UNIVERSIDADE ESTADUAL DE CAMPINAS
FACULDADE DE ENGENHARIA MECÂNICA
DEPARTAMENTO DE ENGENHARIA DE PETRÓLEO

ESTE EXEMPLAR
CORRESPONDE A REDAÇÃO FINAL
DA TERE DEFENDIDA PELO ENG. JOSÉ FERNANDO
GARCIA ALMEIDA E APROVADA PELA COMISSÃO
JULGADORA EM 23/11/1990.
Sua assinatura
PROF. DR. FERNANDO IGUTI.

Dissertação Apresentada à
Faculdade de Engenharia Mecânica
Como Requisito Parcial à Obtenção do
Título de Mestre em Engenharia de Petróleo

ALMEIDA

**SIMULAÇÃO DE DESLOCAMENTO MISCÍVEL EM
MEIO POROSO PELO MÉTODO DOS ELEMENTOS
FINITOS**

Autor : José Fernando Garcia Almeida
Orientador : Fernando Iguti
Co-orientador : Antônio Cláudio de França Corrêa

49/90

novembro de 1990

UNIVERSIDADE ESTADUAL DE CAMPINAS
FACULDADE DE ENGENHARIA MECÂNICA
DEPARTAMENTO DE ENGENHARIA DE PETRÓLEO

A dissertação "Simulação de Deslocamento Miscível em Meio Poroso, pelo Método dos Elementos Finitos", elaborada por José Fernando Garcia Almeida e aprovada por todos os membros da Banca Examinadora foi aceita pela Sub-Comissão de Pós Graduação em Engenharia de Petróleo como requisito parcial à obtenção do Título de Mestre em Engenharia de Petróleo.

Campinas, 23 de novembro de 1990

Banca Examinadora

Fernando Iguti, Ph.D.
(Orientador)

Antônio Cláudio de França Corrêa, Ph.D.

José Ricardo Figueiredo, Dr. Eng.

Aos meus pais
que sempre incentivaram meus estudos,
e ainda são meus heróis.

AGRADECIMENTOS

“Há homens que nunca parecem envelhecer. Sempre mentalmente ativos; sempre prontos para adotar idéias novas; satisfeitos e, contudo, querendo mais; realizados e, contudo, cheios de aspirações; sabem gozar o melhor do que há e serem os primeiros a descobrir o melhor do que há de vir”.

(Shakespeare)

Este trabalho não se realizaria sem a dedicação irrestrita, a paciência e a motivação infundáveis do orientador desta tese, Prof. Dr. Fernando Iguti, qualidades que por si só mostram-se pequenas perto da oportunidade maior de tê-lo como amigo.

Por sempre mostrar-se uma fonte de novos desafios e fazer da crença na educação uma conquista do dia-a-dia, agradeço ao co-orientador desta tese, Prof. Dr. Antônio Cláudio de França Corrêa.

Pela gentileza da cessão dos dados do modelo experimental desenvolvido para sua tese, agradeço ao amigo Eng^o. Renato Luiz Almeida dos Santos.

Por compartilharem das dificuldades e alegrias com o espírito de solidariedade e a disposição de construir, agradeço a todos os colegas de Mestrado.

Pelo apoio e solicitude, agradeço a todos os professores de cujo convívio fui honrado.

Pela relação prazerosa durante este período, agradeço a todos os funcionários do Departamento de Engenharia de Petróleo e CEPETRO.

Pela concessão de uma bolsa de estudos e pela postura de investir no homem, agradeço à PETROBRAS S.A..

Nomenclatura

- A = área, $[L]^2$
 c = compressibilidade do fluido, $[M]^{-1} [L] [T]^2$
 C = concentração "in situ"
 C_s = concentração "in situ" da componente salina da solução
 C_w = concentração "in situ" da componente água da solução
 C_f = concentração dinâmica
 C_{fs} = concentração dinâmica da componente salina
 C_i = concentração inicial no meio poroso
 C_1 = concentração do fluido injetado
 D = coeficiente de difusão de Fick, $[L]^2 [T]^{-1}$ (Cap. 2)
 D = profundidade vertical, $[L]$ (Cap. 3)
 f_s = fluxo fracionário da componente salina
 f_w = fluxo fracionário da componente água
 F = fator de resistividade da formação
 g = constante da aceleração da gravidade, $[L] [T]^{-2}$
 h = espessura do reservatório, $[L]$
 k = permeabilidade absoluta do meio, $[L]^2$
 k_1 = permeabilidade efetiva do meio ao fluido deslocado, $[L]^2$
 k_2 = permeabilidade efetiva do meio ao fluido deslocante, $[L]^2$
 k_{rs} = permeabilidade relativa à componente salina
 k_{rw} = permeabilidade relativa à componente água
 K = coeficiente de dispersão, $[L]^2 [T]^{-1}$
 L = comprimento
 L_x = comprimento do domínio na direção x
 L_y = comprimento do domínio na direção y
 M = razão de mobilidade
 $[M]$ = matriz de acumulação
 N_i = planos base da função interpoladora linear
 N_{pe} = número de Peclet
 p = pressão, $[M] [L]^{-1} [T]^{-2}$
 p_1 = pressão no bloco de produção, $[M] [L]^{-1} [T]^{-2}$
 p_D = pressão adimensional
 p_{ij} = pressão em um bloco genérico qualquer, $[M] [L]^{-1} [T]^{-2}$
 p_N = pressão no bloco de injeção, $[M] [L]^{-1} [T]^{-2}$
 p_o = pressão do simulador para o bloco do poço, $[M] [L]^{-1} [T]^{-2}$

- p_{wf} = pressão do fluxo de fundo no poço, $[M] [L]^{-1} [T]^{-2}$
 Δp = queda de pressão, $[M] [L]^{-1} [T]^{-2}$
 q = vazão mássica do fluido, $[M] [L]^{-3}$
 q_D = vazão adimensional
 q_s = vazão mássica da componente salina da solução, $[M] [L]^{-3}$
 Q = vazão volumétrica, $[L]^3 [T]^{-1}$
 Q_i = vazão volumétrica de injeção, $[M] [L]^{-3}$
 $Q_{prod.}$ = vazão volumétrica de produção, $[M] [L]^{-3}$
 $\{Q\}$ = vetor fonte/sumidouro
 r = raio médio das esferas de vidro ou grãos de areia, $[L]$
 r_e = raio equivalente no bloco para a malha utilizada, $[L]$
 r_w = raio do poço, $[L]$
 $[R]$ = matriz de propagação
 t = tempo
 t_{DA} = tempo adimensional
 u = velocidade média no poro, $[L] [T]^{-1}$
 v = velocidade de escoamento superficial, $[L] [T]^{-1}$
 v_0 = velocidade de referência, $[L] [T]^{-1}$
 v_s = velocidade da componente salina, $[L] [T]^{-1}$
 v_{sc} = velocidade da componente salina devido ao transporte convectivo, $[L] [T]^{-1}$
 v_{sd} = velocidade da componente salina devido ao transporte difusivo, $[L] [T]^{-1}$
 v_w = velocidade da componente água, $[L] [T]^{-1}$
 v_{wc} = velocidade da componente água devido ao transporte convectivo, $[L] [T]^{-1}$
 v_{wd} = velocidade da componente água devido ao transporte difusivo, $[L] [T]^{-1}$
 v_x = componente da velocidade na direção x, $[L] [T]^{-1}$
 v_{xD} = componente da velocidade na direção x adimensional
 v_y = componente da velocidade na direção y, $[L] [T]^{-1}$
 v_{yD} = componente da velocidade na direção y adimensional
 v_T = velocidade total, $[L] [T]^{-1}$

Letras Gregas

- α = fator de dispersividade ou coeficiente de mistura, $[L]$
 α_l = fator de dispersividade longitudinal, $[L]$
 α_t = fator de dispersividade transversal, $[L]$
 β = coeficientes da função interpoladora linear
 γ_s = peso específico da componente salina, $[M] [L]^{-2} [T]^{-2}$

- γ_w = peso específico da componente água, $[M] [L]^{-2} [T]^{-2}$
 λ = mobilidade, $[M]^{-1} [L]^3 [T]$
 μ = viscosidade, $[M] [L]^{-1} [T]^{-1}$
 μ_1 = viscosidade do fluido deslocado, $[M] [L]^{-1} [T]^{-1}$
 μ_2 = viscosidade do fluido deslocante, $[M] [L]^{-1} [T]^{-1}$
 ρ = massa específica do fluido, $[M] [L]^{-3}$
 ρ_s = massa específica da componente salina da solução, $[M] [L]^{-3}$
 ϕ = porosidade (Cap.2 e Cap.3)
 ϕ = função interpoladora linear (Cap.4)
 Φ_i = valor da função interpoladora no nó i
 $\dot{\Phi}_i$ = valor da derivada no tempo da função interpoladora no nó i
 ψ = função interpoladora genérica

Resumo

Neste trabalho investiga-se o comportamento do método dos elementos finitos - Galerkin na resolução da equação diferencial linear, bidimensional, da difusão-convecção. O sistema modelado objetiva reproduzir numericamente o comportamento de experimento em laboratório de deslocamento miscível em um meio poroso, sob as seguintes condições: um meio poroso bidimensional, rígido, homogêneo e de formato retangular com injeção à vazão constante em um dos vértices e com produção pelo vértice oposto.

O modelo matemático é considerado linear, assumindo-se uma distribuição espacial homogênea da porosidade, permeabilidade do meio isotrópica e fluidos de mesma viscosidade.

Comparam-se os resultados numéricos com soluções analíticas disponíveis a fim de validar o algoritmo e o programa computacional implementado e confirma-se a invariância da solução para diferentes orientações do sistema de eixos coordenados. Os resultados obtidos atestam a viabilidade e a potencialidade do simulador baseado no Método dos Elementos Finitos.

Abstract

The Galerkin - Finite Element Method applied to the linear, two dimensional, convection-dispersion differential equation is presented in this work. The purpose of this study is to simulate numerically a laboratory experiment of a miscible fluid displacement in porous media under the following assumptions: a regular rectangular 2D domain with a constant volume of effluent injection at a vertex of the rigid, homogeneous, porous medium and with a production well at the opposite vertex.

The mathematical model is considered as linear because the spatial porosity distribution is homogeneous, the permeability is isotropic and the fluids have the same viscosity.

Numerical results are compared with the available analytical solutions in order to validate the algorithm and the implemented computer program. The Finite Element invariance to the system of coordinate direction is confirmed. The obtained results confirm the viability and the potentiality of numerical simulators based on the Finite Element Method.

Lista de Figuras

2.1	Esquema de uma malha padrão de cinco poços (“five-spot”)	3
3.1	Esquema da malha utilizada	14
3.2	Determinação do r_o pela extrapolação da reta de pressão vs. raio	15
3.3	Determinação do r_o pela extrapolação da reta de pressão vs. raio	16
3.4	Aproximação da tensão por seis elementos	17
3.5	Aproximação da velocidade por oito elementos	18
3.6	Curva de permeabilidade relativa	23
4.1	Modelagem para o elemento triangular e quadrangular	31
4.2	Numeração de um elemento triangular	38
4.3	Função interpoladora para o elemento triangular simplex	40
4.4	Elemento triangular simplex	41
4.5	Esquema para um fluxo imposto no contorno do elemento	53
4.6	Esquema da variação linear de φ_i e φ_j no contorno do elemento	56
4.7	Domínio de oito elementos propriamente numerado	60
4.8	Esquema de montagem da matriz global	64
5.1	Campo de pressão no regime permanente	72
5.2	Curvas isobáricas no regime permanente	72
5.3	Campo de velocidade no regime permanente	73
5.4	Curvas isocinéticas no regime permanente	73
5.5	Comparação do período inicial com a solução para reservatório infinito	76
5.6	Progressão da frente de C_{fD} para o caso unidimensional	79
5.7	Perfil da frente de C_{fD} para vários N_{pe}	79
5.8	Progressão da frente de C_D para o caso unidimensional	82
5.9	Perfil da frente de C_D para o caso unidimensional	82
5.10	Progressão da frente de C_D para o caso unidimensional com $N_{pe} = 10$	83
5.11	Curva de concentração do efluente para $N_{pe} = 10$	83
5.12	Curva de concentração do efluente para $N_{pe} = 100$	84
5.13	Curva de concentração do efluente para $N_{pe} = 1000$	84
5.14	Comparação do perfil da frente de concentração “in situ” e dinâmica para $N_{pe} = 10$	85
5.15	Comparação do perfil da frente de concentração “in situ” e dinâmica para $N_{pe} = 100$	86

5.16	Comparação do perfil da frente de concentração “in situ” e dinâmica para $N_{pe} = 1000$	87
5.17	Visão 3-D da propagação da frente de concentração para $t_D = 1$	89
5.18	Visão 3-D da propagação da frente de concentração para $t_D = 2$	89
5.19	Visão 3-D da propagação da frente de concentração para $t_D = 3$	90
5.20	Visão 3-D da propagação da frente de concentração para $t_D = 4$	90
5.21	Comparação da curva de concentração do efluente medido experimentalmente com a solução numérica	91
5.22	Comparação da curva de concentração do efluente medido experimentalmente com a solução numérica	91
5.23	Esquema de rotação da malha para um ângulo qualquer	93
5.24	Curvas de isoconcentração para $t_D = 1$	93
5.25	Curvas de isoconcentração para $t_D = 2$	94
5.26	Curvas de isoconcentração para $t_D = 3$	94
5.27	Curvas de isoconcentração para $t_D = 4$	95
A.1	Volume de controle para o balanço diferencial	99
B.1	Esquema da malha utilizada	105

Lista de Tabelas

4.1	Orientação para os elementos da malha	60
4.2	Valores de θ que correspondem a métodos clássicos	66
5.1	Comparação do p_{wfdi} analítico e numérico no regime permanente	71
5.2	Comparação dos erros percentuais e absolutos no regime permanente	71
5.3	Comparação do período inicial calculado com a solução de reservatório infinito	74
5.4	Comparação do erro para o período inicial calculado	75
5.5	Comparação da solução de C_{fD} para $t_D = 0,2, 0,5$ e $0,8$	78
5.6	Comparação da solução de C_{fD} para $N_{pe} = 10, 100$ e 1000	78
5.7	Comparação da solução de C_D para $N_{pe} = 10, 100,$ e 1000	81
5.8	Comparação da solução de C_D para $t_D = 0,2, 0,5$ e $0,8$	81
5.9	Comparação da solução numérica para diferentes posições dos eixos coordenados	92

Conteúdo

1	Introdução	1
2	O Deslocamento Miscível Ideal	3
2.1	O Escoamento de Traçadores Miscíveis	3
2.2	A Difusão e a Convecção no Deslocamento	4
2.2.1	A Convecção	4
2.2.2	A Difusão Hidrodinâmica	4
2.2.3	Teoria da Zona de Mistura	5
2.3	Experimentos em Laboratório	5
2.3.1	Efeito da Razão de Viscosidade	5
2.3.2	Efeito da Velocidade de Escoamento	6
3	O Modelo Matemático	8
3.1	A Equação Diferencial para Escoamento em Reservatórios	8
3.1.1	Introdução	8
3.1.2	Alguns Operadores Diferenciais	8
3.1.3	Equação Geral para o Fluxo Monofásico	9
3.1.4	O Modelo de Poço	14
3.1.5	Cálculo das Componentes da Velocidade	16
3.2	Equação da Difusão-Convecção	18
3.2.1	A Concentração “in situ”	18
3.2.2	A Concentração Dinâmica	24
3.2.3	Adimensionalização da Equação Diferencial	26
4	O Método dos Elementos Finitos	30
4.1	O Conceito Fundamental do MEF	30
4.2	Formulação Fraca do Método dos Resíduos Ponderados	31
4.2.1	Definições Básicas	31
4.2.2	A Formulação Fraca	34
4.2.3	A Relaxação da Satisfação das Condições de Contorno Naturais para as Funções Admissíveis $\varphi_j(x, y, z)$	35
4.2.4	Relaxação das Condições de Continuidade.	36
4.2.5	Convergência	37

4.3	MEF - Formulação de Galerkin	37
4.3.1	Elemento Triangular Simplex	37
4.3.2	Obtenção das Matrizes dos Elementos	42
4.3.3	Montagem da Matriz Global	59
4.4	O Método Trapezoidal Generalizado	65
4.5	O Método de Runge-Kutta	67
5	Validação do Modelo de Elemento Finito	69
5.1	Validação Computacional da Matriz de Difusividade	69
5.1.1	No Regime Permanente	70
5.1.2	No Regime Transiente	74
5.2	Validação das Matrizes de Difusão-Convecção	75
5.2.1	Caso de Deslocamento Miscível Unidimensional	76
5.2.2	Caso de Deslocamento Miscível Bidimensional	88
5.3	Efeito de Orientação de Malha	92
6	Comentários e Conclusões	96
	Apêndice A - Equação Geral para o Fluxo Monofásico	98
	Apêndice B - Adimensionalização da Equação de Difusividade	104
	Apêndice C - Coeficientes de Difusão	110
	Bibliografia	112

Capítulo 1

Introdução

A equação da difusão-convecção, a qual descreve o deslocamento de escalares em variados tipos de escoamento, particularmente o deslocamento miscível em meio poroso, encontra-se entre as que apresentam um alto grau de dificuldade de resolução através de métodos numéricos. A natureza da equação de concentração varia de parabólica à quase hiperbólica, dependendo da relação entre o termo convectivo e o difusivo (número de Peclet) e das condições de contorno.

A utilização de técnicas de diferenças finitas clássicas como: a aproximação por diferença centrada para o termo convectivo resulta em instabilidades e oscilações. Métodos utilizando a aproximação da diferença à montante apresentam soluções não oscilantes mas com erros significativos que se manifestam no comportamento denominado de difusão numérica. Verifica-se também que a utilização de vários esquemas de diferenças finitas podem apresentar respostas diferentes se a orientação dos eixos coordenados com relação à direção real de fluxo é alterada. Este efeito de orientação de malha está intimamente relacionado com a difusão numérica.

Neste estudo utiliza-se um dos esquemas alternativos a fim de investigar as dificuldades mencionadas acima, o método dos elementos finitos a partir da formulação de Galerkin. A atratividade do método vem se confirmando pelo número crescente de trabalhos realizados, utilizando essa técnica, na resolução de problemas típicos à indústria do petróleo, nessa área.

No segundo capítulo faz-se uma pequena revisão dos mecanismos que governam o deslocamento miscível e introduzem-se alguns conceitos básicos. O último item é destinado a relatos, difundidos na literatura, de alguns comportamentos observados em experimentos de laboratório.

O terceiro capítulo é dedicado ao desenvolvimento do modelo matemático que rege o problema físico. Definem-se as condições de contorno, adimensionaliza-se o sistema de equações e distingue-se o conceito de concentração "in situ", da concentração dinâmica.

O método dos elementos finitos é tratado no capítulo quatro, assim como o conceito fundamental do método dos resíduos ponderados e cada etapa envolvida na obtenção da formulação fraca. Apresenta-se o elemento finito triangular simplex e suas funções interpoladoras. Procurou-se destacar a obtenção das matrizes elementares e como

estas se compõem no processo de obtenção da matriz global do sistema discretizado. Ao final do capítulo faz-se uma rápida menção dos métodos de integração utilizados: o de Runge-Kutta e a Regra do Trapézio Generalizada.

O capítulo cinco é destinado ao teste do algoritmo e do programa computacional. Avalia-se o erro entre as soluções numérica e analítica, onde obtém-se dados para diferentes valores de discretização, do tempo e do espaço. Aproveita-se para comentar o comportamento invariante do método em relação à orientação da malha.

Capítulo 2

O Deslocamento Miscível Ideal

2.1 O Escoamento de Traçadores Miscíveis

Os testes usualmente realizados com traçadores são de dois tipos:

- testes inter-poços no qual o traçador é bombeado por um poço injetor e detetado continuamente em um poço produtor;
- testes de poço no qual o traçador é injetado, de modo que este reaja com o fluido da formação, e depois é produzido pelo mesmo poço.

Este trabalho refere-se ao escoamento em testes do primeiro tipo, efetuados em malha padrão de cinco poços (“five-spot”), Figura 2.1.

Figura 2.1: Esquema de uma malha padrão de cinco poços (“five-spot”)

Dois componentes são mutuamente miscíveis quando se misturam em qualquer proporção sem que haja a formação de interface entre ambos. A definição é equacionada considerando-se a fase composta por componentes mutuamente miscíveis. Nosso estudo considera o deslocamento miscível ideal, ou seja: com componentes que não alteram as propriedades da fase formada.

O caso mais simples que podemos considerar é o deslocamento miscível monofásico de um componente por outro, onde para efetuarmos uma análise quantitativa faz-se necessário o conhecimento do mecanismo de movimento do traçador na formação. Em geral, o transporte do traçador em meio poroso é sujeito a dois fenômenos: a convecção e a difusão.

2.2 A Difusão e a Convecção no Deslocamento

2.2.1 A Convecção

A convecção é usada para descrever o movimento de fluidos governados pela equação de Darcy [3.6]. Este escoamento resulta do gradiente de potencial imposto no sistema. No reservatório a diferença de potencial é estabelecida, ou pela diferença de densidade entre os fluidos escoantes, ou pela diferença de pressão ocasionada pela produção e/ou injeção de fluidos. O fenômeno da convecção depende fundamentalmente da disposição geométrica dos poços e das condições de operação do poço. O nosso estudo visa considerar o caso de arranjo de malha com padrão cinco poços ("five-spot") com vazão de injeção constante.

2.2.2 A Difusão Hidrodinâmica

A difusão hidrodinâmica é composta de duas partes: a difusão molecular e a dispersão mecânica. A difusão molecular resulta do gradiente de concentração dos componentes estabelecido entre dois fluidos miscíveis e ocorre independentemente da velocidade do escoamento. É causada pelo movimento aleatório de moléculas de tipos diferentes. A dispersão mecânica é o resultado do movimento individual das partículas do fluido que escoam com velocidade variável ao longo dos tortuosos canais de um meio poroso. No escoamento bidimensional, tem sido feita uma distinção entre a dispersão mecânica ocorrida na direção do fluxo (dispersão longitudinal), e a que ocorre na direção perpendicular às linhas de fluxo (dispersão transversal).

Como consequência da difusão hidrodinâmica, o traçador gradualmente se espalha e ocupa porções maiores do domínio do escoamento, além da região que ocuparia por efeito do escoamento convectivo puro. O tamanho do espalhamento (ou mistura) depende da dispersividade do meio poroso e da geometria do sistema de escoamento.

