

UNIVERSIDADE ESTADUAL DE CAMPINAS
FACULDADE DE ENGENHARIA MECÂNICA
DEPARTAMENTO DE ENERGIA

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

**EFEITO DE ORIENTAÇÃO DA MALHA NO
DESLOCAMENTO MISCÍVEL EM MEIOS
POROSOS COM GEOMETRIA PADRÃO CINCO-POÇOS**

Autor : Armando Lins Netto
Orientador : José Ricardo Figueiredo

dezembro de 1993

ESTE EXEMPLAR CORRESPONDE A REDAÇÃO FINAL
DA TESE DEFENDIDA POR Armando Lins Netto
Netto E APROVADA PELA
COMISSÃO JULGADORA EM 14/12/93.


ORIENTADOR

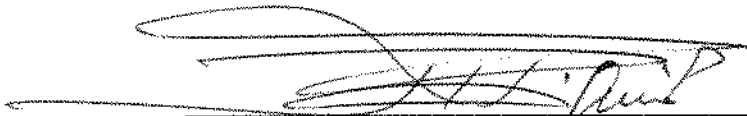
UNICAMP
BIBLIOTECA CENTRAL

UNIVERSIDADE ESTADUAL DE CAMPINAS
FACULDADE DE ENGENHARIA MECÂNICA
DEPARTAMENTO DE ENERGIA

A dissertação "Efeito de Orientação da Malha no Deslocamento Miscível em Meios Porosos com Geometria Padrão Cinco-Poços", elaborada por Armando Lins Netto e aprovada por todos os membros da Banca Examinadora foi aceita pela Sub-Comissão de Pós Graduação em Engenharia Mecânica como requisito parcial à obtenção do Título de Mestre em Engenharia Mecânica.

Campinas, 14 de dezembro de 1993

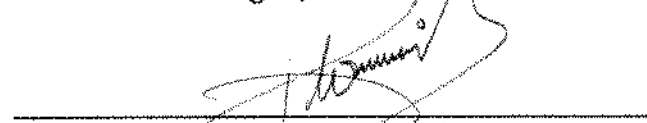
Banca Examinadora



José Ricardo Figueiredo, Dr. Eng. - UNICAMP
(Orientador)



Fernando Iguti, Ph.D. - UNICAMP



Clóvis Raimundo Maliska, Ph.D. - UFSC

AGRADECIMENTOS

Primeiramente agradeço a minha família que sempre deu o apoio necessário para que esta tese se tornasse uma realidade.

Pela sugestão do tema e do constante incentivo deixo especial agradecimento a José Ricardo Figueiredo.

Agradeço também à todos os professores que tive, desde o início de minha educação, que colaboraram para o verdadeiro aprendizado.

Agradeço a todos os colegas da Unicamp e de Campinas que dividiram os momentos de alegria e incertezas, entre os quais : Thomaz, Roxana, Hermes, Paulinho, Wilson, Marcelo, Silvião, Rubão, Bia, Belquis, Ricardo(s), Pinotti, Ana Maria , Pardal, Nelson, Marta.

Agradeço à Universidade Federal do Pará pela bolsa PICD-Capes que me foi concedida.

