in the reconstruction stage. The entire formulation developed was checked numerically by a variety of problems model. Where it was possible the results are compared with the semi-analytical solution or other numerical solutions available in the literature. The results obtained in this study compare favorably with other methods provided by different authors and performed well achieving a high accuracy efficiently. Saturation profiles for said simulations show the correct capture of the saturation front (shock) wave and rarefaction. The simple model analyzed in this work shows that the use of high order methods yields accurate and efficient results, which is even more relevant if real large scale applications are devised.

Keywords: Petroleum Reservoirs. Two Phase Flows. Finite Volume Method. High Order Methods. Spectral Method.

---

# Lista de Figuras

2.1	(a) Solução inicial descontínua compressiva. (b) Solução no plano $x-t$ . . . .	24
2.2	(a) Condição inicial descontínua de caráter expansiva. (b) Solução do choque de rarefação no plano $x-t$ . . . . .	24
2.3	Onda de rarefação: (a) Condição inicial descontínua de caráter expansiva. (b) Solução (rarefação) satisfazendo a condição de entropia. . . . .	25
2.4	(a) Função $f_{adv}$ . (b) Derivada da função $f_{adv}$ , para o modelo de Brooks-Corey com $\mu_o/\mu_w = 1$ . . . . .	26
2.5	Construção do ponto tangencial. . . . .	27
2.6	Curva para a função pressão capilar, correspondente aos parâmetros $p_d = 1$ , $\omega = 3$ , $S_{wr} = 0$ . . . . .	30
2.7	Curvas para as funções de permeabilidade relativa, correspondente aos parâmetros $\alpha = \beta = 2$ , $S_{wr} = S_{or} = 0$ . . . . .	30
2.8	Diagrama esquemático das condições de contorno para a equação de saturação, adaptada de (Chavent and Jaffré, 1986). . . . .	33
2.9	Solução semi analítica para o problema do Buckley-Leverett (a) e função fluxo e velocidade característica (b) . . . . .	34
3.1	Esquema de primeira ordem de acurácia. . . . .	37
3.2	Esquema de segunda ordem de acurácia. . . . .	41
3.3	Reconstrução linear típica: (a) não limitada e (b) limitada. . . . .	43
3.4	Regiões de estabilidade para o esquema de Runge-Kutta. . . . .	46
4.1	Domínio físico com 4 células espectrais SV, utilizando segunda ordem de acurácia, $k = 2$ , com contornos $x_{i,j-1/2}$ e $x_{i,j+1/2}$ para a subcélula espectral CV e pontos solução $(\bullet) \bar{S}_{w(i,j)}$ . . . . .	49
4.2	(a) Polinômios de Chebyshev até ordem 5. (b) Partições não uniformes do SV no domínio computacional gerados pelos zeros do polinômio de Chebyshev, para ordem de acurácia 2 (b.1), ordem 3 (b.2) e ordem 4 (b.3). . . . .	51
4.3	Bases polinomiais $\{L\}$ com variável média no centro da célula utilizando CV equidistantes para: (a) $k=3$ e (b) $k=6$ . . . . .	52
4.4	Surgimento do fenômeno de Runge ao interpolar a função: $f(x) = \frac{1}{1+12x^2}$ utilizando 16 pontos de interpolação. . . . .	53

## Lista de Figuras

---

4.5	Bases polinomiais $\{L\}$ com variável média no centro da célula utilizando CVs dados pelos pontos de quadratura de Gauss-Lobatto para (a) $k=3$ e (b) $k=6$ . . . . .	54
4.6	Esquema do domínio físico, com uma célula fantasma SV(gho) e três células espectrais, incluindo a célula interna SV(int) e o contorno SVbnd. . . . .	61
4.7	Reconstrução polinomial por partes para o SFVM. . . . .	64
5.1	Detalhe da solução exata e numérica obtida utilizando o método SFVM de ordem 5 para 64 SVs com CVs uniformes. . . . .	71
5.2	Taxa de convergência demonstrando a acurácia espectral para o refinamento $h$ para a equação de onda linear. . . . .	72
5.3	Taxa de convergência demonstrando a acurácia espectral com o refinamento $p$ , para a equação de onda linear. . . . .	73
5.4	Simulação do pulso Gaussiano utilizando SFVM de ordem $k = 1,2,3$ e 4 no tempo $t=1.0$ , sem função limitadora. . . . .	74
5.5	Simulação de uma onda quadrada feita com o método SFVM para um tempo final $t = 1$ : (a) sem função limitadora. (b) Utilizando o limitador SVTVDM. . . . .	75
5.6	Soluções numéricas para a equação do Burgers no tempo $t=0.3$ através do SFVM do ordem 2, com 12 DOFs, graficada junto com a solução numérica para ordem 4 com 12 graus de liberdade. . . . .	76
5.7	Soluções numéricas para a equação de Burgers no tempo $t = 2/\pi$ , utilizando o SFVM de ordem $k = 4$ , com 80 DOFs, sem função limitadora (a) e com função limitadora tipo SVTVBM e CVTVBM (b). . . . .	78
5.8	Soluções numéricas para a equação de Burgers no tempo $t = 1$ , utilizando o SFVM de ordem $k = 4$ , com 160 DOFs, sem função limitadora (a) e com função limitadora do tipo SVTVBM e CVTVBM (b). . . . .	79
5.9	Comparação entre os perfis de saturação de água para o problema unidimensional de Buckley-Leverett numa malha primal com 16 subdivisões (a) e numa malha de 32 subdivisões (b) ao longo do eixo $x$ em $t=0.2$ . Solução semi-analítica e soluções aproximadas obtidas com o SFVM e MUSCL-TVD. . . . .	81
5.10	Comparação entre os perfis de saturação de água para o problema unidimensional de Buckley-Leverett numa malha primal com 64 subdivisões (a) e numa malha de 128 subdivisões (b) ao longo do eixo $x$ em $t=0.2$ . Solução semi-analítica e soluções aproximadas obtidas com o SFVM e MUSCL-TVD. . . . .	82
5.11	Operações de ponto flutuante para o SFVM e MUSCL-TVD. . . . .	83
5.12	Solução do problema de Buckley-Leverett, utilizando o SFVM de diferentes ordens de acurácia $k = 2, 4, 8$ e 16. . . . .	85
5.13	Função fluxo fracional com efeitos gravitacionais (acima), velocidade característica (abaixo) e ponto de choque (símbolo ponto quadrado). . . . .	86

5.14	Solução do modelo bifásico com efeitos gravitacionais pelo SFVM para um tempo $t = 0.25$ (a) e $t = 0.5$ (b) vs a solução obtida através do método TB(TVD)-FV de ordem 2 (Durlinsky, 1993). . . . .	87
5.15	Solução do modelo bifásico sem efeitos gravitacionais (Buckley-Leverett), utilizando SFVM de segunda ordem de acurácia, para $t = 0.25$ (a) e $t = 0.5$ (b) vs a solução obtida através do método TB(TVD)-FV de ordem 2. . . . .	88
5.16	Efeito da pressão capilar no perfil de saturação para diferentes valores de $\varepsilon$ . . . . .	89
5.17	Modelo do fluxo bifásico com efeitos da pressão capilar, utilizando o SFVM de diferentes ordens de acurácia e deixando fixo o número de CV, ou seja, igual número de incógnitas ou DOFs são resolvidas. . . . .	90
5.18	Modelo do fluxo bifásico com efeitos gravitacionais e de pressão capilar para um tempo $t = 2$ . . . . .	91

# Lista de Tabelas

4.1	Coeficientes de reconstrução para CVs não uniformes utilizando a distribuição dos pontos de Gauss-Lobatto Eq. (4.32). . . . .	59
4.2	Coeficientes de reconstrução para CVs uniformes utilizando a distribuição dada na Eq. (4.33). . . . .	59
4.3	Posições otimizadas para os contornos dos CVs no domínio computacional.	60
5.1	Avaliação da acurácia do esquema 1-D SFVM, para a equação da onda, utilizando CV uniformes. . . . .	70
5.2	Avaliação da acurácia do 1-D SFVM, para a equação da onda, utilizando CV não uniformes gerados pelos pontos de quadratura de Gauss-Lobatto. .	72
5.3	Estudo da acurácia na solução da Equação de Burgers com condição inicial senoidal no tempo $t = 0.3$ e volumes de controle não uniformes, gerados pelos pontos de quadratura de Gauss-Lobatto. . . . .	77
5.4	Tempo da CPU em segundos utilizado pelos resolvedores SFVM e MUSCL-TVD, para a simulação do problema de Buckley-Leverett. . . . .	84

---

# Nomenclatura

## Acrônimos e siglas

ADER	Arbitrary Derivative Riemann Problem
CFD	Computational Fluid Dynamics
CFL	Courant-Friedrichs-Lewy
CV	Control Volume
CVFDM	Control Volume Finite Difference Method
CVTVBM	(CV-wise-TVBM) Limiter
CVTVDM	(CV-wise-TVDM) Limiter
DG	Discontinuous Galerkin
DOF	Degrees of Freedom
EDO	Equação Diferencial Ordinária
ENO	Essentially-Non-Oscillatory
FCT	Flux Correct Transport
FEM	Finite Element method
FVM	Finite Volume Method
MPFA	Multipoint Flux Approximation
MUSCL	Monotonic Upstream-Centered Scheme for Conservation Laws
PDE	Partial Differential Equation
RK	Runge-Kutta Method
SFDM	Spectral Finite Difference Method
SFVM	Spectral Finite Volume Method

## Nomenclatura

---

SV	Spectral Volume
SVTVBM	(SV-wise-TVBM) Limiter
SVTVDM	(SV-wise-TVDM) Limiter
TB(TVD)-FV	Triangle-Based TVD-type Finite Volume
TPFA	Two Point Flux Aproximation
TV	Total variation
TVB	Total Variation Bounded
TVD	Total Variation Diminishing
VC	Volume de controle e célula de malha primal
WENO	Weighted Essentially-Non-Oscilatory

### Símbolos Latinos

$\bar{S}_{w(i,j)}$	Saturação média no $CV_{i,j}$
$\bar{S}_w$	Saturação média da fase água no volume de controle
$\Delta t$	Intervalo temporal
$\tilde{S}$	Função primitiva para a variável de estado
$\vec{n}$	Vetor área normal
$\hat{S}_w^\pm$	Variáveis reconstruídas limitadas
$a$	Velocidade de propagação da onda
$F$	Função fluxo numérico
$f_{adv}$	Fluxo advectivo
$h_{i,j}$	Comprimento do CV
$k$	Ordem de acurácia
$p$	Ordem do polinômio interpolador
$p_c$	Pressão capilar
$Q_\sigma$	Vazão da fase $\sigma$
$Q_w$	Vazão volumétrica específica da fase $w$

$R_i$	Residuo
$S'_{w(i+1/2)}$	Derivada espacial da saturação nas interfaces numéricas
$S_w$	Saturação da fase água
$t$	Instante de tempo
$v_\sigma$	Velocidade da fase $\sigma$
$v_t$	Velocidade total do fluido

### Símbolos Gregos

$\alpha_{\max}$	Raio espectral da matriz Jacobiana dos fluxos
$\bar{\xi}_i^n$	Função limitadora de inclinação
$\Gamma$	Contorno ou fronteira
$\mu$	Viscosidade
$\Omega$	Domínio
$\partial\Omega$	Contorno do domínio
$\phi$	Porosidade
$\sigma$	Tipo de fase

### Subscritos

$i$	Célula espectral
L	Lado esquerdo da interface numérica
R	Lado direito da interface numérica

### Superescritos

$n$	Instante de tempo atual
$n + 1$	Instante de tempo posterior

---

# Sumário

<b>1</b>	<b>Introdução</b>	<b>16</b>
1.1	Motivação . . . . .	16
1.2	Objetivos . . . . .	18
1.3	Organização da dissertação . . . . .	18
<b>2</b>	<b>Equações governantes</b>	<b>20</b>
2.1	Considerações iniciais . . . . .	20
2.2	Problemas modelo da dinâmica dos fluidos . . . . .	20
2.2.1	Equação linear da advecção . . . . .	20
2.2.2	Equação não linear de Burgers . . . . .	21
2.2.3	O problema de Riemann . . . . .	23
2.3	Escoamento bifásico e imiscível em meios porosos . . . . .	28
2.3.1	Conceitos fundamentais . . . . .	28
2.3.2	Condições iniciais e de contorno . . . . .	32
2.3.3	Equação de Buckley-Leverett . . . . .	33
<b>3</b>	<b>O método dos volumes finitos clássico</b>	<b>35</b>
3.1	Esquema de primeira ordem de acurácia . . . . .	36
3.1.1	Formulação geral . . . . .	36
3.1.2	Resolvedores de Riemann aproximados . . . . .	38
3.2	Esquemas TVD e TVB . . . . .	39
3.3	Esquema de alta ordem de acurácia . . . . .	40
3.4	Esquema limitador de declividade . . . . .	42
3.5	Discretização do termo difusivo . . . . .	43
3.6	Discretização temporal . . . . .	44
<b>4</b>	<b>Método espectral dos volumes finitos</b>	<b>47</b>
4.1	Considerações iniciais . . . . .	47
4.2	Método espectral dos volumes finitos unidimensional . . . . .	48
4.3	Definição das partições . . . . .	50
4.4	Reconstrução polinomial unidimensional . . . . .	53
4.5	Constantes de interpolação polinomial . . . . .	55

4.6	Condições de contorno e iniciais . . . . .	61
4.6.1	Condição de contorno de Dirichlet . . . . .	61
4.6.2	Condições iniciais . . . . .	62
4.7	Funções limitadoras . . . . .	62
4.8	Avaliação de acurácia dos métodos numéricos . . . . .	66
4.9	Algoritmo geral . . . . .	67
<b>5</b>	<b>Aplicações</b>	<b>69</b>
5.1	Estudo da acurácia utilizando a equação da onda linear . . . . .	69
5.1.1	Propagação da onda senoidal . . . . .	69
5.1.2	Propagação do pulso Gaussiano . . . . .	73
5.1.3	Propagação da onda quadrada . . . . .	74
5.2	Teste para equação não linear de Burgers . . . . .	75
5.3	Modelo do fluxo bifásico . . . . .	80
5.3.1	Problema de Buckley-Leverett . . . . .	80
5.3.2	Efeitos gravitacionais . . . . .	86
5.3.3	Efeitos da pressão capilar . . . . .	89
5.3.4	Efeitos gravitacionais e da pressão capilar . . . . .	91
<b>6</b>	<b>Conclusões e trabalhos futuros</b>	<b>92</b>
	<b>Referências</b>	<b>94</b>

---

# Capítulo 1

## Introdução

### 1.1 Motivação

Í números reservatórios de petróleo de interesse econômico e particularmente os reservatórios do pré-sal, apresentam uma variação muito acentuada das propriedades geofísicas tanto em termos espaciais como direcionais (i.e. heterogeneidade e anisotropia), requerendo uma modelagem numérico-computacional acurada e eficiente dos processos envolvidos no escoamento multifásico em meios porosos.

De fato a simulação de escoamentos multifásicos em reservatórios de petróleo com geometrias e características complexas, ainda é um problema desafiador. Contudo, levando em consideração que existem atualmente formulações clássicas relativamente bem sucedidas utilizando-se os métodos das diferenças finitas, elementos finitos ou volumes finitos, ainda se apresentam algumas questões a serem resolvidas.

O principal problema tem relação com a acurácia da solução numérica. De fato, uma anomalia das formulações clássicas que decrementa a acurácia e surge com maior intensidade na simulação de reservatórios de petróleo é a difusão numérica. A referida difusão numérica causa demasiada suavização da solução perto de descontinuidades e gradientes acentuados. Do ponto de vista físico, as descontinuidades podem ser entendidas como as interfaces entre fases fluídicas, quando ocorre o fenômeno de deslocamento dos fluidos no interior do meio poroso (Chavent and Jaffré, 1986). A ocorrência do fenômeno da difusão numérica têm sua origem nas interpolações pouco acuradas utilizadas nos métodos de baixa ordem de acurácia, como por exemplo no esquema upwind de primeira ordem. Estes métodos de primeira ordem são muito utilizados para aproximar termos advectivos na área de simulação de reservatórios devido à sua simplicidade, além de garantir a monotonicidade das soluções numéricas.

Para lidar com o problema da difusão numérica na literatura existem inúmeras metodologias que são denominadas de alta ordem, tais como; esquemas centrais clássicos, como por exemplo o MC (MacCormack scheme) - TVD (Total Variation Diminishing), esquemas do tipo MUSCL (monotonic upstream centered scheme for conservation laws)

- TVD, ENO (essentially-non-oscillatory) e WENO (weighted essentially-non-oscillatory), DG (discontinuous Galerkin), SFVM (spectral finite volume method) e esquemas ADER (arbitrary derivative Riemann problem) (Schwartzkopff et al., 2004; Titarev and Toro, 2005). Estas formulações são utilizadas para tratar modelos com equações hiperbólicas ou parabólicas, além de hiperbólica dominante (Cueto-Felgueroso and Colominas, 2008). Contudo, os esquemas de segunda ordem de acurácia tipo MUSCL-TVD apresentam resultados com uma ordem de acurácia menor que o esperado quando são utilizadas malhas não estruturadas. Além deste fato, é bem conhecido que esquemas TVD têm a sua ordem de acurácia reduzida a primeira ordem na presença de choques. Isto ocorre devido ao efeito das funções limitadoras necessárias para a manutenção da monotonicidade das soluções.

Entretanto, os esquemas ENO e WENO utilizam um modelo de reconstrução intrínseca o qual depende da disponibilidade de células vizinhas para a reconstrução polinomial de cada célula em cada passo de tempo, o qual é bastante caro computacionalmente.

O esquema DG fornece uma alta ordem de acurácia, porém a desvantagem é percebida quando se precisa calcular as integrais de superfície e de volume, próprias do método, que são computacionalmente caras. Devido às considerações anteriores, e visando o estudo numérico-computacional do processo de recuperação secundária, dentre os métodos citados, será investigado o método espectral dos volumes finitos (SFVM), que tem sido empregado com sucesso na solução de problemas regidos pelas equações de Euler e Navier-Stokes, com aplicações na área da aerodinâmica (Sun et al., 2006; Cueto-Felgueroso and Colominas, 2008; Breviglieri et al., 2010), além de ter também sido empregado na solução das equações de águas rasas (Choi et al., 2004).

A técnica de produção denominada recuperação secundária convencional é, em geral, utilizada durante ou após a possível saída espontânea do óleo residente devido às altas pressões no interior das rochas reservatório. Esta técnica envolve a injeção, normalmente, de água através de poços injetores, de forma que esta água sirva para aumentar a pressão no interior dos reservatórios e também para deslocar mecanicamente o óleo na direção de poços produtores (Fanchi, 2005; Chen et al., 2006).

A recuperação secundária é de extrema importância. Um primeiro modelo simplificado, para o estudo da mesma considera apenas o escoamento bifásico de água e óleo que será utilizado neste trabalho. Levando-se em conta que no modelo simplificado os fluidos são incompressíveis, o problema pode ser modelado por uma equação de advecção-difusão-reação não linear. Quando o termo difusivo é dominante, a equação apresenta comportamento parabólico. No caso contrário, quando o termo advectivo predomina sobre o termo difusivo, a equação assume um carácter fortemente hiperbólico, com propriedades similares ao que apresentam as equações hiperbólicas de primeira ordem (Peaceman, 1977). Apesar das simplificações neste modelo, ele detém as principais características físico-matemáticas dos modelos multifásicos, envolvendo um sistema de equações diferenciais parciais acopladas, não lineares, contendo termos de acumulação (ou transientes),

de difusão, de advecção e de fonte (ou sumidouro).

Até onde nós sabemos, depois de fazer a pesquisa bibliográfica em diversas bases de dados a nível mundial, o SFVM não foi investigado no contexto de simulação de reservatórios de petróleo e parece particularmente promissor para lidar com meios heterogêneos, além de ter um bom desempenho no tratamento da equação hiperbólica onde se pode ter a presença de “choques” ou gradientes acentuados de saturação.

## 1.2 Objetivos

A presente dissertação tem como objetivo geral a aplicação de uma formulação numérica conservativa, denominada o SFVM, às equações diferenciais parciais do modelo matemático que descreve o escoamento bifásico e imiscível de água e óleo no interior da rocha reservatório. Serão considerados apenas problemas unidimensionais, embora todos os aspectos conceituais considerados na formulação podem ser estendidos a problemas multidimensionais.

Os objetivos específicos podem ser resumidos como:

- Obter as equações discretizadas do modelo matemático a partir do SFVM.
- Implementar e avaliar um solver baseado na formulação conservativa do SFVM, para a solução da equação modelo que rege o escoamento bifásico e imiscível de água-óleo em reservatórios de petróleo, utilizando uma integração temporal através do método Runge-Kutta explícito de terceira ordem .
- Inclusão na modelagem dos fenômenos físicos que possam se tornar relevantes no processo de deslocamento. Assim, por exemplo, deverão estar consideradas as influências da pressão capilar e da gravidade.
- Finalmente, propõe-se avaliar a metodologia numérica adotada, comparando seus resultados com outras formulações de alta ordem e soluções semi-analíticas disponíveis, discutindo-se suas vantagens e desvantagens.

## 1.3 Organização da dissertação

O presente texto está dividido em seis capítulos e, uma bibliografia.

No presente capítulo, fazemos uma breve introdução, onde é apresentada a motivação para a realização deste trabalho e onde são discutidas em forma breve algumas vantagens e desvantagens de diferentes formulações numéricas utilizadas no estudo de escoamentos de fluidos em meios porosos. Finalmente o objetivo geral e os objetivos específicos da dissertação são apresentados.

No capítulo dois, apresentamos a formulação matemática para o problema físico de interesse, onde as principais propriedades da rocha reservatório e do fluido são descritas e as equações que modelam o fluxo bifásico da água e óleo em meios porosos são obtidas.

A formulação clássica do método dos volumes finitos (FVM) é introduzida no capítulo três, onde também é discutida a discretização conservativa dos termos elípticos, utilizando o CVFDM (Control Volume Finite Difference Method).

O Método Espectral dos Volumes Finitos é descrito detalhadamente no capítulo quatro, junto com o tratamento das condições de contorno e iniciais, além da utilização de funções limitadoras de nos gradientes.

Com o objetivo de avaliar a acurácia da formulação proposta neste trabalho, no capítulo cinco aplicou-se o SFVM em alguns problemas de referência encontrados na literatura.

As principais conclusões e contribuições deste trabalho estão contidas no capítulo seis, onde também serão indicadas sugestões para trabalhos futuros.

Por fim, apresenta-se uma bibliografia que contém as referências aos trabalhos que foram utilizados no desenvolvimento desta dissertação.

# Capítulo 2

## Equações governantes

### 2.1 Considerações iniciais

Neste capítulo se apresentam as equações fundamentais que descrevem o problema relacionado ao escoamento bifásico incompressível de dois fluidos imiscíveis no interior de rochas reservatório. As equações abordadas neste trabalho podem ser classificadas do ponto de vista matemático como parabólicas, elípticas, ou hiperbólicas (Anderson et al., 1984; Fortuna, 2000).

De forma geral as equações elíptica e parabólicas podem ser associadas a problemas de difusão ou dispersão de uma propriedade física característica por exemplo condução de calor em sólidos, determinação de campo de pressões em escoamentos mono ou multifásicos, no regime transiente ou permanente. Por outro lado as equações hiperbólicas podem ser relacionadas a problemas de advecção ou convecção por exemplo dinâmica dos gases, geofísica, ótica, onde o termo convecção é utilizado para o transporte advectivo devido à diferença de temperatura, em geral estas equações estão associadas a problemas de transporte de ondas com pouco ou nenhum amortecimento. Dependendo da relação entre a velocidade e os mecanismos físicos de dissipação da informação transportada, as equações de advecção-difusão ou advecção-dispersão podem apresentar carácter parabólico ou hiperbólico (Hirsch, 2007; Lyra, 1994).

### 2.2 Problemas modelo da dinâmica dos fluidos

#### 2.2.1 Equação linear da advecção

Considerando a equação linear da advecção, a qual pode ser escrita na forma a seguir:

$$\frac{\partial S}{\partial t} + a \frac{\partial S}{\partial x} = 0, \quad (2.1)$$

onde a grandeza transportada  $S(x, t)$  é uma função de duas variáveis independentes. O problema de Cauchy ou problema de valor inicial para esta equação no domínio  $-\infty <$

$x < \infty$ ,  $t \geq 0$ , fica definido com a introdução da condição inicial:

$$S(x, t) = S(x, 0) = S_0(x), \quad (2.2)$$

cuja solução é dada por:

$$S(x, t) = S_0(x - at), \quad (2.3)$$

para  $t \geq 0$ . Como a evolução do tempo, a perturbação é propagada sem mudança alguma para o lado direito do domínio computacional quando  $a > 0$ , ou para o lado esquerdo se  $a < 0$ , onde “ $a$ ” representa a velocidade de propagação da onda. Portanto, a solução  $S(x, t)$  é constante ao longo de cada reta  $x - at = x_0$ , que são conhecidas com o nome de linhas características da equação. As linhas características são curvas no plano  $x - t$  satisfazendo a equação diferencial ordinária  $(dx(t)/dt) = a$ ,  $x(0) = x_0$ . Tomando a derivada total de  $S(x, t)$  ao longo de uma destas curvas para encontrar a taxa de variação de  $S$  ao longo das linhas características, temos:

$$\begin{aligned} \frac{d}{dt}S(x(t), t) &= \frac{\partial}{\partial t}S(x(t), t) \frac{dt}{dt} + \frac{\partial}{\partial x}S(x(t), t) \frac{dx(t)}{dt}, \\ &= \frac{\partial S}{\partial t} + \frac{\partial S}{\partial x}a, \\ &= 0, \end{aligned} \quad (2.4)$$

mostrando que  $S$  é constante ao longo das linhas características (LeVeque, 1992).

## 2.2.2 Equação não linear de Burgers

Considerando a equação escalar:

$$\frac{\partial S}{\partial t} + \frac{\partial f_{\text{adv}}(S)}{\partial x} = 0, \quad (2.5)$$

onde  $f_{\text{adv}}(S)$  é uma função não linear de  $S$ , sendo que  $f_{\text{adv}}(S)$  é uma função convexa, ou seja  $df_{\text{adv}}^2(S)/dS^2 > 0$ , para todos os valores de  $S$ , ou  $f_{\text{adv}}(S)$  é côncava com  $df_{\text{adv}}^2(S)/dS^2 < 0 \forall S$ .

Um dos modelos mais estudados para equações não lineares é a equação de Burgers, na qual  $f_{\text{adv}}(S) = \frac{1}{2}S^2$ , então a Eq. (2.5) pode ser escrita na forma a seguir:

$$\frac{\partial S}{\partial t} + S \frac{\partial S}{\partial x} = 0, \quad (2.6)$$

que representa um dos modelos mais simples que inclui efeitos não lineares na dinâmica dos fluidos.

Agora, considerando a equação de Burgers Eq. (2.6) com uma condição inicial suave, isto é sem gradientes acentuados, é possível construir uma solução utilizando a teoria

das linhas características, em que a Eq. (2.6) é uma equação de advecção, porém com velocidade de advecção  $S$  igual à grandeza advectada ou transportada. Logo, podemos escrever:

$$\frac{dx(t)}{dt} = S(x(t), t), \quad (2.7)$$

onde ao longo da cada linha característica  $S$  é constante, uma vez que:

$$\begin{aligned} \frac{d}{dt}S(x(t), t) &= \frac{\partial}{\partial t}S(x(t), t) \frac{dt}{dt} + \frac{\partial}{\partial x}S(x(t), t) \frac{dx(t)}{dt}, \\ &= \frac{\partial S}{\partial t} + S \frac{\partial S}{\partial x}, \\ &= 0. \end{aligned} \quad (2.8)$$

Além disso, uma vez que  $S$  é constante em cada linha característica, a inclinação ( $dx(t)/dt$ ) é dada pela Eq. (2.7) onde as características são linhas retas determinadas pela condição inicial. Se a condição inicial é suave e, para tempos curtos, quando as linhas característica não se cruzam, o desenvolvimento anterior pode ser utilizado para encontrar a solução  $S(x, t)$ , onde para cada  $(x, t)$  pode-se resolver a equação,

$$x = x_0 + u(x_0, 0) t, \quad (2.9)$$

para  $x_0$  e, então, temos que

$$S(x, t) = u(x_0, 0). \quad (2.10)$$

**Formação do choque** Para determinado tempo  $t$  a Eq. (2.9) é multi-avaliada. Isto acontece quando as linhas características se cruzam, ou também podemos dizer quando a onda quebra, por analogia do choque de uma onda contra a praia. Para um tempo “ $t$ ” dado por:

$$t^{\text{choque}} = \frac{1}{\max \left| \frac{\partial f_{\text{adv}}}{\partial x^0} \right|}, \quad (2.11)$$

onde as linhas se cruzam pela primeira vez, a derivada função  $\partial S(x, t)/\partial x$  é infinita, então tem-se a formação do choque (Toro, 2009). Depois deste ponto, temos soluções não clássicas para a PDE e a solução fraca que desejamos encontrar torna-se descontínua. O problema é que a Eq. (2.5) pode admitir várias soluções fracas, então outras condições devem ser impostas para que a solução fisicamente correta seja obtida (LeVeque, 1992).

### 2.2.3 O problema de Riemann

O problema de Riemann surge na tentativa de dar solução à equação de conservação, como por exemplo a Eq. (2.5), utilizando uma condição inicial especial. Dita condição inicial é uma função contínua por partes, com uma única descontinuidade, por exemplo em  $x = 0$ ,

$$S(x, 0) = \begin{cases} S_L & \text{para } x < 0, \\ S_R & \text{para } x > 0. \end{cases} \quad (2.12)$$

As Eqs. (2.5) e (2.12), representam o transporte de informação de, por exemplo, uma certa quantidade de matéria, de forma descontínua através de um domínio característico. A forma da solução para  $S(x, t)$  depende da relação entre  $S_L$  e  $S_R$  e, de se a função  $f_{adv}$  é convexa ou côncava, ou convexa e côncava (LeVeque, 1992; Wesseling, 2009).

#### Problema de Riemann tipo I

Inicialmente é considerada uma função convexa. Desta forma existem dois possíveis casos a considerar:

**Caso I.** Neste caso é considerado  $S_L > S_R$ , logo temos uma única solução fraca,

$$S(x, t) = \begin{cases} S_L & \text{para } x < v_{\text{choque}}t, \\ S_R & \text{para } x > v_{\text{choque}}t. \end{cases} \quad (2.13)$$

onde

$$v_{\text{choque}} = \frac{f_{adv}(S_L) - f_{adv}(S_R)}{S_L - S_R} \quad (2.14)$$

é a velocidade de choque, i.e. a velocidade com que a descontinuidade se desloca. A Eq. (2.14) representa a relação entre a  $v_{\text{choque}}$  e os estados L e R, e é chamada de condição de Rankine-Hugoniot. Eq. (2.14) representa a propriedade de conservação local na presença de descontinuidade. Note que com a evolução no tempo as linhas características de cada região onde  $S$  é constante se interceptam configurando a formação de um choque, ver Fig. 2.1. Finalmente pode-se dizer que a solução descontínua com a evolução, é uma onda de choque, que é de caráter compressiva, e satisfaz a condição a seguir:

$$\frac{f_{adv}(S) - f_{adv}(S_L)}{S - S_L} \geq v_{\text{choque}} \geq \frac{f_{adv}(S) - f_{adv}(S_R)}{S - S_R}, \quad (2.15)$$

a qual é denominada de condição de entropia (Toro, 2009), cujos termos representam a inclinação das linhas características. Segundo Oleinik (1957), a condição de entropia, Eq. (2.15) garante que a solução satisfaz a 2ª Lei da Termodinâmica, e que a entropia cresce através da descontinuidade (Lyra, 1994).