2.2.3 Teoria da Zona de Mistura

Quando um fluido miscível desloca outro fluido em um meio poroso, uma zona de transição (região de mistura) é formada entre eles na região de contato. O estabelecimento da zona de mistura é devido ao fenômeno da difusão hidrodinâmica: dispersão mecânica e difusão molecular. O movimento aleatório do fluido, por canais de escoamento irregulares, espalha o fluido deslocante no fluido deslocado, dispersão mecânica, gerando uma região de mistura entre eles. O tamanho do espalhamento depende da capacidade dispersiva do meio poroso. A propriedade do meio poroso que mede esta capacidade de produzir dispersão mecânica é chamada dispersividade. Em geral, a dispersividade é considerada como tendo dois componentes: uma na direção principal do escoamento (dispersão longitudinal) e outra na direção perpendicular ao escoamento principal (dispersão transversal). Para propósitos práticos a dispersão transversal tem um efeito pequeno na mistura dos fluidos se comparado com a dispersão longitudinal, *Harleman et al*[2]. A difusão molecular a um nível macroscópico ocorre como consequência de gradientes de concentração através de superfícies normais à direção média do escoamento. Esta difusão molecular também contribui para o crescimento da região de mistura. Entretanto, tem sido verificado que o efeito da difusão molecular na mistura dos fluidos é desprezível, exceto para deslocamentos a baixas velocidades, *Brigham et al* [3]. Deste modo, na maioria dos casos práticos de escoamento miscível de fluidos em meio poroso, a dispersão mecânica longitudinal é o principal fator de criação da zona de mistura entre os fluidos.

A concentração de cada fluido na zona de mistura pode ser obtida como uma função da posição e do tempo de injeção, se a geometria do escoamento e a dispersividade do meio poroso são conhecidas. Para deslocamentos miscíveis estáveis (na ausência de “frentes de instabilidade” – “viscous fingering”), dispomos de equações que descrevem a concentração dos fluidos sob as seguintes hipóteses: ausência de reação química, ausência de adsorção e ausência de decaimento dos fluidos miscíveis. Soluções exatas foram obtidas para as formas mais simples da equação, considerando que as dimensões físicas do sistema de escoamento são grandes e que o efeito de difusão molecular é desprezível. O grupo adimensional que caracteriza este escoamento é conhecido como número de Peclet. É definido como sendo a relação entre a posição da frente de deslocamento e a constante de dispersão do meio poroso.

2.3 Experimentos em Laboratório

2.3.1 Efeito da Razão de Viscosidade

A razão de mobilidade (M) é definida como sendo a razão entre a mobilidade do fluido deslocante e a do fluido deslocado, ou

$$M = \frac{k_2/\mu_2}{k_1/\mu_1} \quad (2.1)$$

onde,

k_1, k_2 = permeabilidade efetiva do meio ao fluido deslocado e deslocante, respectivamente.

μ_1, μ_2 = viscosidade do fluido deslocado e deslocante, respectivamente.

Em deslocamentos miscíveis, a permeabilidade efetiva a ambos os fluidos é a mesma e M reduz-se a,

$$M = \frac{\mu_1}{\mu_2} \quad (2.2)$$

Estudos experimentais realizados por *Brigham et al* [3], mostraram que a relação de viscosidade durante o deslocamento apresenta grande influência sobre a taxa de dispersão, do seguinte modo:

- a) Quando uma razão de viscosidade favorável foi alterada por um fator de 5,7 (0,175 para 0,998), o coeficiente de dispersão modificou-se por um fator de 5,7. Embora isto pareça sugerir uma relação linear, não foram obtidos dados suficientes para consubstanciar esta conclusão.
- b) Quando efetuou-se uma suave mudança na relação de viscosidade, da favorável (0,998) para a desfavorável (1,002), a taxa de mistura foi desproporcionalmente aumentada e a curva predita pela solução da função erro, equação (5.21), perdeu a validade.
- c) Quando a relação de viscosidade utilizada foi de 5,71, a curva de concentração do efluente foi enormemente estendida e evidências analíticas e visuais mostraram a existência de "frentes de instabilidade" ("viscous fingers") do fluido deslocante propagando-se adiante da frente média de deslocamento.
- d) Para relações de viscosidade acima de 1.0, a solução teórica da curva de função erro não é mais válida.

2.3.2 Efeito da Velocidade de Escoamento

As seguintes conclusões foram tiradas por *Brigham et al* [1] para deslocamentos efetuados com uma relação de viscosidade favorável (razão de viscosidade ≤ 1.0):

- a) Para escoamentos a baixas vazões, o coeficiente de dispersão K é diretamente proporcional ao coeficiente de difusão de Fick,

$$\frac{K}{D} = \frac{1}{F\phi} \quad (2.3)$$

onde,

- K = coeficiente de dispersão (cm^2/sec)
 D = coeficiente de difusão de Fick (cm^2/sec)
 F = fator de resistividade da formação
 ϕ = porosidade

- b) Para escoamentos a altas vazões, o coeficiente de dispersão é caracterizado pela seguinte relação, considerando um meio poroso artificial de esferas de vidro ou arentos:

$$\frac{K}{D} = \alpha \left(\frac{\bar{r}u}{D} \right)^{1.20} \quad (2.4)$$

onde,

- $\bar{r}$ = raio médio das esferas de vidro ou grãos de areia (cm)
 u = velocidade média no poro (cm/sec)
 α = coeficiente de mistura

- c) Alfa (α) nesta equação não é uma constante mas uma função da relação de viscosidade dos fluidos escoantes e da heterogeneidade do meio poroso.
- d) O comprimento da zona de mistura é função da velocidade do escoamento. O comprimento da região de mistura aumenta a baixíssimas vazões de escoamento assim como para altíssimas vazões. Existe portanto uma velocidade para a qual a região de mistura é mínima. Nesta velocidade, a contribuição do coeficiente de difusão molecular é uma fração mínima do coeficiente de difusão total.

Capítulo 3

O Modelo Matemático

3.1 A Equação Diferencial para Escoamento em Reservatórios

3.1.1 Introdução

A simulação de reservatórios é o processo de inferir o comportamento de um reservatório real a partir do desempenho de um modelo daquele reservatório. O modelo pode ser físico, tal qual um modelo de escala em laboratório, ou matemático. Para os nossos propósitos, um modelo matemático de um sistema físico é um conjunto de equações diferenciais parciais, acopladas a um conjunto apropriado de condições de contorno que nós acreditamos descrever adequadamente o processo físico do sistema analisado. Os processos atuantes nos reservatórios de petróleo são basicamente, o escoamento de fluidos e a transferência de massa.

O modelo de equações, além de considerar as forças envolvidas no processo, deve também ser capaz de considerar uma descrição do reservatório com respeito a sua heterogeneidade e geometria. As equações são desenvolvidas pela simples combinação da Lei de Darcy com o diferencial do balanço de materiais.

3.1.2 Alguns Operadores Diferenciais

Seja u_x , u_y e u_z as componentes x, y e z de um vetor $\vec{u}$. O divergente deste vetor, escreve-se $\vec{\nabla} \cdot \vec{u}$, é o operador diferencial tal que:

$$\vec{\nabla} \cdot \vec{u} = \frac{\partial u_x}{\partial x} + \frac{\partial u_y}{\partial y} + \frac{\partial u_z}{\partial z} \quad (3.1)$$

Outro operador diferencial útil é o gradiente, que é o vetor formado pelas derivadas de uma função escalar.

Se u é uma função escalar, o gradiente, escreve-se $\vec{\nabla} u$, é o vetor cuja componente

na direção x é $\frac{\partial u}{\partial x}$, cuja componente na direção y é $\frac{\partial u}{\partial y}$ e cuja componente na direção z é $\frac{\partial u}{\partial z}$, ou seja:

$$\vec{\nabla}u = \frac{\partial u}{\partial x}\vec{i} + \frac{\partial u}{\partial y}\vec{j} + \frac{\partial u}{\partial z}\vec{k} \quad (3.2)$$

Um operador especial que resulta de uma combinação de operadores é o divergente do gradiente de uma função, isto é, $\vec{\nabla} \cdot (\vec{\nabla}u)$, denominado de Laplaciano de u , e abreviado como $\nabla^2 u$, ou seja:

$$\nabla^2 u = \frac{\partial^2 u}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 u}{\partial y^2} + \frac{\partial^2 u}{\partial z^2} \quad (3.3)$$

3.1.3 Equação Geral para o Fluxo Monofásico

3.1.3.1 A Lei de Darcy

A Lei de Darcy para o fluxo monofásico diz que a vazão volumétrica, Q , para um sistema com escoamento horizontal através de um volume poroso de comprimento L e área de seção transversal A , é dada por:

$$Q = \frac{kA \Delta p}{\mu L} \quad (3.4)$$

onde Δp é a queda de pressão aplicada ao comprimento L , μ é a viscosidade do fluido e k é a permeabilidade absoluta do meio.

Para o escoamento numa direção qualquer, nós podemos escrever a lei de Darcy na seguinte forma diferencial:

$$\vec{v} = \frac{Q\vec{\pi}}{A} = -\frac{k}{\mu}\vec{\nabla}p \quad (3.5)$$

onde $v = Q/A$ é a velocidade de escoamento superficial, e $\frac{\partial p}{\partial x}$, $\frac{\partial p}{\partial y}$ e $\frac{\partial p}{\partial z}$ são as componentes do gradiente de pressão na direção x , y e z respectivamente. Observe que o sinal negativo na equação indica que a pressão declina na direção do escoamento.

A equação acima não considera a gravidade, entretanto, pode ser modificada para incluir o termo gravitacional. Considerando a profundidade, D , como uma função arbitrária das coordenadas, (x,y,z) , então a forma diferencial da Lei de Darcy torna-se:

$$\vec{v} = -\frac{k}{\mu}(\vec{\nabla}p - \rho g \vec{\nabla}D) \quad (3.6)$$

onde ρ é a massa específica do fluido e g é o valor da aceleração devido à gravidade.

Derivando a equação diferencial para o escoamento, considera-se o termo para injeção do fluido usando a variável, q , igual a vazão mássica de injeção por unidade de volume de reservatório. (Um q negativo implica em produção). Admite-se que a massa específica do fluido varia com o tempo. Frequentemente a porosidade do meio também se altera com o tempo.

Considerando o meio poroso homogêneo e isotrópico, vide Apêndice A, então k e ϕ são constantes, e obtém-se:

$$\nabla^2 \rho = \frac{\phi \mu c}{k} \frac{\partial \rho}{\partial t} + \frac{\mu c}{k} q \quad (3.7)$$

Da definição de compressibilidade de um fluido pode-se escrever:

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} = c \rho \frac{\partial p}{\partial t} \quad (3.8)$$

e,

$$\frac{\partial \rho}{\partial x} = c \rho \frac{\partial p}{\partial x} \quad (3.9)$$

Diferenciando em relação a x , tem-se:

$$\frac{\partial^2 \rho}{\partial x^2} = c \rho \frac{\partial^2 p}{\partial x^2} + c \frac{\partial \rho}{\partial x} \frac{\partial p}{\partial x} = c \rho \frac{\partial^2 p}{\partial x^2} + c^2 \rho \left(\frac{\partial p}{\partial x} \right)^2 \quad (3.10)$$

Expressão similar é obtida para $\partial^2 \rho / \partial y^2$ e $\partial^2 \rho / \partial z^2$ no que resulta:

$$\nabla^2 \rho = c \rho \nabla^2 p + c^2 \rho \left[\left(\frac{\partial p}{\partial x} \right)^2 + \left(\frac{\partial p}{\partial y} \right)^2 + \left(\frac{\partial p}{\partial z} \right)^2 \right] \quad (3.11)$$

Substituindo a equação (3.11) e a equação (3.8) na equação (3.7) e dividindo por $c \rho$, tem-se:

$$\nabla^2 p + c\left[\left(\frac{\partial p}{\partial x}\right)^2 + \left(\frac{\partial p}{\partial y}\right)^2 + \left(\frac{\partial p}{\partial z}\right)^2\right] = \frac{\phi\mu c}{k} \frac{\partial p}{\partial t} + \frac{\mu}{\rho k} q \quad (3.12)$$

Considerando fluidos de pequena compressibilidade, tem-se:

$$\frac{\partial^2 p}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 p}{\partial y^2} + \frac{\partial^2 p}{\partial z^2} \gg c\left[\left(\frac{\partial p}{\partial x}\right)^2 + \left(\frac{\partial p}{\partial y}\right)^2 + \left(\frac{\partial p}{\partial z}\right)^2\right] \quad (3.13)$$

no que resulta,

$$\nabla^2 p = \frac{\phi\mu c}{k} \frac{\partial p}{\partial t} + \frac{\mu}{\rho k} q \quad (3.14)$$

A formulação acima, conhecida como equação da difusividade será por nós utilizada para definir o campo do gradiente de pressão e o campo de velocidades, que na sua forma bidimensional resulta:

$$\frac{\partial^2 p}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 p}{\partial y^2} = \frac{\phi\mu c}{k} \frac{\partial p}{\partial t} + \frac{\mu}{\rho k} q \quad (3.15)$$

onde o termo de injeção/produção q , vazão mássica de fluido por unidade de volume de reservatório, pode ser escrito em função da vazão volumétrica, Q , para um reservatório de espessura constante, h , como:

$$q = \frac{Q\rho}{Ah} \quad (3.16)$$

3.1.3.2 As Condições de Contorno

Para a análise numérica necessita-se definir ou explicitamente assumir o tipo e a forma do contorno externo ao qual o fluido escoar.

Para o propósito deste trabalho definem-se as condições de contorno da análise para a malha padrão de cinco poços ("five-spot network").

O quadrado maior na Figura 2.1 representa a malha padrão de desenvolvimento do campo e o quadrado menor, por simetria, passa a ser o nosso domínio de estudo, Figura 3.1. Através do modelo matemático desenvolvido pretende-se prever numericamente o comportamento em laboratório de um modelo bidimensional para estudar a injeção de traçadores em meio poroso. Em tal experimento o meio poroso tem forma quadrangular reproduzindo a malha padrão, com injeção em um vértice e produção através do vértice

oposto, submetido à escoamento horizontal.

Para o experimento, dispõe-se de uma bomba de vazão constante sendo que a produção é colhida à pressão atmosférica.

A experiência consiste inicialmente em se injetar água destilada no meio poroso, até que haja uma completa estabilização da pressão de injeção. Após isto, sem quebra da continuidade, injeta-se uma solução aquosa contendo uma concentração conhecida de um traçador salino.

A concentração do traçador no efluente é medida continuamente, sendo que da análise de tal concentração determinam-se os parâmetros que descrevem o deslocamento miscível (monofásico) no meio poroso.

Tais condições podem ser traduzidas matematicamente pelas imposições seguintes:

i) Tem-se a vazão nula em todo contorno,

$$\left. \frac{\partial p(t)}{\partial x} \right|_{\substack{x=0 \\ x=L_x}} = 0 \quad (3.17)$$

$$\left. \frac{\partial p(t)}{\partial y} \right|_{\substack{y=0 \\ y=L_y}} = 0 \quad (3.18)$$

ii) A condição inicial é de pressão atmosférica,

$$p_{ij}(0) = 1 atm \quad (3.19)$$

iii) Para os termos de produção/injeção, tem-se:

$$Q_{prod.} = \frac{2\pi kh (p_1 - p_{wf})}{4 \mu \ln(r_o/r_w)} \quad (3.20)$$

$$Q_{inj.} = \frac{2\pi kh (p_{wf} - p_N)}{4 \mu \ln(r_o/r_w)} = cte \quad (3.21)$$

onde,

p_{wf} = é a pressão do fluxo de fundo no poço

p_1 = é a pressão no bloco de produção

p_N = é a pressão no bloco de injeção

r_w = é o raio do poço

r_o = é o raio equivalente no bloco para a malha utilizada

O raio equivalente é discutido adiante, mais detalhadamente, no item referente ao modelo de poço.

3.1.3.3 Variáveis Adimensionais

A fim de se obter uma maior generalidade na solução, a despeito do sistema de unidade de interesse, adotam-se as seguintes variáveis adimensionais:

$$p_D = \frac{2\pi kh}{Q_i \mu} p(x, y, t) \quad (3.22)$$

onde, Q_i = vazão volumétrica de injeção de fluido

$$t_{DA} = \frac{kt}{\phi \mu c A} \quad (3.23)$$

onde,

$$A = L_x \cdot L_y \quad (3.24)$$

$$x_D = \frac{x}{L_x} \quad (3.25)$$

$$y_D = \frac{y}{L_y} \quad (3.26)$$

Resumindo, vide Apêndice B, a equação a ser discretizada é:

$$\frac{L_y}{L_x} \frac{\partial^2 p_D}{\partial x_D^2} + \frac{L_x}{L_y} \frac{\partial^2 p_D}{\partial y_D^2} = \frac{\partial p_D}{\partial t_{DA}} + q_D \quad (3.27)$$

Figura 3.1: Esquema da malha utilizada

Com as condições de contorno,

$$\left. \frac{\partial p_D}{\partial x_D} \right|_{\substack{x_D = 0 \\ x_D = 1}} = 0 \quad (3.28)$$

$$\left. \frac{\partial p_D}{\partial y_D} \right|_{\substack{y_D = 0 \\ y_D = 1}} = 0 \quad (3.29)$$

e a condição inicial,

$$p_D(x_D, y_D, 0) = 0 \quad (3.30)$$

3.1.4 O Modelo de Poço

Quando se modela o comportamento de um reservatório por um método numérico, frequentemente as dimensões horizontais de qualquer bloco da malha contendo um poço são maiores que o raio daquele poço. É amplamente aceito que a pressão calculada para o bloco do poço difira significativamente da pressão do fluxo de fundo do poço modelado. *Peaceman* [18], propõe um método específico de como fazer a correção para

a malha utilizada, fazendo o uso conveniente de uma associação de raio equivalente, r_o , com o bloco que contém o poço. Este é o raio com qual a pressão de fluxo real do poço, no regime permanente, é igual à pressão calculada numericamente no bloco do poço. Esta definição resulta em:

$$p = p_o + \frac{Q\mu}{2\pi kh} \ln \frac{r}{r_o} \tag{3.31}$$

e,

$$Q = \frac{2\pi kh (p_o - p_{wf})}{\mu \ln(r_o/r_w)} \tag{3.32}$$

onde,

p_o = pressão do simulador para o bloco do poço

p_{wf} = pressão do fluxo de fundo no poço

r_o = raio equivalente para o bloco do poço

r_w = raio do poço

Figura 3.2: Determinação do r_o pela extrapolação da reta de pressão vs. raio

Do exame da solução numérica da equação de Laplace para distâncias próximas ao poço, obtém-se o valor correto para r_o . Isto foi feito calculando-se a distribuição de pressão, no regime permanente, com uma malha padrão de cinco poços, no quadrante de

simetria. Utilizou-se dois tipos de discretização espacial e plotou-se a solução numérica para os vários nós como uma função do raio, Figuras 3.2 e 3.3. Neste gráfico semilog, a linha reta ajusta-se muito bem aos pontos até um raio de $7\Delta x$, onde $\Delta x = L_x/m$ (m é o número de blocos na direção x).

Do gráfico observa-se que a solução numérica dos nós próximos ao poço comporta-se como a solução da equação para o fluxo radial. E extrapolando a linha reta das Figuras 3.2 e 3.3 com a linha horizontal $(p - p_o) = 0$ nota-se que esta interseção ocorre onde $r = r_o$, de onde retiram-se os seguintes resultados,

$$r_o = 0,581\Delta x, \text{ para malha da Figura 3.2}$$

e

$$r_o = 0,457\Delta x, \text{ para malha da Figura 3.3}$$

A validade do conceito de raio equivalente foi desenvolvido para o regime permanente. Entretanto a simulação numérica indica que este também é válido para o regime transiente. A determinação numérica da pressão no poço utilizando o conceito de raio equivalente nos permite a posterior validação do algoritmo numérico pela comparação do valor obtido com a solução analítica, desenvolvida por *Muskat*[16], para a queda de pressão entre poços numa malha padrão de cinco poços ("five-spot").

Figura 3.3: Determinação do r_o pela extrapolação da reta de pressão vs. raio

3.1.5 Cálculo das Componentes da Velocidade

O cálculo das componentes da velocidade nos nós dos elementos apresenta o mesmo procedimento adotado por *Oden*[17], para o cálculo de tensões num campo de deslocamento. As tensões são obtidas pelo cálculo da derivada primeira do deslocamento, analogamente à velocidade com relação à pressão. *Oden* demonstrou que o cálculo de funções

derivadas a partir de funções interpoladoras lineares, utilizando o procedimento convencional apresenta uma descontinuidade nos nós entre dois elementos contíguos. Utilizando-se de funções de aproximação conjugadas demonstrou que o suavizamento obtido pela imposição da condição de continuidade nos nós para as funções derivadas representa uma diminuição na ordem do erro, Figura 3.4.

Figura 3.4: Aproximação da tensão por seis elementos

Portanto as componentes da velocidade nos nós dos elementos ficam definidas da seguinte forma:

$$V_{x_j} = \frac{\sum_{i=1}^N V_{x_j}^i}{N} \quad (3.33)$$

$$V_{y_j} = \frac{\sum_{i=1}^N V_{y_j}^i}{N} \quad (3.34)$$

onde,

N = número de elementos conjugados ao nó j

$$V_{T_j} = \sqrt{V_{x_j}^2 + V_{y_j}^2} \tag{3.35}$$

V_{x_j} = componente da velocidade na direção x para o nó j

V_{y_j} = componente da velocidade na direção y para o nó j

V_{T_j} = componente da velocidade na direção resultante para o nó j

$V_{x_j}^i$ = componente da velocidade na direção x para o nó j devido ao elemento i

$V_{y_j}^i$ = componente da velocidade na direção y para o nó j devido ao elemento i

Figura 3.5: Aproximação da velocidade por oito elementos

3.2 Equação da Difusão-Convecção

3.2.1 A Concentração “in situ”

Quando um fluido desloca miscivelmente um outro fluido em um meio poroso e este deslocamento é estável, ou seja, não forma “frentes de instabilidade” (“viscous fingers”). A equação da difusão-convecção tem sido muito utilizada para descrever este deslocamento. Nesta equação a concentração especificada é a concentração “in situ”. A equação é derivada usando um balanço de material “in situ”.