NOMENCLATURA

Letras Romanas

ct	= compressibilidade do fluido, $[M]^{-1} [L] [T]^2$
C	= concentração (massa do contaminante por volume), $[M] [L]^{-3}$
d	= distância entre poços, $[L]$
D	= profundidade vertical, $[L]$
$D_{molec.}$	= difusão molecular, $[L] [T]^{-1}$
F_i	= fluxo do contaminante na direção i , $[M] [L]^{-2} [T]^{-1}$
g	= aceleração da gravidade, $[L] [T]^{-2}$
k	= permeabilidade absoluta do meio, $[L]^2$
$\bar{\bar{K}}$	= tensor dispersividade, $[L] [T]^{-1}$
$K_{i,j}$	= componentes do tensor dispersividade, $[L] [T]^{-1}$
L	= lado do domínio, $[L]$
$L()$	= operador diferencial
n	= direção normal ao escoamento
$O(2)$	= termo proporcional a Δx^2
P	= pressão, $[M] [L]^{-1} [T]^{-2}$
Pe	= número de Peclet
P_i	= pressão de referência, $[M] [L]^{-1} [T]^{-2}$
P_{wf}	= pressão de fundo do poço, $[M] [L]^{-1} [T]^{-2}$
q	= vazão volumétrica por unidade de volume do meio, $[T]^{-1}$
Q	= vazão volumétrica, $[L]^3 [T]^{-1}$
r_w	= raio do poço, $[L]$
R	= termo fonte de contaminante, $[M] [L]^{-3} [T]^{-1}$
s	= direção paralela ao escoamento
t	= tempo
U	= velocidade na direção x , $[M] [T]^{-1}$
V	= velocidade na direção y , $[M] [T]^{-1}$
$\bar{V}$	= velocidade do fluido, $[L] [T]^{-1}$

Letras Gregas

α	= ângulo entre o escoamento e o eixo x
α_l	= fator de dispersividade longitudinal, $[L]$
α_t	= fator de dispersividade transversal, $[L]$

δ	= função binária
ϕ	= função escalar genérica (Cap. 1)
ϕ	= porosidade
γ	= inverso da vida média, [T] ⁻¹
η	= direção normal a superfície, [L]
μ	= viscosidade dinâmica do fluido, [M] [L] ⁻¹ [T] ⁻¹
ρ	= massa específica do fluido, [M] [L] ⁻³
Γ	= fronteiras do domínio
ω	= fração em massa (massa do contaminante pela massa total)
ψ	= função binária do esquema exponencial rotacional

Índices

d	= indica variáveis adimensionais
e	= indica a direção cardeal leste
i,j	= indica a posição na malha numérica, i na direção x e j na direção y
n	= indica a direção cardeal norte
s	= indica a direção cardeal sul
t1	= indica tempo adimensional da equação da pressão
t2	= indica tempo adimensional da equação da concentração
w	= indica a direção cardeal oeste

Resumo

O trabalho faz a comparação entre os esquemas central e exponencial em diferenças finitas, volumes finitos e exponencial rotacional em diferenças finitas para a simulação da equação de transporte convectivo-difusivo para altos valores do número de Peclet, investigando-se a dependência da solução com o posicionamento da malha numérica em relação ao escoamento.

Resolveu-se o deslocamento miscível de um traçador em meios porosos em estruturas exploratórias de petróleo com geometria padrão cinco-poços.

Os resultados mostram que o efeito de orientação da malha é mais dependente do método, diferenças ou volumes finitos, do que da curva interpolante propriamente dita. Os esquemas em volumes finitos mostraram grande vantagem em relação aos esquemas em diferenças finitas neste problema.

Abstract

This work compares some schemes for convective-difusive transport equation with high Peclet values, solving the transport equation for miscible displacement in a five-spot grid. The role of the numerical grid orientation is investigated, showing that the discretization of the equation with control volume procedure achieves better results than with finite difference procedure, in this situation.

Lista de Tabelas

Tabela 01	Desempenho das discretizações central e exp. de Allen & Southwell com respeito a variação do ângulo do escoamento com os eixos numéricos.	12
Tabela 02	Resumo dos valores de Δt e tempos a que se referem os resultados apresentados.	49

Lista de Figuras

Figura 01	Malhas numéricas.	5
Figura 02	Disposição dos domínios.	23
Figura 03	Índices das malhas numéricas.	24
Figura 04	Nomenclatura para o esquema exponencial rotacional.	38
Figura 05	Fluxos no volume de controle i,j	43
Figura 06	Relação dimensional entre os dois domínios	48