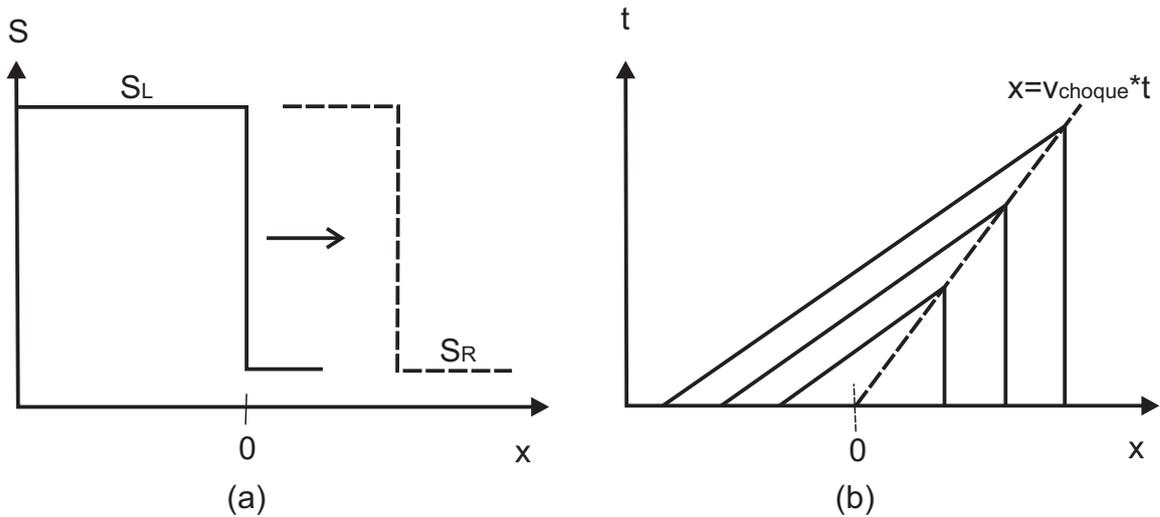


Figura 2.1: (a) Solução inicial descontínua compressiva. (b) Solução no plano  $x-t$ .

**Caso II** Neste caso é considerado que  $S_L < S_R$ , que permite um conjunto infinito de soluções fracas disponíveis tem-se, por exemplo, a solução descontínua que se propaga com velocidade  $v_{\text{choque}}$  semelhante à descrita no caso I. Esta condição inicial é de caráter expansiva. Observe que agora algumas linhas características não se originam na condição inicial, mas sim na linha que representa o “choque”, como indicado na Fig. 2.2, portanto, esta solução é fisicamente incorreta.

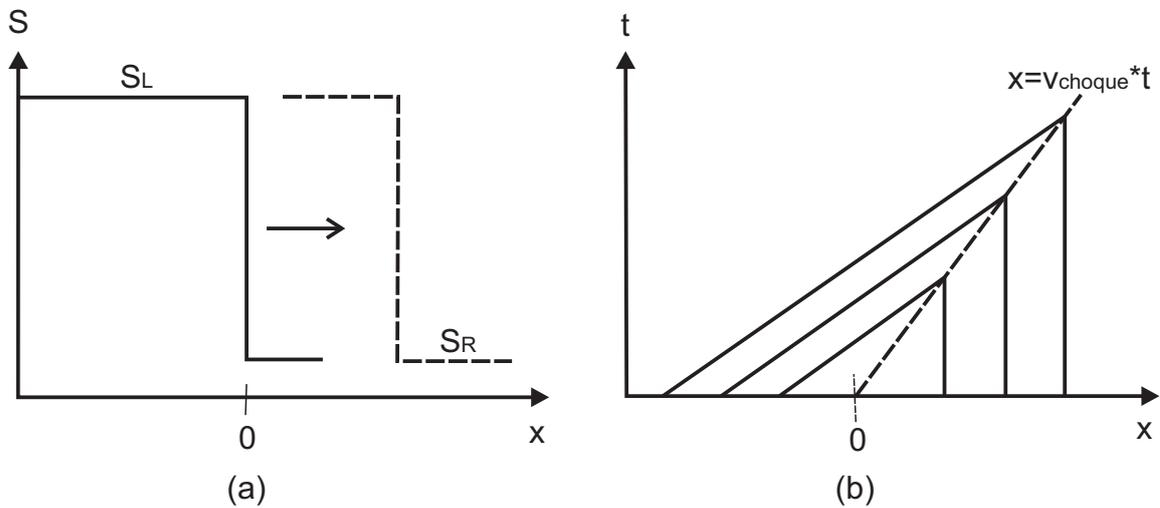


Figura 2.2: (a) Condição inicial descontínua de caráter expansiva. (b) Solução do choque de rarefação no plano  $x-t$ .

Neste caso as linhas características não podem ser acompanhadas até a condição inicial, logo viola a condição de entropia Eq. (2.15), a “física” do problema. Logo aparece o denominado choque de expansão ou rarefação não físico, pois a condição de entropia garante que o “choque” é determinado pelas condições iniciais e não por eventos futuros (Lyra, 1994). Entre outras várias razões para rejeitar esta solução, como uma solução física admissível, esta a instabilidade, que destaca-se como um argumento importante. Entenda-se o conceito de instabilidade como, o efeito de pequenas perturbações na solução inicial,

geram grandes mudanças na solução numérica (Toro, 2009).

Outra solução fraca possível é a onda de rarefação centrada, como se apresenta a seguir:

$$S(x, t) = \begin{cases} S_L & x < S_L t, \\ x/t & S_L \leq x \leq S_R, \\ S_R & x > S_R t. \end{cases} \quad (2.16)$$

A solução Eq. (2.16) é estável. As linhas características podem ser acompanhadas até a condição inicial e esta é uma solução fisicamente correta e corresponde à solução da Eq. de Burgers viscosa no limite em que os termos de difusão são eliminados, i.e., tendem para zero (LeVeque, 2002; Lyra, 1994), ou seja

$$\lim_{\nu \rightarrow 0} \left\{ \frac{\partial S}{\partial t} + S \frac{\partial S}{\partial x} - \nu \frac{\partial^2 S}{\partial x^2} = 0 \right\},$$

como indicado na Fig. 2.3.

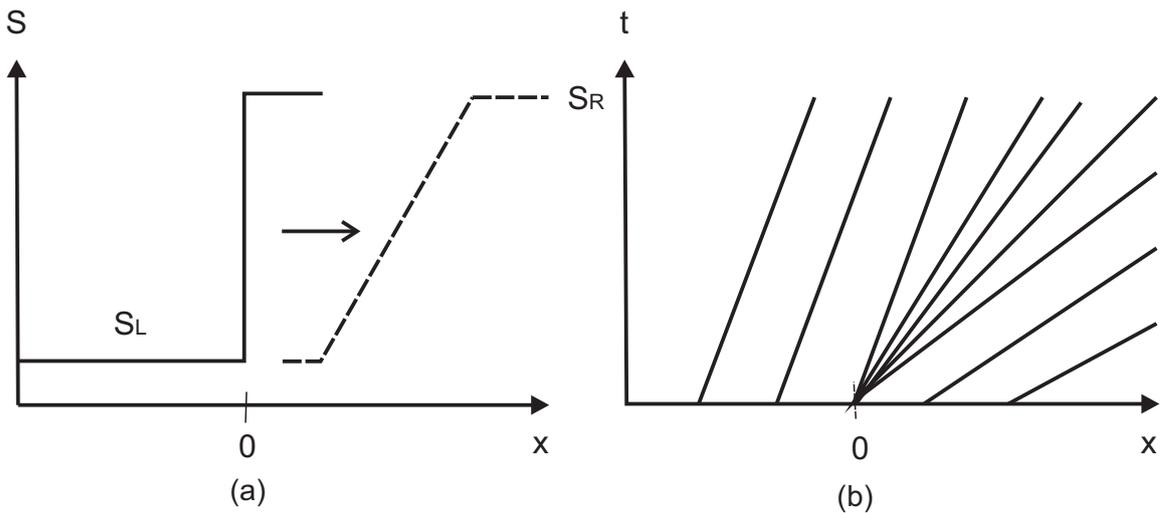


Figura 2.3: Onda de rarefação: (a) Condição inicial descontínua de caráter expansiva. (b) Solução (rarefação) satisfazendo a condição de entropia.

Finalmente a análise do caso para uma função convexa é concluído. O tratamento para a função côncava é similar e não será discutido (ver LeVeque, 2002). Observe que em nos casos das funções convexa e côncava, a descontinuidade na solução do problema de Riemann resulta ou em uma onda de choque, ou uma onda de rarefação, porém não por ambos. No entanto, isso não precisa ser assim para uma função arbitrária (Wesseling, 2009). O caso em que a função é nem convexa nem côncava será ilustrado pelo exemplo da versão unidimensional escalar da equação Buckley-Leverett.

### Problema de Riemann tipo II

A seguir será analisado o caso para o qual a função  $f_{adv}$  tem forma de "S", como indicado na Fig. 2.4a. A solução resultante pode ter ondas de choque, de rarefação ou ambas. Este caso é tratado extensivamente em (LeVeque, 1992; Helmig, 1997). Agora considerando o problema de Riemann com estados  $S_L$  e  $S_R$ . O valor onde a derivada da função  $f_{adv}$  é máxima é chamado de ponto de inflexão  $S_I$ , como indicado na Fig 2.5, para  $S_w = 0.5$ . A solução é obtida considerando os casos a seguir (Bastian, 1999):

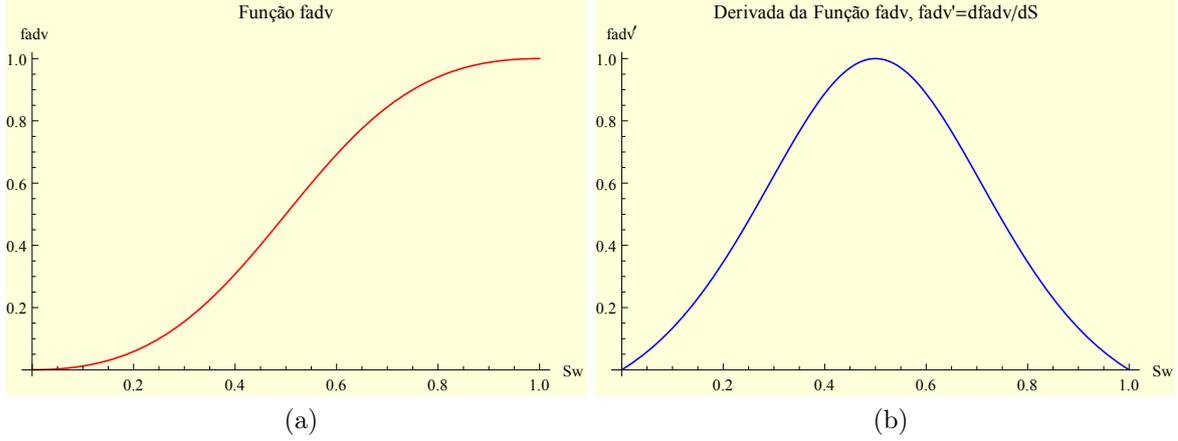


Figura 2.4: (a) Função  $f_{adv}$ . (b) Derivada da função  $f_{adv}$ , para o modelo de Brooks-Corey com  $\mu_o/\mu_w = 1$ .

**Caso I** Neste caso é considerado que  $S_R < S_L \leq S_I$ . Nessa faixa temos que  $\partial f_{adv}(S_L)/\partial S > \partial f_{adv}(S_R)/\partial S$  como no caso I do problema de Riemann tipo I, Eq (2.13). Com velocidade de choque dada pela Eq. (2.14).

**Caso II** Neste caso é considerado que  $S_I \leq S_R < S_L$ . Agora temos que  $\partial f_{adv}(S_L)/\partial S < \partial f_{adv}(S_R)/\partial S$ , e obtemos uma onda de rarefação como solução:

$$S(x, t) = \begin{cases} S_L & x/t < \partial f_{adv}(S_L)/\partial S, \\ [\partial f_{adv}(S_L)/\partial S]^{-1}(x/t) & \partial f_{adv}(S_L)/\partial S \leq x/t \leq \partial f_{adv}(S_R)/\partial S, \\ S_R & x/t > \partial f_{adv}(S_R)/\partial S. \end{cases} \quad (2.17)$$

Para os restantes dois casos, definiremos o ponto de saturação tangencial  $S_T$ , tal que:

$$\partial f_{adv}(S_T)/\partial S = \frac{f_{adv}(S_T) - f_{adv}(S_R)}{S_T - S_R}. \quad (2.18)$$

A construção do ponto tangencial é apresentada graficamente na Fig. 2.5.

**Caso III** Neste caso é considerado que  $S_R < S_I < S_L \leq S_T$ . Este caso é uma extensão do caso I (onda de choque), isso devido a que ainda consideramos que  $\partial f_{adv}(S_L)/\partial S >$

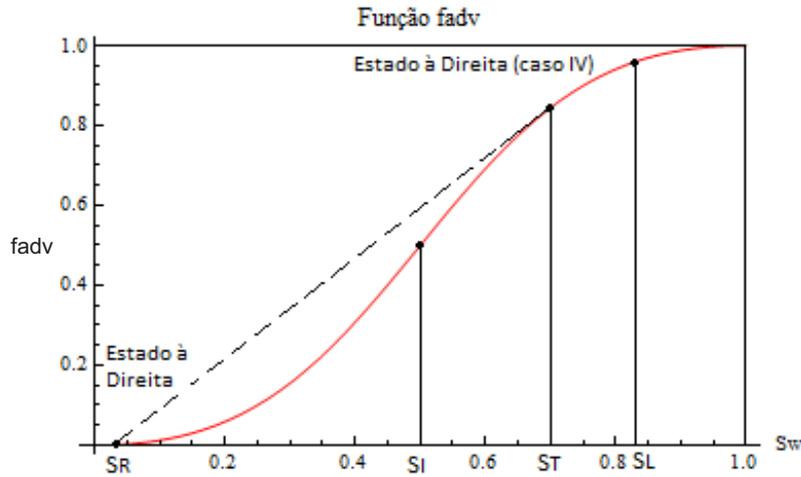


Figura 2.5: Construção do ponto tangencial.

$\partial f_{\text{adv}}(S_R)/\partial S$ . Contudo, é mais complexo para mostrar que as características todas se interceptam para formar o choque.

**Caso IV** Neste caso é considerado que  $S_R < S_I < S_T < S_L$ . O estado à esquerda está acima do ponto tangencial. Assim, obtemos uma onda de rarefação do estado à esquerda para o ponto tangencial, e um choque do ponto tangencial para o estado à direita, i.e.:

$$S(x, t) = \begin{cases} S_L & x/t \leq \partial f_{\text{adv}}(S_L)/\partial S, \\ [\partial f_{\text{adv}}(S_L)/\partial S]^{-1}(x/t) & \partial f_{\text{adv}}(S_L)/\partial S < x/t < \partial f_{\text{adv}}(S_T)/\partial S, \\ S_R & x/t > \partial f_{\text{adv}}(S_T)/\partial S. \end{cases} \quad (2.19)$$

Observe que a velocidade de choque é dada pela Eq. (2.18) e cumpre com a condição de Rankine-Hugoniot. De fato a Eq. 2.18 é construída de forma que a derivada da função  $\partial f_{\text{adv}}(S_L)/\partial S$ , seja inversível para a onda de rarefação. A velocidade de choque satisfaz a condição de Rankine-Hugoniot e as linhas características para  $x/t > \partial f_{\text{adv}}(S_T)/\partial S$  entram no choque.

A solução do problema de Riemann é uma ferramenta fundamental no desenvolvimento de formulações numéricas, tais como o métodos dos volumes finitos que será apresentado no capítulo 3.

## 2.3 Escoamento bifásico e imiscível em meios porosos

### 2.3.1 Conceitos fundamentais

Nesta seção, apresentamos as equações que modelam o escoamento bifásico e incompressível de água e óleo em meios porosos rígidos. A lei de Darcy é substituída diretamente na equação de conservação de massa para cada fase produzindo um conjunto de EDPs parabólicas que são, em geral, resolvidas simultaneamente. Este tipo de formulação é amplamente utilizada na indústria do petróleo (Ertekin et al., 2001). Neste tipo de formulação, diferentes alternativas podem ser utilizadas na escolha das variáveis primitivas do problema. Em função da escolha destas variáveis, podemos classificar estas formulações como (Helmig, 1997; Carvalho, 2005):

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

No presente trabalho adotaremos a formulação número 3, com o objetivo de obter as referidas equações que regem o comportamento do escoamento bifásico e incompressível em meios porosos. Para obter a referida formulação, as principais hipóteses simplificadoras adotadas são (Peaceman, 1977):

- O meio poroso está totalmente saturado pelas fases líquidas.
- O fluido e a rocha são incompressíveis.
- O escoamento é imiscível.
- Os fluidos obedecem à lei de Darcy generalizada, isto é: Os fluidos são newtonianos; não há reação química entre os fluidos e o meio poroso; o escoamento é laminar e isotérmico; a permeabilidade absoluta é independente da pressão e da temperatura (Helmig, 1997).

Tendo em vista as considerações acima, a equação de conservação da massa para o modelo do fluxo bifásico, para a fase  $\sigma$ , pode ser expressa, utilizando as equações de continuidade, dadas por (Helmig, 1997; Bear, 1988)

**Fase 1:** fase molhante  $\sigma = w$  (p. ex., água), tem-se:

$$\phi \frac{\partial (\rho_w S_w)}{\partial t} + \nabla \cdot (\rho_w \vec{v}_w) - \rho_w q_w = 0. \quad (2.20)$$

**Fase 2:** fase não-molhante  $\sigma = o$  (p. ex., óleo), tem-se:

$$\phi \frac{\partial (\rho_o S_o)}{\partial t} + \nabla \cdot (\rho_o \vec{v}_o) - \rho_o q_o = 0. \quad (2.21)$$

Somando as equações (2.20) e (2.21), além de introduzir a velocidade total do sistema bifásico incompressível, com  $\vec{v}_t = \vec{v}_w + \vec{v}_o$ , temos:

$$\nabla \cdot \vec{v}_t = q_o + q_w = q_t. \quad (2.22)$$

Nas equações (2.20) e (2.21),  $v_\sigma$  é a velocidade da fase  $\sigma$ , ou taxa de fluxo por unidade de área da secção transversal do reservatório,  $\rho_\sigma$  é a massa específica ou a densidade da fase  $\sigma$ ,  $\phi$  é a porosidade, i.e., a fração da rocha que pode ser ocupada por fluidos,  $q_\sigma$  denota termos fonte ou sumidouros (por ex. poços) e  $S_\sigma$  é a saturação da fase  $\sigma$ , que representa a fração do volume poroso ocupado por esta fase. Devido à consideração de que o meio poroso está totalmente saturado, podemos escrever a equação constitutiva ou de restrição das saturações, como:

$$\sum_{\sigma=o,w} S_\sigma = 1 \quad \text{ou} \quad S_o + S_w = 1. \quad (2.23)$$

Finalmente define-se a pressão capilar como a diferença entre as pressões das fases, ou seja:

$$p_c = p_o - p_w. \quad (2.24)$$

A pressão capilar representa uma descontinuidade da pressão associada ao contato entre dois fluidos imiscíveis nos interstícios do meio poroso (Bear, 1988; Helmig, 1997). Ela é um parâmetro obtido experimentalmente que depende fortemente da saturação da água, o seja,  $p_c = p_c(S_w)$ . Um modelo empírico clássico utilizado para relacionar pressão capilar e saturação da água é o modelo de Brooks e Corey (Brooks and Corey, 1964). Neste modelo, a pressão capilar é da forma a seguir

$$p_c(S_w) = p_d \left( \frac{S_w - S_{wr}}{1 - S_{wr}} \right)^{-1/\omega}. \quad (2.25)$$

O gráfico para a Eq. (2.25) é indicado na Fig. 2.6. As permeabilidades relativas e saturações normalizadas das fases se relacionam através das seguintes expressões:

$$k_{rw}(S_w) = \left( \frac{S_w - S_{wr}}{1 - S_{wr} - S_{or}} \right)^\alpha, \quad (2.26)$$

$$k_{ro}(S_w) = \left( \frac{1 - S_w - S_{wr}}{1 - S_{wr} - S_{or}} \right)^\beta, \quad (2.27)$$

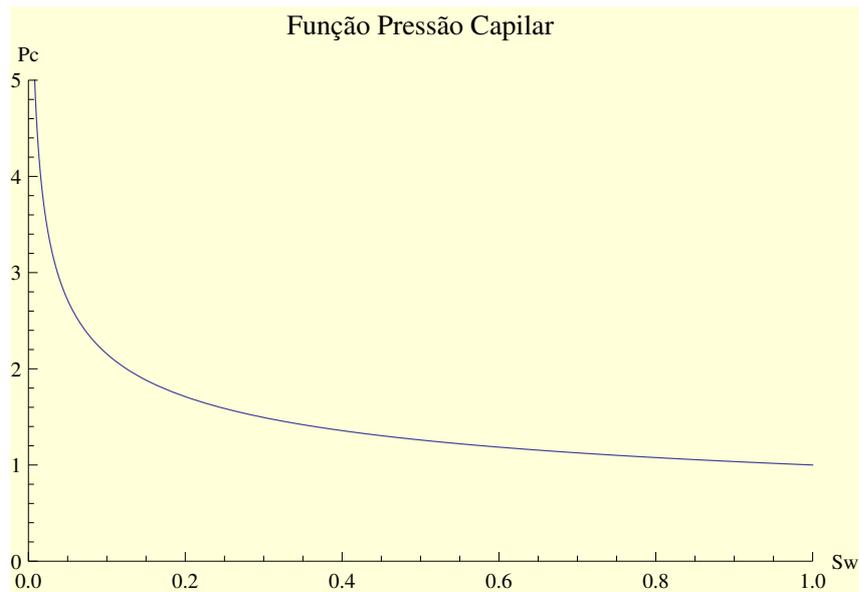


Figura 2.6: Curva para a função pressão capilar, correspondente aos parâmetros  $p_d = 1$ ,  $\omega = 3$ ,  $S_{wr} = 0$ .

Onde  $S_{wr}$  e  $S_{or}$  são as saturação residual da água e a saturação residual de óleo respectivamente, ver gráficos das Eqs. (2.26) e (2.27) na Fig. 2.7. Maiores detalhes sobre os modelos e, particularmente sobre os coeficientes empíricos  $p_d$ ,  $\omega$ ,  $\alpha$ , e  $\beta$ , podem ser encontrados em Helmig (1997).

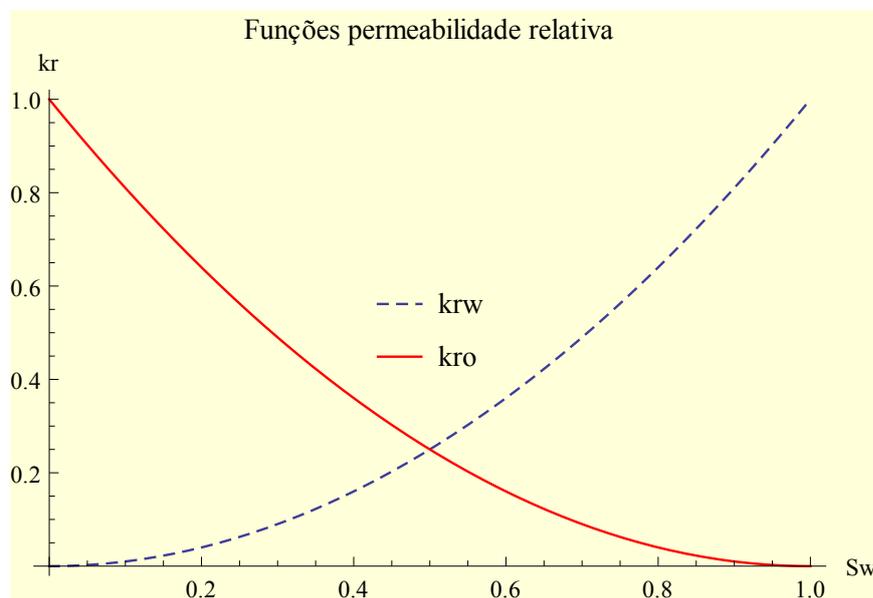


Figura 2.7: Curvas para as funções de permeabilidade relativa, correspondente aos parâmetros  $\alpha = \beta = 2$ ,  $S_{wr} = S_{or} = 0$ .

Para determinar a equação de saturação, inicialmente tomamos o gradiente da pressão capilar, Eq. (2.24), de modo que (Helmig, 1997):

$$\nabla p_c = \nabla p_o - \nabla p_w. \quad (2.28)$$

Utilizando as equações (2.20) e (2.21), e levando em conta que no presente trabalho só será considerado o deslocamento de fluidos em meios porosos isotrópicos, as velocidades das fases água e óleo podem ser escritas, respectivamente, como:

$$\vec{v}_w = -\lambda_w K (\nabla p_w - \rho_w g), \quad (2.29)$$

$$\vec{v}_o = -\lambda_o K (\nabla p_w + \nabla p_c - \rho_o g), \quad (2.30)$$

onde  $K$  é a permeabilidade absoluta do meio, representando uma propriedade apenas da rocha,  $p_\sigma$  é a pressão da fase  $\sigma$ ,  $g$  é o módulo da aceleração gravitacional, e  $\lambda_\sigma = \frac{k_{r\sigma}}{\mu_\sigma}$  é a mobilidade da fase  $\sigma$ , onde  $k_{r\sigma}$  e  $\mu_\sigma$  são a permeabilidade relativa e a viscosidade da fase  $\sigma$ , respectivamente.

Multiplicando a Eq. (2.29) por  $\lambda_o$  e a Eq. (2.30) por  $\lambda_w$  obtemos (Carvalho, 2005):

$$\lambda_o \vec{v}_w = -K \lambda_w \lambda_o (\nabla p_w - \rho_w g), \quad (2.31)$$

$$\lambda_w \vec{v}_o = -K \lambda_o \lambda_w (\nabla p_o - \rho_o g). \quad (2.32)$$

Subtraindo a Eq. (2.31) da Eq. (2.32) chegamos a:

$$\lambda_w \vec{v}_o - \lambda_o \vec{v}_w = -K \lambda_o \lambda_w (\nabla p_o - \rho_o g - \nabla p_w + \rho_w g). \quad (2.33)$$

Multiplicando a Eq. (2.33) por (-1), e usando a Eq. (2.28) temos:

$$-\lambda_w \vec{v}_o + \lambda_o \vec{v}_w = K \lambda_o \lambda_w \nabla p_c - K \lambda_o \lambda_w (\rho_o - \rho_w) g. \quad (2.34)$$

Rearranjando os termos e usando ainda o fato que  $\vec{v}_o = \vec{v}_t - \vec{v}_w$  e que  $\lambda_t = \lambda_w + \lambda_o$  pode se escrever:

$$\lambda_t \vec{v}_w = \lambda_w \vec{v}_t + K \lambda_o \lambda_w [\nabla p_c + (\rho_w - \rho_o) g], \quad (2.35)$$

onde  $\vec{v}_t$  representa a velocidade total e  $\lambda_t$  a mobilidade total.

Definindo o fluxo fracional de uma fase  $\sigma$  como:

$$f_\sigma = \frac{\lambda_\sigma}{\lambda_t}, \quad (2.36)$$

e, para simplificar a notação, definindo

$$h_w = -\varepsilon \frac{(\lambda_o \lambda_w)}{\lambda_t} \frac{dp_c}{dS_w}, \quad (2.37)$$

onde  $0 \leq \varepsilon \leq 1$  é um parâmetro livre (Cueto-Felgueroso, 2009), escolhido pelo usuário para controlar a intensidade da força capilar, o que tem implicações na estabilidade numérica.

Desta forma, obtemos a equação da velocidade para a fase água dada por:

$$\vec{v}_w = f_w \vec{v}_t - Kh_w \nabla S_w + K \lambda_o f_w (\rho_w - \rho_o) g. \quad (2.38)$$

Assim, consegue-se escrever a velocidade da fase água,  $\vec{v}_w$ , em função da velocidade total  $\vec{v}_t$ . Substituindo a Eq. (2.38) na Eq. (2.20) e rearranjando os termos, temos:

$$\frac{\partial(\phi \rho_w S_w)}{\partial t} = -\nabla \cdot [\rho_w (f_w \vec{v}_t - Kh_w \nabla S_w + K \lambda_o f_w (\rho_w - \rho_o) g)] + q_w. \quad (2.39)$$

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

$$\phi \rho_w \frac{\partial S_w}{\partial t} = -\rho_w \nabla \cdot [(f_w \vec{v}_t - Kh_w \nabla S_w + K \lambda_o f_w (\rho_w - \rho_o) g)] + q_w. \quad (2.40)$$

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

$$\underbrace{\phi \frac{\partial S_w}{\partial t}}_{\text{termo 1}} = -\nabla \cdot \left\{ \underbrace{f_w [\vec{v}_t + K \lambda_o (\rho_w - \rho_o) g]}_{\text{termo 2}} - \underbrace{Kh_w \nabla S_w}_{\text{termo 3}} \right\} + \underbrace{Q_w}_{\text{termo 4}}. \quad (2.41)$$

A Eq. (2.41) é conhecida como a equação de saturação da fase água num meio poroso rígido. Esta equação é similar a uma equação de advecção-difusão-reação não linear. Por outro lado, na Eq. (2.41), o termo 1 representa o termo de acumulação, o termo 2, é o termo advectivo

$$f_{\text{adv}} = f_w [\vec{v}_t + K \lambda_o (\rho_w - \rho_o) g], \quad (2.42)$$

e o termo 3 está associado aos efeitos de capilaridade de carácter difusivo,

$$f_{\text{diff}} = Kh_w \nabla S_w, \quad (2.43)$$

o termo 4 representa as fontes ou sumidouros. Um pré-requisito para a solução da Eq. (2.41) é ter calculado *a priori* a velocidade total  $v_t$  (Helmig, 1997).

### 2.3.2 Condições iniciais e de contorno

Para que o problema representado pela equação de saturação seja completamente determinado é necessário utilizar as condições iniciais e de contorno adequadas. A seguir se apresenta um conjunto de condições iniciais e de contorno associadas a um reservatório com contorno de injeção  $\Gamma_-$  e contorno de produção  $\Gamma_+$ , como indicado na Fig. 2.8.

No presente contexto, uma condição de contorno fisicamente admissível do tipo Dirichlet para a equação de saturação será imposta da forma a seguir:

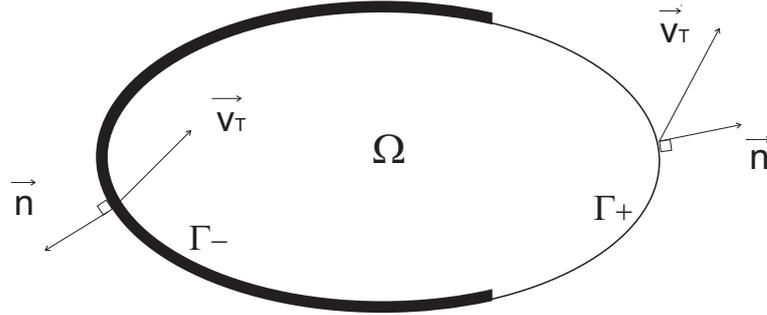


Figura 2.8: Diagrama esquemático das condições de contorno para a equação de saturação, adaptada de (Chavent and Jaffré, 1986).

$$S_w(\vec{x}, t) = \bar{S}_w \quad \text{em } \Gamma_- \times [t^0, T], \quad (2.44)$$

onde  $\bar{S}_w$  é um valor da saturação prescrito para o contorno  $\Gamma_-$  e  $[t^0, T]$  representa o intervalo de tempo considerado. As condições iniciais do problema podem ser escritas como:

$$S_w(\vec{x}, 0) = \bar{S}_w^0 \quad \text{em } \Omega \times t^0, \quad (2.45)$$

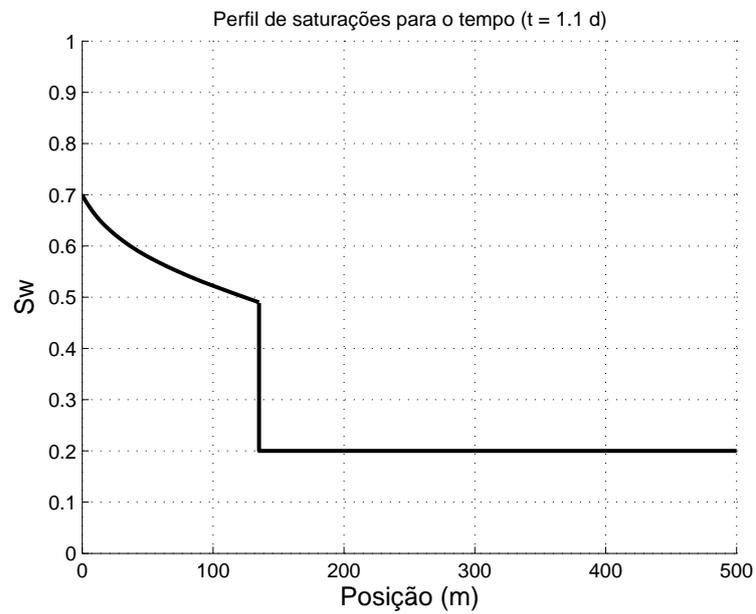
para um domínio  $\Omega$  no tempo inicial  $t^0$ .