Aplicando a equação da conservação para a componente salina da solução e considerando um meio poroso incompressível, tem-se:

$$-\vec{\nabla} \cdot (\rho_s \vec{v}_s) = \phi \frac{\partial}{\partial t} (\rho_s C_s) + q_s \tag{3.36}$$

Desenvolvendo a equação (3.36),

$$- \left[\vec{\nabla} \rho_s \cdot \vec{v}_s + \rho_s \vec{\nabla} \cdot \vec{v}_s \right] = \phi \left[C_s \frac{\partial \rho_s}{\partial t} + \rho_s \frac{\partial C_s}{\partial t} \right] + q_s \quad (3.37)$$

Considerando um fluido incompressível, tem-se:

$$- \rho_s \vec{\nabla} \cdot \vec{v}_s = \phi \rho_s \frac{\partial C_s}{\partial t} + q_s \quad (3.38)$$

Dividindo ambos os lados pela massa específica do componente, tem-se:

$$- \vec{\nabla} \cdot \vec{v}_s = \phi \frac{\partial C_s}{\partial t} + \bar{q}_s \quad (3.39)$$

onde

$$\bar{q}_s = \frac{q_s}{\rho_s} \quad (3.40)$$

mas,

$$\vec{v}_s = \vec{v}_{sc} + \vec{v}_{sd} \quad (3.41)$$

onde,

$\vec{v}_{sc}$ = velocidade da componente salina devido ao transporte convectivo

$\vec{v}_{sd}$ = velocidade da componente salina devido ao transporte difusivo

Substituindo as equações (3.41) em (3.39), obtém-se:

$$\vec{\nabla} \cdot (\vec{v}_{sc} + \vec{v}_{sd}) = -\phi \frac{\partial C_s}{\partial t} - \bar{q}_s \quad (3.42)$$

Analogamente para a componente água, tem-se:

$$\vec{\nabla} \cdot (\vec{v}_{wc} + \vec{v}_{wd}) = -\phi \frac{\partial C_w}{\partial t} - \bar{q}_w \quad (3.43)$$

Somando (3.42) e (3.43), tem-se:

$$\vec{\nabla} \cdot (\vec{v}_{sc} + \vec{v}_{sd} + \vec{v}_{wc} + \vec{v}_{wd}) = -\phi \frac{\partial(C_s + C_w)}{\partial t} - \bar{q}_s - \bar{q}_w \quad (3.44)$$

mas,

$$C_s + C_w = 1 \quad (3.45)$$

$$\bar{q}_s + \bar{q}_w = \bar{q}_T \quad (3.46)$$

$$\vec{v}_s + \vec{v}_w = \vec{v}_T \quad (3.47)$$

modelo do coeficiente de difusão (vide Apêndice C)

$$\vec{v}_{sd} = -\alpha |\vec{v}_T| \vec{\nabla} C_s = \quad (3.48)$$

$$= -\alpha |\vec{v}_T| \vec{\nabla} (1 - C_w) =$$

$$= \alpha |\vec{v}_T| \vec{\nabla} C_w$$

$$\vec{v}_{wd} = -\alpha |\vec{v}_T| \vec{\nabla} C_w = -\vec{v}_{sd} \quad (3.49)$$

Substituindo (3.45), (3.46), (3.47) e (3.49) em (3.44), tem-se:

$$\vec{\nabla} \cdot \vec{v}_T = -q_T \quad (3.50)$$

A Lei de Darcy pode ser escrita como:

$$\vec{v}_{wc} = -\lambda_w(\vec{\nabla}p - \gamma_w \vec{\nabla}D) \quad (3.51)$$

$$\vec{v}_{sc} = -\lambda_s(\vec{\nabla}p - \gamma_s \vec{\nabla}D) \quad (3.52)$$

onde,

$$\lambda_l = \frac{kk_{rl}}{\mu_l} \quad l = w, s \quad (3.53)$$

Combinando as equações (3.51) e (3.52), e considerando um fluxo horizontal, tem-se:

$$\vec{v}_{wc} = \frac{\lambda_w}{\lambda_s} \vec{v}_{sc} \quad (3.54)$$

De (3.47),

$$\vec{v}_{wc} = \vec{v}_T - \vec{v}_{sc} \quad (3.55)$$

Substituindo,

$$\vec{v}_{sc} = \vec{v}_T \left(\frac{1}{1 + (\lambda_w/\lambda_s)} \right) \quad (3.56)$$

ou

$$\vec{v}_{wc} = \vec{v}_T \left(\frac{1}{1 + (\lambda_s/\lambda_w)} \right) \quad (3.57)$$

Seja,

$$\frac{1}{1 + (\lambda_s/\lambda_w)} = \frac{\lambda_w}{\lambda_w + \lambda_s} = f_w \quad (3.58)$$

e

$$f_s = \frac{\lambda_s}{\lambda_w + \lambda_s} \quad (3.59)$$

A definição dos coeficientes de fluxo fracionário resulta de (3.58) e (3.59):

$$\vec{v}_{sc} = f_s \vec{v}_T \quad (3.60)$$

$$\vec{v}_{wc} = f_w \vec{v}_T \quad (3.61)$$

Substituindo (3.48) e (3.60) em (3.42), tem-se:

$$\vec{\nabla} \cdot (f_s \vec{v}_T) + \vec{\nabla} \cdot (-\alpha |\vec{v}_T| \vec{\nabla} C_s) = -\phi \frac{\partial C_s}{\partial t} - \bar{q}_s \quad (3.62)$$

Desenvolvendo a equação acima,

$$\vec{\nabla} f_s \cdot \vec{v}_T + f_s \vec{\nabla} \cdot \vec{v}_T - \alpha \vec{\nabla} |\vec{v}_T| \cdot \vec{\nabla} C_s - \alpha |\vec{v}_T| \nabla^2 C_s = -\phi \frac{\partial C_s}{\partial t} - \bar{q}_s \quad (3.63)$$

Multiplicando por (-1) e tendo,

$$\vec{\nabla} f_s = \frac{df_s}{dC_s} \vec{\nabla} C_s \quad (3.64)$$

$$\alpha |\vec{v}_T| \nabla^2 C_s - \vec{v}_T \cdot \frac{df_s}{dC_s} \vec{\nabla} C_s + \alpha \vec{\nabla} |\vec{v}_T| \cdot \vec{\nabla} C_s - f_s \vec{\nabla} \cdot \vec{v}_T = \phi \frac{\partial C_s}{\partial t} + \bar{q}_s \quad (3.65)$$

Considerando-se que:

$$k_{r,l} = F(C_s) = aC_s \quad (3.66)$$

Figura 3.6: Curva de permeabilidade relativa

Seja, $k_{rw} = C_w$
 $k_{rs} = C_s = 1 - C_w$, Figura 3.6

$$f_s = \frac{\lambda_s}{\lambda_w + \lambda_s} = \frac{kk_{rs}/\mu_s}{kk_{rw}/\mu_w + kk_{rs}/\mu_s}$$

Considerando o meio poroso isotrópico e assumindo os fluidos de mesma viscosidade,

$$f_s = \frac{k_{rs}}{k_{rw} + k_{rs}} = \frac{C_s}{1 - C_s + C_s} = C_s \quad (3.67)$$

$$\frac{df_s}{dC_s} = 1 \quad (3.68)$$

Substituindo as equações (3.50), (3.67) e (3.68) em (3.65),

$$\alpha|\vec{v}_T|\nabla^2 C_s - \vec{v}_T \cdot \vec{\nabla} C_s + \alpha\vec{\nabla}|\vec{v}_T| \cdot \vec{\nabla} C_s + C_s \bar{q}_T = \phi \frac{\partial C_s}{\partial t} + \bar{q}_s \quad (3.69)$$

Considerando o escoamento com pequenos gradientes de velocidade e fatores de dispersividade baixos, assume-se:

$$\alpha\vec{\nabla}|\vec{v}_T| \simeq 0 \quad (3.70)$$

Finalmente, substituindo (3.70) na equação (3.69), obtém-se:

$$\underbrace{\alpha|\vec{v}_T|}_K \nabla^2 C_s - \vec{v}_T \cdot \vec{\nabla} C_s = \phi \frac{\partial C_s}{\partial t} \quad (3.71)$$

desenvolvido para o balanço de material “in-situ”, com as seguintes características:

- escoamento isotérmico miscível de 2 (dois) componentes;
- Meio poroso homogêneo e isotrópico;
- Fluido e rocha incompressíveis;
- Fluido Newtoniano;
- Mistura ideal;
- Fluxo monofásico;
- Efeito gravitacional desprezível.

3.2.2 A Concentração Dinâmica

A concentração dinâmica conforme demonstrado por *Brigham* [4], surgiu da análise da condição de contorno utilizada para o caso unidimensional clássico. Onde assume-se o comportamento para pequenas amostras experimentais como sendo o de uma pequena porção de uma amostra infinitamente grande. Por esta condição, o fluido deslocante deve deixar a amostra experimental a uma vazão igual à que atravessa um plano normal ao fluxo situado a uma distância L de uma amostra infinita. A vazão de escoamento do fluido deslocante, Q , que atravessa um plano qualquer é, por definição:

$$Q = v_T A \phi C - K A \phi \frac{\partial C}{\partial \eta} \quad (3.72)$$

onde A é a área do plano e η é a coordenada local normal ao plano.

Tem-se que a vazão total do escoamento é igual a:

$$Q_T = v_T A \phi \quad (3.73)$$

Uma vez que a concentração do fluido escoante é sua vazão dividida pela vazão total, a concentração do fluido deslocante que escoa através de um plano qualquer deve

ser a equação (3.72) dividida pela equação (3.73). Chamemos a concentração que flui, concentração dinâmica, C_f , para distinguirmos da concentração "in situ", C ,

$$C_f = \frac{Q}{v_T A \phi} = C - \frac{K}{v_T} \frac{\partial C}{\partial \eta} \quad (3.74)$$

Como $\frac{\partial C}{\partial \eta}$ é negativo, a equação (3.74) mostra que a concentração escoando através de um plano qualquer é sempre maior do que a concentração no plano.

O fenômeno é análogo ao escoamento bifásico em tubulações, onde a relação gás-líquido "in situ" é, quase sempre, diferente da relação gás-líquido que escoar, em razão de um fluido escoar mais rápido que o outro. A equação acima diz que, em virtude do gradiente de concentração, o fluido deslocante está fluindo mais rápido que o fluido deslocado.

Utiliza-se a equação (3.74) acima para modificar a variável dependente na equação (3.71) para concentração dinâmica, considerando o estado multidimensional.

Diferenciando a equação (3.74) com respeito às coordenadas espaciais, e rearranjando, tem-se:

$$\vec{v}_T \cdot \vec{\nabla} C_f = \vec{v}_T \cdot \vec{\nabla} C - K \vec{\nabla} \left(\frac{\partial C}{\partial \eta} \right) \quad (3.75)$$

Substituindo a equação (3.75) na equação (3.71), obtém-se:

$$- \vec{v}_T \cdot \vec{\nabla} C_{fs} = \phi \frac{\partial C_s}{\partial t} \quad (3.76)$$

Diferenciando a equação (3.74) com respeito à coordenada temporal e rearranjando:

$$\frac{\partial C}{\partial t} = \frac{\partial C_f}{\partial t} + \frac{K}{v_T} \frac{\partial}{\partial t} \left(\frac{\partial C}{\partial \eta} \right) = \frac{\partial C_f}{\partial t} + \frac{K}{v} \frac{\partial}{\partial \eta} \left(\frac{\partial C}{\partial t} \right) \quad (3.77)$$

A inversão da ordem da diferenciação na equação acima é válida em virtude das derivadas parciais serem contínuas neste sistema, e t e η serem variáveis independentes. Substituindo a equação (3.76) na equação (3.77) e resolvendo a diferenciação indicada:

$$\frac{\partial C_s}{\partial t} = \frac{\partial C_{fs}}{\partial t} + \frac{K}{v_T} \frac{\partial}{\partial \eta} \left(\frac{-\vec{v}_T \cdot \vec{\nabla} C_{fs}}{\phi} \right) \quad (3.78)$$

$$\begin{aligned}
&= \frac{\partial C_{fs}}{\partial t} + \frac{K}{v_T} \vec{\eta} \cdot \vec{\nabla} \left(\frac{-\vec{v}_T}{\phi} \cdot \vec{\nabla} C_{fs} \right) \\
&= \frac{\partial C_{fs}}{\partial t} - \frac{K}{v_T} \frac{|\vec{v}_T|}{\phi} \nabla^2 C_{fs} \\
&= \frac{\partial C_{fs}}{\partial t} - \frac{K}{\phi} \nabla^2 C_{fs}
\end{aligned} \tag{3.79}$$

onde $\vec{\eta}$ é o versor unitário na direção da coordenada local η , normal ao plano. Substituindo a equação (3.79) acima na equação (3.76) e rearranjando, obtém-se:

$$K \nabla^2 C_{fs} - \vec{v}_T \cdot \vec{\nabla} C_{fs} = \phi \frac{\partial C_{fs}}{\partial t} \tag{3.80}$$

As equações (3.71) e (3.80) apresentam formas idênticas. Em decorrência de se ter efetuado tão somente uma troca de variáveis para se obter uma da outra, ambas definem o mesmo processo. Para se distingüir qual solução está sendo obtida, se em termos da concentração "in situ" ou da concentração dinâmica, deve-se considerar a condição de contorno. Considerando o caso bidimensional com $K_{xx} = K_{yy} = K$, tem-se: para a concentração "in situ",

$$C_s(0, 0, t) = 1 + \frac{K}{v_T} (\vec{\nabla} C \cdot \vec{\eta}), \tag{3.81}$$

e para concentração dinâmica,

$$C_{fs}(0, 0, t) = 1. \tag{3.82}$$

A condição inicial é comum a ambas as variáveis:

$$C_s(x, y, 0) = C_{fs}(x, y, 0) = 0 \tag{3.83}$$

3.2.3 Adimensionalização da Equação Diferencial

Considerando o caso bidimensional definem-se as seguintes variáveis adimensionais:

$$x_D = \frac{x}{\sqrt{A}} \quad (3.84)$$

$$y_D = \frac{y}{\sqrt{A}} \quad (3.85)$$

onde,

$$A = L_x \cdot L_y$$

$$t_D = \frac{v_0 t}{\phi \sqrt{A}} \quad (3.86)$$

$$C_D = \frac{C_s(x, y, t) - C_i}{C_1 - C_i} \quad (3.87)$$

onde,

C_i = concentração inicial no meio poroso

C_1 = concentração do fluido injetado

v_0 = velocidade de referência

$$N_{pe} = \frac{v_T \sqrt{A}}{K} = \frac{v_T \sqrt{A}}{\alpha v_T} = \frac{\sqrt{A}}{\alpha} \quad (3.88)$$

$$v_{xD} = \frac{v_x}{v_0} \quad (3.89)$$

$$v_{yD} = \frac{v_y}{v_0} \quad (3.90)$$

A equação diferencial para um problema bidimensional:

$$K \left(\frac{\partial^2 C_s}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 C_s}{\partial y^2} \right) - v_x \frac{\partial C_s}{\partial x} - v_y \frac{\partial C_s}{\partial y} = \phi \frac{\partial C_s}{\partial t} \quad (3.91)$$

Da equação (3.84), tem-se:

$$\frac{dx_D}{dx} = \frac{1}{\sqrt{A}} \Rightarrow \frac{\partial}{\partial x} = \frac{1}{\sqrt{A}} \frac{\partial}{\partial x_D} \quad (3.92)$$

Da equação (3.85), tem-se:

$$\frac{dy_D}{dy} = \frac{1}{\sqrt{A}} \Rightarrow \frac{\partial}{\partial y} = \frac{1}{\sqrt{A}} \frac{\partial}{\partial y_D} \quad (3.93)$$

Da equação (3.87), tem-se:

$$\frac{\partial C_D}{\partial x} = \frac{1}{\sqrt{A}} \frac{\partial C_D}{\partial x_D} \quad (3.94)$$

$$\frac{\partial C_D}{\partial y} = \frac{1}{\sqrt{A}} \frac{\partial C_D}{\partial y_D} \quad (3.95)$$

e,

$$\frac{\partial^2 C_D}{\partial x^2} = \frac{\partial}{\partial x} \left(\frac{\partial C_D}{\partial x} \right) = \frac{1}{\sqrt{A}} \frac{\partial}{\partial x_D} \left(\frac{1}{\sqrt{A}} \frac{\partial C_D}{\partial x_D} \right) = \frac{1}{A} \frac{\partial^2 C_D}{\partial x_D^2} \quad (3.96)$$

$$\frac{\partial^2 C_D}{\partial y^2} = \frac{1}{A} \frac{\partial^2 C_D}{\partial y_D^2} \quad (3.97)$$

Da equação (3.86), tem-se:

$$\frac{dt_D}{dt} = \frac{v_0}{\phi \sqrt{A}} \Rightarrow \frac{\partial}{\partial t} = \frac{v_0}{\phi \sqrt{A}} \frac{\partial}{\partial t_D} \quad (3.98)$$

$$\frac{\partial C_D}{\partial t} = \frac{v_0}{\phi\sqrt{A}} \frac{\partial C_D}{\partial t_D} \quad (3.99)$$

Substituindo as equações (3.94), (3.95), (3.96), (3.97), (3.99) em (3.91), tem-se:

$$\frac{K}{A} \left(\frac{\partial^2 C_D}{\partial x_D^2} + \frac{\partial^2 C_D}{\partial y_D^2} \right) - \frac{v_x}{\sqrt{A}} \frac{\partial C_D}{\partial x_D} - \frac{v_y}{\sqrt{A}} \frac{\partial C_D}{\partial y_D} = \frac{\phi v_0}{\phi\sqrt{A}} \frac{\partial C_D}{\partial t_D}$$

Multiplicando todos os termos por $\ast \left(\frac{\sqrt{A}}{v_0} \right)$

$$\frac{K}{v_0\sqrt{A}} \left(\frac{\partial^2 C_D}{\partial x_D^2} + \frac{\partial^2 C_D}{\partial y_D^2} \right) - \frac{v_x}{v_0} \frac{\partial C_D}{\partial x_D} - \frac{v_y}{v_0} \frac{\partial C_D}{\partial y_D} = \frac{\partial C_D}{\partial t_D}$$

$$\frac{v_T}{v_0 N_{pe}} \left(\frac{\partial^2 C_D}{\partial x_D^2} + \frac{\partial^2 C_D}{\partial y_D^2} \right) - v_{x_D} \frac{\partial C_D}{\partial x_D} - v_{y_D} \frac{\partial C_D}{\partial y_D} = \frac{\partial C_D}{\partial t_D} \quad (3.100)$$

Capítulo 4

O Método dos Elementos Finitos

4.1 O Conceito Fundamental do MEF

O MEF é um procedimento matemático desenvolvido para resolver numericamente equações diferenciais da Física e da Engenharia.

Em problemas estruturais estáticos lineares, a aplicação do método resulta num sistema de equações de equilíbrio lineares, a partir da minimização da energia potencial total do sistema.

O método, inicialmente obtido por minimização, foi expandido incluindo procedimentos de resíduos ponderados, como o método de Galerkin e o dos mínimos quadrados, *Brebbia* [2], *Connor et al* [6], *Finlayson* [9] e *Zienkiewicz* [29]. É atualmente aplicado a inúmeros tipos de equações diferenciais, sem necessidade da formulação variacional. Baseia-se no fato de que qualquer variável física, contínua num domínio, pode ser aproximada por uma combinação de funções interpoladoras contínuas, definidas em subdomínios. As funções interpoladoras são definidas localmente usando os valores da variável física em um número finito de pontos dos subdomínios.

O modelo discreto é construído do seguinte modo:

- identifica-se um número finito de pontos, os *pontos nodais*;
- o campo da variável física contínua é considerado como a função a ser determinada;
- o domínio total é dividido em subdomínios chamados *elementos*; cada subdomínio é definido pelos pontos nodais;
- em cada elemento a variável física é aproximada por um polinômio interpolador, de modo que haja continuidade na fronteira entre dois elementos adjacentes.

As derivadas do polinômio não são necessariamente contínuas nas fronteiras, se a ordem da derivada não corresponder a uma condição de contorno essencial.

A possibilidade de se considerar separadamente um elemento típico é um aspecto importante do MEF. Esta propriedade permite que a função interpoladora do elemento

seja definida independentemente da locação final do elemento e das variáveis físicas do problema (Figura 4.1).

Figura 4.1: Modelagem para o elemento triangular e quadrangular

4.2 Formulação Fraca do Método dos Resíduos Ponderados

4.2.1 Definições Básicas

a) Sejam $F(x, y, z)$ e $G(x, y, z)$ funções contínuas em $\mathcal{D}$. O produto interno de F e G é representado por:

$$(F, G) = \langle F, G \rangle = (G, F)$$

cuja operação é definida como:

$$(F, G) = \int_{\mathcal{D}} F \cdot G \, d\mathcal{D} \quad (4.1)$$

b) Operadores Diferenciais.

O operador $\mathcal{L}(\)$ é definido como sendo um processo que quando aplicado a uma função $\phi(x, y, z)$, produz uma outra função $f(x, y, z)$.

Seja $\phi(x, y, z)$ uma função diferenciável até a ordem $2m$.

A $\mathcal{L}_{2m}(\phi)$ é uma expressão contendo ϕ e/ou derivadas, parciais ou ordinárias, de ordem 0 até $2m$.

$$\mathcal{L}_{2m}(\phi) = f \quad \text{em } \mathcal{D} \quad (4.2)$$

As relações entre os coeficientes das derivadas de ϕ em $\mathcal{L}_{2m}(\)$ determinam o tipo de operador:

- elíptico;
- parabólico;
- hiperbólico.

c) Operadores Diferenciais Lineares.

Sejam $\phi_1(x, y, z)$ e $\phi_2(x, y, z)$ funções diferenciáveis e α, β escalares. Um operador diferencial é linear se :

$$\mathcal{L}(\alpha\phi_1 + \beta\phi_2) = \alpha\mathcal{L}(\phi_1) + \beta\mathcal{L}(\phi_2) \quad (4.3)$$

d) Condições de Contorno.

Sejam:

$$\mathcal{L}_{2m}(\phi(x, y, z)) = f(x, y, z) \quad \text{em } \mathcal{D} \quad (4.4)$$

$$B_i(\phi(x, y, z)) = g_i(x, y, z) \quad \text{em } \mathcal{C}, \quad i = 1, 2, \dots, m$$

onde $B_i(\phi)$ são operadores diferenciais contendo ϕ e derivadas de ϕ até a ordem $(2m - 1)$.

- O operador $B_i(\)$ não precisa ser contínuo em todo o contorno $\mathcal{C}$ de $\mathcal{D}$.
- Se $g_i(x, y, z) = 0$, as condições de contorno são chamadas de *homogêneas*.

- Condições de contorno *essenciais* ou *geométricas* são aquelas que envolvem ϕ e derivadas até a ordem $(m - 1)$.
- Condições de contorno *não essenciais* ou *naturais* são aquelas que envolvem derivadas de ϕ de ordem m até $(2m - 1)$.
- ϕ é dita uma função *admissível* se satisfizer as condições de diferenciabilidade para $\mathcal{L}_{2m}(\)$ em $\mathcal{D}$ e as condições de contorno *essenciais*.

e) Função Resíduo, $R(x, y, z)$.

Dado:

$$\mathcal{L}_{2m}(\phi) = f \quad \text{em } \mathcal{D} \tag{4.5}$$

$$B_i(\phi) = g_i \quad \text{em } \mathcal{C}, \quad i = 1, 2, \dots, m$$

Sendo ϕ uma função admissível, definimos a *função resíduo* como:

$$R_{\mathcal{D}} = \mathcal{L}_{2m}(\phi) - f \quad \text{em } \mathcal{D} \tag{4.6}$$

$$R_{\mathcal{C}} = \sum_{i=1}^m (B_i(\phi) - g_i) \quad \text{em } \mathcal{C}_N, \quad i = 1, 2, \dots, m$$

onde $\mathcal{C}_N$ corresponde aos pontos do contorno onde existem condições de contorno naturais.

f) Norma de uma Função.