Lista de Gráficos

01	Determinação do raio equivalente através do campo de pressão.	27
02	Concentração no tempo para os esquemas na forma convectiva, $Pe=10$ e malha 10×10 .	51
03	Concentração no tempo para os esquemas na forma divergente, $Pe=10$ e malha 10×10 .	52
04	Concentração no tempo para o esquema exponencial, $Pe=10$ e malha 10×10 ; para a forma convectiva e divergente.	53
05	Concentração na diagonal para os esquemas na forma convectiva, $Pe=10$ e malha 10×10 .	56
06	Concentração na diagonal para os esquemas na forma divergente, $Pe=10$ e malha 10×10 .	57
07	Concentração na diagonal para o esquema exponencial, $Pe=10$ e malha 10×10 ; para a forma convectiva e divergente.	58
08	Campo de concentração para os esquemas central e exponencial na forma convectiva, $Pe=10$ e malha diagonal 10×10 .	59
09	Campo de concentração para os esquemas exp. e exp. rot. na.	60

	forma convectiva, $Pe=10$ e malha diagonal 10×10 .	
10	Campo de concentração para os esquemas central e exponencial na forma divergente, $Pe=10$ e malha diagonal 10×10 .	61
11	Campo de concentração para o esquema exponencial, $Pe=10$ e malha diagonal 10×10 ; para a forma convectiva e divergente.	62
12	Campo de concentração para o esquema central na forma divergente, $Pe=10$ e malha paralela 14×14 .	63
13	Campo de concentração para o esquema exponencial na forma divergente, $Pe=10$ e malha paralela 14×14 .	64
14	Campo de concentração para o esquema central na forma convectiva, $Pe=10$ e malha paralela 14×14 .	65
15	Campo de concentração para o esquema exponencial na forma convectiva, $Pe=10$ e malha paralela 14×14 .	66
16	Campo de concentração para o esquema exp. rot. na forma convectiva, $Pe=10$ e malha paralela 14×14 .	67
17	Concentração no tempo para os esquemas na forma convectiva, $Pe=100$ e malha 10×10 .	70
18	Concentração no tempo para os esquemas na forma convectiva, $Pe=100$ e malha 20×20 .	71
19	Convergência do esquema central na forma convectiva com $Pe 100$.	72
20	Convergência do esquema exponencial na forma convectiva com $Pe 100$.	73
21	Convergência do esquema exp. rot. na forma convectiva com $Pe 100$.	74
22	Concentração no tempo para os esquemas na forma divergente, $Pe=100$ e malha 10×10 .	75
23	Concentração no tempo para os esquemas na forma divergente, $Pe=100$ e malha 20×20 .	76
24	Convergência do esquema central na forma divergente com $Pe 100$.	77
25	Convergência do esquema exponencial na forma divergente com $Pe 100$.	78
26	Concentração no tempo para o esquema exponencial, $Pe=100$ e malha 10×10 ; para a forma convectiva e divergente.	79
27	Concentração no tempo para o esquema exponencial, $Pe=100$ e malha 20×20 ; para a forma convectiva e divergente.	80
28	Concentração no tempo para os esquemas na forma convectiva, $Pe=1000$ e malha 10×10 .	83
29	Concentração no tempo para os esquemas na forma convectiva, $Pe=1000$ e malha 20×20 .	84
30	Convergência do esquema central na forma convectiva com $Pe 1000$.	85
31	Convergência do esquema exponencial na forma convectiva com $Pe 1000$.	86
32	Convergência do esquema exp. rot. na forma convectiva com $Pe 1000$.	87
33	Concentração no tempo para os esquemas na forma divergente, $Pe=1000$ e malha 10×10 .	88
34	Concentração no tempo para os esquemas na forma divergente, $Pe=1000$ e malha 20×20 .	89
35	Convergência do esquema central na forma divergente com $Pe 1000$.	90
36	Convergência do esquema exponencial na forma divergente com $Pe 1000$.	91