### 2.3.3 Equação de Buckley-Leverett

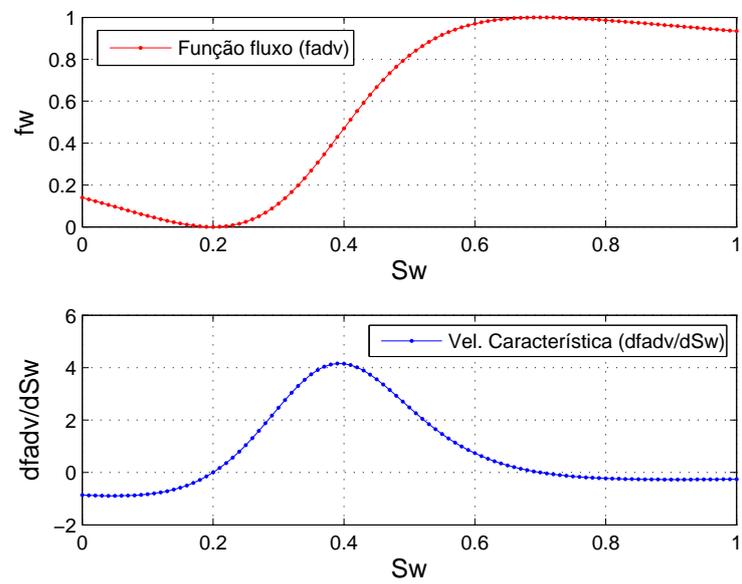
A equação diferencial não linear (2.41) é formalmente parabólica, se o gradiente de pressão capilar têm valor significativo. Por outro lado se o gradiente de pressão capilar é muito pequeno  $\frac{dp_c}{dS_w} \simeq 0$ , o termo difusivo é desprezível e a Eq. (2.41) torna-se hiperbólica. Se são desconsiderados os efeitos da pressão capilar, os efeitos gravitacionais e os termos fonte ou sumidouro, a Eq. (2.41) transforma-se na chamada de equação de Buckley-Leverett:

$$\phi \frac{\partial S_w}{\partial t} + \vec{v}_t \frac{df_w}{dS_w} \frac{\partial S_w}{\partial x} = 0. \quad (2.46)$$

Nesta equação é assumido que a velocidade  $\vec{v}_t$  é constante (Helmig, 1997). A Eq. (2.46) foi originalmente obtida por Buckley and Leverett (1942), num trabalho clássico e que se tornou referência para o estudo de escoamentos bifásicos em meios porosos. Esta equação representa o deslocamento imiscível e unidimensional de óleo por água num meio poroso rígido (Carvalho, 2005). Para ilustrar, apresentamos na Fig. 2.9 a frente de saturação nos instantes  $t=1.1$  para o problema do deslocamento imiscível unidimensional de óleo por água, com presença de ondas de compressão (choque  $S_w = 0.5$ ), ondas de rarefação e suas respectivas curvas da função fluxo fracional e velocidade característica.



(a)



(b)

Figura 2.9: Solução semi analítica para o problema do Buckley-Leverett (a) e função fluxo e velocidade característica (b)

---

## Capítulo 3

# O método dos volumes finitos clássico

Uma grande classe de problemas físicos pode ser descrita por sistemas de equações diferenciais parciais. Soluções analíticas para estes sistemas estão disponíveis para apenas um número reduzido de casos simplificados, e em geral o domínio e as equações governantes têm que ser discretizadas para se obter uma solução aproximada (van den Abeele, 2009).

A seguir, apresenta-se uma visão geral de um dos métodos mais utilizado na discretização espacial das equações governantes da dinâmica dos fluidos, e que é conhecido como o método dos volumes finitos (FVM) que foi introduzido por McDonald em 1971. Na prática são considerados métodos dos volumes finitos todos os métodos de discretização em que, inicialmente, as equações diferenciais são integradas diretamente no domínio físico e, posteriormente, o teorema da divergência de Green-Gauss é utilizado, de modo a transformarem-se as integrais de domínio em integrais de superfície. Só então, aplica-se algum procedimento de discretização que permita a obtenção da solução numérica do problema (Carvalho, 2005). Uma característica importante de todos os métodos que se enquadram nesta categoria é o fato que, quando bem aplicados, garantem conservação local no nível da célula e global de quantidades como massa, momento e energia. O FVM é o mais utilizado para a discretização espacial na simulação de problemas na dinâmica dos fluidos computacional e atingiu um nível considerável de maturidade. É suficientemente flexível para resolver problemas físicos com acurácia em geometrias complexas utilizando malhas não estruturadas, em geral, de primeira ou “segunda” ordem. Isto, inclusive, é adequado para o nível de erro requerido para a maioria dos problemas de engenharia. Além disso, este método possui robustez suficiente para lidar com soluções de uma ampla classe de problemas. Por estas razões, a maioria dos pacotes de softwares comerciais para a simulação de escoamentos existentes hoje são baseados no FVM (van den Abeele, 2009).

## 3.1 Esquema de primeira ordem de acurácia

### 3.1.1 Formulação geral

Considerando a forma geral da lei de conservação da grandeza  $S_w$ , Eq. (2.41), com apenas fluxos advectivos  $\vec{f}_{\text{adv}}$  e termo fonte  $Q_w$ , temos:

$$\phi \frac{\partial S_w}{\partial t} + \nabla \cdot (\vec{f}_{\text{adv}}) = Q_w, \quad (3.1)$$

onde  $\vec{f}_{\text{adv}} = f_w \vec{v}_t$ . Integrando a Eq. (3.1) em cada célula também conhecida como volume de controle, onde são realizados os balanços discretos no caso do FVM, obtemos:

$$\int_{\Omega} \phi \frac{\partial S_w}{\partial t} d\Omega + \int_{\Omega} \nabla \cdot (\vec{f}_{\text{adv}}) d\Omega = \int_{\Omega} Q_w d\Omega, \quad (3.2)$$

com volume  $\Omega$ , contornos  $\partial\Omega$ , e aplicando o teorema da divergência de Green-Gauss temos:

$$\phi \frac{\partial \bar{S}_w}{\partial t} = - \int_{\Gamma} \vec{f}_{\text{adv}}(S_w) \cdot \vec{n} d\Gamma + \int_{\Omega} Q_w d\Omega, \quad (3.3)$$

onde o vetor  $\vec{n}$  é o vetor área normal que aponta para fora da superfície de controle, e a variável conservativa média no volume de controle  $\bar{S}_w$  é dada por:

$$\bar{S}_w = \int_{\Omega} S_w d\Omega. \quad (3.4)$$

Estas representam as incógnitas do problema discretizado pelo método dos volumes finitos.

Para avaliar o primeiro termo do lado direito da Eq. (3.3), as variáveis conservativas nas faces dos volumes de controle são necessárias para calcular os fluxos advectivos. Estes não estão imediatamente disponíveis e, assim, devem ser reconstruídos a partir dos valores médios das células. No método “upwind” clássico de primeira ordem de acurácia de Godunov (1959), a solução em uma face é aproximada pela solução média da célula, o que corresponde a uma extrapolação com um polinômio de grau zero (ver Fig. 3.1). A fim de assegurar a conservação em nível discreto, as contribuições de uma face para as suas duas células vizinhas devem ser iguais em magnitude e opostas em sinal.

Assim um único fluxo  $\vec{F} \cdot \vec{n}$  deverá ser calculado a partir de duas soluções disponíveis (LeVeque, 2002; Hirsch, 2007; van den Abeele, 2009). No método original de Godunov, este objetivo é alcançado ao calcular a solução exata para o problema de Riemann resultante (Toro, 2009). Alternativamente e visando uma maior eficiência computacional, são utilizados resolvidores de Riemann aproximados para este propósito que, em muitos casos, podem ser escritos na forma

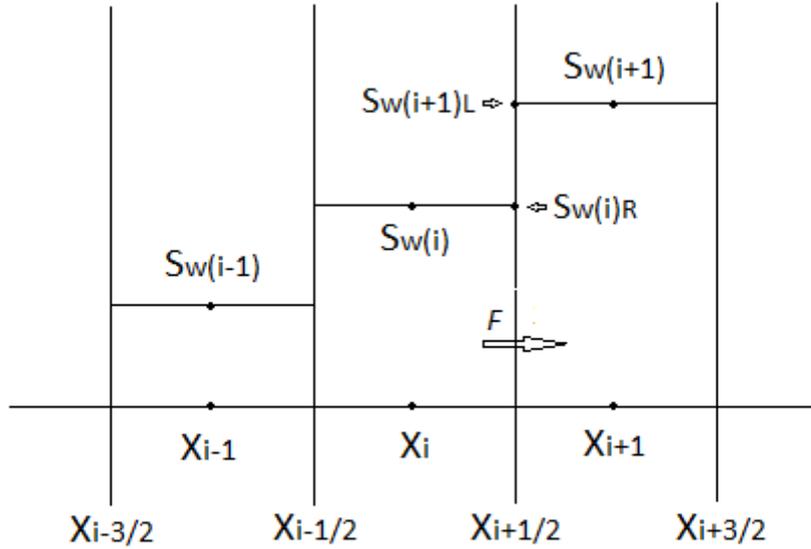


Figura 3.1: Esquema de primeira ordem de acurácia.

$$\vec{F}(S_{wL}, S_{wR}) \cdot \vec{n} = \underbrace{\left[ \frac{\vec{f}_{\text{adv}}(S_{wL}) + \vec{f}_{\text{adv}}(S_{wR})}{2} \right]}_{\text{termo 1}} \cdot \vec{n} - \underbrace{|A| \frac{S_{wR} - S_{wL}}{2}}_{\text{termo 2}}, \quad (3.5)$$

onde  $S_{wL}$  e  $S_{wR}$  são, respectivamente, as variáveis conservadas reconstruídas a partir das células da esquerda e da direita de uma face, o vetor normal  $\vec{n}$  é orientado da esquerda para a direita. No método “upwind” de primeira ordem de acurácia temos:

$$S_{wL} = \bar{S}_{wL} \quad \text{e} \quad S_{wR} = \bar{S}_{wR}. \quad (3.6)$$

O termo 1 no lado direito da Eq. (3.5) é apenas a média dos fluxos advectivos analíticos do lado esquerdo e do lado direito da face e corresponde a diferenças finitas centradas de segunda ordem. O termo 2 assegura que os dados que são utilizados para o cálculo do fluxo vem do lado a partir do qual as grandezas físicas estão se propagando. Isto é conhecido com o nome de “upwinding” que introduz uma quantidade de amortecimento ou difusão para estabilizar os cálculos. A matriz  $|A|$  deve ser definida de tal forma que o “upwinding” seja assegurado. O fluxo de Riemann mais simples é o de Rusanov (1962). A definição de  $|A|$  para o fluxo de Rusanov é simplesmente:

$$|A| = \alpha_{\max} \mathbf{I}, \quad (3.7)$$

onde  $\alpha_{\max}$  é o raio espectral da matriz jacobiana dos fluxos no sentido de  $\vec{n}$  na face, que é dada por:

$$\frac{\partial \left( \vec{f}_{\text{adv-L(R)}} \cdot \vec{n} \right)}{\partial S_{w\text{L(R)}}}. \quad (3.8)$$

Para a equação linear de advecção, discutida na subsec. 2.2.1, isso simplesmente resulta em  $\alpha_{\text{max}} = |a|$ , e para a equação de Burger em 1D,  $\alpha_{\text{max}} = 0.5(|u|_{\text{L}} + |u|_{\text{R}})$ , ver subsec. 2.2.2.

Na subseção a seguir apresentamos outros exemplos de resolvidores de Riemann aproximados, os quais são geralmente utilizados na comunidade de CFD (computational fluid dynamics) na solução de um problema de Riemann escalar (Cockburn and Shu, 1989).

### 3.1.2 Resolvidores de Riemann aproximados

**Godunov :**

$$F^{\text{G}}(S_{w\text{L}}, S_{w\text{R}}) = \begin{cases} \min_{S_{w\text{L}} \leq S_w \leq S_{w\text{R}}} f_{\text{adv}}(S_w) & \text{se } S_{w\text{L}} \leq S_{w\text{R}}, \\ \max_{S_{w\text{L}} \geq S_w \geq S_{w\text{R}}} f_{\text{adv}}(S_w) & \text{se } S_{w\text{L}} > S_{w\text{R}}. \end{cases} \quad (3.9)$$

**Lax-Friedrichs (global):**

$$F^{\text{LFG}}(S_{w\text{L}}, S_{w\text{R}}) = \frac{1}{2} [f_{\text{adv}}(S_{w\text{L}}) + f_{\text{adv}}(S_{w\text{R}}) - \alpha(S_{w\text{R}} - S_{w\text{L}})], \quad (3.10)$$

$$\alpha = \max \left| \frac{\partial f_{\text{adv}}(S_w)}{\partial S_w} \right|,$$

onde o máximo é calculado sobre a região inteira de  $S_w$ , isto é  $[\inf u_0(x), \sup u_0(x)]$ , onde  $u_0(x)$  é a solução inicial.

**Lax-Friedrichs (local):**

$$F^{\text{LFL}}(S_{w\text{L}}, S_{w\text{R}}) = \frac{1}{2} [f_{\text{adv}}(S_{w\text{L}}) + f_{\text{adv}}(S_{w\text{R}}) - \beta(S_{w\text{R}} - S_{w\text{L}})], \quad (3.11)$$

$$\beta = \max_{\min(S_{w\text{L}}, S_{w\text{R}}) \leq S_w \leq \max(S_{w\text{L}}, S_{w\text{R}})} \left| \frac{\partial f_{\text{adv}}(S_w)}{\partial S_w} \right|,$$

para funções convexas, isto é  $\frac{\partial^2 f_{\text{adv}}}{\partial S_w^2} \geq 0$ , temos que  $\beta = \max \left[ \left| \frac{\partial f_{\text{adv}}(S_{w\text{L}})}{\partial S_w} \right|, \left| \frac{\partial f_{\text{adv}}(S_{w\text{R}})}{\partial S_w} \right| \right]$ .

**Roe com correção de entropia:**

$$F^{\text{RF}}(S_{w\text{L}}, S_{w\text{R}}) = \begin{cases} f_{\text{adv}}(S_{w\text{L}}) & \text{se } f'_{\text{adv}}(S_w) \geq 0; S_w \in [\min(S_{w\text{L}}, S_{w\text{R}}), \max(S_{w\text{L}}, S_{w\text{R}})], \\ f_{\text{adv}}(S_{w\text{R}}) & \text{se } f'_{\text{adv}}(S_w) \leq 0; S_w \in [\min(S_{w\text{L}}, S_{w\text{R}}), \max(S_{w\text{L}}, S_{w\text{R}})], \\ F^{\text{LFL}} & \text{caso contrário.} \end{cases} \quad (3.12)$$

Geralmente é utilizado o resolvidor de Riemman aproximado tipo  $F^G$  se a função  $f_{adv}$  é simples. Contudo, para funções convexas, é sugerido utilizar resolvidores de Riemann tais como  $F^{LFL}$  ou  $F^{RF}$  por sua simplicidade e bons resultados numéricos (ver sec. 4 de (Cockburn and Shu, 1989)).

## 3.2 Esquemas TVD e TVB

Um conceito relevante surge da propriedade matemática de que a variação total (TV):

$$TV(S_w) = \int \left| \frac{\partial S_w}{\partial x} \right| dx, \quad (3.13)$$

de qualquer solução física admissível de uma lei de conservação hiperbólica escalar, que não deve crescer no tempo (LeVeque, 2002). A medida da TV para uma dada função  $S_w$ , que é a solução numérica do problema descrito pela Eq. (3.1) com as condições iniciais e de contorno apropriadas, além de desconsiderar o termo de fonte, é definida na sua forma discreta como:

$$TV(S_w) = \sum_i |S_{w(i+1)} - S_{w(i)}|. \quad (3.14)$$

Levando em consideração a premissa anterior, a seguir, é apresentado uma classe de método conservativo de muito sucesso para resolver a Eq. (3.1), definido pela expressão:

$$S_{w(i)}^{n+1} = S_{w(i)}^n - \frac{\Delta t}{\Delta x} (F_{i+1/2} - F_{i-1/2}), \quad (3.15)$$

que é TVD, ou seja, *total variation diminishing* se

$$TV(S_w^{n+1}) \leq TV(S_w^n) \leq TV(S_w^0), \quad (3.16)$$

donde  $S_w^n$  refere-se à solução numérica no nível de tempo  $t^n$ . Um esquema é chamado de TVB, i.e. *total variation bounded*, quando:

$$TV(S_w^n) \leq M(\Delta x)^2, \quad (3.17)$$

onde M é um parâmetro fixo escolhido pelo usuário (Shu, 1987, 1988).

Métodos numéricos que satisfazem as condições Eq. (3.16) e Eq. (3.17) preservam a monotonicidade, apresentando um comportamento livre de oscilações. Harten et al. (1983), provou que:

1. Todo esquema numérico monótono é TVD. Para nosso caso  $S_w$  é denominada monótona se, para todo  $i$ ,  $\min(S_{w(i-1)}, S_{w(i+1)}) \leq S_{w(i)} \leq \max(S_{w(i-1)}, S_{w(i+1)})$ .
2. Todo esquema TVD preserva a monotonicidade.

O objetivo principal por trás da construção de um método de alta resolução e que seja TVD é obter uma aproximação de ordem maior em regiões suaves, impedindo o surgimento de oscilações nas proximidades de gradientes acentuados e apresentando nestas regiões propriedades semelhantes àsquelas de métodos monótonos de ordem mais baixa.

Infelizmente, em quaisquer esquemas TVD, a solução é, em geral, de segunda ordem em regiões suaves da solução e de primeira ordem contíguo a “descontinuidades”. Por outro lado os esquemas TVB permitem relaxar a exigência de monotonicidade, para manter o ordem de acurácia espacial globalmente (Shu, 1987). Para construir métodos de ordem mais alta é preciso utilizar as denominadas funções limitadoras de declividade ou *slope limiters* para as variáveis dependentes  $S_w$  ou a partir da limitação do fluxo  $\vec{f}_{\text{adv}}(S_w)$  de maneira adaptativa. Boris and Book (1973) foram os primeiros a trabalhar com funções limitadoras não lineares incluindo na formulação a diferença entre os fluxos de primeira ordem e os fluxos de segunda ordem para evitar o surgimento de oscilações próprias dos esquemas de segunda ordem. Estes métodos são denominados FCT, i.e. *flux correct transport*.

### 3.3 Esquema de alta ordem de acurácia

Na década de 70, van Leer (1974) introduz a ideia de modificar o método de Godunov de primeira ordem, a partir da utilização de uma aproximação de maior ordem para Eq. (3.4) nos volumes de controle, de maneira a obtermos uma melhor aproximação para os fluxos  $\vec{f}_{\text{adv}}(S_w)$ , nas interfaces, como um primeiro passo para alcançar uma alta ordem de acurácia. Esta é a base para o esquema MUSCL (Monotone Upstream Centered Scheme for Conservation Laws). Seguindo os mesmos princípios que foram utilizados por van Leer, para a extensão do método de Godunov, Colella and Woodward (1984) introduziram uma reconstrução quadrática que permite representações de ordem mais elevada do que MUSCL. Eles nomearam o esquema método parabólico por partes (PPM). Outra abordagem, seguindo ideias semelhantes e que permite ainda uma reconstrução de ordem superior é o método ENO (essentially non-oscillatory) (Harten and Osher, 1997). A acurácia de segunda ordem pode ser conseguida com relativa facilidade, através da substituição do estado constante  $\{S_{w(i)}^n\}$  para cada VC no método de primeira ordem, por um polinômio linear por partes para cada célula  $S_{w(i)}(x)$ , usando apenas os dados a partir das células vizinhas próximas como indicado na Fig. 3.2.

De igual forma que no esquema de primeira ordem de acurácia é considerado que  $\bar{S}_{w(i)}^n$  representa a integral média na célula  $I_i = [x_{i-1/2}, x_{i+1/2}]$ , como indicado a seguir:

$$\bar{S}_{w(i)}^n = \frac{1}{\Delta x} \int_{x_{i-1/2}}^{x_{i+1/2}} S_w(x, t^n) dx. \quad (3.18)$$

Isto resulta geralmente numa reconstrução conservativa e linear por partes. Um polinômio

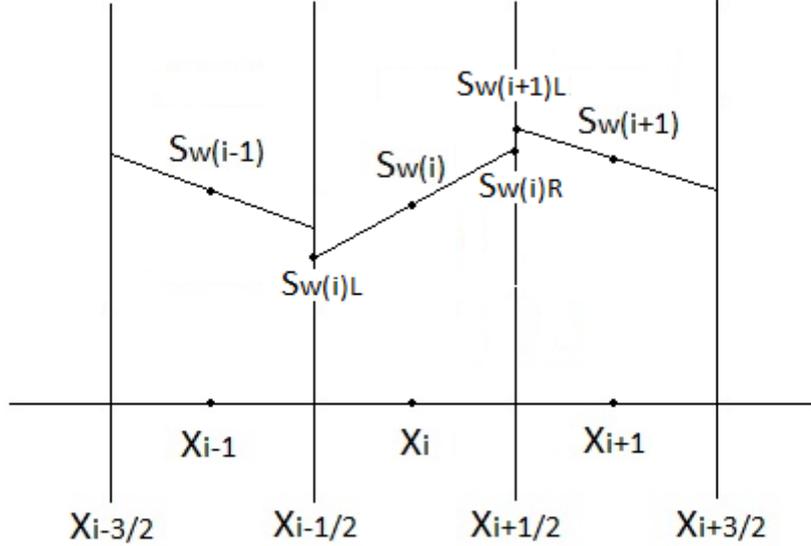


Figura 3.2: Esquema de segunda ordem de acurácia.

linear da forma:

$$S_w^n(x, t_n) = \bar{S}_{w(i)}^n + \xi_i^n(x - x_i), \quad x \in I_i \quad (3.19)$$

é calculado, onde  $x_i$  é a posição do centro da célula e  $\xi_i^n$  é a inclinação de  $S_w^n(x, t_n)$  no volume de controle  $i$ , onde a função linear  $S_w^n(x, t_n)$  é definida localmente no volume de controle. De modo que se  $\xi_i^n = 0$ , o esquema se reduz ao esquema de primeira ordem tipo Godunov, enquanto que para  $\xi_i^n \neq 0$ , é possível obter um esquema de ordem mais alta.

O centro do volume de controle  $x_i$  em coordenadas locais é  $x = \frac{1}{2}\Delta x$ , onde  $\Delta x = x_{i+1/2} - x_{i-1/2}$ , portanto,  $S_w^n(x_i, t_n) = \bar{S}_{w(i)}^n$ . Os valores de  $S_w^n(x, t_n)$  nos pontos extremos desempenham um papel fundamental e são dados por:

$$S_{w(i)L}^n(x, t_n) = S_w^n(x_{i-1/2}) = \bar{S}_{w(i)}^n - \frac{1}{2}\xi_i^n; \quad S_{w(i)R}^n(x, t_n) = S_w^n(x_{i+1/2}) = \bar{S}_{w(i)}^n + \frac{1}{2}\xi_i^n, \quad (3.20)$$

obtendo-se uma melhor estimativa em comparação com a reconstrução constante. Note que a integral de  $S_w^n(x, t_n)$ , no VC  $I_i$  é a mesma que  $\bar{S}_{w(i)}^n$ , e assim, desta forma conseguimos que o processo de reconstrução se mantém conservativo (Toro, 2009). Os valores para  $S_{w(i)L}^n$  e  $S_{w(i)R}^n$  para cada volume de controle são então conhecidos, o que pode ser usado para avaliar os fluxos numéricos para cada face, como por exemplo o fluxo  $F_{i+1/2} \left( S_{w(i)R}^n, S_{w(i+1)L}^n \right)$  para a face  $x_{i+1/2}$  do volume de controle  $i$ , como indicado na Fig. 3.2. Com a disponibilidade dos fluxos em cada uma das interfaces numéricas para os volumes de controle, é possível calcular o resíduo de alta ordem procurado, como se apresenta a seguir:

$$R_i = -\frac{1}{\Delta x} (F_{i+1/2} - F_{i-1/2}). \quad (3.21)$$

Agora nosso objetivo é lidar com as oscilações espúrias características dos métodos de ordem maior que um, as quais surgem na vizinhança de altos gradientes ou nas descontinuidades. Isto é estabelecido pelo teorema de Godunov, onde é mencionado, que esquemas numéricos lineares para resolver EDPs sem gerar novos extremos são, no máximo, de primeira ordem (Godunov, 1959). Para este fim, na seção 3.4 é apresentada uma forma para construir versões não lineares para os esquemas de alta ordem de acurácia, onde para alcançar o referido objetivo a inclinação  $\xi_i^n$  na Eq. (3.19) no estágio de reconstrução é substituída pela inclinação limitada  $\bar{\xi}_i^n$ , atendendo às restrições dadas pela Eq. (3.16).

### 3.4 Esquema limitador de declividade

A ideia básica por trás do conceito de limitadores é controlar o processo de geração de oscilações, *over and undershoots*, impedindo que os gradientes excedam certos limites ou mudem de sinal entre volumes de controle vizinhos (LeVeque, 2002). Desta forma, os esquemas não-monótonos podem ser “controlados” em cada intervalo de tempo e, dentro de cada célula, mantendo os gradientes dentro dos limites adequados. Diversas funções limitadoras de inclinação podem ser utilizadas (Hirsch, 2007), sendo que no presente trabalho é utilizada a função limitadora “min mod”, que é sugerido por Wang (2002), para a implementação de funções limitadoras tipo SVTVDM, SVTVBM, CVTVDM, CVTVBM. Este é um limitador de propósito geral que, embora seja mais difusivo e menos preciso do que outros limitadores, converge melhor. O limitador de inclinação tipo minmod, com dois parâmetros, é apresentado a seguir:

$$\bar{\xi}_i^n = \frac{1}{\Delta x} \min \text{mod}(\bar{S}_{w(i+1)}^n - \bar{S}_{w(i)}^n, \bar{S}_{w(i)}^n - \bar{S}_{w(i-1)}^n), \quad (3.22)$$

onde a função minmod é definida como:

$$\begin{aligned} \min \text{mod}(a, b) &= \begin{cases} a & \text{se } |a| < |b| \text{ e } ab > 0, \\ b & \text{se } |b| < |a| \text{ e } ab > 0, \\ 0 & \text{se } ab \leq 0; \end{cases} \\ &= \frac{1}{2} [\text{sign}(a) + \text{sign}(b)] \min(|a|, |b|). \end{aligned} \quad (3.23)$$

Este procedimento pode ser melhor explicado pela visualização de uma reconstrução linear para um caso 1D simples. A Fig. 3.3a ilustra uma solução típica utilizando-se uma reconstrução linear não limitada nos volumes de controle. Usando-se uma função limitadora as inclinações são reduzidas para evitar a formação de “extremos” ou oscilações

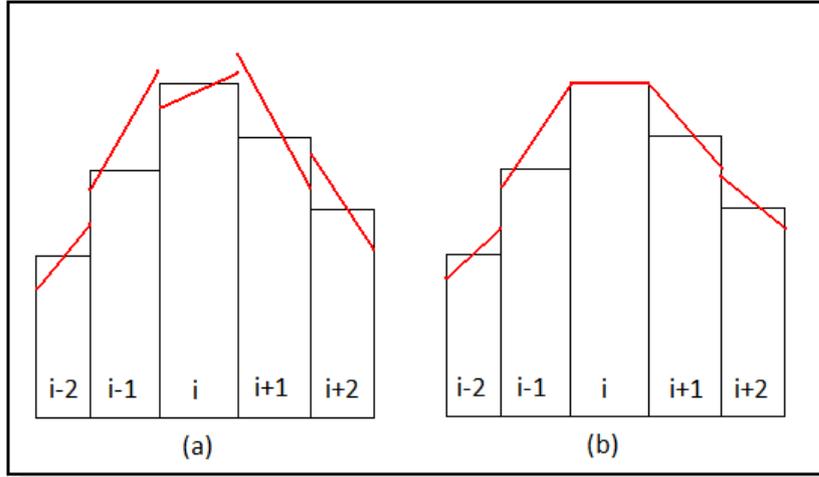


Figura 3.3: Reconstrução linear típica: (a) não limitada e (b) limitada.

espúrias. Isto é feito durante a reconstrução levando à solução ilustrada na Fig. 3.3b.

Um dos métodos de alta ordem, conhecido com o nome de SFVM ou *spectral finite volume method* será descrito nesta dissertação e aplicado ao tratamento do modelo do fluxo bifásico em reservatórios de petróleo nos capítulos subsequentes.

### 3.5 Discretização do termo difusivo

O modelo matemático unidimensional para o fluxo imiscível de água e óleo Eq. (2.41), desconsiderando o termo fonte pode ser reescrita como:

$$\frac{\partial S_w}{\partial t} + \frac{\partial}{\partial x} (f_{\text{adv}}(S_w) + f_{\text{diff}}(S_w)) = 0. \quad (3.24)$$

Levando em conta a natureza distinta dos termos advectivo e difusivo, as discretizações seguem caminhos separados. Isto significa que suas discretizações serão realizadas de forma independente e com distintos esquemas numéricos. No presente trabalho, e considerando o modelo matemático dado em Eq. (3.24), o termo advectivo é discretizado usando o SFVM a ser descrito no capítulo 4. O termo de capilaridade ou termo difusivo será aproximado utilizando o método de diferenças finitas centrado para os volumes de controle (CVFD). A integração no tempo é feita utilizando o método explícito de Runge-Kutta (RK) de ordem 3.

Com as definições prévias, o esquema “semi-discreto” pode ser escrito como (Cueto-Felgueroso, 2009):

$$\frac{dS_w}{dt} + \frac{1}{\Delta x_i} [(f_{\text{adv}}^n + f_{\text{diff}}^n)|_{x_{i+1/2}} - (f_{\text{adv}}^n + f_{\text{diff}}^n)|_{x_{i-1/2}}] = 0. \quad (3.25)$$

Rearranjando os termos da Eq. (3.25), temos:

$$\frac{dS_w}{dt} + \frac{1}{\Delta x_i} \left[ (f_{\text{adv}}^n |_{x_{i+1/2}} - f_{\text{adv}}^n |_{x_{i-1/2}}) + (f_{\text{diff}}^n |_{x_{i+1/2}} - f_{\text{diff}}^n |_{x_{i-1/2}}) \right] = 0. \quad (3.26)$$

Para calcular os fluxos difusivos  $f_{\text{diff}}^n |_{x_{i\pm 1/2}}$ , precisa-se aproximar a Eq. (2.43) nas interfaces numéricas  $x_{i\pm 1/2}$  de cada volume de controle, o que implica:

1. Interpolarmos a saturação  $S_w$  para as interfaces.
2. Aproximarmos a derivada espacial da saturação  $S'_w$ , também nas interfaces.

Uma vez que temos as saturações interpoladas nas interfaces, e utilizando-se a derivada “analítica”  $dp_c/dS_w$  do modelo de Brooks e Corey na Eq. (2.25) podemos avaliar os coeficientes de “difusão”  $h_w(S_w)$ , dados pela Eq. (2.37). Multiplicando pela derivada da saturação nas interfaces, é obtido o fluxo nas interfaces dado pela Eq. (2.43). A fim de aproximar a derivada das saturações nas interfaces, pode-se construir uma matriz de diferenciação. Assim dadas as saturações nos centros das células e nos contornos das referidas células, pode-se obter as derivadas nos pontos centrais através de um produto matriz-vetor. Nos pontos interiores do domínio,  $x_{i+1/2}, i = 1, \dots, N - 1$ , nós podemos utilizar diferenças centradas de ordem 2, da forma a seguir:

$$S'_{w(i+1/2)} = \frac{S_{w(i+1)} - S_{w(i)}}{\Delta x_i}, \quad (3.27)$$

e para a esquerda (LB) e direita (RB) do contorno utilizamos fórmulas de ordem 1,

$$S'_{w(1/2)} = \frac{S_{w1} - S_{w\text{LB}}}{\Delta x_i/2}, \quad S'_{w(N+1/2)} = \frac{S_{w\text{RB}} - S_{wN}}{\Delta x_i/2}, \quad (3.28)$$

onde  $\Delta x_i$  é o comprimento do volume de controle (VC).