A norma de uma função $R(x, y, z)$ é definida como sendo a raiz quadrada do produto interno de R em R , e é representada por:

$$\| R \| = (R, R)^{1/2} = \left(\int_{\mathcal{D}} R^2 \, d\mathcal{D} \right)^{1/2} \tag{4.7}$$

g) Resíduo Ponderado.

Chama-se *resíduo ponderado* o escalar resultante do produto interno da função $R(x, y, z)$ e $W_i(x, y, z)$, onde W_i é um conjunto de funções ponderadoras, e representa-se por:

$$(R, W_i) = \int_{\mathcal{D}} R.W_i \, d\mathcal{D}, \quad i = 1, 2, \dots, N \quad (4.8)$$

No método dos resíduos ponderados o resíduo ponderado é forçado a ser zero, num sentido de média, fazendo-se o conjunto de integrais igual a zero:

$$(R, W_i) = 0, \quad i = 1, 2, \dots, N \quad (4.9)$$

4.2.2 A Formulação Fraca

O Método dos Resíduos Ponderados é aplicável a casos onde os operadores diferenciais envolvidos são arbitrários, inclusive aqueles que definem as condições de contorno. A sua formulação na *forma fraca* permite que apenas parte das condições de contorno sejam satisfeitas e, ainda mais importante, o uso de funções base com exigências de condição de continuidade relaxadas.

Inicialmente, entretanto, introduz-se a classificação para o grau de continuidade de uma função. Considere-se a função $R(x)$ definida sobre uma região $\mathcal{S} \in [0, 1]$, contínua por partes e finita em qualquer ponto do domínio. Sua norma satisfaz a seguinte condição:

$$\| R \|_0 = \int_0^L R^2 dx < \infty \quad (4.10)$$

Todas as funções que satisfazem a condição da equação (4.10) acima, são ditas pertencentes ao espaço funcional L_2 . Este espaço inclui a maioria das funções com que lidamos.

A imposição de restrições à continuidade de derivadas configura um sub-espaço, chamado *espaço de Sobolev*. O espaço, $W_2^{(1)}$, contém todas as funções do espaço L_2 cujo quadrado da derivada primeira também é integrável. Essa definição, para a função unidimensional $R(x)$, resulta em:

$$\| R \|_1 = \int_0^L (R^2 + (\frac{dR}{dx})^2) dx < \infty \quad (4.11)$$

O sobrescrito em W refere-se à ordem da maior derivada finita, e o subscrito à medida de norma quadrática. Espaços de ordem superiores são definidos de forma análoga.

Retornando ao problema de se resolver a equação diferencial, tem-se:

$$\mathcal{L}_{2m}(\phi) = f \quad \text{em } \mathcal{D} \quad (4.12)$$

$$B_i(\phi) = g_i \quad \text{em } \mathcal{C}, \quad i = 1, 2, \dots, m$$

Inicialmente, não se faz distinção entre as condições de contorno *essencial* e *natural*.

No método dos resíduos ponderados clássico, a solução aproximada é obtida a partir de:

$$\varphi(x, y, z) = \varphi_0(x, y, z) + \sum_{j=1}^N \beta_j \varphi_j(x, y, z) \quad (4.13)$$

onde as funções $\varphi_0(x, y, z)$ devem satisfazer todas as condições de contorno e $\varphi_j(x, y, z)$ as condições de contorno *homogêneas* associadas (sendo $B_i(\cdot)$ um operador linear). As funções $\varphi_j(x, y, z)$ devem satisfazer as condições de diferenciabilidade que são impostas pelo operador $\mathcal{L}_{2m}(\cdot)$. No mínimo, as derivadas de ordem $(2m - 1)$ devem ser contínuas por partes.

$$(R, W_i) = \int_{\mathcal{D}} \left[\mathcal{L}_{2m} \left(\varphi_0 + \sum_1^N \beta_j \varphi_j \right) - f \right] W_i \, d\mathcal{D} < \infty, \quad i = 1, 2, \dots, N \quad (4.14)$$

onde $W_i(x, y, z)$ deve ser contínua por partes.

4.2.3 A Relaxação da Satisfação das Condições de Contorno Naturais para as Funções Admissíveis $\varphi_j(x, y, z)$.

Substituindo a solução aproximada no contorno, tem-se:

$$B_i(\varphi_0) = g_i \quad \text{em } \mathcal{C}$$

$$B_i(\varphi_j) = 0 \quad \text{em } \mathcal{C}_E \quad (\text{contorno essencial}), \quad j = 1, 2, \dots, N$$

$$B_i(\varphi_k) \neq 0 \quad \text{em } \mathcal{C}_N \quad (\text{contorno natural}), \quad k = 1, 2, \dots, N$$

E obtém-se os resíduos:

$$R_{\mathcal{C}_E} = B_i(\varphi_j) = 0 \quad \text{em } \mathcal{C}_E \quad (4.15)$$

$$R_{\mathcal{C}_N} = B_i(\varphi_k) \neq 0 \quad \text{em } \mathcal{C}_N$$

Portanto, calcula-se o resíduo correspondente às condições de contorno naturais em $\mathcal{C}$ (derivadas de ordem $m \rightarrow (2m - 1)$).

O resíduo ponderado (R, W_i) passa a ser a soma dos resíduos ponderados em $\mathcal{D}$ e em $\mathcal{C}_N$.

$$(R, W_i) = (R_{\mathcal{D}}, W_i) + (R_{\mathcal{C}_N}, W_i) \quad (4.16)$$

4.2.4 Relaxação das Condições de Continuidade.

Considerando o resíduo ponderado no domínio $\mathcal{D}$, tem-se:

$$\begin{aligned} (R, W_i) &= \int_{\mathcal{D}} \left[\mathcal{L}_{2m} \left(\varphi_0 + \sum_1^N \beta_j \varphi_j \right) - f \right] W_i \, d\mathcal{D}, \quad i = 1, 2, \dots, N \\ &= \int_{\mathcal{D}} \mathcal{L}_{2m}(\varphi) W_i \, d\mathcal{D} - \int_{\mathcal{D}} f W_i \, d\mathcal{D} \end{aligned} \quad (4.17)$$

Utilizando-se a integração por partes, por exemplo, para o caso unidimensional:

$$\int u \, dv = u \, v - \int v \, du \quad (4.18)$$

reduz-se a ordem da primeira integral:

$$\int_0^L \frac{d^{2m} \varphi(x)}{dx^{2m}} W_i(x) \, dx = W_i(x) \frac{d^{2m-1} \varphi(x)}{dx^{2m-1}} \Big|_0^L - \int_0^L \frac{d^{2m-1} \varphi(x)}{dx^{2m-1}} \frac{dW_i(x)}{dx} \, dx \quad (4.19)$$

A integração por partes é utilizada até se obter duas funções de mesma ordem na integral, $\frac{d^m \varphi(x)}{dx^m}$ e $\frac{d^m W_j(x)}{dx^m}$.

4.2.5 Convergência

O Método de Galerkin apresenta como característica o fato das funções ponderadoras serem as próprias funções interpoladoras φ_j e de permitir a redução da ordem da maior derivada existente pelo uso da formulação fraca na equação,

$$(\mathcal{L}_{2m}(\varphi), \varphi_j) = 0, \quad j = 1, 2, \dots, N \quad (4.20)$$

reduzindo-se a ordem das derivadas de φ até que se igualem à ordem das derivadas das funções interpoladoras φ_j . Desse modo, se a derivada de maior ordem existente em $\mathcal{L}(\varphi)$ for de ordem $2m$, a aplicação do teorema de Gauss m vezes reduz a derivada de maior ordem na equação (4.20) para ordem m .

Para a convergência até a solução exata é necessário que as funções interpoladoras sejam capazes de representar o valor da função e de suas derivadas até ordem, m . Considerando o uso de funções interpoladoras polinomiais, a condição anterior implica em um polinômio completo, no mínimo, até a ordem m , *Fletcher* [10]. Desse modo, se a derivada segunda aparecer na formulação fraca, então, no mínimo funções de forma quadráticas são exigidas para a obtenção da convergência. Se a sequência de funções interpoladoras que constitui φ , equação (4.13), for completa, a solução aproximada converge para a solução exata no limite, $N \rightarrow \infty$, *Finlayson* [9].

4.3 MEF - Formulação de Galerkin

4.3.1 Elemento Triangular Simplex

Existem duas famílias de elementos simplex bidimensionais: a do triângulo e a do quadrilátero. Os elementos lineares geralmente têm lados retos, mas os de ordem superior (quadrático e cúbico) podem ter lados retos ou curvos. Pode-se modelar lados curvos considerando-se pontos intermediários entre os vértices. Elementos triangulares e quadriláteros podem ser usados em conjunto. Neste trabalho utiliza-se apenas o elemento simplex triangular.

O método dos elementos finitos é baseado no conceito de se aproximar uma função contínua por um modelo semi-discreto, composto de funções contínuas por partes.

Os elementos finitos podem ser classificados de acordo com a ordem do polinômio. O elemento simplex tem um termo constante e mais os termos lineares. O

polinômio:

$$\phi(x, y) = \beta_1 + \beta_2 x + \beta_3 y \quad (4.21)$$

é uma função simplex para um elemento bidimensional triangular. O polinômio interpolador é linear em x e em y , e contém três coeficientes pois um triângulo possui três vértices que definem os nós do elemento. O triângulo é o mostrado na Figura 4.2, com lados retos. Existe a necessidade de uma numeração consistente dos nós, nesse caso feita no sentido trigonométrico, a partir do nó "1".

Figura 4.2: Numeração de um elemento triangular

Aplicando a equação (4.21) aos nós "1", "2" e "3":

$$\begin{aligned} \Phi_1 &= \beta_1 + \beta_2 x_1 + \beta_3 y_1 \\ \Phi_2 &= \beta_1 + \beta_2 x_2 + \beta_3 y_2 \\ \Phi_3 &= \beta_1 + \beta_2 x_3 + \beta_3 y_3 \end{aligned} \quad (4.22)$$

A equação (4.21) na forma matricial pode ser escrita como:

$$\phi(x, y) = [1 \quad x \quad y] \begin{Bmatrix} \beta_1 \\ \beta_2 \\ \beta_3 \end{Bmatrix} \quad (4.23)$$

Mas, do sistema de equações (4.22), tem-se:

$$\begin{Bmatrix} \Phi_1 \\ \Phi_2 \\ \Phi_3 \end{Bmatrix} = \begin{bmatrix} 1 & x_1 & y_1 \\ 1 & x_2 & y_2 \\ 1 & x_3 & y_3 \end{bmatrix} \begin{Bmatrix} \beta_1 \\ \beta_2 \\ \beta_3 \end{Bmatrix} \quad (4.24)$$

ou

$$\{\Phi_i\} = [A] \{\beta_i\}$$

que resulta em:

$$\{\beta_i\} = [A]^{-1} \{\Phi_i\} \quad (4.25)$$

Substituindo (4.25) em (4.23):

$$\phi(x, y) = [1 \quad x \quad y] [A]^{-1} \begin{Bmatrix} \Phi_1 \\ \Phi_2 \\ \Phi_3 \end{Bmatrix} \quad (4.26)$$

Da inversão da matriz $[A]$ se obtém:

$$\begin{aligned} [A]^{-1} &= \frac{1}{2A^e} \begin{bmatrix} (x_2y_3 - x_3y_2) & (x_3y_1 - x_1y_3) & (x_1y_2 - x_2y_1) \\ (y_2 - y_3) & (y_3 - y_1) & (y_1 - y_2) \\ (x_3 - x_2) & (x_1 - x_3) & (x_2 - x_1) \end{bmatrix} \\ &= \frac{1}{2A^e} \begin{bmatrix} a_1 & a_2 & a_3 \\ b_1 & b_2 & b_3 \\ c_1 & c_2 & c_3 \end{bmatrix} \end{aligned} \quad (4.27)$$

onde A^e é a área do triângulo:

$$2A^e = |A| = (x_1y_2 + x_2y_3 + x_3y_1) - (x_1y_3 + x_2y_1 + x_3y_2)$$

Substituindo a equação (4.27) em (4.26) resulta:

Figura 4.3: Função interpoladora para o elemento triangular simplex

$$\phi(x, y) = \frac{1}{2A^e} [(a_1 + b_1x + c_1y) \quad (a_2 + b_2x + c_2y) \quad (a_3 + b_3x + c_3y)] \begin{Bmatrix} \Phi_1 \\ \Phi_2 \\ \Phi_3 \end{Bmatrix} \quad (4.28)$$

ou

$$\phi(x, y) = [N_1(x, y) \quad N_2(x, y) \quad N_3(x, y)] \begin{Bmatrix} \Phi_1 \\ \Phi_2 \\ \Phi_3 \end{Bmatrix} \quad (4.29)$$

e

$$N_i(x, y) = \frac{1}{2A^e} (a_i + b_i x + c_i y) \quad , \quad i = 1, 2 \text{ e } 3$$

Calculando-se, por exemplo, $N(x, y)$ no nó "1", pode-se verificar que $N_1(x_1, y_1) = 1$. Essa propriedade é válida para os outros nós:

$$N_i(x, y) = 1 \quad \text{no nó } i \quad N_i(x_j, y_j) = 0 \quad \text{nos nós } j \neq i$$

Assim, a função $\phi(x, y)$ depende das funções de forma $N_1(x, y)$, $N_2(x, y)$ e

Figura 4.4: Elemento triangular simplex

$N_3(x, y)$, que são lineares em x e y , Figuras 4.3 e 4.4.

As derivadas nas direções x e y tem, respectivamente, a forma:

$$\begin{aligned} \frac{\partial \phi(x, y)}{\partial x} &= \frac{\partial N_1}{\partial x} \Phi_1 + \frac{\partial N_2}{\partial x} \Phi_2 + \frac{\partial N_3}{\partial x} \Phi_3 \\ &= \frac{1}{2A^e} [b_1 \quad b_2 \quad b_3] \{\Phi_i\} \end{aligned} \quad (4.30)$$

$$\frac{\partial \phi(x, y)}{\partial y} = \frac{1}{2A^e} [c_1 \quad c_2 \quad c_3] \{\Phi_i\} \quad (4.31)$$

ou seja, a derivada é constante no elemento. Um gradiente constante no interior do elemento indica que elementos pequenos devem ser usados nas regiões onde haja uma rápida mudança do valor de $\phi(x, y)$.

Reduzindo-se gradativamente o tamanho do elemento, o gradiente tende ao valor real da função sobre o elemento.

Além disso, existe a exigência do elemento ser *conforme*, Fletcher [10]. Isto é, se m for a maior derivada da equação (4.19), a função interpoladora e suas $(m - 1)$ primeiras derivadas devem ser contínuas nos contornos do elemento, Zienkiewicz [29]. Assim, as funções interpoladoras devem pertencer ao espaço de Sobolev (item 4.2.2).

Para efeito do presente estudo, em particular, a maior derivada existente na

equação diferencial governante é de segunda ordem ($m = 2$). Após a aplicação do teorema de Gauss para a forma fraca, $m = 1$; portanto, elementos com continuidade apenas no valor da função são suficientes. Finalmente pode-se afirmar que o uso de elementos *conformes* asseguram a continuidade entre os elementos, exigida para a convergência.

4.3.2 Obtenção das Matrizes dos Elementos

O método de Galerkin é um caso particular do método dos resíduos ponderados no qual as funções ponderadas utilizadas são as próprias funções interpoladoras.

Dado o sistema de equações:

$$\mathcal{L}_{2m}(\phi) - f = 0 \quad \text{em } \mathcal{D}, \quad (4.32)$$

$$B_i(\phi) - g_i = 0 \quad \text{em } \mathcal{C} \quad i = 1, 2, \dots, m$$

e a função aproximação, que satisfaz as condições de contorno essenciais,

$$\phi(x, y) = \sum_{k=1}^3 \Phi_k N_k(x, y) \quad (4.33)$$

O resíduo:

$$R = \mathcal{L}_{2m}\left(\sum_{k=1}^3 \Phi_k N_k\right) - f \quad (4.34)$$

é ortogonalizado em relação às funções interpoladoras N_i :

$$(R, N_i) = 0 \quad (4.35)$$

$$\int_{\mathcal{D}} \left\{ \mathcal{L}_{2m}\left(\sum_{k=1}^N \Phi_k N_k\right) - f \right\} N_i d\mathcal{D} = 0 \quad i = 1, 2, 3$$

Se $\mathcal{L}_{2m}()$ for um operador linear, (4.35) resulta em um sistema de equações lineares, a partir do qual os coeficientes Φ_k podem ser obtidos. Vale lembrar, entretanto,

que o método de Galerkin é igualmente aplicável a problemas não-lineares.

Retornando ao sistema de equações diferenciais sobre o qual se aplica o método:

a) para a pressão p_D , a fim de se determinar o campo de velocidades, tem-se:

$$E_1 \frac{\partial^2 p_D}{\partial x_D^2} + E_2 \frac{\partial^2 p_D}{\partial y_D^2} = E_3 \frac{\partial p_D}{\partial t_{DA}} + q_D \quad (4.36)$$

$$x_D \in [0, 1]$$

$$y_D \in [0, 1]$$

$$t_{DA} \geq 0$$

onde E_1, E_2 e E_3 são constantes.

As condições de contorno são:

$$\frac{\partial p_D}{\partial x_D}(0, y_D, t_{DA}) = 0 \quad ; \quad \frac{\partial p_D}{\partial y_D}(x_D, 0, t_{DA}) = 0$$

$$\frac{\partial p_D}{\partial x_D}(1, y_D, t_{DA}) = 0 \quad ; \quad \frac{\partial p_D}{\partial y_D}(x_D, 1, t_{DA}) = 0$$

e

$$q_{Dinj.} = \frac{-4\pi}{\Delta x_D \cdot \Delta y_D}$$

$$q_{Dprod.} = \frac{\pi p_{1D}}{\Delta x_D \Delta y_D \ln(r_o/r_w)}$$

vide apêndice B.

A condição inicial é:

$$p_D(x_D, y_D, 0) = 0$$

b) para a concentração C_D , tem-se:

$$F_1 \frac{\partial^2 C_D}{\partial x_D^2} + F_2 \frac{\partial^2 C_D}{\partial y_D^2} - v_{x_D} \frac{\partial C_D}{\partial x_D} - v_{y_D} \frac{\partial C_D}{\partial y_D} = F_3 \frac{\partial C_D}{\partial t_D} \quad (4.37)$$

onde F_1, F_2 e F_3 são constantes. Para as condições de contorno :

$$\begin{aligned} v_{x_D}(0, y_D, t_D) = 0 & \quad ; \quad v_{y_D}(x_D, 0, t_D) = 0 \\ v_{x_D}(1, y_D, t_D) = 0 & \quad ; \quad v_{y_D}(x_D, 1, t_D) = 0 \\ \frac{\partial C_D}{\partial x_D}(0, y_D, t_D) = 0 & \quad ; \quad \frac{\partial C_D}{\partial y_D}(x_D, 0, t_D) = 0 \\ \frac{\partial C_D}{\partial x_D}(1, y_D, t_D) = 0 & \quad ; \quad \frac{\partial C_D}{\partial y_D}(x_D, 1, t_D) = 0 \\ C_D(0, 0, t_D) = 1 & \end{aligned}$$

e a condição inicial:

$$C_D(x_D, y_D, 0) = 0$$

Obtendo-se os valores dos resíduos ponderados em relação aos sistemas anteriores, equações (4.36) e (4.37):

a) para a pressão:

$$\begin{aligned} (R, N_i) &= \int \int_{\mathcal{D}} \left(E_1 \frac{\partial^2 \phi}{\partial x_D^2} + E_2 \frac{\partial^2 \phi}{\partial y_D^2} \right) N_i dx_D dy_D + \\ &- \int \int_{\mathcal{D}} E_3 \frac{\partial \phi}{\partial t_{DA}} N_i dx_D dy_D + \\ &- \int \int_{\mathcal{D}} q_D N_i dx_D dy_D = 0 \end{aligned} \quad (4.38)$$

b) para a concentração:

$$\begin{aligned}
 (R, N_i) &= \int \int_{\mathcal{D}} \left(F_1 \frac{\partial^2 \phi}{\partial x_D^2} + F_2 \frac{\partial^2 \phi}{\partial y_D^2} \right) N_i dx_D dy_D + \\
 &- \int \int_{\mathcal{D}} v_{x_D} \frac{\partial \phi}{\partial x_D} N_i dx_D dy_D + \\
 &- \int \int_{\mathcal{D}} v_{y_D} \frac{\partial \phi}{\partial y_D} N_i dx_D dy_D + \\
 &- \int \int_{\mathcal{D}} F_3 \frac{\partial \phi}{\partial t_D} N_i dx_D dy_D = 0
 \end{aligned} \tag{4.39}$$

Para efetuar o cálculo das integrais é necessário considerar-se o conceito fundamental do método dos elementos finitos:

$$\int \int_{\mathcal{D}} \mathcal{L}(\phi) d\mathcal{D} = \sum_{i=1}^{N_{el}} \int \int_{\mathcal{D}^e} \mathcal{L}(\phi) d\mathcal{D}^e \tag{4.40}$$

onde:

N_{el} - número de elementos no qual o domínio foi discretizado

$\mathcal{D}^e$ - domínio do elemento

Utilizando-se de (4.40) calcula-se cada termo do resíduo ponderado, equações (4.38) e (4.39):

a) para o termo da derivada segunda no espaço, tem-se:

$$\int \int_{\mathcal{D}} \left(G_1 \frac{\partial^2 \phi}{\partial x_D^2} + G_2 \frac{\partial^2 \phi}{\partial y_D^2} \right) N_i dx_D dy_D = \sum_{j=1}^{N_{el}} \int \int_{\Delta} \left(G_1 \frac{\partial^2 \phi}{\partial x_D^2} + G_2 \frac{\partial^2 \phi}{\partial y_D^2} \right) N_i dx_D dy_D, \quad i = 1, 2, 3$$

onde G_1 e G_2 são constantes no elemento.