37	Concentração no tempo para o esquema exponencial, $Pe=1000$ e malha 10×10 ; para a forma convectiva e divergente.	92
38	Concentração no tempo para o esquema exponencial, $Pe=1000$ e malha 20×20 ; para a forma convectiva e divergente.	93
39	Concentração na diagonal para os esquemas na forma convectiva, $Pe=1000$ e malha 20×20 .	96
40	Concentração na diagonal para os esquemas na forma convectiva, $Pe=1000$ e malha 10×10 .	97
41	Convergência na diagonal do esquema central na forma convectiva com $Pe=1000$.	98
42	Convergência na diagonal do esquema exponencial na forma convectiva com $Pe=1000$.	99
43	Convergência na diagonal do esquema exp. rot. na forma convectiva com $Pe=100$.	100
44	Concentração na diagonal para os esquemas na forma divergente, $Pe=1000$ e malha 20×20 .	101
45	Concentração na diagonal para os esquemas na forma divergente, $Pe=1000$ e malha 10×10 .	102
46	Convergência na diagonal do esquema exponencial na forma divergente com $Pe=1000$.	103
47	Convergência na diagonal do esquema central na forma divergente com $Pe=1000$.	104
48	Concentração na diagonal para o esquema exponencial, $Pe=1000$ e malha 20×20 ; para a forma convectiva e divergente.	105
49	Campo de concentração para o esquema central na forma convectiva, $Pe=1000$ e malha diagonal 10×10 .	107
50	Campo de concentração para o esquema central na forma convectiva, $Pe=1000$ e malha diagonal 20×20 .	108
51	Campo de concentração para o esquema central na forma convectiva, $Pe=1000$ e malha paralela 14×14 .	109
52	Campo de concentração para o esquema central na forma convectiva, $Pe=1000$ e malha paralela 28×28 .	110
53	Campo de concentração para o esquema exponencial na forma convectiva, $Pe=1000$ e malhas diagonais 10×10 e 20×20 .	111
54	Campo de concentração para o esquema exponencial na forma convectiva, $Pe=1000$ e malha paralela 14×14 .	112
55	Campo de concentração para o esquema exponencial na forma convectiva, $Pe=1000$ e malha paralela 28×28 .	113
56	Campo de concentração para o esquema exp. rot. na forma convectiva, $Pe=1000$ e malhas diagonais 10×10 e 20×20 .	114
57	Campo de concentração para o esquema exp. rot. na forma convectiva, $Pe=1000$ e malha paralela 14×14 .	115
58	Campo de concentração para o esquema exp. rot. na forma convectiva, $Pe=1000$ e malha paralela 28×28 .	116

59	Campo de concentração para o esquema central na forma divergente, ... 117 Pe=1000 e malha diagonal 10x10.
60	Campo de concentração para o esquema central na forma divergente, ... 118 Pe=1000 e malha diagonal 20x20.
61	Campo de concentração para o esquema central na forma divergente, ... 119 Pe=1000 e malha paralela 14x14.
62	Campo de concentração para o esquema central na forma divergente, ... 120 Pe=1000 e malha paralela 28x28.
63	Campo de concentração para o esquema exponencial 121 na forma divergente, Pe=1000 e malhas diagonais 10x10 e 20x20.
64	Campo de concentração para o esquema exponencial na forma 122 divergente, Pe=1000 e malha paralela 14x14.
65	Campo de concentração para o esquema exponencial na forma 123 divergente, Pe=1000 e malha paralela 28x28.
66	Concentração no tempo para o esquema exponencial na forma 126 divergente com destruição de matéria, com Pe=100 e malha diagonal 10x10.
67	Concentração no tempo para o esquema exponencial na forma 127 divergente com destruição de matéria, com Pe=1000 e malha diagonal 10x10.