Com os fluxos advectivos e difusivos calculados, pode-se avançar no tempo de acordo com a Eq. (3.26), utilizando um esquema explícito tipo RK. Este foi escolhido na procura de uma discretização temporal acurada e de uma faixa de estabilidade maior, e será descrito na continuação.

### 3.6 Discretização temporal

Na discretização temporal tem-se duas abordagens. Uma delas consiste em tratar a dimensão temporal como apenas uma outra dimensão “espacial”. Isto é possível, e foi considerado no passado (Zienkiewicz and Taylor, 1988). Mas esta abordagem não encontrou ampla aceitação, pois é computacionalmente injustificada porque implica em custo computacional desnecessário e proibitivo (Löhner, 2008). A segunda abordagem considera de forma separada a discretização espacial e a temporal. Em geral, realiza-se primeiro a discretização espacial do operador e o problema semi-discreto a ser resolvido é expresso

por um sistema de equações diferenciais ordinárias não lineares (EDO). Considerando a segunda abordagem a Eq. (3.26) pode ser escrita em forma compacta como:

$$\frac{dS_w}{dt} = R(S_w), \quad (3.29)$$

com  $S_w$  representando as incógnitas.

Abordagem para esquemas explícitos para a solução da Eq. (3.29) é feita tomando o  $R$  do lado direito da Eq. (3.29) em um momento conhecido e calculando a incógnita  $S_w$  em algum momento no futuro, com base nele. O caso mais simples é o esquema de Euler avançado, que é dado por:

$$S_w^{n+1} = S_w^n + \Delta t R(S_w^n). \quad (3.30)$$

Este esquema é apenas de primeira ordem. Uma generalização imediata que permite obter esquemas de ordem superior é dada pelo método explícito de RK (Hirsch, 2007; Lyra, 1994), que pode ser expresso como:

$$\begin{aligned} S_w^0 &= S_w^n, \\ &\vdots \\ S_w^{(m)} &= S_w^n + \eta_m \Delta t R^{(m+1)}(S_w^n), \quad m = 1 \dots s, \\ &\vdots \\ S_w^{n+1} &= S_w^{(s)}. \end{aligned}$$

Qualquer método de RK é definido pelo número de etapas "s" e os coeficientes "η". Estes coeficientes são escolhidos de acordo com as propriedades desejadas, tais como a quantidade de difusão artificial e ordem temporal de acurácia. As escolhas mais comuns são:

1. Esquema de uma-etapa (Euler avançado):  $\eta_1 = 1.0$
2. Esquema de duas-etapas:  $\eta_1 = 0.5, \quad \eta_2 = 1;$
3. Esquema de três-etapas  $\eta_1 = 0.6, \quad \eta_2 = 0.6, \quad \eta_3 = 1;$

As principais propriedades dos esquemas explícitos são:

- Permitir uma ordem arbitrária de acurácia temporal.
- Facilidade de implementação.
- Simplicidade na aplicação das condições de contorno.
- Existência de um  $\Delta t$  máximo ditado por questões de estabilidade, como indicado na Fig. 3.4. Onde observa-se o aumento da região de estabilidade ao incrementar a

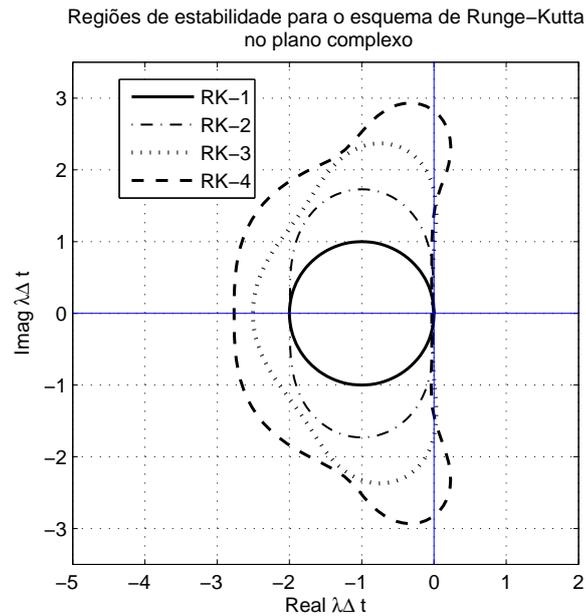


Figura 3.4: Regiões de estabilidade para o esquema de Runge-Kutta.

ordem de acurácia, ou seja o número de etapas do método (Trefethen, 2000; Hirsch, 2007).

O intervalo de tempo permissível  $\Delta t$  é limitado por restrições de estabilidade, tais como o chamado número de CFL (Courant-Friedrichs-Levy) (Hirsch, 2007). Para um sistema hiperbólico de equações diferenciais parciais lineares, o número de CFL é dado pela relação a seguir:

$$\text{CFL} = \frac{\Delta t \lambda_{\max}}{\Delta x}, \quad (3.31)$$

onde  $\Delta t$  é o intervalo de tempo,  $\Delta x$  é um tamanho característico da célula e  $\lambda_{\max}$  é o máximo autovalor da matriz jacobiana  $A = \frac{\partial f_{\text{adv}}}{\partial S_w}$ , onde  $f_{\text{adv}}$  é fluxo advectivo de  $S_w$ .

## Capítulo 4

# Método espectral dos volumes finitos

### 4.1 Considerações iniciais

Algoritmos numéricos para leis de conservação têm sido extensivamente pesquisados nas últimas três décadas. As formulações numéricas para lidar com leis de conservação hiperbólicas mais utilizadas basam-se no método de Godunov (1959) e, em geral, utilizam procedimentos como resolvedores de Riemann aproximados ou métodos do tipo *Flux/Vector-Splitting*, para melhorar a eficiência Liou (2000); Osher (1984); Roe (1981); van Leer (1982); Wang (1997). O capítulo anterior foi apresentado o método dos volumes finitos clássico (FVM). Este método tem muitas propriedades favoráveis, tais como flexibilidade para trabalhar com malhas quaisquer, disponibilidade de funções limitadoras de inclinação/fluxo “robustas” para garantir as propriedades TVD, além de apresentar a propriedade de conservação local. Ditas características fazem com que o método seja amplamente utilizado para a discretização espacial de equações governantes associadas a problemas físicos e da engenharia (Choi et al., 2004). Por outro lado o FVM apresenta algumas importantes deficiências para lidar com problemas onde a física e a geometria são complexas, e onde a ordem de acurácia maior que dois ( $k > 2$ ), é desejável (van den Abeele, 2009). O FVM de primeira ou segunda ordem de acurácia apresenta excessiva quantidade de erros numéricos, amplamente difusivos, embora também dispersivos, que só podem ser minimizados com o aumento do número de VC e, portanto, aumentando o custo computacional (Choi et al., 2004). A principal limitante do FVM é a disponibilidade de só um grau de liberdade por VC, ou seja a solução média. Portanto é necessário um conjunto de VC vizinhos para conseguir uma reconstrução polinomial de ordem maior que um ( $k > 1$ ). A disponibilidade do conjunto de VC vizinhos é complexa dada ao quase-aleatório arranjo de VC das malhas não estruturadas. A complexidade ainda é maior na tentativa de construir esquemas de alta ordem (Choi et al., 2004).

Diversos esquemas de alta ordem têm sido desenvolvidos, por exemplo, o esquema de alta ordem de volumes finitos  $k$ -exato, desenvolvido por Barth and Frederickson (1990), o esquema ENO (essentially non-oscillatory) desenvolvido por Abgrall (1994) e o esquema

WENO (weighted essentially non-oscillatory) desenvolvido por Friedrich (1998) e Hu and Shu (1999). Destacam-se ainda os algoritmos localmente conservativos e de alta ordem conhecidos como método de Galerkin descontínuo (DG) que foi desenvolvido por Cockburn and Shu (1989) e Cockburn et al. (1989, 1990), e outro esquema conservativo de alta ordem conhecido por método multidomínio espectral que foi desenvolvido por Kopriva (1991) e Kopriva and Kalias (1995).

No presente capítulo um método muito eficaz de alta-ordem de acurácia ( $k \geq 2$ ), para lidar com leis de conservação hiperbólicas, denominado método espectral dos volumes finitos ou SFVM (spectral finite volume method), que foi desenvolvido por Wang, Liu e colaboradores no início do século vinte um será discutido (Wang, 2002; Wang and Liu, 2002). A expressão “método espectral” pode possuir diferentes significados para diversas subáreas da matemática. Porém, no contexto deste trabalho, a dita expressão faz referência a um método numérico de alta acurácia para resolver PDE eficientemente, onde a solução numérica é expressa como uma expansão finita de um conjunto de funções de base polinomiais. Para a atualização da referida solução é utilizado um método tipo Godunov (1959), que tornou-se o estado da arte para lidar com leis de conservação. O SFVM pode ser visualizado como uma extensão do método tipo de Godunov para alta ordem, no qual o DOFs (degrees-of-freedom) é acrescentado na forma de sub-células, no interior de cada célula simples da malha primal ou VC. No SFVM cada VC é denominado SV (spectral volume) e cada sub-célula é referida como CV (control volume). No SFVM todos os SVs são subdivididos em forma geométrica similar e utilizando procedimentos analíticos, conseguindo desta maneira um estêncil de reconstrução único e pré-definido para todos os SVs. Com o objetivo de atualizar as incógnitas ou DOFs que são as soluções médias nas sub-células ou CVs, um procedimento de igual modo ao FVM é utilizado. Diversos estudos realizados no passado têm demonstrado a eficácia do SFVM para lidar com uma ampla variedade de aplicações na engenharia, e desta forma mostrando sua robustez (Kannan and Wang, 2012).

## 4.2 Método espectral dos volumes finitos unidimensional

Para analisar as características do SFVM, o esquema unidimensional será estudado a partir de agora. Por conseguinte é considerada a lei de conservação unidimensional a seguir, onde o termo fonte é desconsiderado:

$$\frac{\partial S_w(x, t)}{\partial t} + \nabla \cdot \vec{f}_{\text{adv}}(S_w(x, t)) = 0 \quad \text{em} \quad [a, b] \times [0, T], \quad (4.1)$$

com condição inicial  $S_w(x, 0) = S_{w(0)}(x)$ ,  $\forall x \in [a, b]$  e condições de contorno periódicas. Outros tipos de condições de contorno serão analisadas na seção 4.6. Aqui  $S_w(x, t)$  é a variável conservativa e  $\vec{f}_{\text{adv}}(S_w(x, t))$  representa o fluxo advectivo dado pela Eq. (2.42).

O domínio computacional  $\Omega \equiv a \leq x \leq b$  sobre o qual esta lei de conservação é válida é dividido em  $N_{SV}$  células espectrais,  $SV(\Omega_i)$ , com índice  $i : x_{i-1/2} \leq x \leq x_{i+1/2}$  de tal forma que  $x_{1/2} \equiv a$  e  $x_{N_{SV}+1/2} \equiv b$ . Para um esquema unidimensional de  $k$ -ésima ordem de acurácia, estas células  $SV$  são subdivididos em  $k$  volumes de controle,  $CV(\Omega_{i,j})$ , com índice  $j$  e contornos  $x_{i,j-1/2}$  e  $x_{i,j+1/2}$ . Na Fig. 4.1 a subdivisão do volume espectral  $SV$  em volumes de controle  $CV$  é apresentada para segunda ordem de acurácia.

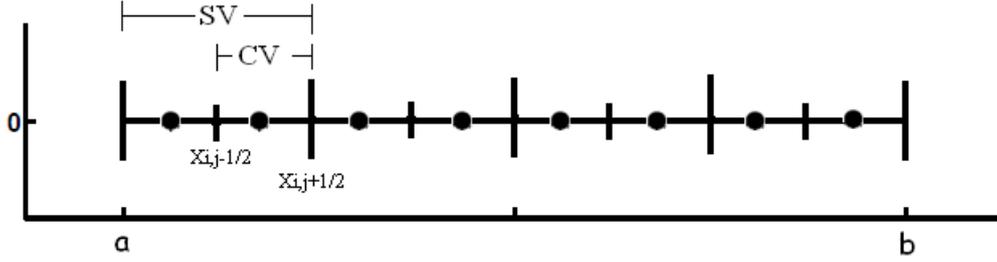


Figura 4.1: Domínio físico com 4 células espectrais  $SV$ , utilizando segunda ordem de acurácia,  $k = 2$ , com contornos  $x_{i,j-1/2}$  e  $x_{i,j+1/2}$  para a subcélula espectral  $CV$  e pontos solução ( $\bullet$ )  $\bar{S}_{w(i,j)}$ .

Integrando a Eq. (4.1) em cada  $CV(\Omega_{i,j})$  e aplicando o teorema da divergência de Green-Gauss, temos:

$$\int_{\Omega_{i,j}} \frac{\partial S_w(x,t)}{\partial t} dx + \int_{\partial\Omega_{i,j}} \vec{f}_{adv}(S_w(x,t)) \cdot d\vec{s} = 0. \quad (4.2)$$

Aplicando o teorema da média a Eq. (4.2), pode-se escrever da forma a seguir:

$$\frac{d\bar{S}_{w(i,j)}}{dt} = - \frac{\vec{f}_{adv}(S_w(i,j+1/2)) - \vec{f}_{adv}(S_w(i,j-1/2))}{x_{i,j+1/2} - x_{i,j-1/2}}, \quad (4.3)$$

onde  $\bar{S}_{w(i,j)}$  são as variáveis conservativas médias nos CVs. Estas são obtidos através de:

$$\bar{S}_{w(i,j)} = \frac{1}{x_{i,j+1/2} - x_{i,j-1/2}} \int_{x_{i,j-1/2}}^{x_{i,j+1/2}} S_w(x,t) dx. \quad (4.4)$$

Em cada  $SV$  a solução pode ser aproximada por um polinômio  $P_i^{SV}(x,t)$  de grau  $p$  (i.e.  $p = k - 1$ ), assim:

$$S_w(i)(x,t) \approx P_i^{SV}(x,t) \equiv \sum_{j=1}^{p+1} \bar{L}_{i,j}(x) \bar{S}_{w(i,j)}(t). \quad (4.5)$$

Na Eq. (4.5), as funções de base  $\bar{L}_{i,j}$  para o  $SV$  são definidas por

$$\frac{1}{x_{i,j+1/2} - x_{i,j-1/2}} \int_{x_{i,j-1/2}}^{x_{i,j+1/2}} \bar{L}_{i,k}(x) dx = \delta_{j,k}, \quad (4.6)$$

com  $\delta_{j,k}$  sendo a função delta de Kronecker. Agora, utilizando a solução polinomial dada na Eq. (4.5), os fluxos nos contornos dos CV podem ser aproximados e o lado direito da Eq. (4.3) pode ser avaliado. Na interface entre as duas células dos SVs, um resolvidor de Riemann Eq. 3.5 para  $f_{\text{adv}}$  é utilizado para lidar com a potencial descontinuidade na solução numérica, onde  $S_{wL}$  e  $S_{wR}$  representam os estados à esquerda e à direita das interfaces, respectivamente. Assim, a Eq. (4.3) pode ser escrita da forma a seguir:

$$\frac{d\bar{S}_{w(i,j)}}{dt} = - \frac{F_{(i,j+1/2)} - F_{(i,j-1/2)}}{x_{i,j+1/2} - x_{i,j-1/2}}, \quad (4.7)$$

onde  $F_{(i,j+1/2)}$  são os fluxos obtidos do resolvidor de Riemann. Deste modo, cada CV dentro de um SV é tratado independentemente, com o objetivo de atualizar a variável de estado média para o CV no próximo passo de tempo. Para o caso onde as variáveis reconstruídas nos contornos dos CV são contínuas. Isto é para funções simples, as quais não apresentam gradientes acentuados, e onde as funções limitadoras não são necessárias. O fluxo numérico nas interfaces internas torna-se um fluxo analítico, que é muito mais barato, que o fluxo numérico ou de Riemann. O fluxo analítico é da forma a seguir:

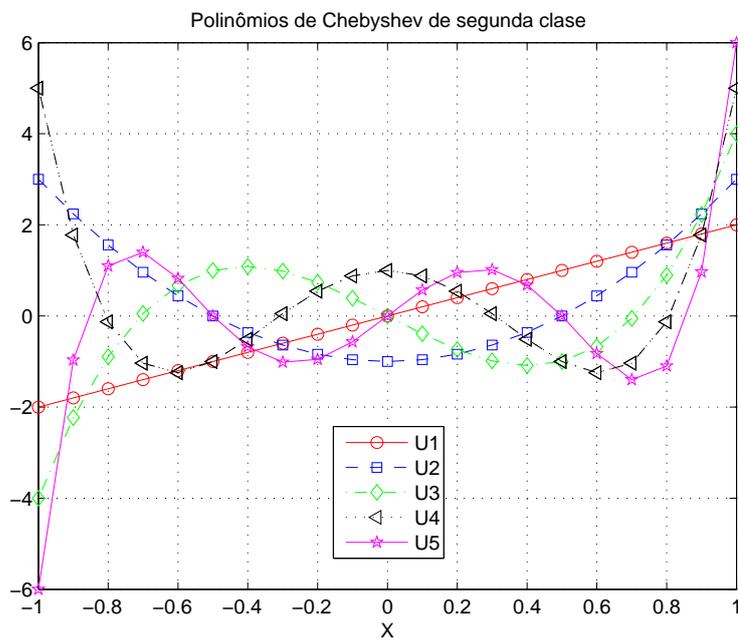
$$F_{(i,j-1/2)} = f_{\text{adv}(i,j-1/2)}. \quad (4.8)$$

No entanto, quando se introduz uma função limitadora para suprimir oscilações espúrias, os resolvidores de Riemann podem ser necessários nas interfaces entre CVs (Wang et al., 2004; Breviglieri et al., 2010). Neste ordem de ideias, quando o fluxo numérico é requerido, um primeiro passo é calcular a diferença entre as variáveis de estado à esquerda e à direita da face entre CVs. O caso a referida diferença seja zero, para todas as variáveis no interior do SV, o fluxo analítico é calculado. Caso contrário o fluxo numérico é avaliado, como será discutido na Sec. 4.7. A Eq. (4.7) é uma equação diferencial ordinária (EDO) e pode ser resolvida no tempo utilizando qualquer algoritmo para tais sistemas, por exemplo o esquema de RK.

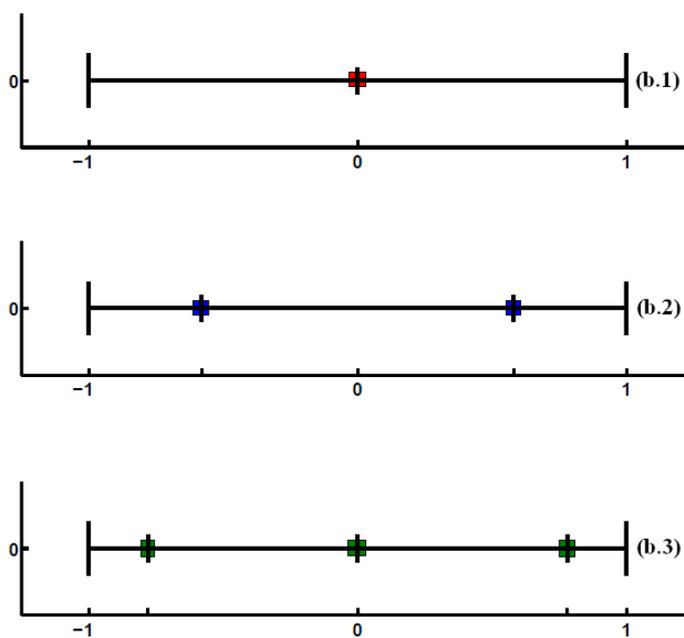
### 4.3 Definição das partições

O processo para obter as partições para a célula espectral no SFVM, que para o caso unidimensional é composto por segmentos de reta, é discutido a seguir. Uma célula padrão SV é utilizada para definir as partições, sendo mapeada no domínio computacional  $[-1,1]$  como se apresenta na Fig. 4.2.

Existem duas abordagens para fazer as partições. A primeira é uma subdivisão natural do SV em CVs uniformes. Porém deve-se tomar cuidado com esta partição devido ao comportamento fortemente oscilatório dos polinômios perto dos contornos da célula espec-



(a)



(b)

Figura 4.2: (a) Polinômios de Chebyshev até ordem 5. (b) Partições não uniformes do SV no domínio computacional gerados pelos zeros do polinômio de Chebyshev, para ordem de acurácia 2 (b.1), ordem 3 (b.2) e ordem 4 (b.3).

tral, para ordens de acurácia maiores que 3 ( $k > 3$ ). Note-se que para  $k = 6$  na Fig. 4.3b, as bases polinomiais perto dos contornos do SV são bastante oscilatórias. Os valores estabelecidos nesses pontos variam de -4 a 4, tornando as interpolações potencialmente oscilatórias em tais locais.

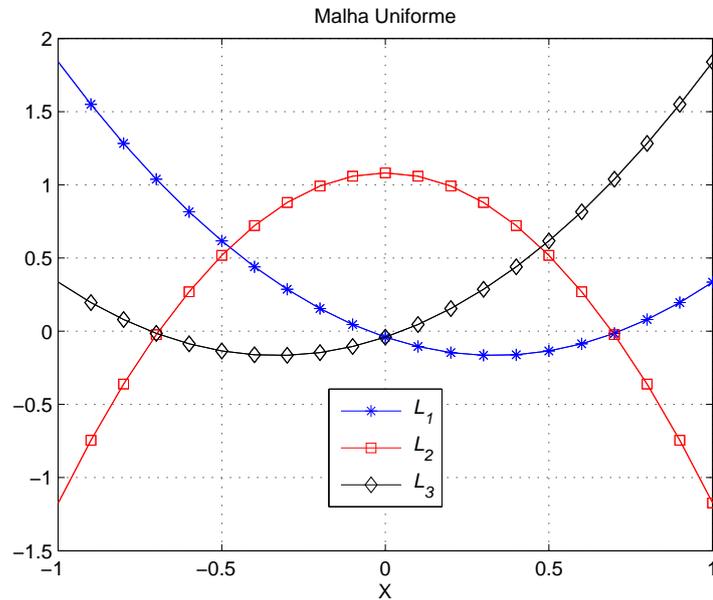
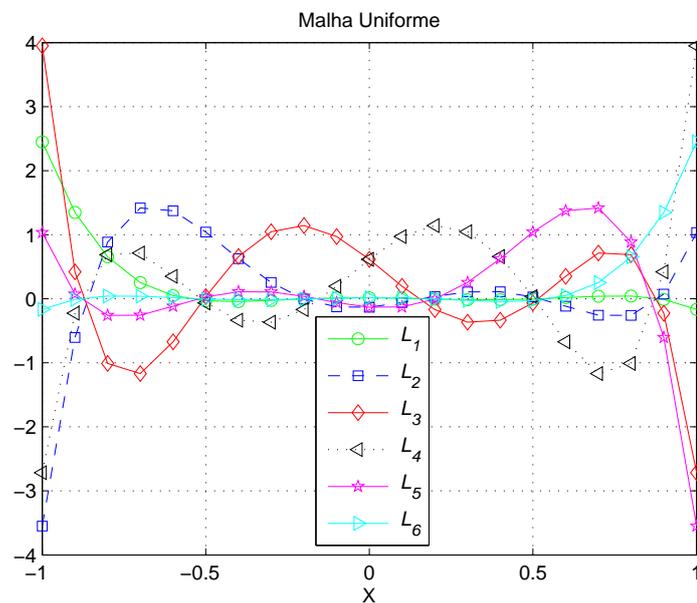
(a)  $k = 3$ (b)  $k = 6$ 

Figura 4.3: Bases polinomiais  $\{L\}$  com variável média no centro da célula utilizando CV equidistantes para: (a)  $k=3$  e (b)  $k=6$ .

Isto é conhecido como o fenômeno de Runge (Isaacson, 1994), que é um problema de oscilação nas bordas de um intervalo, que ocorre quando se utiliza interpolação polinomial com polinômios de ordem elevada. A continuação se apresenta uma maneira de minimizar este problema, utilizando os nós de Chebyshev ou pontos de Gauss-Lobatto, em vez de

nós equidistantes, como indicado na Fig. 4.4.

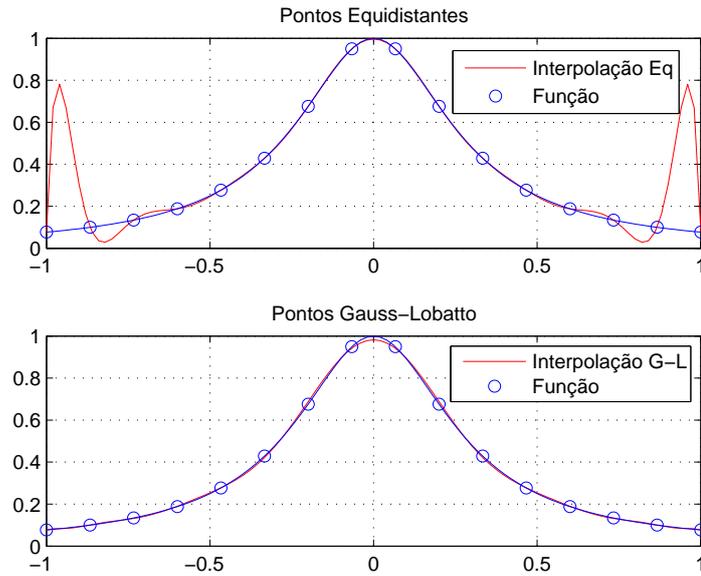


Figura 4.4: Surgimento do fenômeno de Runge ao interpolar a função:  $f(x) = \frac{1}{1+12x^2}$  utilizando 16 pontos de interpolação.

Se os pontos da malha no intervalo padrão do domínio computacional (DC)  $[-1, 1]$ , utilizados para subdividir o SV são os pontos da quadratura de Gauss-Lobatto, definidos a seguir:

$$x_{i,j+1/2}^{\text{DC}} = -\cos\left(\frac{j\pi}{k}\right), \quad j = 0, \dots, k, \quad (4.9)$$

os quais correspondem aos zeros do polinômio de Chebyshev de segunda classe, consegue-se uma reconstrução polinomial muito menos oscilatória. Note-se na Fig. 4.5b que as bases polinomiais estão limitadas entre -1.0 e 1.7, obtendo-se desta forma uma interpolação com menor oscilação nos extremos do DC. É claro, então, que o agrupamento dos pontos da malha perto dos contornos produz interpolações polinomiais limitadas.

O mapeamento de cada SV do DC para o domínio físico (DF) é feito utilizando a relação a seguir:

$$x_{i,j+1/2}^{\text{DF}} = a + \frac{\left(x_{i,j+1/2}^{\text{DC}} + 1\right)}{2} (b - a), \quad (4.10)$$

onde  $a$  e  $b$  são os extremos no intervalo do DF.

## 4.4 Reconstrução polinomial unidimensional

Dadas as variáveis de estado médias de  $S_w$  para todos os CVs em  $SV_i$ , Eq. (4.4), temos como objetivo construir um polinômio  $P_i^{\text{SV}}(x)$ , de grau no máximo  $k - 1$ , para  $SV_i$ , de

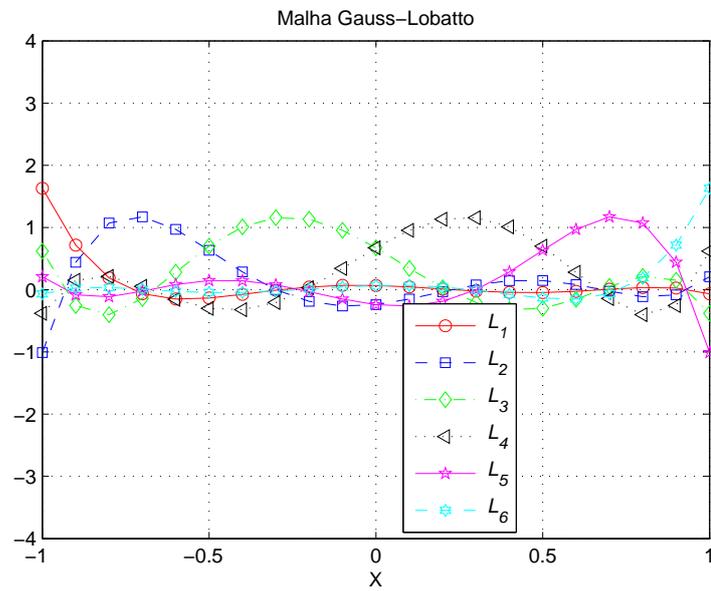
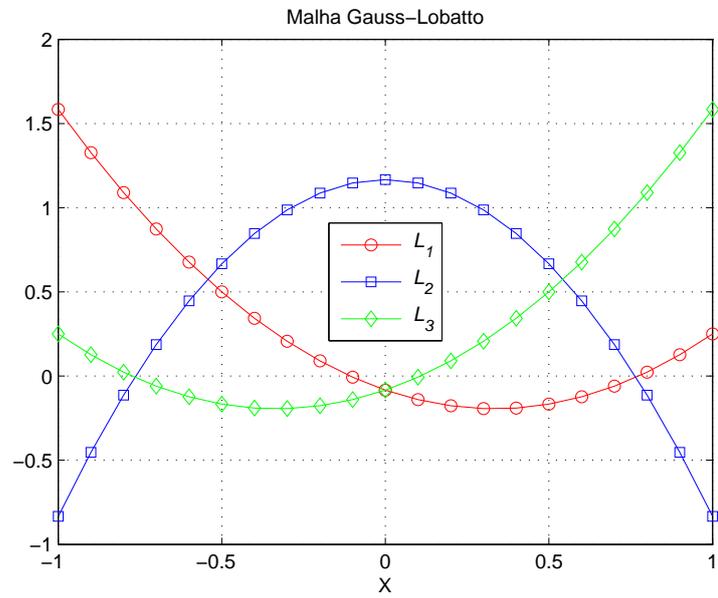


Figura 4.5: Bases polinomiais  $\{L\}$  com variável média no centro da célula utilizando CVs dados pelos pontos de quadratura de Gauss-Lobatto para (a)  $k=3$  e (b)  $k=6$ .

tal forma que este polinômio seja de  $k$ -ésima ordem de aproximação para a função  $S_w(x)$  no interior de  $SV_i$ , i.e.,

$$P_i^{\text{SV}}(x) = S_w(x) + O(h^k), \quad x \in SV_i, \quad i = 1, \dots, N. \quad (4.11)$$

Em particular a Eq. (4.11) fornece as aproximações para a função  $S_w(x)$  nos contornos dos CVs, da forma a seguir:

$$S_{w(i,j+1/2)} \equiv P_i^{\text{SV}}(x_{i,j+1/2}) = S_{w(i)}(x_{i,j+1/2}) + O(h^k), \quad j = 0, \dots, k \quad i = 1, \dots, N. \quad (4.12)$$

Esta reconstrução pode ser feita de muitas formas. Porém, aqui é utilizado o método apresentado por Shu (1998), no qual se considera a existência de um único polinômio de grau no máximo  $k - 1$ , de tal forma que a média em cada um dos CV em  $SV_i$  pode ser escrita como:

$$\bar{S}_{w(i,j)} = \frac{1}{h_{i,j}} \int_{x_{i,j-1/2}}^{x_{i,j+1/2}} P_i^{\text{SV}}(x) dx; \quad j = 1, \dots, k, \quad (4.13)$$

onde  $P_i^{\text{SV}}(x)$  é a aproximação de  $S_w(x)$  e  $h_{i,j} = x_{i,j+1/2} - x_{i,j-1/2}$  (ver Eq. 4.4). Resumindo, é preciso calcular a solução aproximada de  $S_w(x)$  nos contornos dos CV, para atualizar a variável de estado  $\bar{S}_w(x)$  no próximo nível de tempo. Uma vez que o mapeamento das variáveis médias  $\bar{S}_{w(i,j)}$  para os contornos dos CV é resultado de uma combinação linear, existem coeficientes  $c_{jl}$  os quais dependem do ordem de acurácia  $k$  e do tamanho da malha  $h_{i,j}$  em  $SV_i$ , mas não da própria função  $S_w$  (Shu, 1998), de tal forma que:

$$S_{w(i,j+1/2)} = \sum_{l=1}^k c_{jl} \bar{S}_{w(i,l)}, \quad j = 0, \dots, k. \quad (4.14)$$

Com a expressão anterior, Eq. (4.14), é possível aproximar o valor de  $S_w$  nos contornos dos CVs de forma simples. A continuação é discutido o procedimento para calcular as constantes de interpolação  $c_{jl}$ .