Aplicando a integração por partes:

$$\int \int_{\Delta} G_1 \frac{\partial^2 \phi}{\partial x_D^2} dx_D N_i dy_D = G_1 \int_{c^e} \frac{\partial \phi}{\partial x} N_i dy_D - G_1 \int \int_{\Delta} \frac{\partial \phi}{\partial x} \frac{\partial N_i}{\partial x} dx_D dy_D$$

onde C^e é o contorno do elemento.

$$\int \int_{\Delta} G_2 \frac{\partial^2 \phi}{\partial y_D^2} dy_D N_i dx_D = G_2 \oint_{C^e} \frac{\partial \phi}{\partial y_D} N_i dx_D - G_2 \int \int_{\Delta} \frac{\partial \phi}{\partial y_D} \frac{\partial N_i}{\partial y} dx_D dy_D$$

portanto:

$$\begin{aligned} & \sum_{j=1}^{N_{ei}} \int \int_{\Delta} \left(G_1 \frac{\partial^2 \phi}{\partial x_D^2} + G_2 \frac{\partial^2 \phi}{\partial y_D^2} \right) N_i dx_D dy_D = \\ & - \int \int_{\Delta} \left(G_1 \frac{\partial \phi}{\partial x_D} \frac{\partial N_i}{\partial x_D} + G_2 \frac{\partial \phi}{\partial y_D} \frac{\partial N_i}{\partial y_D} \right) dx_D dy_D + \\ & + G_1 \oint_{C^e} \frac{\partial \phi}{\partial x_D} N_i dy_D + G_2 \oint_{C^e} \frac{\partial \phi}{\partial y_D} N_i dx_D \end{aligned}$$

No sistema de equações considerado, o gradiente ao longo do contorno do problema em questão é nulo, portanto:

$$\frac{\partial \phi}{\partial x} = \frac{\partial \phi}{\partial y} = 0$$

resultando nos seguintes termos das equações:

$$\begin{aligned} & - \int \int_{\Delta} \left(G_1 \frac{\partial \phi}{\partial x_D} \frac{\partial N_1}{\partial x_D} + G_2 \frac{\partial \phi}{\partial y_D} \frac{\partial N_1}{\partial y_D} \right) dx_D dy_D \\ & - \int \int_{\Delta} \left(G_1 \frac{\partial \phi}{\partial x_D} \frac{\partial N_2}{\partial x_D} + G_2 \frac{\partial \phi}{\partial y_D} \frac{\partial N_2}{\partial y_D} \right) dx_D dy_D \\ & - \int \int_{\Delta} \left(G_1 \frac{\partial \phi}{\partial x_D} \frac{\partial N_3}{\partial x_D} + G_2 \frac{\partial \phi}{\partial y_D} \frac{\partial N_3}{\partial y_D} \right) dx_D dy_D \end{aligned} \tag{4.41}$$

Escrevendo o sistema acima na sua forma matricial, considerando a função interpoladora para o elemento triangular, equações (4.29), (4.30) e (4.31), tem-se:

$$\begin{aligned}
 & - \int \int_{\Delta} \begin{bmatrix} G_1 \frac{\partial N_1}{\partial x_D} & G_2 \frac{\partial N_1}{\partial y_D} \\ G_1 \frac{\partial N_2}{\partial x_D} & G_2 \frac{\partial N_2}{\partial y_D} \\ G_1 \frac{\partial N_3}{\partial x_D} & G_2 \frac{\partial N_3}{\partial y_D} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \frac{\partial N_1}{\partial x_D} & \frac{\partial N_2}{\partial x_D} & \frac{\partial N_3}{\partial x_D} \\ \frac{\partial N_1}{\partial y_D} & \frac{\partial N_2}{\partial y_D} & \frac{\partial N_3}{\partial y_D} \end{bmatrix} dx_D dy_D \begin{Bmatrix} \Phi_1 \\ \Phi_2 \\ \Phi_3 \end{Bmatrix} = \\
 & = - \frac{A^e}{4(A^e)^2} \begin{bmatrix} G_1 b_1 & G_2 c_1 \\ G_1 b_2 & G_2 c_2 \\ G_1 b_3 & G_2 c_3 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} b_1 & b_2 & b_3 \\ c_1 & c_2 & c_3 \end{bmatrix} \begin{Bmatrix} \Phi_1 \\ \Phi_2 \\ \Phi_3 \end{Bmatrix}
 \end{aligned}$$

onde A^e é a área do elemento. Continuando:

$$= \frac{-1}{4A^e} \begin{bmatrix} (G_1 b_1^2 + G_2 c_1^2) & (G_1 b_1 b_2 + G_2 c_1 c_2) & (G_1 b_1 b_3 + G_2 c_1 c_3) \\ & (G_1 b_2^2 + G_2 c_2^2) & (G_1 b_2 b_3 + G_2 c_2 c_3) \\ & & (G_1 b_3^2 + G_2 c_3^2) \end{bmatrix} \begin{Bmatrix} \Phi_1 \\ \Phi_2 \\ \Phi_3 \end{Bmatrix}$$

sim.

e representa-se por:

$$[R_d^e] \{\Phi_i\}$$

b) para o termo da derivada no tempo, tem-se:

$$- \int \int_{\Delta} G_3 \frac{\partial \phi}{\partial t} N_i dx_D dy_D = - \sum_{j=1}^{N_{el}} \int \int_{\Delta} G_3 \frac{\partial \phi}{\partial t} N_j dx_D dy_D \quad i = 1, 2, 3 \quad (4.42)$$

onde G_3 é uma constante no domínio do elemento.

Diferenciando a função interpoladora para o elemento triangular, equação (4.33), com respeito ao tempo:

$$\frac{\partial \phi}{\partial t} = [N_1 \quad N_2 \quad N_3] \{\dot{\Phi}_i\}, \quad i = 1, 2, 3 \quad (4.43)$$

Escrevendo o sistema de equações (4.42) na sua forma matricial e substituindo a equação (4.43), tem-se:

$$- \int \int_{\Delta} G_3 \begin{bmatrix} N_1 \\ N_2 \\ N_3 \end{bmatrix} [N_1 \quad N_2 \quad N_3] dx_D dy_D \begin{Bmatrix} \dot{\Phi}_1 \\ \dot{\Phi}_2 \\ \dot{\Phi}_3 \end{Bmatrix} =$$

$$= - \int \int_{\Delta} G_3 \begin{bmatrix} N_1^2 & N_1 N_2 & N_1 N_3 \\ \text{sim.} & N_2^2 & N_2 N_3 \\ & & N_3^2 \end{bmatrix} dx_D dy_D \begin{Bmatrix} \dot{\Phi}_1 \\ \dot{\Phi}_2 \\ \dot{\Phi}_3 \end{Bmatrix} \quad (4.44)$$

A seguinte fórmula de integração, *Connor et al* [6], é válida para o elemento triangular:

$$\int \int_{\Delta} N_1^{\alpha} N_2^{\beta} N_3^{\gamma} dx_D dy_D = \frac{\alpha! \beta! \gamma! 2A^e}{(\alpha + \beta + \gamma + 2)!} \quad (4.45)$$

Utilizando a equação (4.45) em (4.44), obtém-se:

$$- \int \int_{\Delta} G_3 \frac{\partial \phi}{\partial t} N_i dx_D dy_D = -G_3 \frac{A^e}{12} \begin{bmatrix} 2 & 1 & 1 \\ \text{sim.} & 2 & 1 \\ & & 2 \end{bmatrix} \begin{Bmatrix} \dot{\Phi}_1 \\ \dot{\Phi}_2 \\ \dot{\Phi}_3 \end{Bmatrix}$$

e representa-se por:

$$[M^e] \{ \dot{\Phi}_i \}$$

c) para o termo da derivada primeira no espaço, tem-se:

$$\begin{aligned} & - \int \int_{\mathcal{D}} v_{x_D} \frac{\partial \phi}{\partial x_D} N_i dx_D dy_D = \\ & = - \sum_{j=1}^{N_{el}} \int \int_{\mathcal{D}} v_x \frac{\partial \phi}{\partial x_D} N_i dx_D dy_D, \quad i = 1, 2, 3 \end{aligned} \quad (4.46)$$

Escrevendo o sistema de equações (4.46) na sua forma matricial, tem-se:

$$-\frac{1}{2A^e} \int \int_{\Delta} v_{x_D} \begin{bmatrix} N_1 \\ N_2 \\ N_3 \end{bmatrix} [b_1 \quad b_2 \quad b_3] dx_D dy_D \begin{Bmatrix} \Phi_1 \\ \Phi_2 \\ \Phi_3 \end{Bmatrix} =$$

$$= -\frac{1}{2A^e} \int \int_{\Delta} v_{xD} \begin{bmatrix} N_1 b_1 & N_1 b_2 & N_1 b_3 \\ N_2 b_1 & N_2 b_2 & N_2 b_3 \\ N_3 b_1 & N_3 b_2 & N_3 b_3 \end{bmatrix} dx_D dy_D \begin{Bmatrix} \Phi_1 \\ \Phi_2 \\ \Phi_3 \end{Bmatrix} \quad (4.47)$$

Se a componente da velocidade, v_{xD} , na direção x assumir uma variação linear, tem-se:

$$v_{xD} = \begin{bmatrix} N_1 & N_2 & N_3 \end{bmatrix} \begin{Bmatrix} v_{x1} \\ v_{x2} \\ v_{x3} \end{Bmatrix} \quad (4.48)$$

a qual multiplica cada termo da matriz, na equação (4.47). Portanto, calculando-se cada termo, tem-se:

$$\begin{aligned} a_{11} &= \int \int_{\Delta} N_1 b_1 \begin{bmatrix} N_1 & N_2 & N_3 \end{bmatrix} \begin{Bmatrix} v_{x1} \\ v_{x2} \\ v_{x3} \end{Bmatrix} dx_D dy_D = \\ &= b_1 \left[\int \int_{\Delta} N_1 N_1 dx_D dy_D \quad \int \int_{\Delta} N_1 N_2 dx_D dy_D \quad \int \int_{\Delta} N_1 N_3 dx_D dy_D \right] \begin{Bmatrix} v_{x1} \\ v_{x2} \\ v_{x3} \end{Bmatrix} \end{aligned} \quad (4.49)$$

Utilizando-se a fórmula de integração (4.45), nas integrais anteriores, tem-se:

$$\int \int_{\Delta} N_1 N_1 dx_D dy_D = \frac{2!2A^e}{4!} = \frac{A^e}{6} \quad (4.50)$$

$$\int \int_{\Delta} N_1 N_2 dx_D dy_D = \frac{1!1!2A^e}{4!} = \frac{A^e}{12} \quad (4.51)$$

$$\int \int_{\Delta} N_1 N_3 dx_D dy_D = \frac{1!1!2A^e}{4!} = \frac{A^e}{12} \quad (4.52)$$

Substituindo-se (4.50), (4.51) e (4.52) em (4.49):

$$\begin{aligned}
 a_{11} &= b_1 \left[\frac{A^e}{6} \quad \frac{A^e}{12} \quad \frac{A^e}{12} \right] \begin{Bmatrix} v_{x1} \\ v_{x2} \\ v_{x3} \end{Bmatrix} = \\
 &= \frac{b_1 A^e}{12} (2v_{x1} + v_{x2} + v_{x3}) \quad (4.53)
 \end{aligned}$$

Analogamente:

$$a_{12} = \frac{b_2 A^e}{12} (2v_{x1} + v_{x2} + v_{x3}) \quad (4.54)$$

$$a_{13} = \frac{b_3 A^e}{12} (2v_{x1} + v_{x2} + v_{x3}) \quad (4.55)$$

$$a_{21} = \frac{b_1 A^e}{12} (v_{x1} + 2v_{x2} + v_{x3}) \quad (4.56)$$

$$a_{22} = \frac{b_2 A^e}{12} (v_{x1} + 2v_{x2} + v_{x3}) \quad (4.57)$$

$$a_{23} = \frac{b_3 A^e}{12} (v_{x1} + 2v_{x2} + v_{x3}) \quad (4.58)$$

$$a_{31} = \frac{b_1 A^e}{12} (v_{x1} + v_{x2} + 2v_{x3}) \quad (4.59)$$

$$a_{32} = \frac{b_2 A^e}{12} (v_{x1} + v_{x2} + 2v_{x3}) \quad (4.60)$$

$$a_{33} = \frac{b_3 A^e}{12} (v_{x1} + v_{x2} + 2v_{x3}) \quad (4.61)$$

Substituindo as equações de (4.54) a (4.61) em (4.47):

$$\begin{aligned} & - \int \int_{\Delta} v_x \frac{\partial \phi}{\partial x} N_i dx_D dy_D = \\ & = -\frac{1}{24} \begin{bmatrix} b_1(2v_{x1} + v_{x2} + v_{x3}) & b_2(2v_{x1} + v_{x2} + v_{x3}) & b_3(2v_{x1} + v_{x2} + v_{x3}) \\ b_1(v_{x1} + 2v_{x2} + v_{x3}) & b_2(v_{x1} + 2v_{x2} + v_{x3}) & b_3(v_{x1} + 2v_{x2} + v_{x3}) \\ b_1(v_{x1} + v_{x2} + 2v_{x3}) & b_2(v_{x1} + v_{x2} + 2v_{x3}) & b_3(v_{x1} + v_{x2} + 2v_{x3}) \end{bmatrix} \begin{Bmatrix} \Phi_1 \\ \Phi_2 \\ \Phi_3 \end{Bmatrix} \end{aligned} \quad (4.62)$$

e representa-se por:

$$[R_{cx}^e] \{\Phi_i\}$$

Analogamente:

$$\begin{aligned} & - \int \int_{\Delta} v_y \frac{\partial \phi}{\partial y} N_i dx_D dy_D = \\ & -\frac{1}{24} \begin{bmatrix} c_1(2v_{y1} + v_{y2} + v_{y3}) & c_2(2v_{y1} + v_{y2} + v_{y3}) & c_3(2v_{y1} + v_{y2} + v_{y3}) \\ c_1(v_{y1} + 2v_{y2} + v_{y3}) & c_2(v_{y1} + 2v_{y2} + v_{y3}) & c_3(v_{y1} + 2v_{y2} + v_{y3}) \\ c_1(v_{y1} + v_{y2} + 2v_{y3}) & c_2(v_{y1} + v_{y2} + 2v_{y3}) & c_3(v_{y1} + v_{y2} + 2v_{y3}) \end{bmatrix} \begin{Bmatrix} \Phi_1 \\ \Phi_2 \\ \Phi_3 \end{Bmatrix} \end{aligned}$$

e representa-se por:

$$[R_{cy}^e] \{\Phi_i\}$$

Note-se que as matrizes $[R_{cx}^e]$ e $[R_{cy}^e]$ não são simétricas.

d) para o termo fonte tem-se:

$$- \int \int_D q_D N_i dx_D dy_D = - \sum_{i=1}^{N_{el}} \int \int_{\Delta} q N_i dx_D dy_D, \quad i = 1, 2, 3 \quad (4.63)$$

Escrevendo esse sistema de equações na forma matricial resulta:

d.1) tendo $q_D(x, y) = q_o = ct\epsilon$,

$$\{Q_e\} = -q_o \int \int_{\Delta} \begin{bmatrix} N_1 \\ N_2 \\ N_3 \end{bmatrix} dx_D dy_D = \frac{q_o A^e}{3} \begin{Bmatrix} 1 \\ 1 \\ 1 \end{Bmatrix}$$

d.2) tendo

$$q(x, y) = [N_1 \quad N_2 \quad N_3] \{q_i\}, \quad i = 1, 2, 3 \quad (4.64)$$

(variação linear no elemento),

$$\begin{aligned} \{Q_e\} &= - \int \int_{\Delta} \begin{bmatrix} N_1 \\ N_2 \\ N_3 \end{bmatrix} [N_1 \quad N_2 \quad N_3] dx_D dy_D \begin{Bmatrix} q_1 \\ q_2 \\ q_3 \end{Bmatrix} = \\ &= - \int \int_{\Delta} \begin{bmatrix} N_1^2 & N_1 N_2 & N_1 N_3 \\ \text{sim.} & N_2^2 & N_2 N_3 \\ & & N_3^2 \end{bmatrix} dx_D dy_D \begin{Bmatrix} q_1 \\ q_2 \\ q_3 \end{Bmatrix} \end{aligned}$$

Substituindo as equações (4.50), (4.51) e (4.52) nessas integrais,

$$\{Q_e\} = \frac{A^e}{12} \begin{bmatrix} 2 & 1 & 1 \\ & 2 & 1 \\ \text{sim.} & & 2 \end{bmatrix} \begin{Bmatrix} q_1 \\ q_2 \\ q_3 \end{Bmatrix}$$

e representa-se por:

$$\{Q_e\}_F$$

e) para outros tipos de condição de contorno imposta:

e.1) para um fluxo V_n imposto no lado l_{ij} do elemento,

Figura 4.5: Esquema para um fluxo imposto no contorno do elemento

$$\oint_{C^e} V_n \varphi_i ds \tag{4.65}$$

onde:

$$V_n = -G_4 \frac{\partial \phi}{\partial \eta} = cte$$

é o fluxo normal ao contorno, Figura 4.5. G_4 é uma constante característica.

Da integral (4.65) tem-se que:

$$\{Q_e\}_{ij} = \int_0^{l_{ij}} V_n \left\{ \begin{matrix} \varphi_i \\ \varphi_j \end{matrix} \right\} ds \tag{4.66}$$

onde φ_i e φ_j assumem uma variação linear no contorno, Figura 4.6: obtendo-se:

$$\{Q_e\}_{ij} = \int_0^{l_{ij}} V_n \left\{ \begin{matrix} (1 - \frac{s}{l_{ij}}) \\ \frac{s}{l_{ij}} \end{matrix} \right\} ds$$

o que representa para o elemento triangular,

$$\{Q_e\}_{12} = \frac{V_\eta l_{12}}{2} \begin{Bmatrix} 1 \\ 1 \\ 0 \end{Bmatrix}$$

$$\{Q_e\}_{23} = \frac{V_\eta l_{23}}{2} \begin{Bmatrix} 0 \\ 1 \\ 1 \end{Bmatrix}$$

$$\{Q_e\}_{31} = \frac{V_\eta l_{13}}{2} \begin{Bmatrix} 1 \\ 0 \\ 1 \end{Bmatrix}$$

e representa-se por:

$$\{Q_e\}_V$$

e.2) para o valor da variável dependente, conhecido no exterior (por exemplo, pressão de um aquífero, temperatura ambiente, ...), onde tem-se:

$$V_\eta = G_5(\phi - \phi_o) \quad (4.67)$$

sendo G_5 constante característica.

Substituindo a equação (4.67) na integral (4.65) e desenvolvendo, tem-se:

$$\int_{C^e} G_5(\phi - \phi_o)\varphi_i ds = \int_{C^e} G_5\phi\varphi_i ds - \int_{C^e} G_5\phi_o\varphi_i ds \quad (4.68)$$

Calculando cada uma das integrais tem-se:

e.2.1) com $\phi_o = cte$

$$\int_0^{l_{ij}} G_5 \phi_o \begin{Bmatrix} \varphi_i \\ \varphi_j \end{Bmatrix} ds = \{Q_e\}_{ij} \quad (4.69)$$

no que resulta,

$$\{Q_e\}_{12} = \frac{G_5 \phi_o l_{12}}{2} \begin{Bmatrix} 1 \\ 1 \\ 0 \end{Bmatrix}$$

$$\{Q_e\}_{23} = \frac{G_5 \phi_o l_{23}}{2} \begin{Bmatrix} 0 \\ 1 \\ 1 \end{Bmatrix} \quad (4.70)$$

$$\{Q_e\}_{31} = \frac{G_5 \phi_o l_{13}}{2} \begin{Bmatrix} 1 \\ 0 \\ 1 \end{Bmatrix}$$

e.2.2) considerando ϕ_o variando linearmente,

$$\phi_o(s) = \begin{bmatrix} \varphi_i(s) & \varphi_j(s) \end{bmatrix} \begin{Bmatrix} \phi_{oi} \\ \phi_{oj} \end{Bmatrix} \quad (4.71)$$

onde:

$$\varphi_i(s) = \left(1 - \frac{s}{l_{ij}}\right)$$

$$\varphi_j(s) = \frac{s}{l_{ij}}$$

Substituindo a equação (4.71) na integral (4.69), tem-se:

Figura 4.6: Esquema da variação linear de φ_i e φ_j no contorno do elemento

$$\int_0^{l_{ij}} G_5 \begin{bmatrix} \varphi_i \\ \varphi_j \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \varphi_i & \varphi_j \end{bmatrix} ds \begin{Bmatrix} \phi_{oi} \\ \phi_{oj} \end{Bmatrix} =$$

$$\int_0^{l_{ij}} G_5 \begin{bmatrix} (1 - \frac{s}{l_{ij}})^2 & \frac{s}{l_{ij}}(1 - \frac{s}{l_{ij}}) \\ \text{sim.} & (\frac{s}{l_{ij}})^2 \end{bmatrix} ds \begin{Bmatrix} \phi_{oi} \\ \phi_{oj} \end{Bmatrix}$$

Integrando,

$$\{Q_e\}_{ij} = \frac{G_5 l_{ij}}{6} \begin{bmatrix} 2 & 1 \\ 1 & 2 \end{bmatrix} \begin{Bmatrix} \phi_{oi} \\ \phi_{oj} \end{Bmatrix} =$$

$$\frac{G_5 l_{ij}}{6} \begin{Bmatrix} 2\phi_{oi} + \phi_{oj} \\ \phi_{oi} + 2\phi_{oj} \end{Bmatrix}$$

o que representa, para o elemento triangular,

$$\{Q_e\}_{12} = \frac{G_5 l_{12}}{6} \begin{Bmatrix} 2\phi_{o1} + \phi_{o2} \\ \phi_{o1} + 2\phi_{o2} \\ 0 \end{Bmatrix}$$

$$\{Q_e\}_{23} = \frac{G_5 l_{23}}{6} \begin{Bmatrix} 0 \\ 2\phi_{o2} + \phi_{o3} \\ \phi_{o2} + 2\phi_{o3} \end{Bmatrix} \quad (4.72)$$

$$\{Q_e\}_{13} = \frac{G_5 l_{13}}{6} \begin{Bmatrix} 2\phi_{o1} + \phi_{o3} \\ 0 \\ \phi_{o1} + 2\phi_{o3} \end{Bmatrix}$$

e representa-se por:

$$\{Q_e\}_P$$

e.2.3) para $\phi = \begin{bmatrix} \varphi_i & \varphi_j \end{bmatrix} \left\{ \begin{matrix} \Phi_i \\ \Phi_j \end{matrix} \right\}$

$$\begin{aligned} \int_{C^e} G_5 \phi \varphi_i ds &= \int_0^{l_{ij}} G_5 \begin{bmatrix} \varphi_i \\ \varphi_j \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \varphi_i & \varphi_j \end{bmatrix} ds \left\{ \begin{matrix} \Phi_i \\ \Phi_j \end{matrix} \right\} = \\ &= \int_0^{l_{ij}} G_5 \begin{bmatrix} \varphi_i^2 & \varphi_i \varphi_j \\ \text{sim.} & \varphi_j^2 \end{bmatrix} ds \left\{ \begin{matrix} \Phi_i \\ \Phi_j \end{matrix} \right\} \end{aligned} \quad (4.73)$$

Integrando,

$$[R_P^e]_{ij} = \frac{G_5 l_{ij}}{6} \begin{bmatrix} 2 & 1 \\ 1 & 2 \end{bmatrix} \left\{ \begin{matrix} \Phi_i \\ \Phi_j \end{matrix} \right\}$$

o que representa para o elemento triangular,

$$[R_P^e]_{12} = \frac{G_5 l_{12}}{6} \begin{bmatrix} 2 & 1 & 0 \\ 1 & 2 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \end{bmatrix} \left\{ \begin{matrix} \Phi_1 \\ \Phi_2 \\ \Phi_3 \end{matrix} \right\}$$

$$[R_P^e]_{23} = \frac{G_5 l_{23}}{6} \begin{bmatrix} 0 & 0 & 0 \\ 0 & 2 & 1 \\ 0 & 1 & 2 \end{bmatrix} \left\{ \begin{matrix} \Phi_1 \\ \Phi_2 \\ \Phi_3 \end{matrix} \right\}$$

$$[R_P^e]_{13} = \frac{G_5 l_{13}}{6} \begin{bmatrix} 2 & 0 & 1 \\ 0 & 0 & 0 \\ 1 & 0 & 2 \end{bmatrix} \left\{ \begin{matrix} \Phi_1 \\ \Phi_2 \\ \Phi_3 \end{matrix} \right\}$$

Finalmente, somando todas as matrizes, obtém-se:

$$[M^e] \left\{ \dot{\Phi}_i \right\} + \left[[R_d^e] + [R_{cx}^e] + [R_{cy}^e] + [R_P^e] \right] \left\{ \Phi_i \right\} =$$

$$= \{Q_e\}_F + \{Q_e\}_V + \{Q_e\}_P \quad (4.74)$$

ou

$$[M^e] \{\dot{\Phi}_i\} + [R^e] \{\Phi_i\} = \{Q_e\}$$

onde $[M^e]$ é a matriz de acumulação, $[R^e]$ é a matriz de propagação, $\{Q_e\}$ é o vetor fonte/sumidouro de fluxo, $\{\Phi_i\}$ é o vetor de pressão e $\{\dot{\Phi}_i\}$ é a derivada no tempo de $\{\Phi_i\}$.