## 4.5 Constantes de interpolação polinomial

Considerando a função primitiva para  $S_w(x)$ , dada por:

$$\tilde{S}_w(x) \equiv \int_{x_{i,1/2}}^x S_w(\xi) d(\xi), \quad x \in SV_i. \quad (4.15)$$

Ao avaliar em  $x = x_{i,j+1/2}$  a Eq. (4.15) pode ser expressa exatamente pela média de  $S_w(x)$  das células dos CVs nos contornos do volume de controle para um  $SV_i$ , como se apresenta a seguir:

$$\tilde{S}_w(x_{i,j+1/2}) = \sum_{l=1}^j \int_{x_{i,l-1/2}}^{x_{i,l+1/2}} S_w(\xi) d\xi = \sum_{l=1}^j \bar{S}_{w(i,l)} h_{i,l}, \quad \text{para } j = 1, \dots, k. \quad (4.16)$$

Por definição, a Eq. (4.15), quando  $j = 0$  é:

$$\tilde{S}_w(x_{i,1/2}) = 0. \quad (4.17)$$

Resumindo, acontece que conhecendo as variáveis médias nas células para os CV, é possível calcular a função primitiva  $\tilde{S}_w(x)$  exatamente nos contornos dos CV. Denotando o único polinômio de grau no máximo  $k$ , o qual interpola  $\tilde{S}_w(x_{i,j+1/2})$  nos  $k+1$  pontos a seguir:

$$x_{i,1/2}, \dots, x_{i,k+1/2}, \quad (4.18)$$

por  $\varphi_i(x)$  e a derivada deste polinômio por  $P_i(x)$ , i.e.,

$$P_i(x) \equiv \varphi_i'(x), \quad (4.19)$$

então se verifica que:

$$\begin{aligned} \frac{1}{h_{i,j}} \int_{x_{i,j-1/2}}^{x_{i,j+1/2}} P_i(x) dx &= \frac{1}{h_{i,j}} \int_{x_{i,j-1/2}}^{x_{i,j+1/2}} \varphi_i'(x) dx = \frac{1}{h_{i,j}} [\varphi(x_{i,j+1/2}) - \varphi(x_{i,j-1/2})], \\ &= \frac{1}{h_{i,j}} [\tilde{S}_w(x_{i,j+1/2}) - \tilde{S}_w(x_{i,j-1/2})], \\ &= \frac{1}{h_{i,j}} \left( \int_{x_{i,1/2}}^{x_{i,j+1/2}} S_w(x) dx - \int_{x_{i,1/2}}^{x_{i,j-1/2}} S_w(x) dx \right), \\ &= \frac{1}{h_{i,j}} \int_{x_{i,j-1/2}}^{x_{i,j+1/2}} S_w(x) dx = \bar{S}_{w(i,j)}, \quad j = 1, \dots, k. \end{aligned} \quad (4.20)$$

Isto implica que  $P_i(x)$  é o polinômio procurado. Pela teoria de aproximação padrão tem-se:

$$\varphi_i'(x) = \tilde{S}'_w(x) + O(h^k), \quad x \in SV_i; \quad (4.21)$$

i.e.,

$$P_i(x) = S_w(x) + O(h^k), \quad x \in SV_i. \quad (4.22)$$

A Eq. (4.22), apresenta o requerimento de acurácia desejado. Para obter as constantes

$\{c_{jl}\}$  da Eq. (4.14), é utilizado o formalismo de interpolação polinomial de Lagrange, onde

$$\wp_i(x) = \sum_{r=0}^k \tilde{S}_{w(i,r+1/2)} \varphi_{i,r+1/2}(x) \quad x \in SV_i. \quad (4.23)$$

Onde,  $\tilde{S}_{w(i,r+1/2)} = \tilde{S}_w(x_{i,r+1/2})$  e  $\varphi_{i,r+1/2}(x)$  são os coeficientes de interpolação de Lagrange, da forma a seguir:

$$\varphi_{i,r+1/2}(x) = \prod_{l=0, l \neq r}^k \frac{x - x_{i,l+1/2}}{x_{i,r+1/2} - x_{i,l+1/2}}. \quad (4.24)$$

Introduzindo:

$$\chi(x) = (x - x_{i,1/2})(x - x_{i,3/2}) \dots (x - x_{i,k+1/2}), \quad (4.25)$$

pode-se escrever a Eq. (4.24) como:

$$\varphi_{i,r+1/2} = \frac{\chi(x)}{(x - x_{i,r+1/2}) \chi'(x_{i,r+1/2})}. \quad (4.26)$$

Para a reconstrução baseada nas variáveis média na célula, o polinômio de ordem  $k-1$  procurado, considerando as Eqs. (4.17) e (4.19), a Eq. (4.23) pode ser escrita da forma a seguir:

$$P_i(x) = \wp'_i(x) = \sum_{r=0}^k \tilde{S}_{w(i,r+1/2)} \varphi'_{i,r+1/2}(x) = \sum_{r=1}^k \tilde{S}_{w(i,r+1/2)} \varphi'_{i,r+1/2}(x), \quad (4.27)$$

onde da Eq. (4.26) temos:

$$\begin{aligned} \varphi'_{i,r+1/2}(x) &= \frac{\chi'(x)}{(x - x_{i,r+1/2}) \chi'(x_{i,r+1/2})} - \frac{\chi(x)}{(x - x_{i,r+1/2})^2 \chi'(x_{i,r+1/2})}, \\ &= \frac{1}{\chi'(x_{i,r+1/2})} \sum_{l=0, l \neq r}^k \frac{\chi(x)}{(x - x_{i,r+1/2})(x - x_{i,l+1/2})}. \end{aligned} \quad (4.28)$$

Substituindo a Eq. (4.16) na Eq. (4.27), é obtido o polinômio de ordem  $k-1$  baseado nas variáveis média nas células da forma a seguir:

$$P_i(x) = \sum_{r=1}^k \sum_{l=1}^r \bar{S}_{w(i,l)} h_{i,l} \varphi'_{i,r+1/2}(x) = \sum_{l=1}^k \left( \sum_{r=l}^k \varphi'_{i,r+1/2}(x) h_{i,l} \right) \bar{S}_{w(i,l)}. \quad (4.29)$$

Utilizando as Equações (4.28) e (4.29), pode-se escrever a forma geral para as funções de base polinomiais da forma a seguir:

$$\begin{aligned}
L_l(x) &= h_{i,l} \sum_{r=l}^k \varphi'_{i,r+1/2}(x) = h_{i,l} \sum_{r=l}^k \frac{1}{\chi'(x_{i,r+1/2})} \sum_{m=0, m \neq r}^k \frac{\chi(x)}{(x - x_{i,r+1/2})(x - x_{i,m+1/2})} \\
&= h_{i,l} \sum_{r=l}^k \frac{1}{\chi'(x_{i,r+1/2})} \sum_{\substack{m=0 \\ m \neq r}}^k \prod_{\substack{q=0 \\ q \neq r, m}}^k (x - x_{i,q+1/2}).
\end{aligned} \tag{4.30}$$

Logo,

$$P_i(x) = \sum_{l=1}^k L_l(x) \bar{S}_w(i,l). \tag{4.31}$$

Portanto os coeficientes  $\{c_{jl}\}$  são da forma a seguir:

$$c_{jl} = L_l(x_{i,j+1/2}) = h_{i,l} \sum_{r=l}^k \frac{1}{\chi'(x_{i,r+1/2})} \sum_{\substack{m=0 \\ m \neq r}}^k \prod_{\substack{q=0 \\ q \neq r, m}}^k (x_{i,j+1/2} - x_{i,q+1/2}). \tag{4.32}$$

A Eq. (4.32) pode ser utilizada para calcular as constantes de interpolação para qualquer distribuição de pontos i.e., subdivisão de CV no SV. Se os CVs são de igual tamanho a Eq. (4.32) pode ser escrita da forma a seguir:

$$c_{jl} = \sum_{r=l}^k \frac{1}{\prod_{q=0, q \neq r}^k (r - q)} \sum_{\substack{m=0 \\ m \neq r}}^k \prod_{\substack{q=0 \\ q \neq r, m}}^k (j - q). \tag{4.33}$$

Nas Tabelas (4.1) e (4.2) são apresentadas as constantes de interpolação utilizando a Eq. (4.32) e Eq. (4.33) respectivamente. As constantes de interpolação  $c_{jl}$  não mudam ao mapear do domínio computacional para o domínio físico para quaisquer SV. Isto se deve ao fato de que só dependem da ordem de acurácia desejada e da relação do tamanho dos CVs. Esta é uma clara vantagem do SFVM quando comparado com outros métodos de alta ordem, porque as constantes podem ser previamente computadas analiticamente e só ser utilizadas no momento do cálculo das variáveis reconstruídas. Outra forma de ver como é feito o cálculo das constantes  $c_{jl}$  é avaliando as funções base  $L_l$  em sua forma explícita nos pontos de quadratura do domínio computacional para uma determinada partição.

A seguir apresenta-se como exemplo as funções base para ordem de acurácia  $k = l = 3$ :

Tabela 4.1: Coeficientes de reconstrução para CVs não uniformes utilizando a distribuição dos pontos de Gauss-Lobatto Eq. (4.32).

k	j	l=1	l=2	l=3	l=4
1	0	1			
	1	1			
2	0	3/2	-1/2		
	1	1/2	1/2		
	2	-1/2	3/2		
3	0	19/12	-5/6	1/4	
	1	1/2	2/3	-1/6	
	2	-1/6	2/3	1/2	
	3	1/4	-5/6	19/12	
4	0	1801/1118	-1053/1121	1786/3761	-204/1393
	1	1/2	985/1393	-408/1393	102/1189
	2	-204/1393	373/577	373/577	-204/1393
	3	102/1189	-408/1393	985/1393	1/2
	4	-204/1393	1786/3761	-1053/1121	1801/1118

Tabela 4.2: Coeficientes de reconstrução para CVs uniformes utilizando a distribuição dada na Eq. (4.33).

k	j	l=1	l=2	l=3	l=4
1	0	1			
	1	1			
2	0	3/2	-1/2		
	1	1/2	1/2		
	2	-1/2	3/2		
3	0	11/6	-7/6	1/3	
	1	1/3	5/6	-1/6	
	2	-1/6	5/6	1/3	
	3	1/3	-7/6	11/6	
4	0	25/12	-23/12	13/12	-1/4
	1	1/4	13/12	-5/12	1/12
	2	-1/12	7/12	7/12	-1/12
	3	1/12	-5/12	13/12	1/4
	4	-1/4	13/12	-23/12	25/12

$$\begin{aligned}
L_1(x) &= -\frac{2x - 3x^2 + \xi^2}{2 + 2\xi}, \\
L_2(x) &= \frac{1 - 3x^2 + \xi + \xi^2}{1 + \xi}, \\
L_3(x) &= \frac{2x + 3x^2 - \xi^2}{2 + 2\xi},
\end{aligned} \tag{4.34}$$

onde  $x = x_{i,j+1/2}^{\text{DC}}$  pertence ao domínio computacional  $[-1,1]$  e  $\xi$  é um parâmetro livre que depende do tipo de partição (Liu, 2013). Para o caso analisado as funções base polinomiais Eq. (4.34) são avaliadas nos pontos de quadratura gerados pela distribuição de Gauss-Lobatto, Eq. (4.9), com  $\xi = 1/2$ , i.e.,

$$x_{i,j+1/2}^{\text{DC}} = [-1 \quad -1/2 \quad 1/2 \quad 1]. \tag{4.35}$$

A distribuição de Gauss-Lobatto foi adotada neste trabalho devido ao fato de que ela apresenta baixa oscilação perto dos extremos do domínio computacional e, desta forma, conseguimos minimizar o surgimento de oscilações espúrias associadas a esquemas de ordem de acurácia maior a um. Outro motivo é que a distribuição de Gauss-Lobatto é utilizada na maioria dos testes que foram tomados como referência para verificar nosso trabalho.

Por outro lado, existem outros tipos de partições como por exemplo a denominada tangente hiperbólica,

$$x_{i,j+1/2} = \frac{\tanh\left(\frac{2\mu j}{k} - \mu\right)}{\tanh(\mu)}, \quad j = 0, \dots, k, \tag{4.36}$$

onde o parâmetro livre  $\mu$  controla o grau de agrupamento dos pontos de quadratura perto dos contornos da célula espectral. Para mais detalhes, ver Wang (2002). Finalmente, procurando uma otimização do comportamento das partições na solução, van den Abeele et al. (2007b) propõem a distribuição fornecida na Tabela 4.3.

Tabela 4.3: Posições otimizadas para os contornos dos CVs no domínio computacional.

$k$	$\xi_1$	$\xi_2$	$\xi_3$	$\xi_4$	$\xi_5$
2	-1,00	0,00	1,00		
3	-1,00	-0,58	+0,58	+1,00	
4	-1,00	-0,78	0,00	+0,78	+1,00

## 4.6 Condições de contorno e iniciais

As condições de contorno desempenham um papel muito importante em todos os problemas físicos. Dado um conjunto de equações governantes válidas, em um determinado domínio, a solução para um problema físico em estado estacionário é definida inteiramente pelas condições de contorno. No caso de problemas físicos transientes, a solução inicial e as condições de contorno são relevantes. Como consequência, impor adequadamente as condições de contorno e iniciais é uma necessidade para obter simulações numéricas acuradas (van den Abeele, 2009).

Para alcançar este objetivo, um valor para a face no contorno  $S_{\text{bnd}}$  é imposto. Isto significa que a solução numérica é forçada a ter exatamente o mesmo valor no contorno como o que é prescrito pela condição de fronteira, o que corresponde a uma imposição forte. Além disso no SFVM, soluções em um SV “fantasma”, i.e.,  $\bar{S}_{w(\text{gho})}$ , são introduzidas na face à esquerda do contorno de entrada  $SV_{\text{bnd}}$ , ver Fig. 4.6. Isto para auxiliar na implementação das funções limitadoras, como será apresentado na Sec. 4.7. Um tipo básico de condição de contorno, conhecida com o nome de condição de contorno de Dirichlet, será discutido a seguir.

### 4.6.1 Condição de contorno de Dirichlet

A condição de contorno de Dirichlet, que é utilizada nos testes do problema de Buckley-Leverett na Sec. 5.3.1, impõe diretamente um valor para a saturação  $S_w$  no contorno de entrada “bnd” como indicado na Fig 4.6 da forma a seguir:

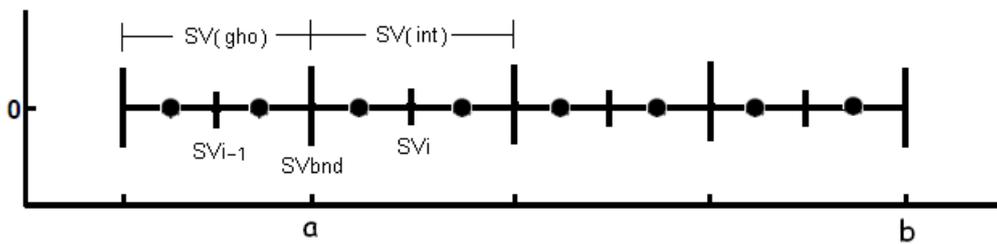


Figura 4.6: Esquema do domínio físico, com uma célula fantasma  $SV(\text{gho})$  e três células espectrais, incluindo a célula interna  $SV(\text{int})$  e o contorno  $SV_{\text{bnd}}$ .

$$S_{w(\text{bnd})} = S_w(0, t) = 1 - S_{or}, \quad (4.37)$$

desta forma o fluxo numérico no ponto de quadratura “bnd” pode ser calculado utilizando o fluxo analítico, como se apresenta a seguir:

$$F_{\text{bnd}} = f_{\text{adv}}(S_{w(\text{bnd})}). \quad (4.38)$$

Para alguns testes apresentados neste trabalho foram utilizadas condições de contorno periódicas. Detalhes a respeito de outras formas para lidar com condições de contorno no contexto do SFVM podem ser encontrados em (van den Abeele, 2009; Breviglieri et al., 2010).

### 4.6.2 Condições iniciais

Para o tratamento da condição inicial no SFVM é necessário tomar cuidado na forma em que é implementada esta condição quando o ordem de acurácia do SFVM é maior que 2 ( $k > 2$ ). Acontece que para orden igual a 2, o teorema do valor medio garante que a posição do ponto de colocação corresponda ao centro do CV, onde a condição inicial é avaliada para inicializar a solução numérica. Caso a ordem for maior que 2 isto não é verdade e se adotarmos a condição inicial erroneamente como no caso de ordem 2 correta, isto produz erros e queda na taxa de convergência esperada. A inicialização da solução numérica para qualquer ordem do SFVM deve utilizar a média exata no CV, a qual é dada pela integral da condição inicial como se apresenta a seguir (Sourek, 2013):

$$S(x, 0) = f(x), \quad (4.39)$$

$$\bar{S}(x, 0) = \frac{1}{h_{i,j}} \int_{x_{i,j-1/2}}^{x_{i,j+1/2}} f(x) dx, \quad (4.40)$$

o tratamento da condição inicial na solução analítica deve ser feito da mesma forma.

## 4.7 Funções limitadoras

O fenômeno de Gibbs associado com esquemas de alta ordem na presença de discontinuidades provoca a perda de monotonicidade da solução de leis de conservação hiperbólicas. Godunov (1959) foi o primeiro a demonstrar que não existem esquemas numéricos lineares de segunda ordem, ou de mais alta ordem, que garantem monotonicidade. Portanto, esquemas monotônicos de alta ordem, se existirem, devem ser não-lineares (Godunov, 1959).

Há duas diferentes abordagens de funções limitadoras para alcançar monotonicidade. Uma delas é adotada pelo algoritmo de FCT (Flux Corrected Transport) de Boris and Book (1973), onde se limita o fluxo anti-difusivo e, assim, a solução no próximo nível de tempo permanece monótona. A outra abordagem, originalmente desenvolvido por van Leer (1974, 1979), é a de limitar a reconstrução de modo que a solução reconstruída seja monótona. Neste trabalho vai ser utilizada a segunda aproximação, com dois tipos de

limitadores, TVD e TVB, que se encontram formulados em termos da notação para os CVs e os SVs (Wang, 2002).

O primeiro limitador de declividade a ser abordado é denominado CVTVDM e atua a nível dos CVs. Deste modo, dadas as variáveis médias para todos os CVs  $\{\bar{S}_{w(i,j)}\}$ , no interior dos SV<sub>*i*</sub>, existe um polinômio de reconstrução de ordem ao menos  $k - 1$ , o qual satisfaz a relação a seguir:

$$\int_{x_{i,j-1/2}}^{x_{i,j+1/2}} P_i^{SV}(x) dx = \bar{S}_{w(i,j)} h_{i,j}, \quad j = 1, \dots, k. \quad (4.41)$$

Lembrando que o polinômio de reconstrução é utilizado para atualizar as variáveis de estado nos contornos dos CVs. Por sua vez estes são usadas para atualizar a solução no próximo nível de tempo, como se apresenta a seguir;

$$\frac{d\bar{S}_{w(i,j)}}{dt} h_{i,j} + (f_{\text{adv}(i,j+1/2)} - f_{\text{adv}(i,j-1/2)}) = 0. \quad (4.42)$$

onde

$$f_{\text{adv}(i,j+1/2)} = F(\hat{S}_{w(i,j+1/2)}^-, \hat{S}_{w(i,j+1/2)}^+), \quad (4.43)$$

sendo  $F$  o resolvidor de Riemann a ser utilizado em todas as interfaces dos CVs, além das interfaces dos SVs. Sendo  $\hat{S}_{w(i,j+1/2)}^-$  e  $\hat{S}_{w(i,j+1/2)}^+$  as variáveis reconstruídas limitadas, as quais garantem que o método numérico tem a propriedade “TVD” ou “TVB”. Para calcular as variáveis reconstruídas limitadas, levamos em consideração que  $S_{w(i,j+1/2)} = S_{w(i,j+1/2)}^- = S_{w(i,j+1/2)}^+$  no interior dos SVs, então podemos escrever os operadores diferenças avançadas e diferenças atrasadas, em termos das variáveis não limitadas como:

$$\Delta S_{w(i,j)}^+ = S_{w(i,j+1/2)}^- - \bar{S}_{w(i,j)}, \quad (4.44)$$

$$\Delta S_{w(i,j+1)}^- = \bar{S}_{w(i,j+1)} - S_{w(i,j+1/2)}^+, \quad (4.45)$$

conforme se apresenta na Fig 4.7, o tratamento nos contornos do SV é da forma:

$$S_{w(i-1,k+1/2)} = S_{w(i,1/2)}^- = \bar{S}_{w(i-1,k)} + \Delta S_{w(i-1,k)}^+, \quad (4.46)$$

$$S_{w(i,1/2)} = S_{w(i,1/2)}^+ = \bar{S}_{w(i,1)} - \Delta S_{w(i,1)}^-. \quad (4.47)$$

Nas equações anteriores os superescritos (-) e (+) são usados para indicar o lado esquerdo e o lado direito da interface numérica, respectivamente, e  $k$  é o ordem de acurácia. Com as considerações anteriores as variáveis limitadas podem ser escritas como:

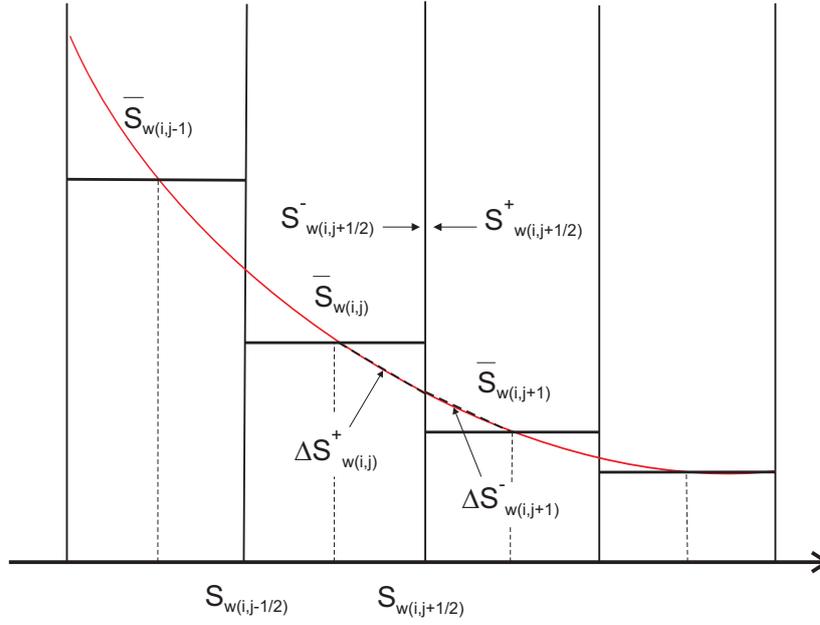


Figura 4.7: Reconstrução polinomial por partes para o SFVM.

$$\widehat{S}_{w(i,j+1/2)}^- = \bar{S}_{w(i,j)} + \Delta \widehat{S}_{w(i,j)}^+, \quad (4.48)$$

$$\widehat{S}_{w(i,j+1/2)}^+ = \bar{S}_{w(i,j+1)} - \Delta \widehat{S}_{w(i,j)}^-, \quad (4.49)$$

onde  $\Delta \widehat{S}_{w(i,j)}^-$  e  $\Delta \widehat{S}_{w(i,j)}^+$  utilizam as funções limitadoras a seguir:

#### Função limitadora tipo CTVDM

$$\Delta \widehat{S}_{w(i,j)}^- = \min \text{ mod } \left( \Delta S_{w(i,j)}^-, \bar{S}_{w(i,j+1)} - \bar{S}_{w(i,j)}, \bar{S}_{w(i,j)} - \bar{S}_{w(i,j-1)} \right), \quad (4.50)$$

$$\Delta \widehat{S}_{w(i,j)}^+ = \min \text{ mod } \left( \Delta S_{w(i,j)}^+, \bar{S}_{w(i,j+1)} - \bar{S}_{w(i,j)}, \bar{S}_{w(i,j)} - \bar{S}_{w(i,j-1)} \right), \quad (4.51)$$

onde a função min mod com três parâmetros é definida como:

$$\min \text{ mod}(x, y, z) = \begin{cases} s \min(|a|, |b|, |c|), & \text{se } s = \text{sign}(a) = \text{sign}(b) = \text{sign}(c) \\ 0 & \text{caso contrário.} \end{cases} \quad (4.52)$$

### Função limitadora tipo CVTVBM

$$\Delta \widehat{S}_{w(i,j)}^- \begin{cases} \Delta S_{w(i,j)}^- & \text{se } |S_{w(i,j)}^-| \leq Mh_{i,j}^2, \\ \min \text{ mod } (\Delta S_{w(i,j)}^-, \bar{S}_{w(i,j+1)} - \bar{S}_{w(i,j)}, \bar{S}_{w(i,j)} - \bar{S}_{w(i,j-1)}) & \text{caso contrário.} \end{cases} \quad (4.53)$$

$$\Delta \widehat{S}_{w(i,j)}^+ \begin{cases} \Delta S_{w(i,j)}^+ & \text{se } |S_{w(i,j)}^+| \leq Mh_{i,j}^2, \\ \min \text{ mod } (\Delta S_{w(i,j)}^+, \bar{S}_{w(i,j+1)} - \bar{S}_{w(i,j)}, \bar{S}_{w(i,j)} - \bar{S}_{w(i,j-1)}) & \text{caso contrário.} \end{cases} \quad (4.54)$$

O número  $M$  é dependente da segunda derivada da solução e é recomendado escolher o valor máximo absoluto da segunda derivada da solução para o domínio computacional (Wang, 2002).

O segundo limitador é conhecido com o nome de SVTVDM. Portanto, dado o vetor das variáveis solução  $\{\bar{S}_{w(i,j)}\}$ , calcula-se o vetor das variáveis solução limitadas  $\{\bar{U}_{w(i,j)}\}$ , de tal forma que:

$$\{\bar{U}_{w(i,j)}\} = \text{SVTVDM}(\{\bar{S}_{w(i,j)}\}). \quad (4.55)$$

A seguir são apresentadas as etapas para obter o limitador SVTVDM:

- Primeiro calcular as variáveis médias nas células para os SV, de acordo com:

$$\bar{S}_{w(i)} = \frac{\sum_{j=1}^k \bar{S}_{w(i,j)} h_{i,j}}{\sum_{j=1}^k h_{i,j}}, \quad i = 1, \dots, N, \quad (4.56)$$

onde  $h_{i,j}$  é o comprimento do CV,  $k$  é a ordem de acurácia do SFVM, e  $N$  é o número de SVs.

- Cálculo da solução limitada nos contornos dos SV utilizando as soluções reconstruídas nos contornos,

$$S_{w(i,1/2)}^+ = \bar{S}_{w(i)} - \min \text{ mod } [\bar{S}_{w(i)} - P_i^{\text{SV}}(x_{i,1/2}), \bar{S}_{w(i)} - \bar{S}_{w(i-1)}, \bar{S}_{w(i+1)} - \bar{S}_{w(i)}], \quad (4.57)$$

$$S_{w(i,k+1/2)}^- = \bar{S}_{w(i)} + \min \text{ mod } [P_i^{\text{SV}}(x_{i,k+1/2}) - \bar{S}_{w(i)}, \bar{S}_{w(i)} - \bar{S}_{w(i-1)}, \bar{S}_{w(i+1)} - \bar{S}_{w(i)}], \quad (4.58)$$

onde  $P_i^{\text{SV}}(x)$  é o polinômio interpolador.

- Agora, se  $S_{w(i,1/2)}^+ = P_i^{\text{SV}}(x_{i,1/2})$  e  $S_{w(i,k+1/2)}^- = P_i^{\text{SV}}(x_{i,k+1/2})$ , então:

$$\bar{U}_{w(i,j)} = \bar{S}_{w(i,j)}, \quad j = 1, \dots, k, \quad (4.59)$$

caso contrário uma distribuição linear é assumida para  $\text{SV}_i$ , i.e.,

$$S_{w(i)}(x) = \bar{S}_{w(i)} + \lambda(x - x_i). \quad (4.60)$$

A inclinação  $\lambda$  é dada por:

$$\lambda = \min \text{ mod} \left[ \frac{2(\bar{S}_{w(i)} - \bar{S}_{w(i-1)})}{h_i}, \frac{2(\bar{S}_{w(i+1)} - \bar{S}_{w(i)})}{h_i} \right]. \quad (4.61)$$

Com a distribuição linear, Eq. (4.60), as variáveis médias na células para os CV podem ser computadas de acordo com:

$$\bar{U}_{w(i,j)}(x) = \bar{S}_{w(i)} + \lambda(x_{i,j} - x_i). \quad (4.62)$$

Similarmente, pode-se definir o limitador SVTVBM, alterando as funções limitadoras das Eq. (4.57) e Eq. (4.58) da forma a seguir:

$$S_{w(i,1/2)}^+ = \begin{cases} \bar{S}_{w(i)} - P_i^{\text{SV}}(x_{i,1/2}) & \text{se } |\bar{S}_{w(i)} - P_i^{\text{SV}}(x_{i,1/2})| \leq Mh_i^2, \\ \bar{S}_{w(i)} - \min \text{ mod} [\bar{S}_{w(i)} - P_i(x_{i,1/2}), \bar{S}_{w(i)} - \bar{S}_{w(i-1)}], & \\ \bar{S}_{w(i+1)} - \bar{S}_{w(i)} & \text{caso contrário.} \end{cases} \quad (4.63)$$

$$S_{w(i,k+1/2)}^- = \begin{cases} P_i^{\text{SV}}(x_{i,k+1/2}) - \bar{S}_{w(i)} & \text{se } |\bar{S}_{w(i)} - P_i^{\text{SV}}(x_{i,k+1/2})| \leq Mh_i^2, \\ \bar{S}_{w(i)} + \min \text{ mod} [P_i^{\text{SV}}(x_{i,k+1/2}) - \bar{S}_{w(i)}, \bar{S}_{w(i)} - \bar{S}_{w(i-1)}], & \\ \bar{S}_{w(i+1)} - \bar{S}_{w(i)} & \text{caso contrário.} \end{cases} \quad (4.64)$$

A desvantagem da função limitadora tipo “TVD” é que reduz a acurácia do método, na presença de descontinuidades, mesmo nos pontos extremos de soluções suaves. Este problema é minimizado utilizando funções limitadoras tipo “TVB”.

## 4.8 Avaliação de acurácia dos métodos numéricos

Para quantificar o erro é preciso escolher uma norma. O conjunto padrão de normas mais comumente usadas na comunidade CFD são as normas  $p$ , i.e.,

$$\|E\|_p = \left( \Delta x \sum_{i=-\infty}^{\infty} |E_i|^p \right)^{1/p}, \quad (4.65)$$

onde  $E$  representa a função aproximação do erro ou a diferença entre a solução numérica e a solução exata, isto é,  $E = (\text{Variável}_{\text{numérica}} - \text{Variável}_{\text{exata}})$ . Note-se que o termo  $\Delta x$  é muito importante para se obter a escala certa e ordem de acurácia quando a malha é refinada. O método é dito ser de ordem  $k$  se:

$$\|E\|_p = O(\Delta x^k), \quad (4.66)$$

quando  $\Delta x \rightarrow 0$ . Idealmente é desejável obter numericamente a taxa de convergência teórica quando a malha é refinada (Hirsch, 2007).