4.3.3 Montagem da Matriz Global

Nesse item leva-se em conta a relação de um elemento individual com o domínio completo.

A forma geral de interpolação é do tipo:

$$\begin{aligned} \phi^e &= [N] \{\Phi_i\} = \\ &= [N_i^e, N_j^e, N_k^e, \dots, N_r^e] \begin{Bmatrix} \Phi_i \\ \Phi_j \\ \Phi_k \\ \dots \\ \Phi_r \end{Bmatrix} \end{aligned} \quad (4.75)$$

Considere-se um domínio-exemplo discretizado por oito elementos, Figura 4.7: O nó i do elemento é indicado por um “*”. Os nós j e k seguem no sentido trigonométrico.

Figura 4.7: Domínio de oito elementos propriamente numerado

Tem-se a seguinte orientação para os elementos:

	Nós		
	i	j	k
Elemento			
1	1	2	4
2	2	5	4
3	2	3	5
4	3	6	5
5	4	5	7
6	5	8	7
7	5	6	8
8	6	9	8

Tabela 4.1: Orientação para os elementos da malha

Estas igualdades valem no elemento porque relacionam os índices i , j e k de um elemento aos números nodais globais. Substituindo i , j e k em (4.75) para todos os elementos, tem-se:

$$\begin{aligned}
 \phi^1 &= N_1^1 \Phi_1 + N_2^1 \Phi_2 + N_4^1 \Phi_4 \\
 \phi^2 &= N_2^2 \Phi_2 + N_5^2 \Phi_5 + N_4^2 \Phi_4 \\
 \phi^3 &= N_2^3 \Phi_2 + N_3^3 \Phi_3 + N_5^3 \Phi_5 \\
 \phi^4 &= N_3^4 \Phi_3 + N_6^4 \Phi_6 + N_5^4 \Phi_5 \\
 \phi^5 &= N_4^5 \Phi_4 + N_5^5 \Phi_5 + N_7^5 \Phi_7 \\
 \phi^6 &= N_5^6 \Phi_5 + N_8^6 \Phi_8 + N_7^6 \Phi_7 \\
 \phi^7 &= N_5^7 \Phi_5 + N_6^7 \Phi_6 + N_8^7 \Phi_8 \\
 \phi^8 &= N_6^8 \Phi_6 + N_9^8 \Phi_9 + N_8^8 \Phi_8
 \end{aligned} \tag{4.76}$$

onde:

$$N_k^e = \frac{1}{2A^e} (a_k^e + b_k^e x + c_k^e y) \tag{4.77}$$

sendo:

$$\begin{aligned}
 a_k^e &= x_i y_j - x_j y_i \\
 b_k^e &= y_i - y_j \\
 c_k^e &= x_j - x_i
 \end{aligned} \tag{4.78}$$

Note que $N_4^1 \neq N_4^2$ mesmo se $A^1 = A^2$

O sistema de equações (4.76) para fins de implementação computacional é escrito na forma matricial e depois é montado em uma única matriz em função de todos os valores nodais globais. Onde a função global de interpolação é a seguinte:

$$\phi = \sum_{e=1}^{N_{el}} \phi^e \quad (4.79)$$

Exemplificando,

COLUNA 1 2 4

$$\phi^1 = \begin{bmatrix} a_1^1 & a_2^1 & a_4^1 \\ b_1^1 & b_2^1 & b_4^1 \\ c_1^1 & c_2^1 & c_4^1 \end{bmatrix} \begin{Bmatrix} \Phi_1 \\ \Phi_2 \\ \Phi_4 \end{Bmatrix} \begin{matrix} 1 \\ 2 \\ 4 \end{matrix} \text{ LINHA}$$

$$\phi^2 = \begin{bmatrix} a_2^2 & a_5^2 & a_4^2 \\ b_2^2 & b_5^2 & b_4^2 \\ c_2^2 & c_5^2 & c_4^2 \end{bmatrix} \begin{Bmatrix} \Phi_2 \\ \Phi_5 \\ \Phi_4 \end{Bmatrix}$$

$$\phi^3 = \begin{bmatrix} a_2^3 & a_3^3 & a_5^3 \\ b_2^3 & b_3^3 & b_5^3 \\ c_2^3 & c_3^3 & c_5^3 \end{bmatrix} \begin{Bmatrix} \Phi_2 \\ \Phi_3 \\ \Phi_5 \end{Bmatrix}$$

$$\phi^4 = \begin{bmatrix} a_3^4 & a_6^4 & a_5^4 \\ b_3^4 & b_6^4 & b_5^4 \\ c_3^4 & c_6^4 & c_5^4 \end{bmatrix} \begin{Bmatrix} \Phi_3 \\ \Phi_6 \\ \Phi_5 \end{Bmatrix}$$

$$\phi^5 = \begin{bmatrix} a_4^5 & a_5^5 & a_7^5 \\ b_4^5 & b_5^5 & b_7^5 \\ c_4^5 & c_5^5 & c_7^5 \end{bmatrix} \begin{Bmatrix} \Phi_4 \\ \Phi_5 \\ \Phi_7 \end{Bmatrix}$$

$$\phi^6 = \begin{bmatrix} a_5^6 & a_8^6 & a_7^6 \\ b_5^6 & b_8^6 & b_7^6 \\ c_5^6 & c_8^6 & c_7^6 \end{bmatrix} \begin{Bmatrix} \Phi_5 \\ \Phi_8 \\ \Phi_7 \end{Bmatrix}$$

$$\phi^7 = \begin{bmatrix} a_5^7 & a_6^7 & a_8^7 \\ b_5^7 & b_6^7 & b_8^7 \\ c_5^7 & c_6^7 & c_8^7 \end{bmatrix} \begin{Bmatrix} \Phi_5 \\ \Phi_6 \\ \Phi_8 \end{Bmatrix}$$

$$\phi^8 = \begin{bmatrix} a_6^8 & a_9^8 & a_8^8 \\ b_6^8 & b_9^8 & b_8^8 \\ c_6^8 & c_9^8 & c_8^8 \end{bmatrix} \begin{Bmatrix} \Phi_6 \\ \Phi_9 \\ \Phi_8 \end{Bmatrix}$$

Cuja matriz global é:

Figura 4.8: Esquema de montagem da matriz global

4.4 O Método Trapezoidal Generalizado

Relembrando, a equação da difusividade discretizada no espaço pode ser escrita como:

$$[M] \{\dot{\Phi}\} + [R] \{\Phi\} = \{Q\} \quad (4.80)$$

onde $[M]$ é a matriz de acumulação, $[R]$ é a matriz de propagação, $\{Q\}$ é o vetor fonte/sumidouro de fluxo, $\{\Phi\}$ é o vetor de pressão e $\{\dot{\Phi}\}$ é a derivada no tempo de $\{\Phi\}$. As matrizes $[M]$ e $[R]$ são simétricas e positivo-definidas. A equação (4.80) deve ser vista como um sistema de n equações diferenciais ordinárias acopladas.

O problema de valor inicial consiste na determinação da função $\{\Phi\} = \{\Phi(t)\}$ satisfazendo (4.80) e a condição inicial:

$$\{\Phi(0)\} = \{\Phi\}_o \quad (4.81)$$

onde $\{\Phi\}_o$ é dado.

Um dos algoritmos mais comuns utilizados para resolução da equação (4.80) pertence à família de métodos trapezoidais generalizados, que consiste das seguintes equações:

$$[M] \{v\}_{n+1} + [R] \{p\}_{n+1} = \{Q\}_{n+1} \quad (4.82)$$

$$\{p\}_{n+1} = \{p\}_n + \Delta t \{v\}_{n+\theta} \quad (4.83)$$

$$\{v\}_{n+\theta} = (1 - \theta) \{v\}_n + \theta \{v\}_{n+1} \quad (4.84)$$

onde $\{p\}_n$ e $\{v\}_n$ são aproximações para $\{\Phi(t_n)\}$ e $\{\dot{\Phi}(t_n)\}$, respectivamente; $\{Q\}_{n+1} = \{Q(t_{n+1})\}$; Δt é o intervalo de tempo, e θ é um parâmetro pertencente ao intervalo $[0, 1]$.

No caso de $\theta = 0$, o algoritmo é dito *explícito*. Neste caso, a solução pode ser obtida sem a necessidade de resolução de um sistema de equações simultâneas. Para isso,

a matriz $[M]$ deve ser obtida na sua forma diagonalizada ("lumped"), *Hughes* [14].

Se $\theta \neq 0$, o método é dito *implícito*. Nestes casos, o sistema de equações, cuja matriz de coeficientes é $([M] + \theta\Delta t[R])$, precisa ser resolvida a cada intervalo de tempo para avançar na solução. Se o Δt for constante, somente será necessário uma fatorização.

Alguns valores de θ identificam métodos consagrados na literatura, conforme se verifica na Tabela 4.2.

θ	Método
0	Diferença Avançada ou Euler Avançado
1/2	Regra do Trapézio ou Regra do ponto centrado ou Crank-Nicolson
1	Diferença Atrasada ou Euler Atrasado

Tabela 4.2: Valores de θ que correspondem a métodos clássicos

O problema computacional é determinar $\{p\}_{n+1}$ e $\{v\}_{n+1}$ dados $\{p\}_n$ e $\{v\}_n$. O procedimento inicia-se com $n = 0$ e $\{p\}_0$ conhecido. O valor inicial de $\{v\}_0$ pode ser obtido da equação discretizada no tempo para $t = 0$.

$$[M] \{v\}_0 = \{Q\}_0 - [R] \{p\}_0 \quad (4.85)$$

Existem muitos recursos de implementação que podem conduzir do passo n para o $(n + 1)$. Define-se como valor de predição para $\{p\}_{n+1}$ o termo $\{\hat{p}\}_{n+1}$ na forma abaixo:

$$\{\hat{p}\}_{n+1} = \{p\}_n + (1 - \theta)\Delta t \{v\}_n \quad (4.86)$$

O valor predito é substituído na equação (4.87), que é resolvida para o valor de $\{v\}_{n+1}$.

$$([M] + \theta\Delta t [R]) \{v\}_{n+1} = \{Q\}_{n+1} - [R] \{\hat{p}\}_{n+1} \quad (4.87)$$

Observe que os termos do lado direito de (4.87) são conhecidos. Uma vez que $\{v\}_{n+1}$ é determinado, usa-se a equação seguinte para calcular o valor de $\{p\}_{n+1}$:

$$\{p\}_{n+1} = \{\hat{p}\}_{n+1} + \theta\Delta t \{v\}_{n+1} \quad (4.88)$$

4.5 O Método de Runge-Kutta

Pode-se escrever o sistema de equações semi-discretizado como:

$$\{\dot{y}\} = [M]^{-1} (\{Q(t)\} - [R]\{y\}) = \{f(t, \{y\})\} \quad (4.89)$$

O método proposto por Euler para resolução do sistema (4.89) é:

$$\{y_{n+1}\} = \{y_n\} + \Delta t \{f(t_n, \{y_n\})\} \quad (4.90)$$

o qual avança a solução de t_n para $t_{n+1} \equiv t_n + \Delta t$. Progride na solução em intervalos de Δt , mas usa-se somente a informação da derivada no início do intervalo, o que representa um erro incremental da ordem do quadrado do passo, $O(\Delta t^2)$, Press [21].

Existem muita razões para o método de Euler não ser recomendado em usos práticos, entre eles: a precisão em comparação com outros métodos e a alta instabilidade.

Considere-se, entretanto, o uso de um passo tipo Euler (4.90) para obter uma estimativa no ponto intermediário do intervalo. Então, use-se o valor de t e $\{y\}$ do ponto médio para calcular o passo de todo o intervalo. As equações (4.91), (4.92) e (4.93) definem a idéia:

$$\{K_1\} = \{f(t_n, \{y_n\})\} \quad (4.91)$$

$$\{K_2\} = \left\{ f\left(t_n + \frac{\Delta t}{2}, \{y_n\} + \frac{\Delta t}{2} \{K_1\}\right) \right\} \quad (4.92)$$

$$\{y_{n+1}\} = \{y_n\} + \Delta t \{K_2\} + O(\Delta t^3) \quad (4.93)$$

Como mostrado no termo de erro, o método é de segunda ordem. O método é convencionalmente chamado $n^{\text{ésima}}$ ordem, se o termo de ordem incremental do erro é $O(\Delta t^{n+1})$. O método acima denomina-se *Runge-Kutta de segunda ordem*.

No entanto, pode-se calcular $\{f(t, \{y\})\}$ utilizando outros procedimentos que produzem coeficientes diferentes com termo de erro de uma ordem superior. A idéia básica é eliminar os termos com ordem de erro inferiores. Dentro deste princípio, uma das formulações mais usadas tem sido o *Método de Runge-Kutta de quarta ordem*, definido

pelas equações:

$$\{K_1\} = \{f(t_n, \{y_n\})\} \quad (4.94)$$

$$\{K_2\} = \left\{ f\left(t_n + \frac{\Delta t}{2}, \{y_n\} + \frac{\Delta t}{2} \{K_1\}\right) \right\} \quad (4.95)$$

$$\{K_3\} = \left\{ f\left(t_n + \frac{\Delta t}{2}, \{y_n\} + \frac{\Delta t}{2} \{K_2\}\right) \right\} \quad (4.96)$$

$$\{K_4\} = \{f(t_n + \Delta t, \{y_n\} + \Delta t \{K_3\})\} \quad (4.97)$$

$$\{y_{n+1}\} = \{y_n\} + \frac{\Delta t}{6} [\{K_1\} + 2\{K_2\} + 2\{K_3\} + \{K_4\}] + O(\Delta t^5) \quad (4.98)$$

O método do Runge-Kutta de quarta ordem calcula a derivada quatro vezes por intervalo: uma no ponto inicial (Euler), duas no ponto médio e uma no ponto terminal. O valor final da função é calculado a partir de uma média ponderada dessas derivadas.

O uso de um controlador de intervalo de tempo adaptativo é recomendado. No entanto, a verificação da precisão, a repetição da integração e a comparação dos resultados podem representar um custo adicional não compensatório em problemas de baixo transiente.

Capítulo 5

Validação do Modelo de Elemento Finito

5.1 Validação Computacional da Matriz de Difusividade

Considerando a equação da difusividade e as condições de contorno adimensionalizadas, para a malha padrão de cinco poços, tem-se:

$$\frac{L_y}{L_x} \frac{\partial^2 p_D}{\partial x_D^2} + \frac{L_x}{L_y} \frac{\partial^2 p_D}{\partial y_D^2} = \frac{\partial p_D}{\partial t_{DA}} + q_D \quad (5.1)$$

$$\left. \frac{\partial p_D}{\partial x_D} \right|_{x_D=0} = 0 \quad (5.2)$$
$$\left. \frac{\partial p_D}{\partial x_D} \right|_{x_D=1} = 0$$

$$\left. \frac{\partial p_D}{\partial y_D} \right|_{y_D=0} = 0 \quad (5.3)$$
$$\left. \frac{\partial p_D}{\partial y_D} \right|_{y_D=1} = 0$$

$$p_D(x_D, y_D, 0) = 0 \quad (5.4)$$

5.1.1 No Regime Permanente

Tem-se a seguinte solução analítica, no regime permanente, *Muskat* [16], para a queda de pressão, Δp , entre o poço injetor e o produtor com um raio de poço, r_w , e uma distância entre poços, d , Figura 2.1:

$$\Delta p = p_{inj} - p_{prod} = \frac{Q\mu}{\pi kh} \ln \left(\frac{d}{r_w} - 0,6190 \right) \quad (5.5)$$

e

$$d = \sqrt{2}\sqrt{A} \quad (5.6)$$

Substituindo a equação (5.6) em (5.5), tem-se:

$$\Delta p = \frac{Q\mu}{\pi kh} \left[\ln \left(\frac{\sqrt{2}\sqrt{A}}{r_w} \right) - 0,6190 \right] \quad (5.7)$$

Para as condições deste estudo, tem-se:

$$Q_i = \frac{1}{4}Q \quad (5.8)$$

e

$$p_{wf di} = \frac{2\pi kh}{Q_i\mu} \Delta p \quad (5.9)$$

logo, para o fluxo permanente, substituindo a equação (5.7) em (5.9), tem-se:

$$p_{wf di} = \frac{2\pi kh}{Q_i\mu} \left(\frac{4Q_i}{Q} \right) \cdot \frac{Q\mu}{\pi kh} \left[\ln \left(\frac{\sqrt{2}\sqrt{A}}{r_w} \right) - 0,6190 \right] \quad (5.10)$$

$$p_{wf di} = 8 \left[\ln \left(\frac{\sqrt{2}\sqrt{A}}{r_w} \right) - 0,6190 \right] \quad (5.11)$$

Abaixo apresenta-se o quadro comparativo, tabela 5.1, das soluções numéricas

obtidas com a solução analítica:

$\frac{\sqrt{A}}{r_w}$	p_{wfdi}		
	analítico	malha (30x30) ¹	malha (10x10) ²
10 ²	34,6619	34,6476	34,8917
10 ³	53,0826	53,0683	53,3124
10 ⁴	71,5033	71,4890	71,7330

Tabela 5.1: Comparação do p_{wfdi} analítico e numérico no regime permanente

$\frac{\sqrt{A}}{r_w}$	erro %		erro absoluto	
	malha (30x30) ¹	malha (10x10) ²	malha (30x30) ¹	malha (10x10) ²
10 ²	0,0412	0,6629	0,0143	0,2298
10 ³	0,0269	0,4329	0,0143	0,2298
10 ⁴	0,0199	0,3212	0,0143	0,2297

Tabela 5.2: Comparação dos erros percentuais e absolutos no regime permanente

Verifica-se pela Tabela 5.2 a convergência da solução com o refinamento da malha. O erro absoluto não varia com a mudança da relação entre a área e o raio do poço.

O erro apresentado pela malha menos refinada (10x10)², é considerado aceitável, no entanto, as malhas utilizadas na propagação da frente de concentração são mais refinadas (10x10)¹.

Plotou-se os valores obtidos numericamente para determinar os campos de pressão, Figura 5.1, e velocidade, Figura 5.3. Estes foram montados por rebatimento em torno do poço injetor uma vez que simulou-se o quadrante de simetria.

Apresenta-se também as projeções em curvas de nível dos campos, Figuras 5.2 e 5.4, respectivamente. As projeções em curvas de nível permitem uma melhor visualização do comportamento radial nas proximidades do poço e dos eixos de simetria.

¹padrão tipo Figura 3.2

²padrão tipo Figura 3.1

Figura 5.1: Campo de pressão no regime permanente

Figura 5.2: Curvas isobáricas no regime permanente

Figura 5.3: Campo de velocidade no regime permanente

Figura 5.4: Curvas isocinéticas no regime permanente

5.1.2 No Regime Transiente

Compara-se o período inicial calculado com a solução de um reservatório infinito, modelo de fonte linear. Num poço de injeção à vazão constante, para instantes iniciais, podemos aproximar a pressão por:

$$p_{wf di} = \frac{1}{2} \ln \left(\frac{4t_D}{\nu} \right) \quad (5.12)$$

onde,

$$t_D = \frac{kt}{\phi\mu c r_w^2} = \frac{kt A}{\phi\mu c r_w^2 A} = t_{DA} \left(\frac{\sqrt{A}}{r_w} \right)^2 \quad (5.13)$$

$$\nu = e^\gamma = 1,781 \quad (5.14)$$

Considerando que $Q_{five-spot} = 4Q_i$, tem-se:

$$p_{wf di} = 2 \ln \left(\frac{4t_{DA}}{\nu} \left(\frac{\sqrt{A}}{r_w} \right)^2 \right) \quad (5.15)$$

Abaixo apresenta-se o quadro comparativo, tabela 5.3, das soluções calculadas numericamente com a analítica. O domínio do modelo finito foi considerado como quadrado.

$\frac{\sqrt{A}}{r_w} = 100$	$p_{wf di nj}$		
	malha (30x30) ¹	malha (10x10) ¹	modelo infinito
t_{DA}			
0,005	9,4373	9,5331	9,4423
0,015	11,6065	11,6459	11,6395
0,025	12,6254	12,6495	12,6612
0,105	15,4927	15,4986	15,5313

Tabela 5.3: Comparação do período inicial calculado com a solução de reservatório infinito

$\frac{\sqrt{A}}{r_w} = 100$	erro			
	malha (30x30) ¹		malha (10x10) ¹	
t_{DA}	%	abs.	%	abs.
0,005	0,0529	0,0050	0,9616	0,0908
0,015	0,2835	0,0330	0,0550	0,0064
0,025	0,2827	0,0358	0,0924	0,0117
0,105	0,2485	0,0386	0,2110	0,0327

Tabela 5.4: Comparação do erro para o período inicial calculado

A malha mais refinada, (30x30)¹, apresenta um erro superior à malha (10x10)¹. Isto pode ser devido ao fato do erro de arredondamento aumentar significativamente com o crescimento do número de operações. Ou devido ao erro de consistência, que depende de Δt e Δx . Eventualmente, o erro em Δt pode estar dominando o problema.

Para um $t_{DA} \leq 0,1$ o valor calculado numericamente apresenta um comportamento semelhante ao da solução para reservatório infinito, com erros sempre inferiores a 0,2%, Figura 5.5.

O método numérico de integração utilizado na resolução do sistema de equações diferenciais algébrico foi o de Crank-Nicholson.

A magnitude do erro, para o período onde o modelo comporta-se como reservatório infinito, mostra-se aceitável, para os propósitos deste trabalho.

5.2 Validação das Matrizes de Difusão-Convecção

Considerando a equação da difusão-convecção, equação (3.100), e as condições de contorno adimensionalizadas, para a malha padrão de cinco poços, tem-se:

$$\frac{v_T}{v_0 N_{pe}} \left(\frac{\partial^2 C_D}{\partial x_D^2} + \frac{\partial^2 C_D}{\partial y_D^2} \right) - v_{x_D} \frac{\partial C_D}{\partial x_D} - v_{y_D} \frac{\partial C_D}{\partial y_D} = \frac{\partial C_D}{\partial t_D} \quad (5.16)$$

$$v_{x_D}(0, y_D, t_D) = 0 \quad ; \quad v_{y_D}(x_D, 0, t_D) = 0$$

$$v_{x_D}(1, y_D, t_D) = 0 \quad ; \quad v_{y_D}(x_D, 1, t_D) = 0$$

$$\frac{\partial C_D}{\partial x_D}(0, y_D, t_D) = 0 \quad ; \quad \frac{\partial C_D}{\partial y_D}(x_D, 0, t_D) = 0 \quad (5.17)$$

Figura 5.5: Comparação do período inicial com a solução para reservatório infinito

$$\frac{\partial C_D}{\partial x_D}(1, y_D, t_D) = 0 \quad ; \quad \frac{\partial C_D}{\partial y_D}(x_D, 1, t_D) = 0$$

$$C_D(0, 0, t_D) = 1 \quad (5.18)$$

$$C_D(x_D, y_D, 0) = 0$$

5.2.1 Caso de Deslocamento Miscível Unidimensional

Pode-se considerar a equação diferencial (5.16) acima para o caso unidimensional e assumir um campo de velocidades uniforme no espaço e constante no tempo, no que resulta:

$$\frac{1}{N_{pe}} \frac{\partial^2 C_D}{\partial x_D^2} - \frac{\partial C_D}{\partial x_D} = \frac{\partial C_D}{\partial t_D} \quad (5.19)$$

a equação (5.19) apresenta solução analítica, obtida por transformada de Laplace, para duas condições de contorno distintas: para a concentração dinâmica e a concentração “in situ”.

5.2.1.1 Solução para a Concentração Dinâmica

Conforme apresentado por Corrêa et al [7], a solução da equação (5.19) é determinada para a concentração dinâmica considerando as seguintes condições de contorno:

$$\begin{aligned} C_{fD}(0, t_D) &= 1 \\ C_{fD}(x_D \rightarrow \infty, t_D) &= 0 \end{aligned} \quad (5.20)$$

e a condição inicial

$$C_{fD}(x_D, 0) = 0$$

no que resulta,

$$C_{fD}(x_D, t_D) = \frac{1}{2} \operatorname{erfc} \left(\frac{x_D - t_D}{2\sqrt{\frac{t_D}{N_{pe}}}} \right) + \frac{e^{x_D N_{pe}}}{2} \operatorname{erfc} \left(\frac{x_D + t_D}{2\sqrt{\frac{t_D}{N_{pe}}}} \right) \quad (5.21)$$

Abaixo apresentam-se algumas tabelas onde se comparam soluções numéricas e soluções analíticas, equação (5.21). A malha do modelo finito foi considerado como unidimensional de comprimento $L_x = 1$.

Das tabelas (5.5) e (5.6) observa-se o comportamento convergente apresentado com o refinamento da malha. Para os propósitos deste trabalho as soluções numéricas obtidas apresentam uma aproximação da solução exata com uma magnitude de erro aceitável. A boa concordância da solução calculada numericamente com a solução exata implica na validação do *elemento* e do *algoritmo* implementado, independentemente do caso simulado ser unidimensional ou bidimensional, uma vez que todos os coeficientes da matriz dos elementos são determinados como se os elementos fossem bidimensionais, não importando qual a dimensão física do problema. A simulação de um caso unidimensional utilizando um elemento bidimensional é levada a efeito através da imposição de condições de contorno convenientes.

Da tabela 5.5 observa-se a existência de “overshoot”. Estes apresentam-se bem condicionados e tendem a decair com o tempo, convergindo para a solução exata.

Podemos analisar visualmente os resultados apresentados nas tabelas 5.5 e 5.6

$N_{pe} = 100$	C_{fd}								
	$t_D = 0,2$			$t_D = 0,5$			$t_D = 0,8$		
x_D	exato	malha (1x40) ¹	malha (1x80) ¹	exato	malha (1x40) ¹	malha (1x80) ¹	exato	malha (1x40) ¹	malha (1x80) ¹
0,125	0,9193	0,9145	0,9189	1,0000	1,0053	1,0025	1,0000	1,0016	1,0008
0,250	0,2549	0,2366	0,2439	0,9961	1,0011	0,9985	1,0000	1,0045	1,0022
0,375	0,0038	0,0087	0,0049	0,9150	0,9111	0,9129	0,9998	1,0015	1,0007
0,500	0,0000	0,0001	0,0000	0,5395	0,5200	0,5332	0,9935	0,9919	0,9922
0,625	0,0000	0,0000	0,0000	0,1218	0,1273	0,1228	0,9302	0,9302	0,9296
0,750	0,0000	0,0000	0,0000	0,0076	0,0125	0,0089	0,6836	0,6783	0,6836
0,875	0,0000	0,0000	0,0000	0,0001	0,0005	0,0002	0,3017	0,3039	0,3040
1,000	0,0000	0,0000	0,0000	0,0000	0,0000	0,0000	0,0649	0,0876	0,0789

Tabela 5.5: Comparação da solução de C_{fd} para $t_D = 0,2, 0,5$ e $0,8$

$t_D = 0,2$	C_{fd}								
	$N_{pe} = 10$			$N_{pe} = 100$			$N_{pe} = 1000$		
x_D	exato	malha (1x40) ¹	malha (1x80) ¹	exato	malha (1x40) ¹	malha (1x80) ¹	exato	malha (1x80) ¹	malha (1x200) ¹
0,125	0,8280	0,8266	0,8274	0,9193	0,9145	0,9189	0,9999	1,0196	0,9999
0,250	0,5502	0,5455	0,5481	0,2549	0,2366	0,2439	0,0070	0,0385	0,0150
0,375	0,2767	0,2720	0,2743	0,0038	0,0087	0,0049	0,0000	0,0000	0,0000
0,500	0,1013	0,0992	0,1000	0,0000	0,0001	0,0000	0,0000	0,0000	0,0000

Tabela 5.6: Comparação da solução de C_{fd} para $N_{pe} = 10, 100$ e 1000

pelos figuras 5.6 e 5.7.

Figura 5.6: Progressão da frente de C_{fD} para o caso unidimensional

Figura 5.7: Perfil da frente de C_{fD} para vários N_{pe}

5.2.1.2 Solução para a Concentração “In Situ”

Conforme apresentado por *Brigham* [4], a solução da equação (5.19) é determinada para a concentração “in situ” considerando as seguintes condições de contorno:

$$C_D(0, t_D) = 1 + \frac{1}{N_{pe}} \frac{\partial C_D}{\partial x_D}$$

$$C_D(x_D \rightarrow \infty, t_D) = 0$$

e a condição inicial

$$C_D(x_D, 0) = 0$$

o que resulta,

$$C_D(x_D, t_D) = \frac{1}{2} \operatorname{erfc} \left(\frac{x_D - t_D}{2\sqrt{\frac{t_D}{N_{pe}}}} \right) + \frac{t_D}{\sqrt{\pi \frac{t_D}{N_{pe}}}} \cdot e^{-\left(\frac{x_D - t_D}{2\sqrt{\frac{t_D}{N_{pe}}}} \right)^2} - [N_{pe}(x_D + t_D) + 1] \frac{1}{2} e^{x_D N_{pe}} \cdot \operatorname{erfc} \left(\frac{x_D + t_D}{2\sqrt{\frac{t_D}{N_{pe}}}} \right) \quad (5.22)$$

Abaixo apresentam-se as tabelas 5.7 e 5.8 onde comparam-se a solução numérica e a solução analítica, equação (5.22).

A condição de contorno foi modelada como sendo um fluxo imposto na fronteira externa, variando no tempo:

$$-\frac{1}{N_{pe}} \frac{\partial C_D}{\partial x_D} = 1 - C_D \quad (5.23)$$

O método de integração utilizado tanto para o cálculo da concentração dinâmica como para a concentração “in situ” foi o de Runge-Kutta de quarta ordem.

Independentemente da condição de contorno modelada, a concordância da solução numérica obtida com a solução exata mostrou-se bastante aceitável para os padrões de

$N_{pe} = 100$	C_D					
	$t_D = 0,2$		$t_D = 0,5$		$t_D = 0,8$	
x_D	exato	malha $(1 \times 80)^1$	exato	malha $(1 \times 80)^1$	exato	malha $(1 \times 80)^1$
0,000	0,9998	0,9998	1,0000	1,0000	1,0000	1,0000
0,125	0,8878	0,8887	0,9999	1,0000	1,0000	1,0000
0,250	0,2088	0,2078	0,9945	0,9949	1,0000	1,0000
0,375	0,0025	0,0032	0,8967	0,8974	0,9997	0,9997
0,500	0,0000	0,0000	0,4992	0,4967	0,9916	0,9921
0,625	0,0000	0,0000	0,1036	0,1044	0,9182	0,9188
0,750	0,0000	0,0000	0,0059	0,0066	0,6542	0,6527
0,875	0,0000	0,0000	0,0001	0,0001	0,2752	0,2741
1,000	0,0000	0,0000	0,0000	0,0000	0,0560	0,0650

Tabela 5.7: Comparação da solução de C_D para $N_{pe} = 10, 100, e 1000$

$t_D = 0,2$	C_D					
	$N_{pe} = 10$		$N_{pe} = 100$		$N_{pe} = 1000$	
x_D	exato	malha $(1 \times 80)^1$	exato	malha $(1 \times 80)^1$	exato	malha $(1 \times 80)^1$
0,000	0,8493	0,8496	0,9998	0,9998	1,0000	1,0000
0,125	0,6173	0,6171	0,8878	0,8887	0,9999	0,9999
0,250	0,3555	0,3551	0,2088	0,2078	0,0061	0,0131
0,375	0,1551	0,1550	0,0025	0,0032	0,0000	0,0000
0,500	0,0496	0,0499	0,0000	0,0000	0,0000	0,0000

Tabela 5.8: Comparação da solução de C_D para $t_D = 0,2, 0,5 e 0,8$

engenharia, Figuras 5.8, 5.9 e 5.10.

5.2.1.3 Análise de Resultados

É usual medir-se em laboratório a concentração do efluente no modelo experimental, com o propósito de se comparar o experimento com o valor simulado.

Conforme apresentado por *Brigham* [3], *Correa et al* [7], o valor da concentração do efluente, em amostras experimentais homogêneas, medido para um volume poroso injetado é sempre superior à 50%. A magnitude desse acréscimo é função do número de Peclet, Figuras 5.11, 5.12 e 5.13.

A observação das curvas de concentração do efluente permite avaliar o balanço de material, conforme mostra *Brigham* [3], traçando-se uma linha vertical a um volume poroso injetado. As áreas hachuradas de cada lado da linha vertical devem ser iguais,

Figura 5.8: Progressão da frente de C_D para o caso unidimensional

Figura 5.9: Perfil da frente de C_D para o caso unidimensional

Figura 5.10: Progressão da frente de C_D para o caso unidimensional com $N_{pe} = 10$

Figura 5.11: Curva de concentração do efluente para $N_{pe} = 10$

Figura 5.12: Curva de concentração do efluente para $N_{pe} = 100$

Figura 5.13: Curva de concentração do efluente para $N_{pe} = 1000$

Figura 5.14: Comparação do perfil da frente de concentração “in situ” e dinâmica para $N_{pe} = 10$

Figuras 5.11, 5.12 e 5.13. A solução analítica conforme demonstrado por *Brigham* [3], mantém constante o balanço de material e a concordância da solução obtida numericamente com esta reflete a conservação de massa pelo algoritmo implementado.

As Figuras 5.14, 5.15 e 5.16 apresentam um perfil comparativo do comportamento da frente de concentração “in situ” e dinâmica, para $N_{pe} = 10$, 100 e 1000, no $t_D = 0,2$. Observa-se facilmente a diferença significativa da solução para baixos N_{pe} e como as respostas tendem a coincidir para escoamentos com características mais convectivas que difusivas.

Figura 5.15: Comparação do perfil da frente de concentração “in situ” e dinâmica para $N_{pe} = 100$

Figura 5.16: Comparação do perfil da frente de concentração “in situ” e dinâmica para $N_{pe} = 1000$

5.2.2 Caso de Deslocamento Miscível Bidimensional

Considerando a equação diferencial (5.16) simulou-se o caso desenvolvido experimentalmente, pelo Eng^o Renato L. A. dos Santos [23], onde consideram-se os seguintes dados:

$$k = 500md, \quad [4,934.10^{-11} m^2]$$

$$h = 2,03cm, \quad [2,03.10^{-2} m]$$

$$L_x = 15cm, \quad [15.10^{-2} m]$$

$$L_y = 15cm, \quad [15.10^{-2} m]$$

$$q_i = 15cm^3/h, \quad [4,17.10^{-9} m^3/s]$$

$$\phi = 0,1775$$

$$c_i = 7,35.10^{-5}atm^{-1}, \quad [7,25.10^{-10} Pa^{-1}]$$

$$\alpha = 0,115cm, \quad [0,115.10^{-2} m]$$

$$N_{pe} = 130,4$$

$$\sqrt{A}/r_w = 30$$

A simulação foi realizada com uma malha $(10 \times 10)^1$ e um intervalo de tempo, $dt = 0,01$, utilizando o método de Runge-Kutta. As Figuras 5.17, 5.18, 5.19 e 5.20 apresentam visões 3-D da propagação da frente de concentração. Nota-se a presença de um pequeno "overshoot" nos instantes iniciais da simulação a qual converge para a solução exata com avanço no tempo.

As Figuras 5.24, 5.25, 5.26 e 5.27, são as projeções em curvas de nível da propagação da frente, estas permitem uma visualização mais clara de como o modelo usado de elementos finitos apresenta-se invariante em relação à orientação da malha (será mais detalhado no item 4.3), não apresentando atenuações da frente, problema comum às discretizações por diferenças finitas clássicas, *Settari et al* [25], considerando-se uma malha orientada na direção diagonal (a 45°) com a linha que une os poços de injeção e produção.

As Figuras 5.21 e 5.22 apresentam a curva de concentração de efluente medida experimentalmente ("breakthrough curve") comparada com a curva obtida pela simulação numérica. A curva simulada numericamente apresenta uma boa coincidência com a curva obtida experimentalmente.

Isto significa que o comportamento do modelo experimental desenvolvido é fortemente governado pela equação de difusão-convecção como poderia ter sido atestado imprimindo-se os dados de concentração de efluente contra a função U (função modificada do volume), num gráfico log-probabilidade conforme mostra *Brigham* [4].

2D - $N_{pe}=130,4$ - $t_d=1$ - $dt=0,01$ - 10×10

Figura 5.17: Visão 3-D da propagação da frente de concentração para $t_D = 1$

2D - $N_{pe}=130,4$ - $t_d=2$ - $dt=0,01$ - 10×10

Figura 5.18: Visão 3-D da propagação da frente de concentração para $t_D = 2$

2D - $N_{pe}=130,4$ - $t_D=3$ - $dt=0,01$ - 10×10

Figura 5.19: Visão 3-D da propagação da frente de concentração para $t_D = 3$

2D - $N_{pe}=130,4$ - $t_D=4$ - $dt=0,01$ - 10×10

Figura 5.20: Visão 3-D da propagação da frente de concentração para $t_D = 4$

Figura 5.21: Comparação da curva de concentração do efluente medido experimentalmente com a solução numérica

Figura 5.22: Comparação da curva de concentração do efluente medido experimentalmente com a solução numérica

5.3 Efeito de Orientação de Malha

Em alguns casos ocorre uma convergência aparente da solução para diferentes respostas dependendo da orientação do sistema de eixos coordenados. Este fenômeno numérico reflete um escoamento preferencial ao longo das linhas da malha. Em diferenças finitas existem orientações clássicas do sistema de eixos coordenados: a malha paralela, a zero grau (0°), com a linha que une os poços de injeção e produção e a diagonal, a quarenta e cinco graus (45°). Pelo método dos elementos finitos pode-se considerar facilmente qualquer orientação dos eixos. Para tanto é suficiente multiplicar as coordenadas nodais da malha gerada inicialmente e o respectivo campo de velocidades pela matriz de rotação, para qualquer ângulo, θ , desejado, Figura 5.23.

Abaixo apresenta-se um quadro comparativo de soluções obtidas para diferentes posições do sistema de eixos coordenados: $\theta = 0^\circ, 30^\circ, 45^\circ$ e 60° .

$N_{pe} = 100$	C_{fd}							
$t_D = 0,2$	x_D							
θ	0,125	0,175	0,225	0,275	0,325	0,375	0,425	0,450
0°	0,9196	0,7112	0,3969	0,1451	0,0333	0,0048	0,0004	0,0001
30°	0,9196	0,7112	0,3969	0,1451	0,0333	0,0048	0,0004	0,0001
45°	0,9196	0,7112	0,3969	0,1451	0,0333	0,0048	0,0004	0,0001
60°	0,9196	0,7112	0,3969	0,1451	0,0333	0,0048	0,0004	0,0001

Tabela 5.9: Comparação da solução numérica para diferentes posições dos eixos coordenados

Observa-se da Tabela 5.9 a inexistência de efeito de orientação de malha. Este resultado está em concordância com o trabalho apresentado por *Settari et al* [25], que utilizou um modelo variacional tendo a função “Chapéu” como base.

Figura 5.23: Esquema de rotação da malha para um ângulo qualquer

2D - Npe=130,4 - td=1 - dt=0,01 - 10x10

Figura 5.24: Curvas de isoconcentração para $t_D = 1$

Figura 5.25: Curvas de isoconcentração para $t_D = 2$

Figura 5.26: Curvas de isoconcentração para $t_D = 3$

Figura 5.27: Curvas de isoconcentração para $t_D = 4$

Capítulo 6

Comentários e Conclusões

As dificuldades típicas encontradas em discretizações clássicas feitas por diferenças finitas, quais sejam: dispersão numérica e o efeito de orientação de malha mostraram-se imperceptíveis no método dos Elementos Finitos.

O aparecimento de "overshoot" mostrou-se bem condicionado, mesmo nos instantes iniciais, decaindo com tempo e tendendo à solução exata.

Reproduziram-se vários estudos clássicos da literatura analisando o comportamento para a concentração "in situ" e dinâmica. Os resultados obtidos apresentaram um bom grau de concordância com as soluções analíticas exatas.

A comparação com o resultado de um modelo experimental desenvolvido em laboratório atesta a viabilidade e a potencialidade do simulador baseado no MEF na predição da concentração em amostras cujo comportamento é governado pela equação difusão-convecção.

Para escoamentos altamente convectivos, $N_{pe} > 1000$, o perfil da frente apresenta um gradiente forte, onde faz-se necessário um grande refinamento da malha, de alto custo computacional. A utilização de elementos de ordem superior possivelmente reduziria o número de elementos necessários à malha, no entanto acredita-se que o uso de elementos com função de interpolação adaptativa, malha hierárquica, representaria um menor custo computacional. A malha hierárquica utiliza funções de ordem superior somente nos elementos cujo gradiente da função esteja acima de um valor previamente definido.

A fim de possibilitar estudos mais abrangentes é sugerida a extensão deste trabalho para escoamentos com razão de mobilidade superior a 1(um), equação da difusão-convecção não-linear.

No decorrer do desenvolvimento deste trabalho apareceram várias sugestões de temas para trabalhos futuros. Assim foi o questionamento apresentado por A.C. Corrêa, durante o exame de qualificação, no sentido de se trabalhar no domínio de Laplace para obter a solução da equação de difusão-convecção linear. Método este onde se pretende discretizar espacialmente a equação diferencial por elementos finitos, e utilizando-se uma formulação modal, transformar as equações diferenciais algébricas ao espaço de Laplace onde a obtenção da solução no domínio do tempo imagina-se possível por inversão analítica

da solução obtida no espaço de Laplace.

Outra continuação natural deste trabalho é a implementação de um elemento tridimensional, onde inicialmente sugere-se o elemento tetraédrico.

O programa computacional ainda encontra-se distante do seu potencial de otimização, para tanto, recomenda-se a implementação de um controlador de intervalo de tempo, um controlador do grau de implicitude do método de integração e um estimador de erros.

Outro estudo promissor é o desenvolvimento de elementos paramétricos adaptativos em especial na geração de malhas, nesse caso a discretização teria como um dos objetivos acompanhar a tendência das linhas fluxo.

Apêndice A : Equação Geral para o Fluxo Monofásico

A Lei de Darcy para o fluxo monofásico diz que a vazão volumétrica, Q , para um sistema com escoamento horizontal através de um volume poroso de comprimento L e área de seção transversal A , é dada por:

$$Q = \frac{kA \Delta p}{\mu L} \quad (\text{A.1})$$

onde Δp é a queda de pressão aplicada ao comprimento L , μ é a viscosidade do fluido e k é a permeabilidade absoluta do meio.

Para o escoamento numa direção qualquer, nós podemos escrever a lei de Darcy na seguinte forma diferencial:

$$\vec{v} = \frac{Q\vec{n}}{A} = -\frac{k}{\mu} \vec{\nabla} p \quad (\text{A.2})$$

onde $v = Q/A$ é a velocidade de escoamento superficial, e $\frac{\partial p}{\partial x}$, $\frac{\partial p}{\partial y}$ e $\frac{\partial p}{\partial z}$ são as componentes do gradiente de pressão na direção x , y e z respectivamente. Observe que o sinal negativo na equação, indica que a pressão declina na direção do escoamento.

A equação acima não considera a gravidade, entretanto, pode ser modificada para incluir o termo gravitacional. Considerando a profundidade, D , como uma função arbitrária das coordenadas, (x,y,z) , então a forma diferencial da Lei de Darcy, torna-se:

$$\vec{v} = -\frac{k}{\mu} (\vec{\nabla} p - \rho g \vec{\nabla} D) \quad (\text{A.3})$$

onde ρ é a massa específica do fluido e g é o valor da aceleração devido à gravidade.

Derivando a equação diferencial para o escoamento, considera-se o termo para injeção do fluido usando a variável, q , igual a vazão mássica de injeção por unidade de volume de reservatório. (Um q negativo implica em produção). Admite-se que a massa específica do fluido varia com o tempo. (Frequentemente a porosidade do meio também se altera com o tempo).