Na obtenção da taxa de convergência utilizou-se a norma  $L_1$  e a norma máxima  $L_\infty$ , ou norma  $\infty$ , para a medida do erro, como se apresenta a seguir:

$$\|E\|_1 = \left( \Delta x \sum_{i=-\infty}^{\infty} |E_i| \right), \quad (4.67)$$

$$\|E\|_\infty = \max_{-\infty < i < \infty} |E_i|. \quad (4.68)$$

Assim, o erro numérico do SVFM, como uma função do espaçamento da malha, pode ser escrita como:

$$\text{erro} \propto \Delta x^k. \quad (4.69)$$

Ao tomar o logaritmo em ambos lados desta equação, ela pode ser escrita como:

$$\log(\text{erro}) \propto k \log(\Delta x). \quad (4.70)$$

Assim, tomando-se duas malhas 1 e 2, temos:

$$k \propto \frac{\log\left(\frac{\text{erro } 1}{\text{erro } 2}\right)}{\log\left(\frac{\Delta x 1}{\Delta x 2}\right)}, \quad (4.71)$$

ou, alternativamente, levando em conta o número de graus de liberdade, DOFs, tem-se:

$$k \propto \frac{\log\left(\frac{\text{erro } 1}{\text{erro } 2}\right)}{\log\left(\frac{\text{DOFs } 2}{\text{DOFs } 1}\right)}. \quad (4.72)$$

## 4.9 Algoritmo geral

As etapas do SFVM para dar solução à equações do modelo matemático que regem o escoamento bifásico de água-óleo em reservatórios de petróleo podem ser resumidas como:

1. A partir de um domínio  $[a,b]$ , a malha primal é construída pela subdivisão do domínio físico em o número  $N$  de SV desejados.
2. Subdivisão dos SVs em CVs, segundo o ordem de acurácia  $k$ , utilizando a Eq. (4.10) para fazer o mapeamento do DC ao DF.
3. Pré-computar os coeficientes de interpolação polinomial para o tipo malha a ser usada. Utilizar a Eq. (4.32) ou Tab. 4.1.

4. Calcular o passo de tempo, de acordo com a condição CFL, o comprimento  $h_{i,j}$  do CV de menor tamanho e a função fluxo Eq. (2.42), da forma a seguir:

$$\Delta t = \frac{\text{CFL}}{\frac{|df_{\text{adv}}/dS_w|}{\Delta x} + \frac{h_w}{\Delta x^2}}. \quad (4.73)$$

5. Calcular a solução inicial  $S_{w0}$ , de acordo com as Eqs. (4.39) e (4.40).
6. Utilização da função FFN ( $\bar{S}_w$ ) para calcular os fluxos numéricos, como se apresenta a seguir:
- Cálculo das variáveis reconstruídas nas interfaces numéricas para cada CV, Eq. (4.14).
  - Cálculo das variáveis reconstruídas limitadas, usando a função limitadora de inclinação (ver Subsec. 4.7).
  - Cálculo do fluxo numérico utilizando os resolvedores de Riemann aproximados (ver Subsec. 3.1.2) nas interfaces entre SVs, e fluxo analítico nas interfaces internas do CV. Se for o caso de que a função limitadora tornou descontínua a variável reconstruída nos contornos dos CVs, o fluxo analítico deve ser substituído pelo fluxo numérico também nas interfaces internas do CV.
7. Avanço no tempo  $n$ -loop via o método explícito de Runge-Kutta de ordem 3.
- Cálculo da solução (etapa 1) usando a solução inicial ( $S_{w0}$ ):
    - Cálculo dos fluxos numéricos usando a função FFN ( $S_{w0}$ ).
    - Cálculo da solução ( $\bar{S}_{w1}$ ) via fórmula conservativa Eq. (4.7).
  - Cálculo da solução (etapa 2) usando a solução ( $\bar{S}_{w1}$ )
    - Cálculo dos fluxos numéricos usando a função FFN ( $\bar{S}_{w1}$ ).
    - Cálculo da solução ( $S_{w2}$ ) via fórmula conservativa Eq. (4.7).
  - Cálculo da solução (etapa 3) usando a solução ( $\bar{S}_{w2}$ )
    - Cálculo dos fluxos numéricos usando a função FFN ( $\bar{S}_{w2}$ ).
    - Cálculo da solução ( $\bar{S}_{w3}$ ) via fórmula conservativa Eq. (4.7).
  - Atualização de solução  $S_{w0} = \bar{S}_{w3}$ , para ser utilizada no próximo nível de tempo  $t = n * \Delta t$ .
  - Fim do loop quando o tempo final de simulação é igual a  $t$ .
8. Cálculo de erros (ver subsec. 4.8) e apresentação de resultados em forma gráfica.

# Capítulo 5

## Aplicações

### 5.1 Estudo da acurácia utilizando a equação da onda linear

#### 5.1.1 Propagação da onda senoidal

Neste exemplo vamos utilizar a equação linear (2.1), no domínio computacional  $[-1,1]$  com condição inicial:

$$S(x, 0) = \sin(\pi x), \quad (5.1)$$

e condições de contorno periódicas nas extremidades do domínio. Para atingir a taxa de convergência esperada a solução numérica para o SFVM deve ser inicializada utilizando a média exata no  $CV$ , a qual é dada pela integral da Eq. (5.1), como se apresenta a seguir:

$$\bar{S}(x, 0) = \frac{1}{h_{i,j}} \int_{x_{i,j-1/2}}^{x_{i,j+1/2}} \sin(\pi x) dx. \quad (5.2)$$

O tratamento da solução analítica deve ser feito de forma similar. Por outro lado, um esquema de integração temporal de ordem 3, tipo TVD Runge-Kutta, foi utilizado, com um intervalo de tempo  $\Delta t = 10^{-4}$ , com o objetivo de conseguir um erro de discretização praticamente não dependente da discretização temporal (Breviglieri et al., 2010; Wang, 2002). Neste teste foi utilizado uma velocidade,  $a = 1$  (van den Abeele et al., 2007b), e o resolvidor de Riemann tipo Roe. Na Tabela 5.1, mostram-se as normas  $L_1$  e  $L_\infty$  do erro produzido com SFVM, utilizando CVs equidistantes para um tempo  $t = 1$ . Aqui, o DOFs, ou seja, o número de SV por o número de CV é calculado da forma a seguir:

$$\text{DOF} = \text{SV} * \text{CV}. \quad (5.3)$$

Como pode-se ver na Tabela 5.1 o SFVM de ordem 2 e 3 com pontos equidistantes se comportam corretamente e atingem a ordem de acurácia esperada em malhas de baixa

Tabela 5.1: Avaliação da acurácia do esquema 1-D SFVM, para a equação da onda, utilizando CV uniformes.

k	$\Delta x$	DOFs	$L_\infty$ erro	$L_\infty$ ordem	$L_1$ erro	$L_1$ ordem
2	1.00e-1	20	5.34e-2	-	3.29e-2	-
	5.00e-2	40	1.41e-2	1,92	8.72e-3	1,92
	2.50e-2	80	3.56e-3	1,99	2.24e-3	1,96
	1.25e-2	160	8.94e-4	1,99	5.65e-4	1,99
	6.25e-3	320	2.24e-4	2,00	1.42e-4	1,99
	3.13e-3	640	5.59e-5	2,00	3.55e-5	2,00
3	6.67e-2	30	4.12e-3	-	2.40e-3	-
	3.33e-2	60	5.31e-4	2,96	3.08e-4	2,96
	1.67e-2	120	6.66e-5	3,00	3.90e-5	2,98
	8.33e-3	240	8.34e-6	3,00	4.90e-6	2,99
	4.16e-3	480	1.04e-6	3,00	6.14e-7	3,00
	2.08e-3	960	1.30e-7	3,00	7.69e-8	3,00
4	1.00e-1	20	3.24e-3	-	1.64e-3	-
	5.00e-2	40	1.91e-4	4,08	1.13e-4	3,85
	2.50e-2	80	1.47e-5	3,70	7.04e-4	4,01
	1.25e-2	160	8.44e-7	4,12	4.30e-7	4,03
	6.25e-3	320	5.39e-8	3,97	2.71e-8	4,00
	3.13e-3	640	3.79e-9	3,83	1.70e-9	3,99
5	1.00e-1	20	1.27e-3	-	4.42e-4	-
	5.00e-2	40	7.55e-5	4,07	2.19e-5	4,33
	2.50e-2	80	8.15e-6	3,21	3.98e-6	2,46
	1.25e-2	160	1.06e-5	-0,20	4.58e-6	-0,38
	6.25e-3	320	4.61e-4	-5,29	1.80e-4	-5,43

densidade. O desempenho do método para ordem  $k = 4$  ainda é próximo do esperado, porém, a taxa ou ordem tem comportamento oscilatório (quedas e ascensões), ou seja, não se comporta exatamente como “esperado”, conforme podemos observar. A ordem 5 de acurácia pode nunca ser atingida porque, quando a malha é refinada, se apresenta um aumento na norma  $L_\infty$  e na norma  $L_1$  e conseqüentemente é obtido uma taxa de convergência negativa. Isto pode acontecer devido a que a interpolação lagrangiana é muito oscilatória, quando o grau do polinômio interpolador atinge  $p = 3$  ou mais (Wang, 2002). Resumindo, acontece que quando a malha é de baixa densidade, o método é capaz de atingir o ordem de acurácia desejada, porém quando a malha é refinada, se apresenta um aumento das normas  $L_1$  e  $L_\infty$ . Isto acontece devido a algumas oscilações locais desenvolvidas com a distribuição dos CV equidistantes (Wang, 2002), ver Sec. 4.3.

A fim de observarmos o comportamento oscilatório local do polinômio interpolador danificando a solução numérica, na Fig. 5.1 apresentamos a solução obtida com o SFVM de ordem  $k = 5$ , comparado com a solução analítica. Levando em consideração que as oscilações locais apresentadas na Fig. 5.1 são produzidas somente pela discretização espacial, no teste seguinte são utilizados os pontos de Gauss-Lobatto (Eq. 4.9) para subdividir os SVs. Os outros parâmetros permanecem iguais. Na Tabela 5.2 são apresentadas as normas dos erros  $L_1$  e  $L_\infty$ , para um tempo final  $t = 1$ .

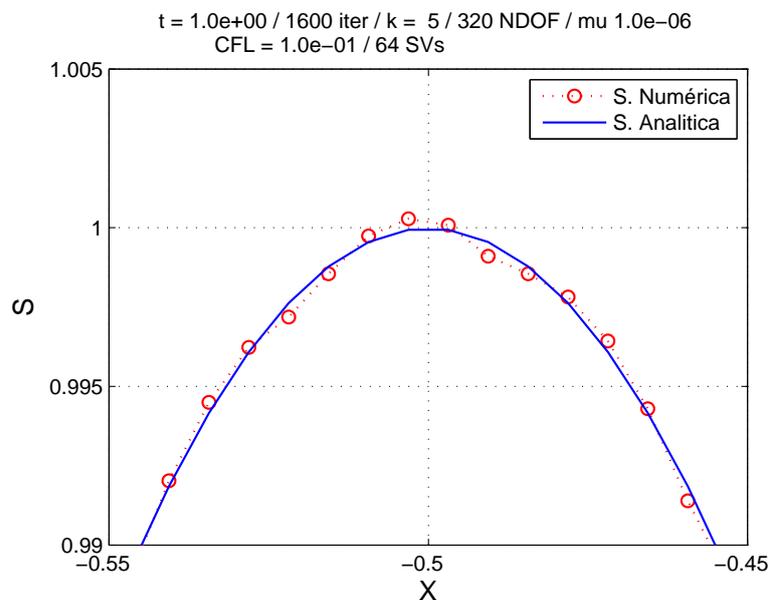


Figura 5.1: Detalhe da solução exata e numérica obtida utilizando o método SFVM de ordem 5 para 64 SVs com CVs uniformes.

Neste exemplo, fica claro que o comportamento do SFVM para ordens de acurácia  $k = 3, 4, 5, 6$ , utilizando a distribuição de Gauss-Lobatto para gerar as partições dos SVs, apresentou uma melhoria expressiva na acurácia e na convergência com respeito ao teste para o SFVM utilizando CVs equidistantes (ver Fig. 5.2).

Com o objetivo de verificar a acurácia espectral do SFVM, um refinamento tipo  $p$ , como o utilizado no contexto do FEM, é realizada. Neste estudo o número de SVs, é

Tabela 5.2: Avaliação da acurácia do 1-D SFVM, para a equação da onda, utilizando CV não uniformes gerados pelos pontos de quadratura de Gauss-Lobatto.

k	$\Delta x$	DOFs	$L_\infty$ erro	$L_\infty$ ordem	$L_1$ erro	$L_1$ ordem
3	6.67e-2	30	2.58e-3	-	1.07e-3	-
	3.33e-2	60	3.45e-4	2,90	1.36e-4	2,97
	1.67e-2	120	4.46e-5	2,95	1.73e-5	2,97
	8.33e-3	240	5.67e-6	2,98	2.18e-6	2,99
	1.25e-2	480	7.14e-7	2,99	2.74e-7	2,99
4	1.00e-1	20	2.23e-3	-	6.77e-4	-
	5.00e-2	40	1.53e-4	3,86	4.61e-5	3,88
	2.50e-2	80	9.52e-6	4,00	2.95e-6	3,97
	1.25e-2	160	6.00e-7	3,99	1.86e-7	3,99
	6.25e-3	320	3.75e-8	4,00	1.17e-8	3,99
	3.13e-3	640	7.3e-10	4,00	2.35e-9	4,00
5	1.00e-1	20	5.50e-4	-	1.57e-4	-
	5.00e-2	40	1.95e-5	4,82	5.11e-6	4,94
	2.50e-2	80	6.24e-7	4,96	1.67e-7	4,94
	1.25e-2	160	2.02e-8	4,95	5.35e-9	4,96
	6.25e-3	320	6.2e-10	5,02	1.7e-10	4,96
6	6.67e-2	30	1.31e-5	-	2.96e-6	-
	3.33e-2	60	4.61e-8	6,20	1.78e-7	6,00
	1.67e-2	120	7.4e-10	5,94	2.89e-9	5,97
	8.33e-3	240	4.2e-11	6,12	1.2e-11	5,90

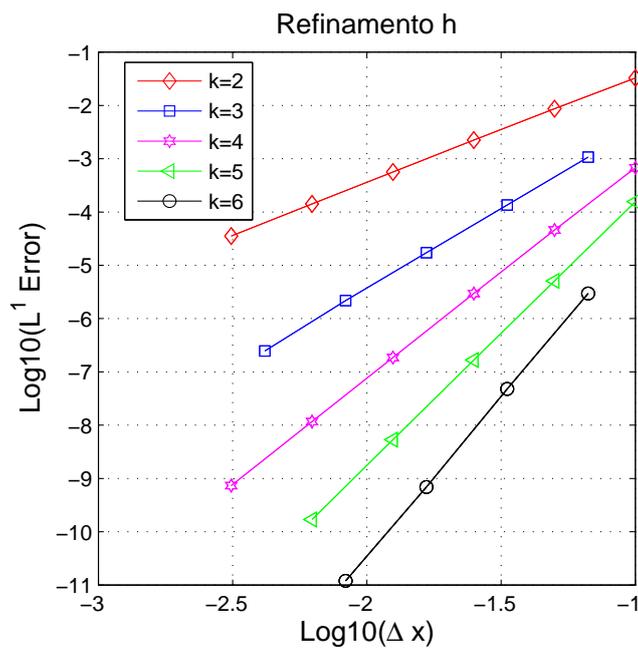


Figura 5.2: Taxa de convergência demonstrando a acurácia espectral para o refinamento h para a equação de onda linear.

mantido fixo, enquanto o grau do polinômio interpolador é aumentado no interior do SV. Como é apresentado na Fig. 5.3, observe que o logaritmo do erro  $L_1$  decresce quase linearmente com respeito à ordem de acurácia.

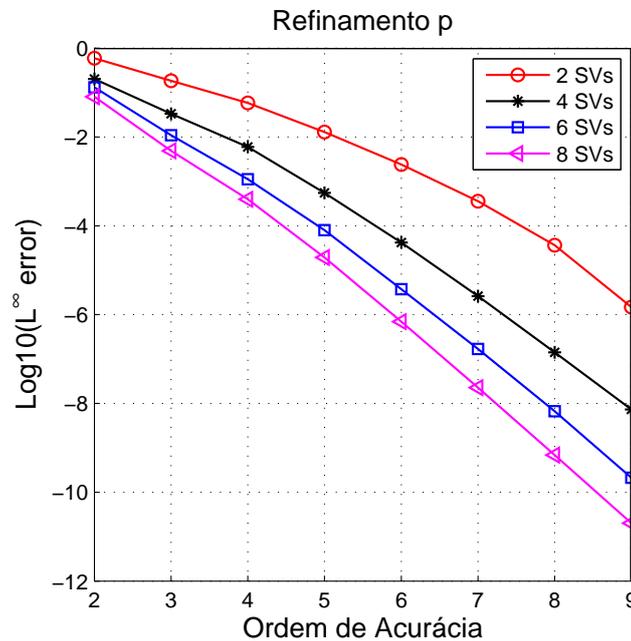


Figura 5.3: Taxa de convergência demonstrando a acurácia espectral com o refinamento  $p$ , para a equação de onda linear.

### 5.1.2 Propagação do pulso Gaussiano

A seguir é feita a simulação para um pulso Gaussiano com largura média de 0.05 e condição inicial dada por:

$$S(x, 0) = \exp \left[ - \left( \frac{x - 0.5}{0.05} \right)^2 \right], \quad (5.4)$$

com condições de contorno periódicas. Esta simulação foi feita com o SFVM de ordem  $k = 1, 2, 3$  e  $4$  com CFL= 0,5; 0,3; 0,18 e 0,12 respectivamente, como é sugerido por Zhang and Shu (2005), na procura do limite de estabilidade ótimo para as diferentes ordens. O tempo de simulação é de  $t=1,0$ ; foram utilizados 60 SVs e velocidade  $a = 1$ . As partições dos SVs foram feitas utilizando uma distribuição de pontos otimizada, como é apresentado na Tab. 4.3. Os resultados são apresentados na Fig. 5.4. Pode-se observar que o esquema de ordem 1 e 2 fornecem uma solução com excesso de difusão numérica. A simulação de segunda ordem mantém a forma da condição inicial, porém mostra difusividade e comportamento oscilatório, o qual esta relacionado com as propriedades de dispersão e difusão do método. Para mais detalhes, ver van den Abeele et al. (2007a) e van den Abeele (2009). As simulações de terceira e quarta ordem produzem boas soluções, ou seja, a solução numérica aproxima-se da solução semi-analítica e não surgem oscilações

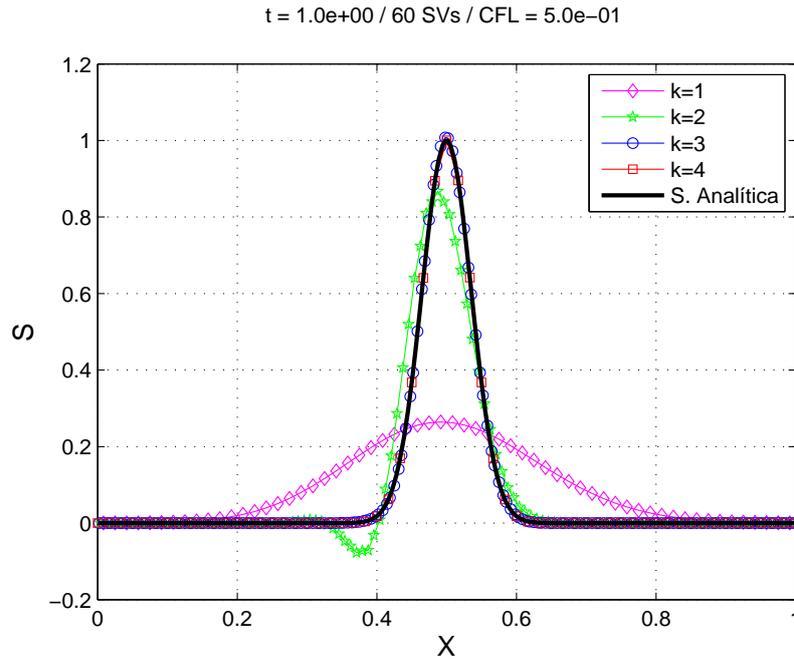


Figura 5.4: Simulação do pulso Gaussiano utilizando SFVM de ordem  $k = 1, 2, 3$  e  $4$  no tempo  $t=1.0$ , sem função limitadora.

espúrias, como se apresenta na Fig. 5.4.

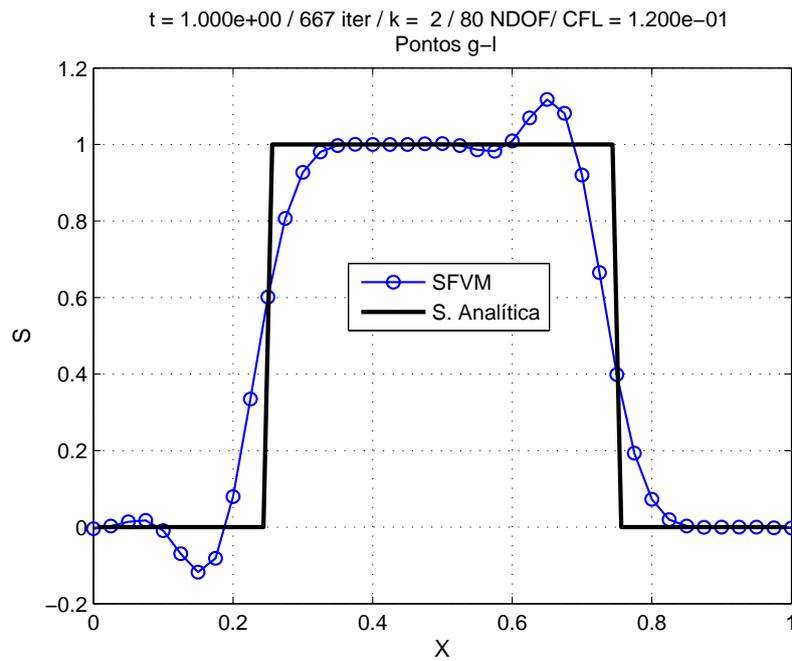
### 5.1.3 Propagação da onda quadrada

No teste subsequente é utilizada uma onda quadrada que se propaga no domínio  $[0,1]$ ,

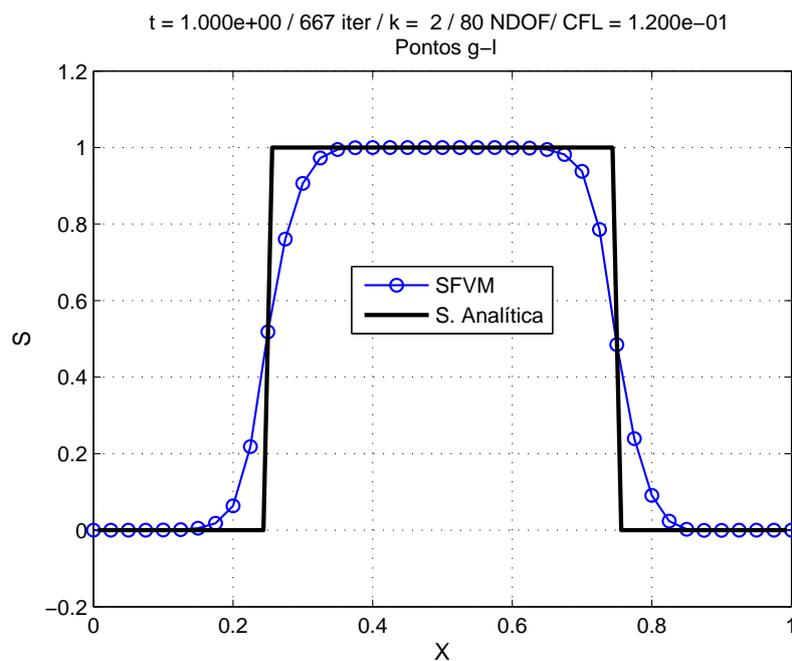
$$S(x, 0) = \begin{cases} 1, & \frac{1}{4} \leq x \leq \frac{3}{4}, \\ 0, & \text{caso contrário,} \end{cases} \quad (5.5)$$

com velocidade constante  $a = 1$  e condições de contorno periódicas. Neste teste foi utilizado o SFVM de ordem de acurácia  $k = 2$ , com 40 volumes espectrais e volumes de controle gerados pelos pontos de quadratura de Gauss-Lobatto para fazer as partições do SV, além do resolvidor de Riemann de Roe. As simulações foram feitas com e sem função limitadora, para um tempo final  $t = 1$ , utilizando o esquema de Runge Kutta de ordem 3, para a discretização temporal com um intervalo de tempo  $\Delta t = 10^{-4}$ . Na Fig. 5.5a pode-se observar as oscilações perto das discontinuidades ou gradientes acentuados denominadas fenômeno de “Gibbs”, as quais se apresentam em formulações numéricas de ordem de acurácia maior que um ( $k > 1$ ), como neste caso (Godunov, 1959).

Para resolver o problema das oscilações na solução numérica, é introduzido um termo não linear na formulação, através de uma função limitadora tipo SVTVDM (ver Sec. 4.7). Na figura 5.5b mostra-se a solução utilizando a função limitadora que atua controlando o gradiente da variável reconstruída nos contornos dos SVs. Desta forma, esta função diminui ou suprime as oscilações espúrias na solução perto dos gradientes acentuados.



(a)



(b)

Figura 5.5: Simulação de uma onda quadrada feita com o método SFVM para um tempo final  $t = 1$ : (a) sem função limitadora. (b) Utilizando o limitador SVTVDM.

## 5.2 Teste para equação não linear de Burgers

Neste teste é estudado a equação não linear de Burgers (2.5), no domínio  $[-1,1]$ , com condições de contorno periódicas e condição inicial:

$$S(x, 0) = 1 + \frac{1}{2} \sin(\pi x). \quad (5.6)$$

Para este teste foi utilizado o resolvidor de Riemman de Roe, volumes de controle gerados utilizando a distribuição de Gauss-Lobatto, velocidade constante  $a = 1$ , e um esquema de discretização temporal tipo Runge Kutta de ordem 3, com passo de tempo  $\Delta t = 10^{-4}$ . A solução exata é suave até um tempo  $t = 2/\pi$ . A partir deste instante de tempo, tem-se então a formação de uma onda de choque. O primeiro teste é feito no tempo  $t = 0.3$ , onde a solução apresenta comportamento suave. Aqui o SFVM é analisado para diferentes ordens de acurácia e os resultados para as normas do erro  $L_1$  e  $L_\infty$  são mostrados na Tabela 5.3, junto com a ordem de acurácia numérica. Em geral observa-se que a ordem de acurácia esperada é atingida.

Com o objetivo de verificar a acurácia espectral e o desempenho computacional, outro teste é apresentado na Fig. 5.6, na qual a solução numérica do método SFVM de ordem 2 com 12 DOFs é graficada junto com a solução numérica para ordem 4 com igual número de graus de liberdade ou igual número de incógnitas por solucionar. Neste problema, não é utilizada a função limitadora, isto é devido a que para o tempo final  $t = 0.3$  a solução é ainda suave e não apresenta ondas de choque. Observa-se neste teste que a solução para ordem  $k = 4$  apresenta melhor comportamento, aproximando-se da solução semi-analítica.

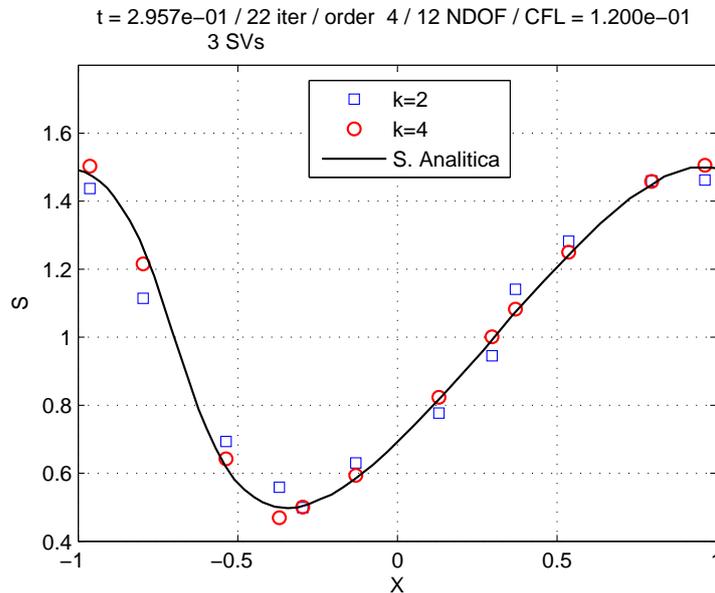


Figura 5.6: Soluções numéricas para a equação do Burgers no tempo  $t=0.3$  através do SFVM do ordem 2, com 12 DOFs, graficada junto com a solução numérica para ordem 4 com 12 graus de liberdade.

No teste subsequente para o tempo  $t = 2/\pi$ , a solução inicia a formação do choque devido ao cruzamento das linhas características. Então, a solução numérica pode apresentar oscilações sem a utilização da função limitadora (ver Fig. 5.7a).

Tabela 5.3: Estudo da acurácia na solução da Equação de Burgers com condição inicial senoidal no tempo  $t = 0.3$  e volumes de controle não uniformes, gerados pelos pontos de quadratura de Gauss-Lobatto.

k	$\Delta x$	DOFs	$L_\infty$ erro	$L_\infty$ ordem	$L_1$ erro	$L_1$ ordem
2	1.00e-1	20	2.73e-2	-	1.19e-2	-
	5.00e-2	40	9.94e-3	1,46	3.05e-3	1,96
	2.50e-2	80	3.16e-3	1,67	7.85e-4	1,96
	1.25e-2	160	8.12e-4	1,95	1.91e-4	2,04
	6.25e-3	320	2.11e-4	1,94	4.87e-5	1,97
	3.13e-3	640	5.25e-5	2,00	1.25e-5	1,96
3	6.67e-2	30	1.14e-2	-	1.46e-3	-
	3.33e-2	60	2.14e-3	2,41	1.95e-4	2,90
	1.67e-2	120	3.86e-4	2,47	2.75e-5	2,83
	8.33e-3	240	5.82e-5	2,73	3.61e-6	2,93
	1.25e-2	480	7.71e-6	2,92	4.82e-7	2,91
	2.08e-3	960	9.95e-7	2,95	6.20e-8	2,96
4	1.00e-1	20	1.63e-2	-	2.89e-3	-
	5.00e-2	40	7.84e-4	4,38	1.05e-4	4,78
	2.50e-2	80	2.56e-4	1,62	1.25e-5	3,07
	1.25e-2	160	1.62e-5	3,98	7.19e-7	4,12
	6.25e-3	320	1.11e-6	3,87	4.35e-8	4,04
	3.13e-3	640	7.05e-8	3,98	2.70e-9	4,01
5	0.2	20	1.43e-2	-	2.10e-3	-
	0.1	40	8.14e-4	4,14	6.40e-5	5,04
	0.05	80	9.16e-5	3,15	3.50e-6	4,19
	2.5e-2	160	4.52e-6	4,34	9.51e-8	5,20
	1.25e-2	320	1.81e-7	4,64	3.81e-9	4,64
	6.25e-3	640	6.75e-9	4,75	1.3e-10	4,87
6	6.67e-2	30	2.93e-3	-	2.79e-4	-
	3.33e-2	60	5.94e-5	5,62	3.65e-6	6,26
	1.67e-2	120	5.46e-6	3,44	1.45e-7	4,65
	8.33e-3	240	8.72e-8	5,97	1.71e-9	6,41
	1.25e-2	480	1.51e-9	5,85	2.6e-11	6,04

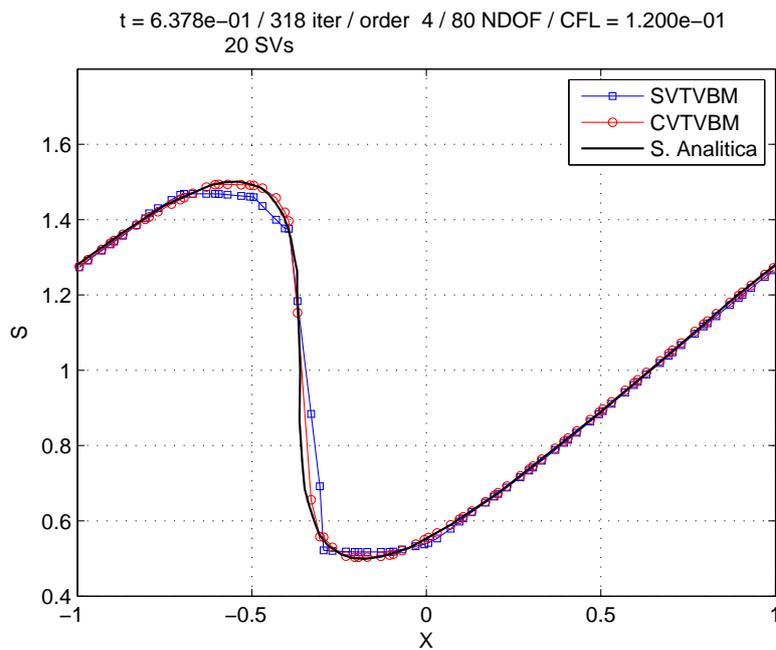
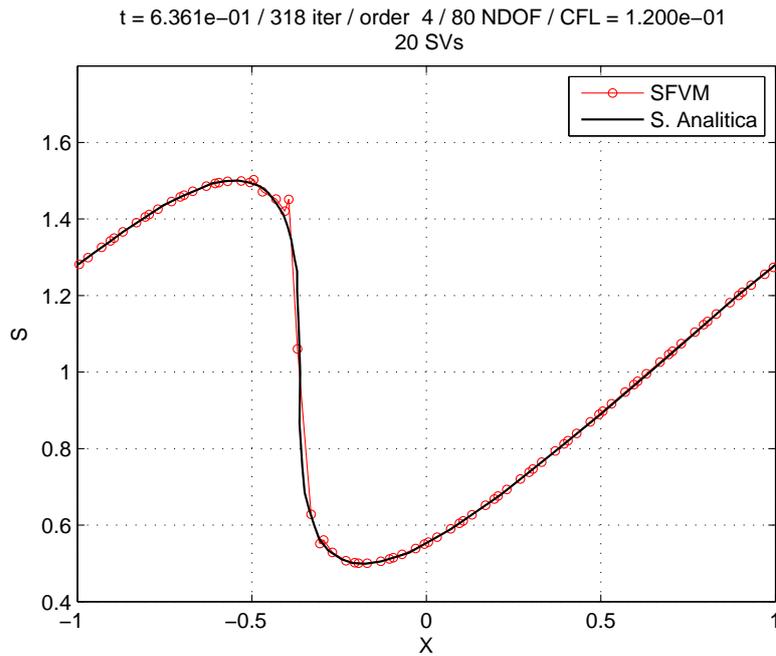


Figura 5.7: Soluções numéricas para a equação de Burgers no tempo  $t = 2/\pi$ , utilizando o SFVM de ordem  $k = 4$ , com 80 DOFs, sem função limitadora (a) e com função limitadora tipo SVTVBM e CVTVBM (b).

Na Fig. 5.7b é apresentada a solução fazendo uso do limitador CVTVBM, que atua diminuindo as oscilações espúrias, que se apresentam perto de gradientes acentuados. O limitador tipo CVTVBM é escolhido neste teste devido ao fato de que apresenta os melhores resultados na captura do choque, tanto no início do mesmo,  $t = 2/\pi$ , como ao final do tempo de simulação,  $t = 1$ , quando a onda de choque já esta formada (Wang,

2002). O comportamento da solução sob a ação da função limitadora tipo CVTVBM, a qual é utilizada, para lidar com oscilações nas descontinuidades no tempo  $t = 1$  é apresentada na Fig. 5.8.

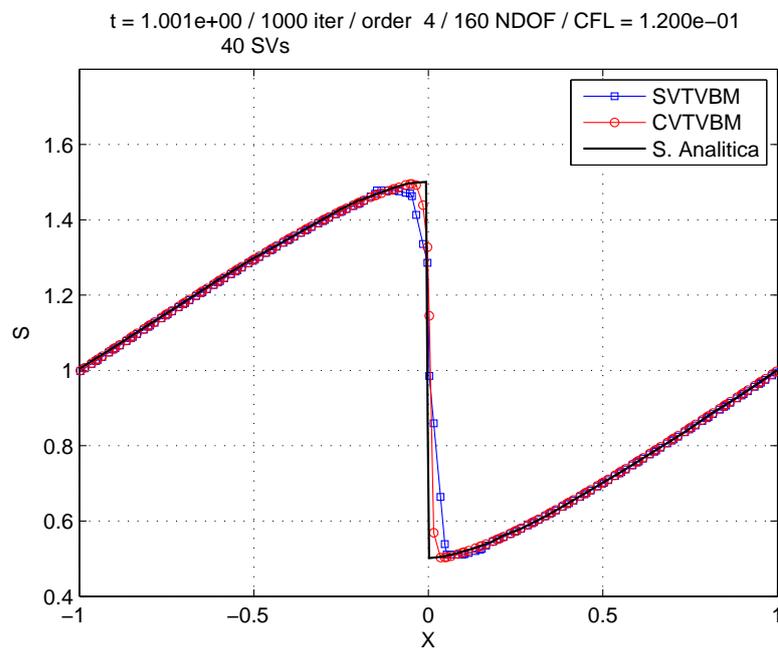
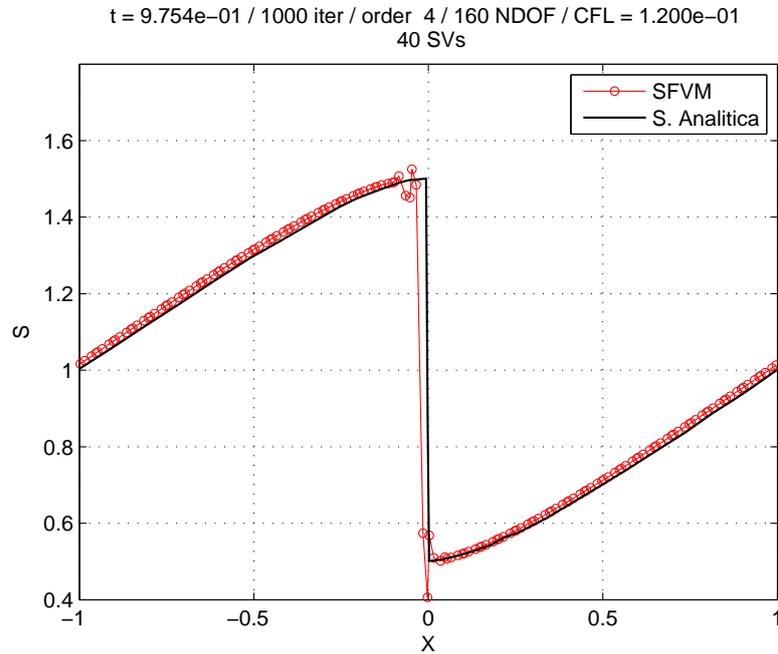


Figura 5.8: Soluções numéricas para a equação de Burgers no tempo  $t = 1$ , utilizando o SFVM de ordem  $k = 4$ , com 160 DOFs, sem função limitadora (a) e com função limitadora do tipo SVTVBM e CVTVBM (b).

## 5.3 Modelo do fluxo bifásico

### 5.3.1 Problema de Buckley-Leverett

Este problema, consiste basicamente no deslocamento imiscível unidimensional de óleo por água ao longo de um meio poroso homogêneo em que, no modelo matemático da Eq. (2.41), desprezamos os efeitos gravitacionais, de capilaridade e termo de fonte. As saturações residuais de água e óleo são  $S_{rw} = S_{ro} = 0.1$  e a razão entre as viscosidades das fases é  $\mu_o/\mu_w = 1$ .

Nos exemplos a seguir, apenas a equação de saturação foi resolvida com as seguintes condições iniciais e de contorno:

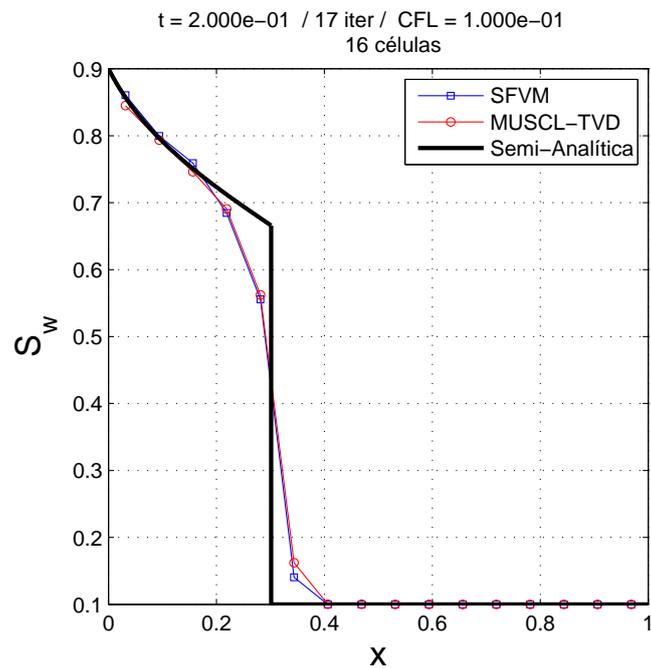
$$\begin{aligned} S_w(x, 0) &= S_{wr} = 0.1 \quad \text{para } 0 < x \leq 1, \\ S_w(0, t) &= 1.0 - S_{or} \quad \text{para } x = 0. \end{aligned} \quad (5.7)$$

### Comparação do método numérico MUSCL-TVD e SFVM

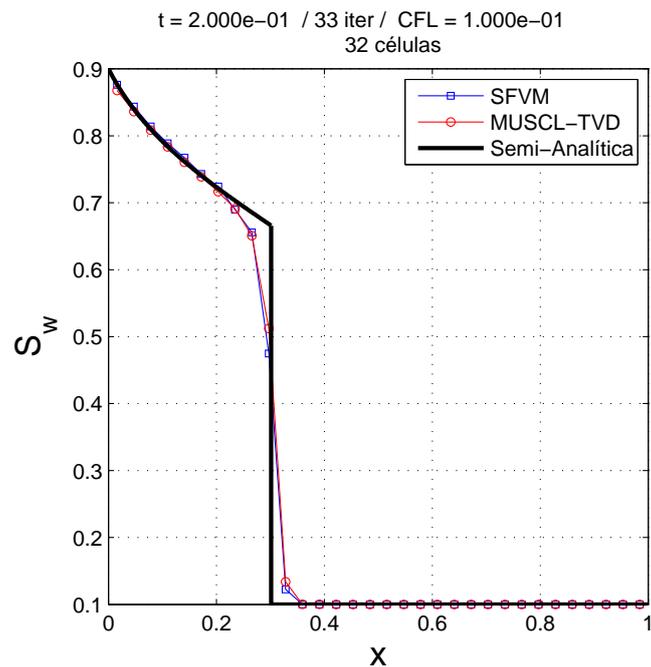
Para este exemplo utilizamos os métodos MUSCL-TVD e SFVM para segunda ordem de acurácia e com igual DOFs. Nas Figs. 5.9 e 5.10, apresentamos as soluções obtidas em  $t=0.2$ , para quatro malhas unidimensionais diferentes, com 16, 32, 64 e 128 divisões da malha primal. Seguindo Pinto (1991), os intervalos de tempo escolhidos para cada malha foram tais que  $CFL = \frac{v\Delta t}{\Delta x} = 0.1$  onde  $v = |\vec{v}_t| = 1$ . Além disso, uma função limitadora tipo CVTVBM foi utilizada para lidar com as oscilações perto das descontinuidades. Como podemos observar nas Figs. 5.9 e 5.10, mesmo para a malha menos densa, com 16 subdivisões ao longo do domínio, nenhum dos métodos apresenta oscilações espúrias. Além disso, os métodos convergem adequadamente para a solução analítica à medida que refinamos as malhas.

Como um primeiro passo para avaliar o desempenho computacional é calculado o número de operações de ponto flutuante (flops) para o SFVM e para o MUSCL-TVD. A premissa para realizar este teste é que a principal diferença entre o SFVM e MUSCL-TVD esta no processo de reconstrução das variáveis nas interfaces numéricas. Por isso só será avaliada a primeira etapa do algoritmo para os dois métodos, desconsiderando então, etapas como a aplicação de funções limitadoras, cálculo de fluxos numéricos, etc. Para fazer o cálculo dos flops, inicialmente consideramos uma malha primal com igual número de células para ambos os métodos. Agora o processo de reconstrução para o MUSCL-TVD é analisado.

Levando em consideração que é atribuído “1-flop” para cada operação básica, como por exemplo, adição (+), subtração (-), multiplicação (\*). O número de flops para as faces são calculados utilizando a Eq. (3.20), com a inclinação  $\xi_i = \bar{S}_{w(i)} - \bar{S}_{w(i-1)}$ , da forma a seguir:

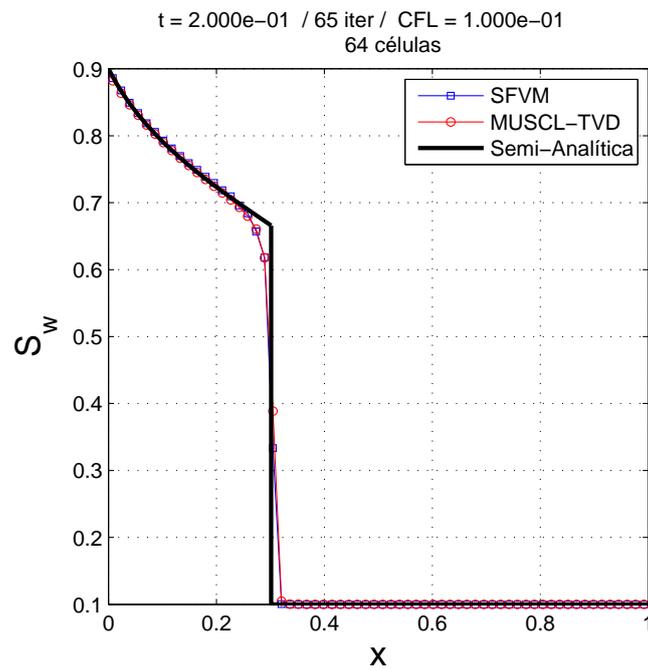


(a)

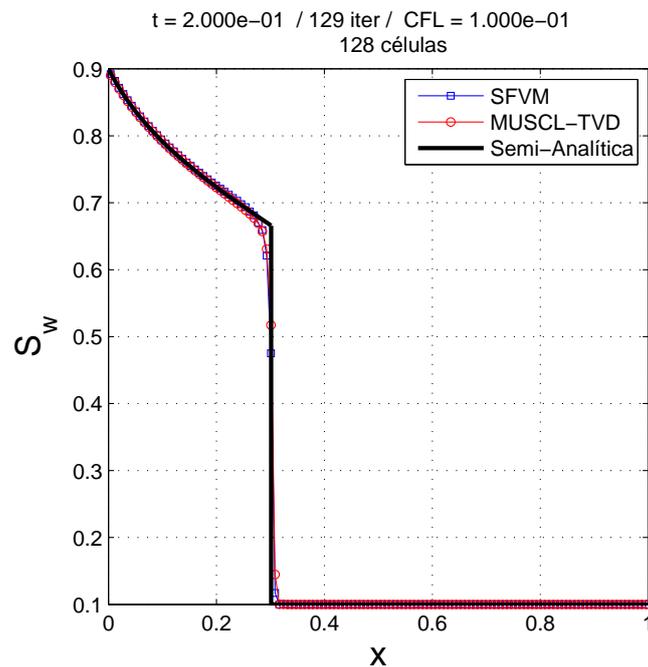


(b)

Figura 5.9: Comparação entre os perfis de saturação de água para o problema unidimensional de Buckley-Leverett numa malha primal com 16 subdivisões (a) e numa malha de 32 subdivisões (b) ao longo do eixo  $x$  em  $t=0.2$ . Solução semi-analítica e soluções aproximadas obtidas com o SFVM e MUSCL-TVD.



(a)



(b)

Figura 5.10: Comparação entre os perfis de saturação de água para o problema unidimensional de Buckley-Leverett numa malha primal com 64 subdivisões (a) e numa malha de 128 subdivisões (b) ao longo do eixo  $x$  em  $t=0.2$ . Solução semi-analítica e soluções aproximadas obtidas com o SFVM e MUSCL-TVD.

$$S_{w(i)L} = \bar{S}_{w(i)} - 0.5 * (\bar{S}_{w(i)} - \bar{S}_{w(i-1)}) \quad S_{w(i)R} = \bar{S}_{w(i)} + 0.5 * (\bar{S}_{w(i)} - \bar{S}_{w(i-1)}) \quad (5.8)$$

Como podemos observar na Eq. (5.8), cada variável reconstruída só faz uso de 3-flops. Isto é “-,\*,-”, para  $S_{w(i)L}$ , e “+,\*,-” para  $S_{w(i)R}$ , como indicado na Fig. 5.11a. Agora a análise para o SFVM é feito utilizando a equação Eq. (4.14), da forma a seguir

$$S_{w(i,1/2)} = c_{01} * \bar{S}_{w(i,1)} + c_{02} * \bar{S}_{w(i,2)}, \quad (5.9)$$

$$S_{w(i,3/2)} = c_{11} * \bar{S}_{w(i,1)} + c_{12} * \bar{S}_{w(i,2)}, \quad (5.10)$$

$$S_{w(i,5/2)} = c_{21} * \bar{S}_{w(i,1)} + c_{22} * \bar{S}_{w(i,2)}, \quad (5.11)$$

onde os coeficientes  $c_{ji}$  são tomados da Tab. 4.1 ou 4.2, para  $k=2$ . Como podemos observar nas Eqs. (5.9), (5.10) e (5.11). O número de flops para cada face numérica é 3, incluindo dois multiplicações e uma adição “\* ,+,\*”. Devido que cada resolvedor utiliza o mesmo DOFs, o SFVM precisa de duas células da malha primal para fazer a reconstrução, como indicado na Fig. 5.11b, então o número total de flops para obter a segunda ordem de acurácia é de 9-Flops por célula espectral SV. Por outro lado o MUSCL-TVD precisa fazer uma nova reconstrução, por exemplo, na célula  $(i+1)$ , utilizando mais uma vez 3-flops por face, ou seja, 6-flops por célula da malha primal. Em conclusão o SFVM utiliza o equivalente a um 25% menos de flops que o MUSCL-TVD no processo de reconstrução.

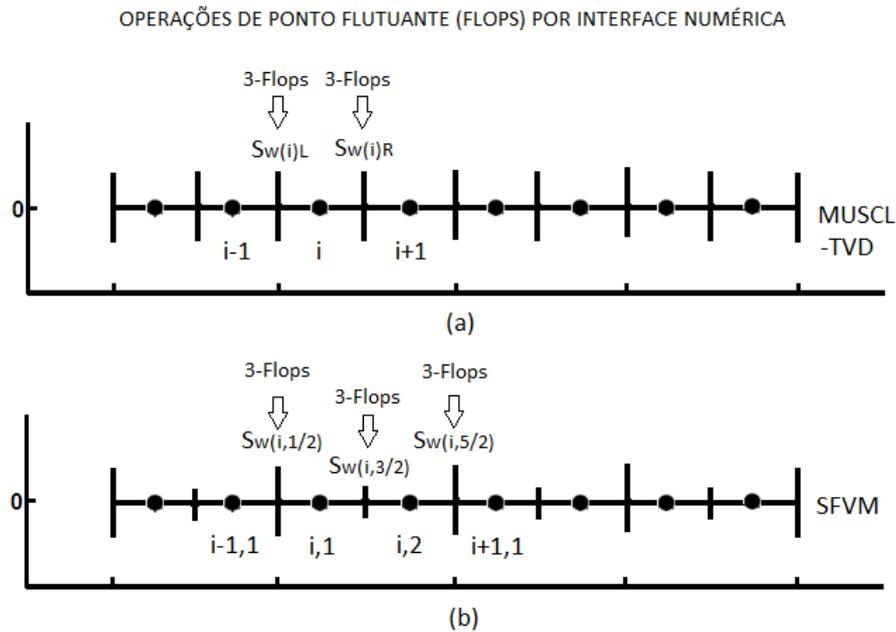


Figura 5.11: Operações de ponto flutuante para o SFVM e MUSCL-TVD.

Como segunda opção para avaliar o custo computacional é feito um teste sugerido por Liang et al. (2013). Neste teste é mantido o número de DOFs, e todos os outros parâmetros permanecem iguais para os dois métodos. Foram efetuadas 5 simulações para cada malha computacional, com o objetivo de ter uma melhor estimativa do tempo. O teste foi realizado num laptop ACER, com um processador Intel® Atom™ CPU N270 @ 1.60GHz  $\times$  2, com 2 Gb de memória RAM, Como é observado na Tab. 5.4, praticamente em todos os casos o SFVM gastou menor tempo de máquina, em comparação com o MUSCL-TVD. Também podemos observar no caso para 128 DOFs que a tendência de aumentar a diferença entre os dois métodos é percebida quando a malha é mais densa. Por outro lado e fazendo um análise visual das Figs. 5.9 e 5.10, as quais apresentam uma resolução similar para os dois métodos. Podemos concluir que o SFVM comporta-se com melhor eficiência computacional que o MUSCL-TVD. O ganho na eficiência computacional será mais relevante no caso de modelos multidimensionais.

Tabela 5.4: Tempo da CPU em segundos utilizado pelos resolvedores SFVM e MUSCL-TVD, para a simulação do problema de Buckley-Leverett.

DOFs	Simulação	Iterações RK-3	SFVM	MUSCL-TVD
16	No.1	240	2,0270	2,0685
	No.2		1,9247	1,9181
	No.3		1,9266	1,9281
	No.4		1,8835	1,9017
	No.5		2,0316	1,9614
32	No.1	480	6,5462	7,2605
	No.2		5,6553	6,2673
	No.3		5,7379	6,1089
	No.4		5,9469	6,0766
	No.5		5,9047	7,4681
64	No.1	960	17,6170	20,5005
	No.2		18,1249	19,0619
	No.3		17,2354	18,6759
	No.4		17,5940	18,8335
	No.5		17,5810	20,0829
128	No.1	1920	59,5418	76,0072
	No.2		59,2562	70,0573
	No.3		58,4880	69,2475
	No.4		61,9353	63,4321
	No.5		58,6911	64,1760

### Solução do problema de Buckley-Leverett utilizando refinamento tipo p.

Neste teste o problema de Buckley-Leverett é resolvido utilizando o refinamento tipo p, para verificar “visualmente” a acurácia espectral e a alta resolução do SFVM. Os intervalos

de tempo escolhidos para a malha primal com 8 SVs, foram tais que  $CFL = \frac{v\Delta t}{\Delta x} = 0.01$  onde  $v = |\vec{v}_i| = 1$  e  $\Delta x = h_{i,j}$ . Sendo  $h_{i,j}$ , o menor comprimento do CV, dentre os  $k$  possíveis CVs no interior do SV, para satisfazer o critério de estabilidade. Além disso, uma função limitadora tipo CVTVBM foi utilizada para lidar com as oscilações perto das discontinuidades. Observamos na Fig. 5.12a que, apesar da malha primal ser pouco densa, o SFVM resolveu o problema, porém ainda com baixa acurácia.

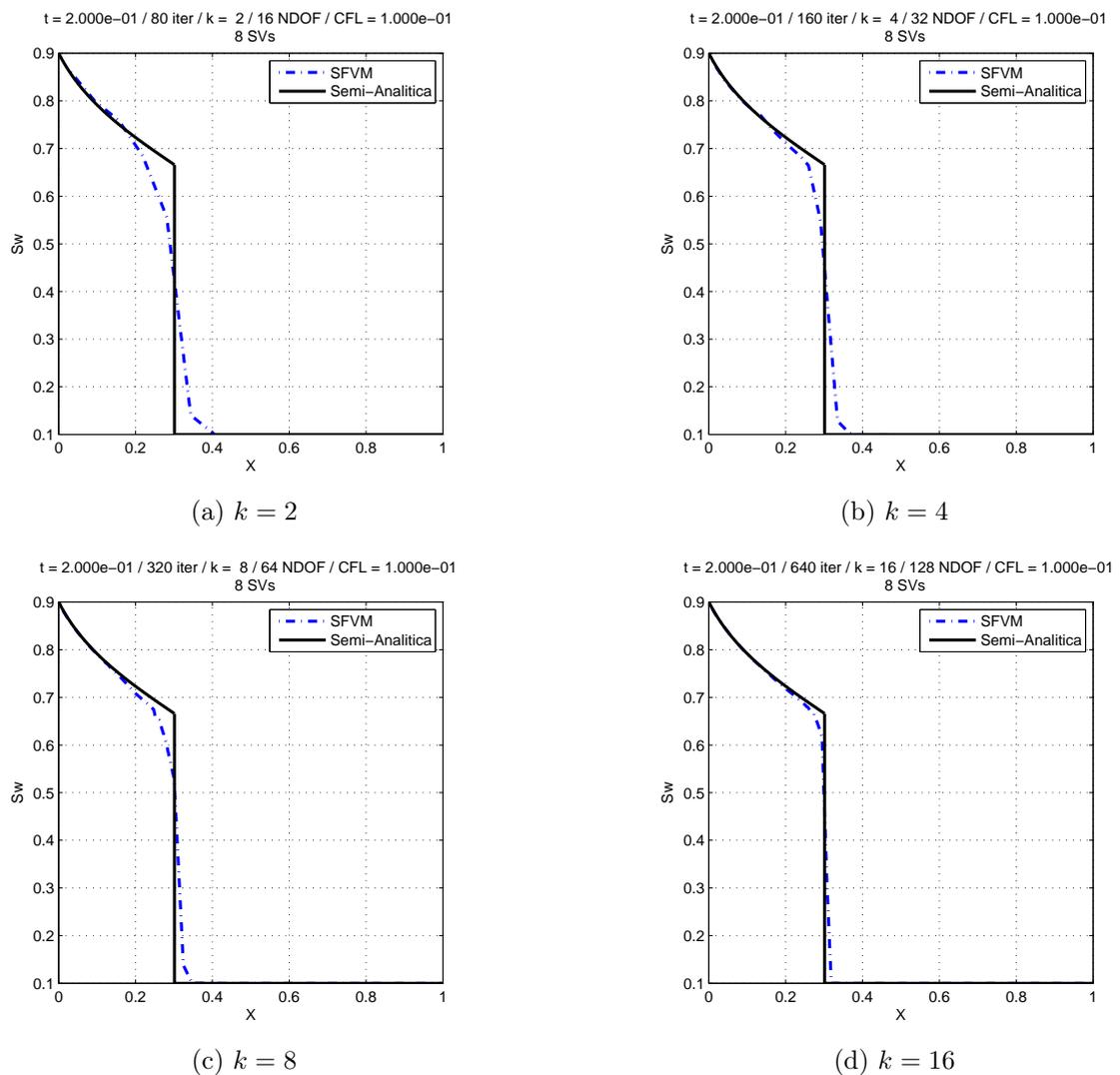


Figura 5.12: Solução do problema de Buckley-Leverett, utilizando o SFVM de diferentes ordens de acurácia  $k = 2, 4, 8$  e  $16$ .

A seguir é utilizado o mesmo número de SVs, porém aumentamos o grau do polinômio de reconstrução, ou seja aumentamos a ordem de acurácia do SFVM, para  $k = 4, 8$ , e  $16$ , como mostram as Figs. 5.12b, c e d. Observamos uma melhoria significativa no comportamento da solução numérica, isto é, a solução numérica apresenta maior acurácia nas regiões suaves de escoamento atrás do choque e sem presença de oscilações espúrias na discontinuidade, convergindo adequadamente para a solução semi-analítica à medida que aumentamos o grau da reconstrução polinomial.

### 5.3.2 Efeitos gravitacionais

Neste teste, resolveremos o problema dado na Eq. (2.41), no domínio  $[0,1]$ , desconsiderando o efeito de pressão capilar e o termo fonte. A velocidade total é conhecida e constante,  $v_t = 1$ . As saturações residuais de água e óleo são  $S_{wr} = S_{or} = 0$ . Considera-se a razão de mobilidade  $\mu_o/\mu_w = 5$ ; a porosidade  $\phi = 1$ ; densidade da água  $\rho_w = 1$ ; densidade do óleo  $\rho_o = 0.78$ ; aceleração gravitacional  $g = 9.8$  e as condições iniciais e de contorno a seguir:

$$\begin{aligned} S_w(x, 0) &= S_{wr} = 0, \quad 0 < x \leq 1, \\ S_w(0, t) &= 1 - S_{or}, \quad x = 0. \end{aligned} \quad (5.12)$$

Nesta simulação, 40 células espectrais foram utilizadas para o SFVM em comparação com 80 células para o método TB(TVD)-FV de segunda ordem de acurácia no caso bidimensional (Durlinsky, 1993), cujos resultados foram capturados das figuras do referido artigo. Neste teste, o fluxo advectivo inclui efeitos gravitacionais que atuam no sentido oposto à velocidade  $v_t$ , isto é, no sentido negativo de  $x$ .

Observe na Fig. 5.13, que a curva para a função fluxo tem um “ponto sônico” em  $S_w = 0.19$ .

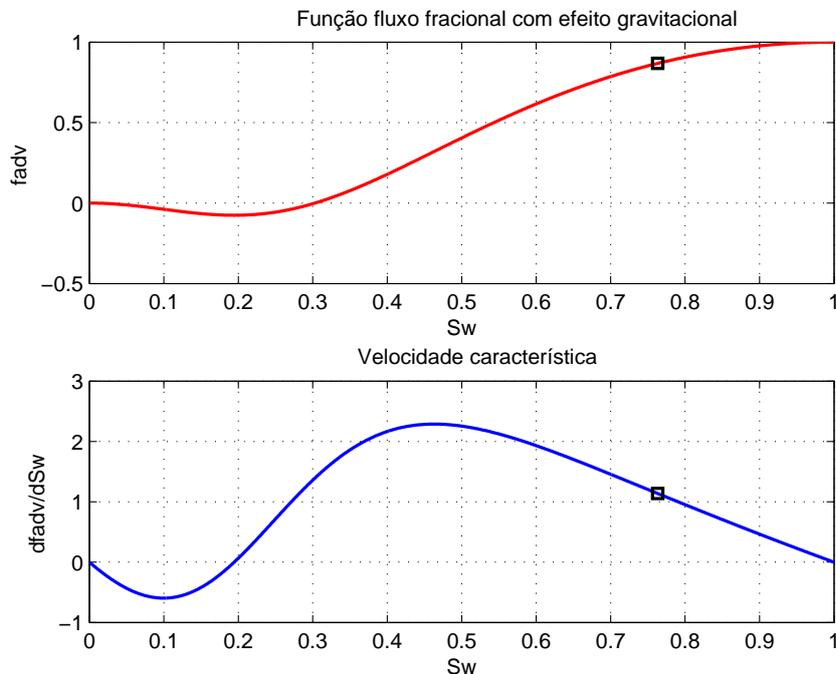
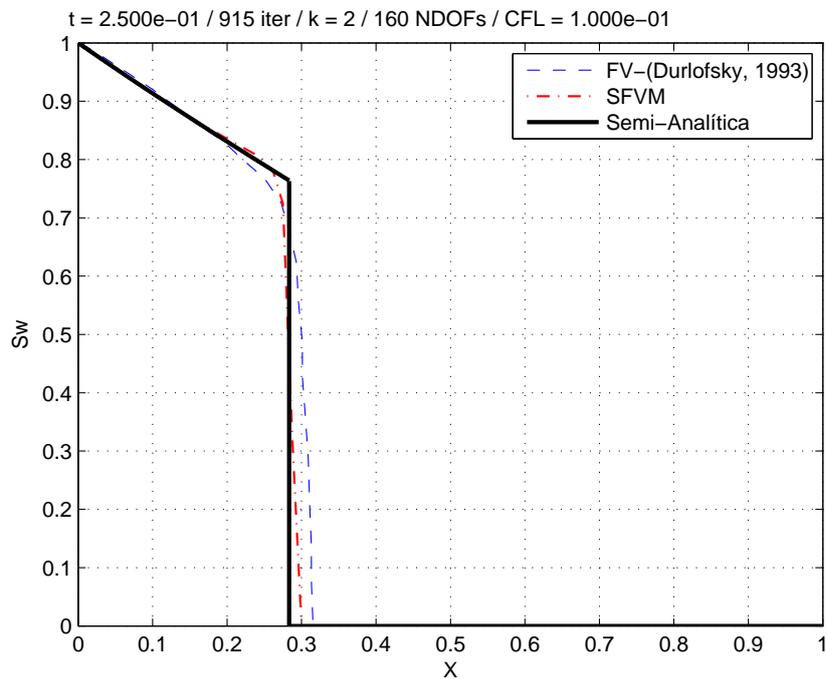


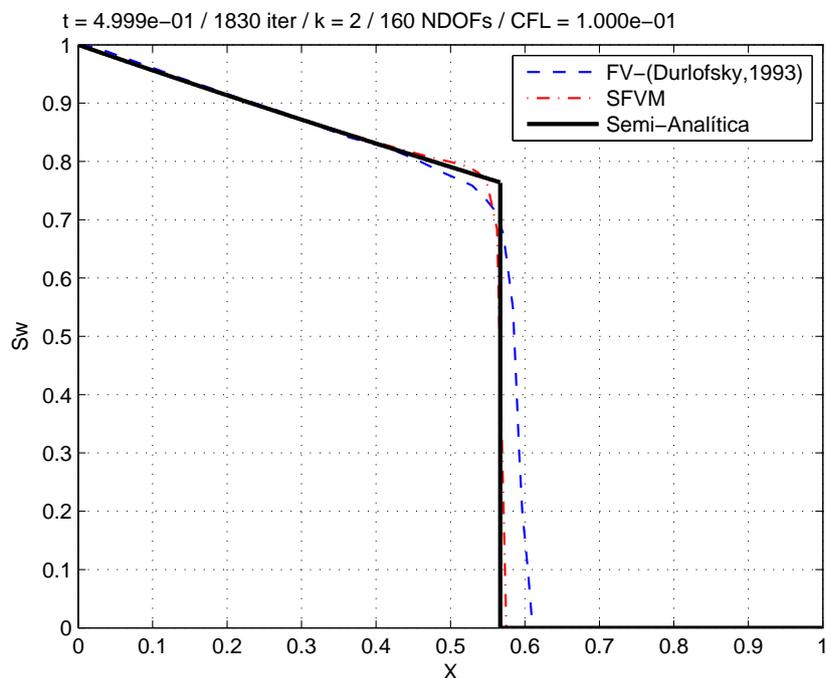
Figura 5.13: Função fluxo fracional com efeitos gravitacionais (acima), velocidade característica (abaixo) e ponto de choque (símbolo ponto quadrado).