Considere-se um balanço de massa sobre um pequeno volume cúbico, Figura A.1. O cubo apresenta um comprimento Δx ; uma largura Δy e uma altura Δz . O centro do cubo está localizado a $x' = x + \frac{1}{2}\Delta x$, $y' = y + \frac{1}{2}\Delta y$ e $z' = z + \frac{1}{2}\Delta z$. A área da face esquerda é $\Delta y\Delta z$; portanto a vazão com que a massa entra no cubo pela face esquerda é dada por:

$$\rho(x, y', z').v_x(x, y', z').\Delta y\Delta z = \Delta y\Delta z(\rho v_x)_{x, y', z'}$$

A vazão com que o fluido sai pela face direita é:

$$\Delta y \Delta z (\rho v_x)_{x+\Delta x, y', z'}$$

O fluido entra pela face frontal à vazão de:

$$\Delta x \Delta z (\rho v_y)_{x', y, z'}$$

e escoa pela face de trás à vazão de:

$$\Delta x \Delta z (\rho v_y)_{x', y+\Delta y, z'}$$

Figura A.1: Volume de controle para o balanço diferencial

O fluido entra pela face inferior à vazão de:

$$\Delta x \Delta y (\rho v_z)_{x', y', z+\Delta z}$$

e sai pela face superior à vazão de:

$$\Delta x \Delta y (\rho v_z)_{x', y', z+\Delta z}$$

O volume do cubo é $\Delta x \cdot \Delta y \cdot \Delta z$; portanto a vazão mássica de fluido injetada no cubo é:

$$\bar{q} \Delta x \Delta y \Delta z,$$

e a taxa de acumulação de massa no cubo é:

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

onde a barra acima da propriedade indica o valor médio desta no cubo. Uma vez que a massa deve ser conservada, temos que:

$$[\text{vazão que entra}] - [\text{vazão que sai}] + [\text{vazão injetada}] = [\text{taxa de acumulação}]$$

Portanto,

$$\begin{aligned} &\Delta y \Delta z (\rho v_x)_{x,y',z'} - \Delta y \Delta z (\rho v_x)_{x+\Delta x,y',z'} + \Delta x \Delta z (\rho v_y)_{x',y,z'} - \Delta x \Delta z (\rho v_y)_{x',y+\Delta y,z} \\ &+ \Delta x \Delta y (\rho v_z)_{x',y',z} - \Delta x \Delta y (\rho v_z)_{x',y',z+\Delta z} + \bar{q} \Delta x \Delta y \Delta z = \frac{\partial(\bar{\phi}\bar{\rho})}{\partial t} \Delta x \Delta y \Delta z \end{aligned}$$

Dividindo por $\Delta x \Delta y \Delta z$,

$$\begin{aligned} &\frac{(\rho v_x)_{x+\Delta x,y',z'} - (\rho v_x)_{x,y',z'}}{\Delta x} - \frac{(\rho v_y)_{x',y+\Delta y,z'} - (\rho v_y)_{x',y,z'}}{\Delta y} \\ &+ \frac{(\rho v_z)_{x',y',z+\Delta z} - (\rho v_z)_{x',y',z}}{\Delta z} + \bar{q} = \frac{\partial(\bar{\phi}\bar{\rho})}{\partial t} \end{aligned}$$

tomando o limite quando $\Delta x \rightarrow 0, \Delta y \rightarrow 0, \Delta z \rightarrow 0$ e observando que $\bar{\rho} \rightarrow \rho(x)$, $\bar{\phi} \rightarrow \phi(x)$, ..., obtem-se:

$$-\frac{\partial(\rho v_x)}{\partial x} - \frac{\partial(\rho v_y)}{\partial y} - \frac{\partial(\rho v_z)}{\partial z} + q = -\frac{\partial(\phi\rho)}{\partial t} \quad (\text{A.4})$$

Para o caso bidimensional, $v_z = 0$. Como ρ é uma função escalar, então $(\rho v_x), (\rho v_y)$ e (ρv_z) são as componentes x, y e z, respectivamente, do vetor $(\rho \vec{v})$. Usando a definição de divergente, escreve-se:

$$-\vec{\nabla} \cdot (\rho \vec{v}) + q = \frac{\partial(\phi \rho)}{\partial t} \quad (\text{A.5})$$

Substituindo a equação (A.3) da lei de Darcy na equação (A.5), obtém-se:

$$\vec{\nabla} \cdot \left[\frac{\rho k}{\mu} (\vec{\nabla} p - \rho g \vec{\nabla} D) \right] + q = \frac{\partial(\phi \rho)}{\partial t} \quad (\text{A.6})$$

Para os nossos propósitos algumas simplificações serão feitas, a primeira delas refere-se à consideração de escoamento horizontal plano, $\vec{\nabla} D = 0$. Portanto:

$$\vec{\nabla} \cdot \left[\frac{\rho k}{\mu} \vec{\nabla} p \right] + q = \frac{\partial(\phi \rho)}{\partial t} \quad (\text{A.7})$$

A compressibilidade de um fluido, c , é definida para condições isotérmicas, como:

$$c = \frac{1}{\rho} \frac{d\rho}{dp} \Rightarrow d\rho = c\rho dp \quad (\text{A.8})$$

e,

$$\rho dp = \frac{d\rho}{c} \quad (\text{A.9})$$

$$\rho \nabla p = \frac{1}{c} \nabla \rho \quad (\text{A.10})$$

Substituindo a equação (A.10) na equação (A.7), tem-se:

$$\vec{\nabla} \cdot \left(\frac{k}{\mu c} \vec{\nabla} \rho \right) = \frac{\partial(\phi \rho)}{\partial t} + q \quad (\text{A.11})$$

Mudando a convenção, a vazão de injeção passa a ter sinal negativo.

Considerando o meio poroso homogêneo e isotrópico, então k e ϕ são constantes, e obtém-se:

$$\nabla^2 \rho = \frac{\phi \mu c}{k} \frac{\partial \rho}{\partial t} + \frac{\mu c}{k} q \quad (\text{A.12})$$

Da definição de compressibilidade de um fluido pode-se escrever:

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} = c \rho \frac{\partial p}{\partial t} \quad (\text{A.13})$$

e,

$$\frac{\partial \rho}{\partial x} = c \rho \frac{\partial p}{\partial x} \quad (\text{A.14})$$

Diferenciando em relação a x , tem-se:

$$\frac{\partial^2 \rho}{\partial x^2} = c \rho \frac{\partial^2 p}{\partial x^2} + c \frac{\partial \rho}{\partial x} \frac{\partial p}{\partial x} = c \rho \frac{\partial^2 p}{\partial x^2} + c^2 \rho \left(\frac{\partial p}{\partial x} \right)^2 \quad (\text{A.15})$$

Expressão similar é obtida para $\partial^2 \rho / \partial y^2$ e $\partial^2 \rho / \partial z^2$ no que resulta:

$$\nabla^2 \rho = c \rho \nabla^2 p + c^2 \rho \left[\left(\frac{\partial p}{\partial x} \right)^2 + \left(\frac{\partial p}{\partial y} \right)^2 + \left(\frac{\partial p}{\partial z} \right)^2 \right] \quad (\text{A.16})$$

Substituindo a equação (A.16) e a equação (A.13) na equação (A.12) e dividindo por $c \rho$, tem-se:

$$\nabla^2 p + c\left[\left(\frac{\partial p}{\partial x}\right)^2 + \left(\frac{\partial p}{\partial y}\right)^2 + \left(\frac{\partial p}{\partial z}\right)^2\right] = \frac{\phi \mu c}{k} \frac{\partial p}{\partial t} + \frac{\mu}{\rho k} q \quad (\text{A.17})$$

Considerando fluidos de pequena compressibilidade, tem-se:

$$\frac{\partial^2 p}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 p}{\partial y^2} + \frac{\partial^2 p}{\partial z^2} \gg c\left[\left(\frac{\partial p}{\partial x}\right)^2 + \left(\frac{\partial p}{\partial y}\right)^2 + \left(\frac{\partial p}{\partial z}\right)^2\right] \quad (\text{A.18})$$

no que resulta,

$$\nabla^2 p = \frac{\phi \mu c}{k} \frac{\partial p}{\partial t} + \frac{\mu}{\rho k} q \quad (\text{A.19})$$

Apêndice B : Adimensionalização da Equação de Difusividade

Afim de se obter uma maior generalidade na solução, a despeito do sistema de unidade de interesse, adotam-se as seguintes variáveis adimensionais:

$$p_D = \frac{2\pi kh}{Q_i \mu} p(x, y, t) \quad (\text{B.1})$$

onde, Q_i = vazão volumétrica de injeção de fluido

$$t_{DA} = \frac{kt}{\phi \mu c A} \quad (\text{B.2})$$

onde,

$$A = L_x \cdot L_y \quad (\text{B.3})$$

$$x_D = \frac{x}{L_x} \quad (\text{B.4})$$

$$y_D = \frac{y}{L_y} \quad (\text{B.5})$$

Adimensionalizando cada termo da equação, tem-se:
de (B.4),

$$\frac{dx_D}{dx} = \frac{1}{L_x} \Rightarrow \frac{\partial}{\partial x} = \frac{1}{L_x} \frac{\partial}{\partial x_D} \quad (\text{B.6})$$

de (B.1),

Figura B.1: Esquema da malha utilizada

$$\frac{\partial^2 p}{\partial x^2} = \frac{\partial}{\partial x} \left(\frac{\partial}{\partial x} (p) \right) = \frac{\partial}{\partial x} \left(\frac{\partial}{\partial x} \left(\frac{Q_i \mu p_D}{2\pi k h} \right) \right) \quad (\text{B.7})$$

Substituindo (B.6) em (B.7),

$$\frac{\partial^2 p}{\partial x^2} = \frac{1}{L_x} \frac{\partial}{\partial x_D} \left(\frac{1}{L_x} \frac{\partial}{\partial x_D} \left(\frac{Q_i \mu p_D}{2\pi k h} \right) \right) = \frac{Q_i \mu}{2\pi L_x^2 k h} \frac{\partial^2 p_D}{\partial x_D^2} \quad (\text{B.8})$$

Analogamente,

$$\frac{\partial^2 p}{\partial y^2} = \frac{Q_i \mu}{2\pi L_y^2 k h} \frac{\partial^2 p_D}{\partial y_D^2} \quad (\text{B.9})$$

De (B.2),

$$\frac{dt_{DA}}{dt} = \frac{k}{\phi \mu c A} \Rightarrow \frac{\partial}{\partial t} = \frac{k}{\phi \mu c A} \frac{\partial}{\partial t_{DA}} \quad (\text{B.10})$$

para o termo de acumulação,

$$\frac{\partial p}{\partial t} = \frac{\partial}{\partial t} \left(\frac{Q_i \mu p_D}{2\pi kh} \right) \quad (\text{B.11})$$

Substituindo (B.10) em (B.11), tem-se:

$$\frac{\partial p}{\partial t} = \frac{k}{\phi \mu c A} \frac{Q_i \mu}{2\pi kh} \frac{\partial p_D}{\partial t_{DA}} = \frac{q_i}{2\pi \phi c A h} \frac{\partial p_D}{\partial t_{DA}} \quad (\text{B.12})$$

Substituindo (B.8), (B.9) e (B.12) em (3.15),

$$\frac{Q_i}{2\pi L_x^2 kh} \frac{\mu}{\partial x_D^2} \frac{\partial^2 p_D}{\partial x_D^2} + \frac{Q_i}{2\pi L_y^2 kh} \frac{\mu}{\partial y_D^2} \frac{\partial^2 p_D}{\partial y_D^2} = \frac{\phi \mu c}{k} \frac{Q_i}{2\pi \phi c A h} \frac{\partial p_D}{\partial t_{DA}} + \frac{q \mu}{\rho k} \quad (\text{B.13})$$

Multiplicando por $\left(\frac{2\pi kh}{Q_i \mu} \right)$,

$$\frac{1}{L_x^2} \frac{\partial^2 p_D}{\partial x_D^2} + \frac{1}{L_y^2} \frac{\partial^2 p_D}{\partial y_D^2} = \frac{1}{L_x L_y} \frac{\partial p_D}{\partial t_{DA}} + \frac{q}{\rho k} \frac{2\pi kh}{Q_i \mu} \quad (\text{B.14})$$

Multiplicando por $(L_x \cdot L_y)$,

$$\frac{L_y}{L_x} \frac{\partial^2 p_D}{\partial x_D^2} + \frac{L_x}{L_y} \frac{\partial^2 p_D}{\partial y_D^2} = \frac{\partial p_D}{\partial t_{DA}} + \frac{2\pi q h L_x L_y}{Q_i \rho} \quad (\text{B.15})$$

De (B.15), tem-se:

$$q_D = \frac{2\pi q h L_x L_y}{Q_i \rho} \quad (\text{B.16})$$

Para a injeção em volume, $\Delta V = (\Delta x \cdot \Delta y / 2) h$, a uma vazão volumétrica constante, da equação (3.16), tem-se:

$$q = \frac{-Q_i \rho}{h(\Delta x \Delta y / 2)} \quad (\text{B.17})$$

Substituindo (B.17) em (B.16),

$$q_D = \frac{2\pi h L_x L_y}{Q_i \rho} \cdot \frac{-Q_i \rho}{h(\Delta x \Delta y / 2)}$$

$$q_D = \frac{-4\pi}{\Delta x_D \cdot \Delta y_D} \quad (\text{B.18})$$

para o bloco de produção com a pressão do poço constante, tem-se:

$$q = \frac{\pi k h p_1}{2\mu \ln(r_o/r_w)} \frac{\rho}{h(\Delta x \Delta y / 2)} \quad (\text{B.19})$$

Substituindo (B.19) em (B.16),

$$q_D = \frac{\pi k h p_1 \rho}{\mu \ln(r_o/r_w) h(\Delta x \Delta y)} \frac{2\pi h L_x L_y}{Q_i \rho}$$

$$q_D = \frac{2\pi^2 k h L_x L_y p_1}{\mu \ln(r_o/r_w) (\Delta x \Delta y) Q_i} \quad (\text{B.20})$$

De (B.1),

$$p_1 = \frac{p_{1D} Q_i \mu}{2\pi k h}$$

Substituindo,

$$q_D = \frac{2\pi^2 k h L_x L_y}{\mu \ln(r_o/r_w) (\Delta x \Delta y) Q_i} \frac{p_{1D} Q_i \mu}{2\pi k h}$$

$$q_D = \frac{\pi L_x L_y p_{1D}}{\Delta x \Delta y \ln(r_o/r_w)}$$

$$q_D = \frac{\pi p_{1D}}{\Delta x_D \Delta y_D \ln(r_o/r_w)} \quad (B.21)$$

Para o cálculo da pressão adimensional no poço de injeção, da equação (3.21), tem-se:

$$\frac{4Q_i \mu \ln(r_o/r_w)}{2\pi kh} = p_{wf} - p_N \quad (B.22)$$

De (B.1),

$$p_N = \frac{p_{Nd} Q_i \mu}{2\pi kh} \quad (B.23)$$

$$p_{wf} = \frac{p_{wfd} Q_i \mu}{2\pi kh} \quad (B.24)$$

Substituindo (B.23) e (B.24) em (B.22),

$$\frac{2Q_i \mu \ln(r_o/r_w)}{\pi kh} = \frac{Q_i \mu}{2\pi kh} (p_{wfd} - p_{Nd})$$

$$p_{wfd} = p_{Nd} + 4 \ln(r_o/r_w) \quad (B.25)$$

Resumindo, a equação a ser discretizada é:

$$\frac{L_y}{L_x} \frac{\partial^2 p_D}{\partial x_D^2} + \frac{\partial^2 p_D}{\partial y_D^2} = \frac{\partial p_D}{\partial t_{DA}} + q_D \quad (\text{B.26})$$

Com as condições de contorno,

$$\left. \frac{\partial p_D}{\partial x_D} \right|_{\substack{x_D = 0 \\ x_D = 1}} = 0 \quad (\text{B.27})$$

$$\left. \frac{\partial p_D}{\partial y_D} \right|_{\substack{y_D = 0 \\ y_D = 1}} = 0 \quad (\text{B.28})$$

e a condição inicial,

$$p_D(x_D, y_D, 0) = 0 \quad (\text{B.29})$$

Apêndice C : Coeficientes de Difusão

O tensor de coeficientes de difusão tem contribuições resultantes da difusão molecular comum e da dispersão mecânica. De trabalhos teóricos e experimentais conforme Setarri et al. [], o coeficiente de difusão pode ser descrito para um escoamento unidimensional como:

$$K = D + \alpha \frac{|\vec{v}|}{\phi} \quad (\text{C.1})$$

onde D é a difusão molecular numa matriz porosa (que é a difusividade molecular clássica dividida pelo fator de tortuosidade) e α é denominado de fator de dispersividade. Para o escoamento bidimensional foi verificado experimentalmente que existem dois valores distintos de dispersão: a dispersão longitudinal, que ocorre na direção do vetor velocidade $\vec{v}$, e a dispersão transversal, que ocorre perpendicularmente a direção de $\vec{v}$. O que representa :

$$K_l = D + \alpha_l \frac{|\vec{v}|}{\phi} \quad (\text{C.2})$$

$$K_t = D + \alpha_t \frac{|\vec{v}|}{\phi} \quad (\text{C.3})$$

Para incorporar o tensor de difusão no nosso modelo numérico, devemos obter um modelo geral para o fluxo difusivo com respeito aos eixos coordenados:

$$\phi K_{xx} = \phi D + \alpha_l \frac{v_x^2}{|\vec{v}|} + \alpha_t \frac{v_y^2}{|\vec{v}|} \quad (\text{C.4})$$

$$\phi K_{xy} = \phi K_{yx} = (\alpha_l - \alpha_t) \frac{|\vec{v}_x \vec{v}_y|}{|\vec{v}|} \quad (\text{C.5})$$

$$\phi K_{yy} = \phi D + \alpha_l \frac{v_y^2}{|\vec{v}|} + \alpha_t \frac{v_x^2}{|\vec{v}|} \quad (\text{C.6})$$

O coeficiente de difusividade cruzada pode ser desprezado, hipótese perfeita-

mente aceitável quando a difusão é pequena e/ou $\alpha_l \simeq \alpha_t$. Entretanto foi observado em processos muito difusivos onde $\alpha_l \gg \alpha_t$, que o desprezo deste termo implica numa distorção da frente similar ao efeito de orientação de malha observado em métodos de diferenças finitas.

Para efeito do estudo desenvolvido será considerado o caso onde $\alpha_l = \alpha_t$ e $D = 0$, o que resulta em:

$$K_x = \phi K_{xx} = \alpha \frac{(v_x^2 + v_y^2)}{|\vec{v}|} = \alpha \cdot |\vec{v}| \quad (C.7)$$

$$K_y = \phi K_{yy} = \alpha \frac{(v_x^2 + v_y^2)}{|\vec{v}|} = \alpha \cdot |\vec{v}| \quad (C.8)$$

ou,

$$K = K_x = K_y = \alpha |\vec{v}| \quad (C.9)$$

Bibliografia

- [1] Abbaszadeh-Dehghani, M., Brigham, W.E.: "Analysis of Unity Mobility Ratio Well-to-Well Tracer Flow to Determine Reservoir Heterogeneity", Stanford University, SUPRI TR-36, December, 1982
- [2] Brebbia, C.A., Telles, J.C.F., Wrobel, L.C.: "Boundary Element Techniques", Springer-Verlag, 1984
- [3] Brigham, W.E., Reed, P.W., and Dew, J.N.: "Experiments on Mixing During Miscible Displacements in Porous Media", Soc. Pet. Eng. J. (March 1961), 1-8.
- [4] Brigham, W.E.: "Mixing Equations in Short Laboratory Cores", SPE 4256, Transaction, vol 257, 1974
- [5] Casulli, V., Greenspan, D.: "Numerical Simulation of Miscible and Immiscible Fluid Flows in Porous Media", SPEJ, October, 1982
- [6] Connor, J.J., Brebbia, C.A.: "Finite Element Techniques for Fluid Flow", Butterworth, 1977
- [7] Correa, A.C., Pande, K.K., Ramey Jr, H.J., Brigham, W.E.: "Computation and Interpretation of Miscible Displacement Performance in Heterogeneous Porous Media", SPE 16704, SPE Reservoir Engineering, February 1990
- [8] Darlow, B.L., Ewing, R.E., Wheeler, M.F.: "Mixed Finite Element Method for Miscible Displacement Problems in Porous Media", SPE 10501, SPEJ, August, 1984
- [9] Finlayson, B.A.: "The Method of Weighted Residuals and Variational Principles", Academic Press, 1972.
- [10] Fletcher, C.A.J.: "Computational Galerkin Methods", Springer-Verlag, 1984.

- [11] Genuchten, M.T. van, Pinder, G.F., Frind, E.O.: "Simulation of Two-Dimensional Contaminant Transport With Isoparametric Hermitian Finite Elements", *Water Resources Research*, vol. 13, n^o 2, April, 1977
- [12] Habermann, B.: "The Efficiency of Miscible Displacement as a Function of Mobility Ratio", *Transaction*, vol. 219, 1960
- [13] Harleman, R.F., and Rumer, R.R.: "Longitudinal and Lateral Dispersion in an Isotropic Porous Medium", *J. Fluid Mech.* (1963), 3, No.16, 385-394.
- [14] Hughes, T.J.R.: "The Finite Element Method", Prentice-Hall, 1987.
- [15] Lake, L.W.: "Enhanced Oil Recovery", Prentice-Hall, 1989
- [16] Muskat, M.: "The Flow of Homogeneous Fluids Through Porous Media", 1982
- [17] Oden, J.T.: "Finite Elements of Nonlinear Continua", Mc Graw-Hill, 1972
- [18] Peaceman, D.W.: "Interpretation of Well-Block Pressures in Numerical Reservoir Simulation", SPE 6893, *Transaction Volume* 1978
- [19] Peaceman, D.W., Rachford Jr., H.H.: "Numerical Calculation of Multidimensional Miscible Displacement", SPEJ, December, 1962
- [20] Perkins, T.C., Johnston, O.C.: "A Review of Diffusion and Dispersion in Porous Media", SPEJ, March, 1963
- [21] Press, W.H., Flannery, B.P., Teukolsky, S.A., Vetterling, W.T.: "Numerical Recipe", Cambridge University Press, 1986.
- [22] Price, H.S., Cavendish, J.C., Varga, R.S.: "Numerical Methods of Higher-Order Accuracy for Diffusion - Convection Equations", SPE 1877, *Transactions*, vol. 243, 1968
- [23] Santos, R.L.A. dos: "Deslocamento Miscível em Malhas Regulares", Universidade Estadual de Campinas, Tese de Mestrado, DEP/FEM, Novembro, 1990.
- [24] Segerlind, L.J.: "Applied Finite Element Analysis", John Wiley & Sons, Inc, 1985
- [25] Settari, A., Price, H.S., Dupont, T.: "Development and Application of Variational Methods for Simulation of Miscible Displacement in Porous Media", SPE 5721, *Transaction volume* 1977.