Os perfis de saturação para  $t = 0.25$  e  $t = 0.5$  são apresentados na Fig. 5.14. Em nenhum momento durante o deslocamento apresentam-se oscilações não físicas, mesmo

na vizinhança do ponto sônico. A gravidade tende a forçar o líquido (água) para a parte de baixo do reservatório, devido à diferença de densidades entre as fases.



(a)

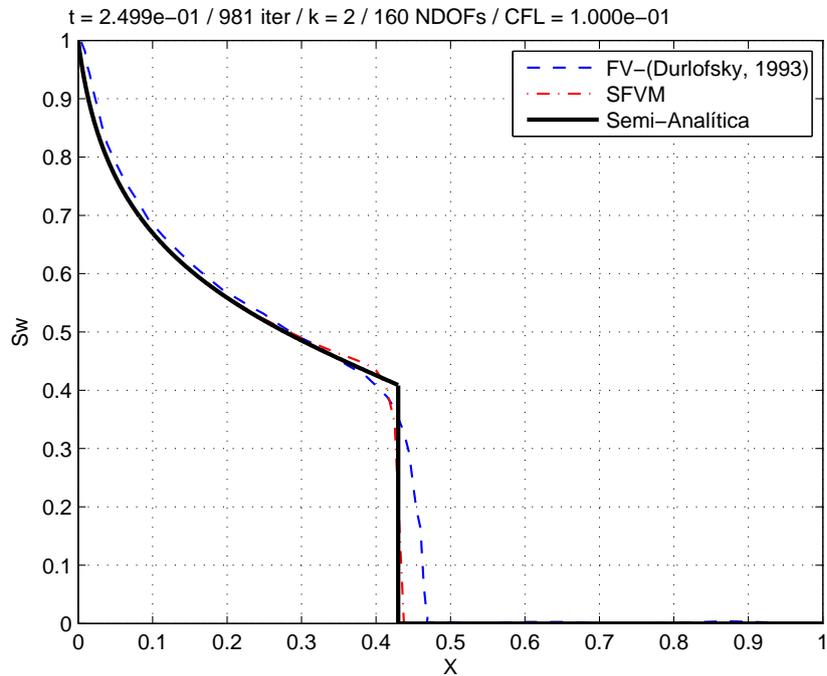


(b)

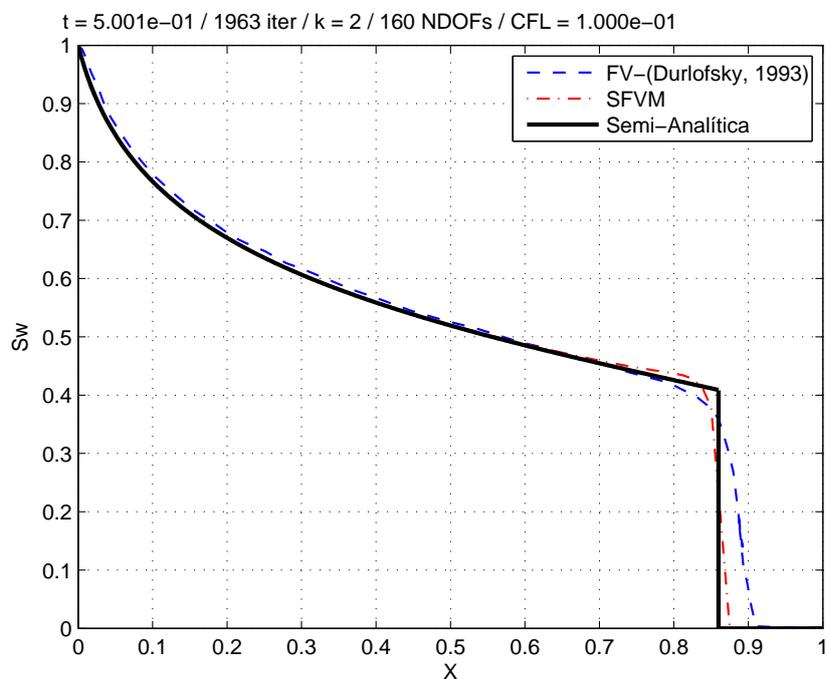
Figura 5.14: Solução do modelo bifásico com efeitos gravitacionais pelo SFVM para um tempo  $t = 0.25$  (a) e  $t = 0.5$  (b) vs a solução obtida através do método TB(TVD)-FV de ordem 2 (Durlfolsky, 1993).

Assim, o perfil de saturação avança mais devagar e apresenta uma frente mais acentu-

ada em comparação com a frente do problema de Buckley-Leverett sem efeitos gravitacionais (ver Fig. 5.15). A localização do ponto de choque é 0.76, de acordo com os resultados numéricos apresentados por Durlofsky (1993) e da solução semi-analítica.



(a)



(b)

Figura 5.15: Solução do modelo bifásico sem efeitos gravitacionais (Buckley-Leverett), utilizando SFVM de segunda ordem de acurácia, para  $t = 0.25$  (a) e  $t = 0.5$  (b) vs a solução obtida através do método TB(TVD)-FV de ordem 2.

### 5.3.3 Efeitos da pressão capilar

Neste teste é resolvido o problema da injeção de água num meio poroso saturado pelo óleo incluindo efeitos de pressão capilar. A lei de conservação, Eq. (2.41), então é resolvida no domínio  $[0,1]$ , desconsiderando os efeitos gravitacionais e o termo fonte. O fluxo  $f_{adv}$  é, em geral, uma função não linear de  $S_w(x)$ . A razão entre as viscosidades, é  $\mu_o/\mu_w = 1$ , e as permeabilidades relativas da fase água e óleo são equivalentes às do problema de Buckley-Leverett da Sec. 5.3.1.

A condição inicial neste teste é da forma a seguir:

$$S_w(x, 0) = \begin{cases} (1 - S_{or}) - \delta & x < 0, \\ S_{wr} + \delta & x \geq 0, \end{cases} \quad (5.13)$$

onde  $\delta \ll 1$  é um número pequeno, por exemplo  $10^{-4}$ , para evitar singularidades para certos funcionais de pressão capilar com  $S_w = 0$  ou  $S_w = 1$ . As condições de contorno são  $S_w(0, t) = (1 - S_{or}) - \delta$  e  $S_w(1, t) = S_{wr} + \delta$  (Cueto-Felgueroso, 2009). O parâmetro  $\omega$ , na Eq. (2.25), é tomado como 3. E diferentes valores são testados, para o parâmetro  $\varepsilon$  na Eq. (2.37), que atua como um controle da força capilar. O passo temporal foi calculado a partir de  $CFL = 0.05$ . Na Fig. 5.16, são apresentados os resultados para um tempo final  $t = 2$ . A pressão capilar é definida como a diferença entre a pressão da fase óleo e a pressão da fase água. Levando em consideração que o gradiente de pressão capilar é positivo e, portanto, este aumenta o valor da frente de penetração da solução do modelo do fluxo bifásico, como se apresenta na Fig. 5.16.

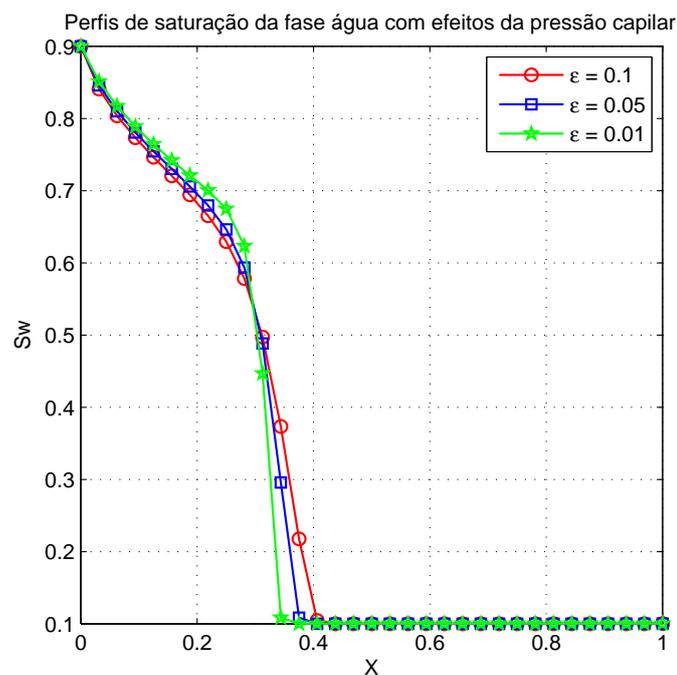


Figura 5.16: Efeito da pressão capilar no perfil de saturação para diferentes valores de  $\varepsilon$ .

No teste subsequente avaliaremos o tempo computacional utilizando para solucionar o problema de Buckley-Leverett com efeitos de pressão capilar. Os parâmetros considerados neste exemplo são os mesmos do teste anterior, além de  $\varepsilon = 0.01$ , porém com igual número de DOFs para diferentes ordens de acurácia  $k = 1, 2, 3$  e  $5$ , e o  $CFL = 0.1$ , para garantir o limite de estabilidade para todos os testes. Para gerar a solução de referência foi utilizado o FVM de primeira ordem, com 5000 células. O teste foi feito num laptop ACER, com um processador Intel® Atom™ CPU N270 @ 1.60GHz  $\times$  2, com 2 Gb de memória RAM. O tempo médio para os cálculos da solução numérica pelo SFVM foi de 29.5 segundos. Neste caso fica claro que é muito melhor utilizar o SFVM de alta ordem, com por exemplo  $k = 5$ , que os resolvedores de ordem mais baixa, já que a resolução é muito melhor como se apresenta na Fig. 5.17.

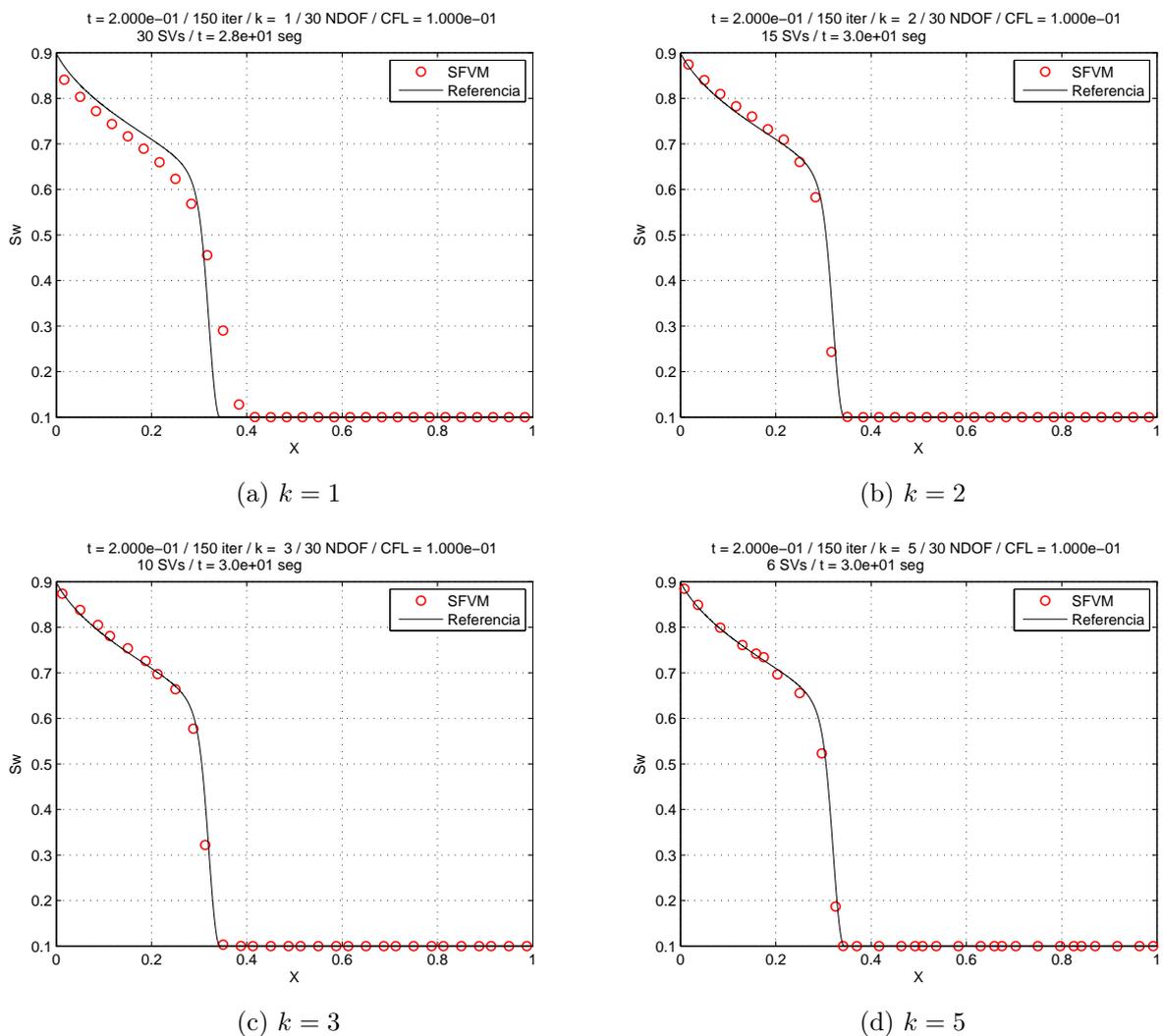


Figura 5.17: Modelo do fluxo bifásico com efeitos da pressão capilar, utilizando o SFVM de diferentes ordens de acurácia e deixando fixo o número de CV, ou seja, igual número de incógnitas ou DOFs são resolvidas.

### 5.3.4 Efeitos gravitacionais e da pressão capilar

Finalmente, neste teste, a Eq. (2.41) é resolvida levando em consideração os efeitos de pressão capilar e de gravidade, sem considerar termo de fonte. As saturações residuais de água e óleo são  $S_{rw} = S_{ro} = 0.1$ , e a razão entre as viscosidades das fases é  $\mu_o/\mu_w = 1$ . A porosidade é  $\phi = 1$ , a densidade da água é  $\rho_w = 1$ , a densidade do óleo é  $\rho_o = 0.78$ , a aceleração gravitacional é  $g = 9.8$ , e termo fonte é  $Q_w = 0$ . As condições iniciais e de contorno dadas na Sec. 5.3.3 são também utilizadas aqui, além de considerar o parâmetro para o controle da força capilar como  $\varepsilon = 0.01$ .

Na Fig. 5.18, é apresentada a comparação entre os perfis da frente de saturação incluindo e sem incluir os efeitos de pressão capilar e gravidade. Nesta figura, observa-se que os efeitos da pressão capilar são muito pequenos ou insignificantes, quando comparados com os efeitos gravitacionais. Neste caso os termos que consideram velocidade e gravidade Eq. (2.42) são mais relevantes.

t = 2.001e-01 / 746 iter / k = 2 / 64 NDOFs / CFL = 5.000e-2 / 32 células

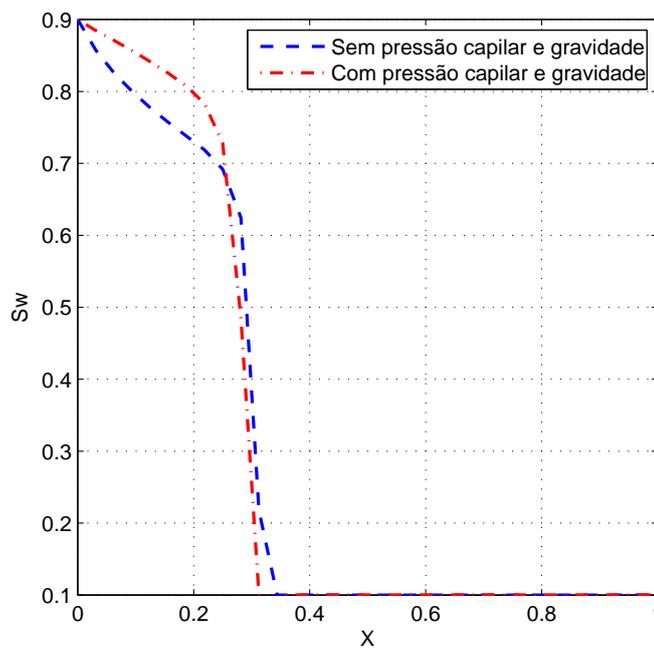


Figura 5.18: Modelo do fluxo bifásico com efeitos gravitacionais e de pressão capilar para um tempo  $t = 2$ .

## Capítulo 6

# Conclusões e trabalhos futuros

O método espectral dos volumes finitos de alta ordem foi implementado com sucesso e verificado para a solução do modelo de fluxo bifásico de água e óleo em meios porosos.

As principais conclusões são listadas a seguir:

- A alta resolução do SFVM foi verificada através de testes numéricos para problemas lineares e não lineares utilizando soluções suaves, confirmando as taxas de convergência esperadas do método.
- O comportamento do método para resoluções de segunda ordem mostrou bom desempenho quando foi comparado com dados numéricos e semi-analíticos, além disso os resultados obtidos indicam que o referido método consegue dar soluções com similar resolução e razoável custo computacional quando comparado com os métodos tradicionais de alta ordem  $k \geq 2$ .
- Por outro lado, devido a o SFVM fornecer resolução ao nível das sub-células, o SFVM captura com excelente resolução as discontinuidades. Esta vantagem é visualizada no desempenho dos limitadores SVTVDM e CVTVBM.
- A função limitadora CVTVBM foi melhorada, utilizando um discriminador para distinguir entre extremo suave e extremo descontínuo nas interfaces internas dos CVs, no interior do SV, a fim de evitar utilizar um resolvedor de Riemann quando é desnecessário.

O SFVM é viável para simulação de reservatórios de petróleo, no sentido de ser compacto da perspectiva da implementação. Isto é, o SV analisado só interage com os vizinhos imediatos o que é importante para trabalhar com meios heterogêneos e anisotrópicos, malhas não estruturadas e computação paralela. O SFVM é extensível para alta ordem de acurácia e computacionalmente eficiente.

Para trabalhos futuros é de interesse estender nosso trabalho para lidar com métodos espectrais, tais como;

- 
- SFVM e SFDM, para o estudo do problema de fluxos multifásicos em meios porosos em múltiplas dimensões.
  - Estudo e acoplamento via IMPES (implicit pressure- explicit saturation), destas formulações espectrais com diferentes métodos utilizados para dar solução à equação de pressão, como por exemplo, TPFA (two point flux approximation), MPFA (multipoint flux approximation), etc.
  - Implementação de metodologias para adaptação h-p.

---

## Referências

- Abgrall, R. (1994). On essentially non-oscillatory schemes on unstructured meshes: analysis and implementation. *Journal of Computational Physics*, 114(1):45–58. 47
- Anderson, D. A., Tannehill, J. C., and Pletcher, R. H. (1984). Computational fluid mechanics and heat transfer. 20
- Barth, T. J. and Frederickson, P. O. (1990). Higher order solution of the Euler equations on unstructured grids using quadratic reconstruction. *AIAA paper*, 90:0013. 47
- Bastian, P. (1999). *Numerical computation of multiphase flows in porous media*. PhD thesis, Ph. D. thesis, Universitat Kiel, Kiel. 26
- Bear, J. (1988). *Dynamics of fluids in porous media*. Dover publications. 28, 29
- Boris, J. P. and Book, D. L. (1973). Flux-corrected transport. I. SHASTA, A fluid transport algorithm that works. *Journal of computational physics*, 11(1):38–69. 40, 62
- Breviglieri, C., Azevedo, J. L. F., and Basso, E. (2010). An unstructured grid implementation of high-order spectral finite volume schemes. *Journal of the Brazilian Society of Mechanical Sciences and Engineering*, 32(SPE):419–433. 17, 50, 62, 69
- Brooks, R. H. and Corey, A. T. (1964). Hydraulic properties of porous media. *Hydrology Papers, Colorado State University*, (March). 29
- Buckley, S. E. and Leverett, M. (1942). Mechanism of fluid displacement in sands. *Trans. AIME*, 146(107):1–7. 33
- Carvalho, D. K. d. (2005). *Uma Formulação do Método dos Volumes Finitos com Estrutura de Dados por Aresta para a Simulação de Escoamentos em Meios Porosos*. PhD thesis, Tese de Doutorado, Universidade Federal de Pernambuco (UFPE), Recife. 28, 31, 33, 35
- Chavent, G. and Jaffré, J. (1986). *Mathematical models and finite elements for reservoir simulation: single phase, multiphase, and multicomponent flows through porous media*, volume 17. North Holland. vii, 16, 33

- Chen, Z., Huan, G., and Ma, Y. (2006). *Computational methods for multiphase flows in porous media*, volume 2. SIAM. 17
- Choi, B.-J., Iskandarani, M., Levin, J., and Haidvogel, D. B. (2004). A spectral finite-volume method for the shallow water equations. *Monthly weather review*, 132(7):1777–1791. 17, 47
- Cockburn, B., Hou, S., and Shu, C.-W. (1990). The Runge-Kutta local projection discontinuous Galerkin finite element method for conservation laws IV: The multidimensional case. *Math. Comp*, 54(190):545–581. 48
- Cockburn, B., Lin, S.-Y., and Shu, C.-W. (1989). TVB Runge-Kutta local projection discontinuous Galerkin finite element method for conservation laws III: One-dimensional systems. *Journal of Computational Physics*, 84(1):90–113. 48
- Cockburn, B. and Shu, C.-W. (1989). TVB Runge-Kutta local projection discontinuous Galerkin finite element method for conservation laws II: General framework. *Math. Comp*, 52(186):411–435. 38, 39, 48
- Colella, P. and Woodward, P. R. (1984). The piecewise parabolic method (PPM) for gas-dynamical simulations. *Journal of computational physics*, 54(1):174–201. 40
- Cueto-Felgueroso (2009). Finite volume methods for one-dimensional scalar conservation laws. *Computational methods for flow in porous media*, page 1.723. 31, 43, 89
- Cueto-Felgueroso, L. and Colominas, I. (2008). High-order finite volume methods and multiresolution reproducing kernels. *Archives of Computational Methods in Engineering*, 15(2):185–228. 17
- Durlofsky, L. J. (1993). A triangle based mixed finite element finite volume technique for modeling two phase flow through porous media. *Journal of Computational Physics*, 105(2):252–266. ix, 86, 87, 88
- Ertekin, T., Abou-Kassem, J. H., and King, G. R. (2001). *Basic applied reservoir simulation*. Richardson, TX: Society of Petroleum Engineers. 28
- Fanchi, J. R. (2005). *Principles of applied reservoir simulation*. Gulf Professional Publishing. 17
- Fortuna, A. d. O. (2000). *Técnicas computacionais para dinâmica dos fluidos: conceitos básicos e aplicações*. EDUSP. 20
- Friedrich, O. (1998). Weighted essentially non-oscillatory schemes for the interpolation of mean values on unstructured grids. *Journal of Computational Physics*, 144(1):194–212. 48

- Godunov, S. (1959). A finite-difference method for the numerical computation of discontinuous solutions of the equations of fluid dynamics. *Mat. Sb*, 47(271). 36, 42, 47, 48, 62, 74
- Harten, A., Lax, P. D., and Leer, B. v. (1983). On upstream differencing and Godunov-type schemes for hyperbolic conservation laws. *SIAM Review*, 25(1):35–61. 39
- Harten, A. and Osher, S. (1997). *Uniformly high-order accurate nonoscillatory schemes. I*. Springer. 40
- Helmig, R. (1997). *Multiphase flow and transport processes in the subsurface*, volume 6. Springer Berlin. 26, 28, 29, 30, 32, 33
- Hirsch, C. (2007). *Numerical computation of internal and external flows: the fundamentals of computational fluid dynamics*, volume 1. Butterworth-Heinemann. 20, 36, 42, 45, 46, 67
- Hu, C. and Shu, C.-W. (1999). Weighted essentially non-oscillatory schemes on triangular meshes. *Journal of Computational Physics*, 150(1):97–127. 48
- Isaacson, E. (1994). *Analysis of numerical methods*. Courier Dover Publications. 52
- Kannan, R. and Wang, Z. (2012). Improving the high order spectral volume formulation using a diffusion regulator. *Communications in Computational Physics*, 12(1):247. 48
- Kopriva, D. A. (1991). Multidomain spectral solution of the Euler gas-dynamics equations. *Journal of Computational Physics*, 96(2):428–450. 48
- Kopriva, D. A. and Kolas, J. H. (1995). A Conservative Staggered-Grid Chebyshev Multidomain Method for Compressible Flow. Technical report, DTIC Document. 48
- LeVeque, R. J. (1992). *Numerical methods for conservation laws*, volume 132. Springer. 21, 22, 23, 26
- LeVeque, R. J. (2002). *Finite volume methods for hyperbolic problems*, volume 31. Cambridge university press. 25, 36, 39, 42
- Liang, C., Cox, C., and Plesniak, M. (2013). A comparison of computational efficiencies of spectral difference method and correction procedure via reconstruction. *Journal of Computational Physics*, 239:138–146. 84
- Liou, M.-S. (2000). Mass flux schemes and connection to shock instability. *Journal of Computational Physics*, 160(2):623 – 648. 47
- Liu, Y. (2013). Comunicação pessoal via e-mail. 60

- Löhner, R. (2008). *Applied computational fluid dynamics techniques: an introduction based on finite element methods*. Wiley. 44
- Lyra, P. R. M. (1994). *Unstructured grid adaptive algorithms for fluid dynamics and heat conduction*. PhD thesis, University of Wales Swansea. 20, 23, 24, 25, 45
- Oleinik, O. A. (1957). Discontinuous solutions of non-linear differential equations. *Uspekhi Matematicheskikh Nauk*, 12(3):3–73. 23
- Osher, S. (1984). Riemann solvers, the entropy condition, and difference. *SIAM Journal on Numerical Analysis*, 21(2):217–235. 47
- Peaceman, D. W. (1977). *Fundamentals of numerical reservoir simulation*, volume 6. Elsevier. 17, 28
- Pinto, A. C. C. (1991). Esquemas de alta resolução para controle da dispersão numérica em simulação de reservatórios. Technical report. 80
- Roe, P. L. (1981). Approximate Riemann solvers, parameter vectors, and difference schemes. *Journal of computational physics*, 43(2):357–372. 47
- Rusanov, V. V. (1962). *Calculation of interaction of non-steady shock waves with obstacles*. NRC, Division of Mechanical Engineering. 37
- Schwartzkopff, T., Dumbser, M., and Munz, C.-D. (2004). Fast high order ADER schemes for linear hyperbolic equations. *Journal of Computational Physics*, 197(2):532–539. 17
- Shu, C.-W. (1987). TVB uniformly high-order schemes for conservation laws. *Mathematics of Computation*, 49(179):105–121. 39, 40
- Shu, C.-W. (1988). Total-variation-diminishing time discretizations. *SIAM Journal on Scientific and Statistical Computing*, 9(6):1073–1084. 39
- Shu, C.-W. (1998). *Essentially non-oscillatory and weighted essentially non-oscillatory schemes for hyperbolic conservation laws*. Springer. 55
- Sourek, J. (2013). Comunicação pessoal via e-mail. *University of West Bohemia, Czech Republic*. 62
- Sun, Y., Wang, Z. J., and Liu, Y. (2006). Spectral (finite) volume method for conservation laws on unstructured grids VI: extension to viscous flow. *Journal of Computational Physics*, 215(1):41–58. 17
- Titarev, V. and Toro, E. (2005). ADER schemes for three-dimensional non-linear hyperbolic systems. *Journal of Computational Physics*, 204(2):715–736. 17

- Toro, E. F. (2009). *Riemann solvers and numerical methods for fluid dynamics: a practical introduction*. Springer. 22, 23, 25, 36, 41
- Trefethen, L. N. (2000). *Spectral methods in MATLAB*, volume 10. Siam. 46
- van den Abeele, K. (2009). *Development of high-order accurate schemes for unstructured grids*. PhD thesis, Vrije Universiteit Brussel. 35, 36, 47, 61, 62, 73
- van den Abeele, K., Broeckhoven, T., and Lacor, C. (2007a). Dispersion and dissipation properties of the 1D spectral volume method and application to a  $p$ -multigrid algorithm. *Journal of Computational Physics*, 224(2):616–636. 73
- van den Abeele, K., Lacor, C., and Wang, Z. J. (2007b). Short note: On the connection between the spectral volume and the spectral difference method. *Journal of Computational Physics*, 227(2):877–885. 60, 69
- van Leer, B. (1974). Towards the ultimate conservative difference scheme. II. Monotonicity and conservation combined in a second-order scheme. *Journal of computational physics*, 14(4):361–370. 40, 62
- van Leer, B. (1979). Towards the ultimate conservative difference scheme. V. A second-order sequel to Godunov’s method. *Journal of computational Physics*, 32(1):101–136. 62
- van Leer, B. (1982). Flux-vector splitting for the Euler equations. In *Eighth international conference on numerical methods in fluid dynamics*, pages 507–512. Springer. 47
- Wang, Z. (1997). A fast flux-splitting for all speed flow. In *Fifteenth International Conference on Numerical Methods in Fluid Dynamics*, pages 141–146. Springer. 47
- Wang, Z. J. (2002). Spectral (Finite) Volume Method for Conservation Laws on Unstructured Grids. Basic Formulation. *Journal of Computational Physics*, 178(1):210–251. 42, 48, 60, 63, 65, 69, 71, 78
- Wang, Z. J. and Liu, Y. (2002). Spectral (finite) volume method for conservation laws on unstructured grids: II. Extension to two-dimensional scalar equation. *Journal of Computational Physics*, 179(2):665–697. 48
- Wang, Z. J., Zhang, L., and Liu, Y. (2004). Spectral (finite) volume method for conservation laws on unstructured grids IV: extension to two-dimensional systems. *Journal of Computational Physics*, 194(2):716–741. 50
- Wesseling, P. (2009). *Principles of computational fluid dynamics*, volume 29. Springer Science & Business. 23, 25

- 
- Zhang, M. and Shu, C.-W. (2005). An analysis of and a comparison between the Discontinuous Galerkin and the Spectral Finite Volume Methods. *Computers & fluids*, 34(4):581–592. 73
- Zienkiewicz, O. C. and Taylor, R. L. (1988). *The finite element method*. McGraw-hill. 44