Conteúdo

1	Introdução	1
1.1	Difusão Numérica	9
1.2	Efeito de Orientação de Malha	11
2	Modelo Matemático	14
2.1	Pressão e Velocidades	14
2.1.1	Condições de Contorno	16
2.2	Equação da Concentração	16
2.2.1	Condições de Contorno e Condição Inicial	18
2.3	Tratamento dos Poços	18
2.4	Adimensionalização	19
2.4.1	Equação da Pressão	19
2.4.2	Equação de Darcy	20
2.4.3	Equação da Concentração	20
3	Procedimento Numérico	22
3.1	Equação da Pressão	22
3.1.1	Condições de Contorno	24
3.1.2	Verificação do Campo de Pressão	25
3.2	Campo de Velocidades	29
3.3	Discretização da EDP da Concentração	30
3.3.1	Discretizações em Diferenças Finitas	32
3.3.1.1	Esquema Central	34
3.3.1.2	Esquema Exponencial de Allen e Southwell	34
3.3.1.3	Esquema Exponencial Rotacional de Figueiredo	37
3.3.2	Discretizações em Volumes Finitos	40
3.3.2.1	Esquema Central	43
3.3.2.2	Esquema Exponencial	44

4	Resultados	46
4.1	Peclet 10	49
4.1.1	Concentração do Efluente x Tempo.	49
4.1.2	Concentração x Diagonal.	54
4.1.3	Concentração em Todo o Domínio	54
4.2	Peclet 100 - Concentração do Efluente x Tempo	68
4.3	Peclet 1000.	81
4.3.1	Concentração do Efluente x Tempo.	81
4.3.2	Concentração x Diagonal.	94
4.3.3	Concentração em Todo o Domínio	106
5	Deslocamento Miscível com Destruição de Matéria	124
6	Conclusão	128
	Referências Bibliográficas	130
	Apêndice A - Listagem do Programa Fonte	134

CAPÍTULO 1

INTRODUÇÃO

Este trabalho aborda a questão da representação discreta das equações do transporte convectivo e difusivo de um traçador para altos valores do número de Peclet, investigando-se o efeito da orientação da malha em relação ao escoamento em diversos esquemas numéricos em um problema de simulação de reservatório petrolífero.

O esquema central por possuir erro assintótico de truncamento de segunda ordem e por sua simplicidade é um esquema bastante atraente, porém sua grande virtude se restringe a representação discreta do termo de transporte difusivo, fornecendo uma matriz de coeficientes estável, ou seja, o erro associado é amortecido no decorrer do tempo ou das iterações. Na representação discreta do termo convectivo o esquema central já não apresenta esta característica de amortecimento ou matriz estável.

Apesar disto, enquanto o transporte difusivo for predominante em relação ao transporte convectivo, o que em geral se associa a números de Peclet celulares (ΔPe) inferiores ou iguais a 2, as propriedades de amortecimento

prevalecem, permitindo que se obtenha boas soluções com o esquema.

Mas, com o aumento da importância do transporte convectivo, o amortecimento proveniente do termo difusivo é vencido e começam a surgir respostas espacialmente oscilatórias, fisicamente irrealistas, popularizados na língua inglesa pela expressão "wiggles". Portanto, para se manter a estabilidade com o aumento do ΔPe se torna necessário o uso de fator de relaxação ou Δt suficientemente pequeno, o que é claro, aumenta consideravelmente o tempo de computação.

Por isto, buscou-se uma alternativa para o esquema central a altos valores do número de Peclet. Do ponto de vista físico, para um escoamento com o transporte convectivo muito mais importante que o transporte difusivo, escoamento a "alta velocidade", a propriedade em um ponto será predominantemente determinada pelo que ocorre a montante, sendo esta idéia a base para o esquema de um ponto a montante.

Este esquema possui um erro que também é amortecido com o tempo, ou seja, apresenta uma matriz estável para a representação discreta do termo convectivo, sendo portanto uma alternativa ao esquema central para a representação do termo convectivo para altos valores do número de Peclet.

Porém, paga-se um preço por isto, o esquema de um ponto a montante possui um erro assintótico de truncamento de primeira ordem, o que exige um maior refinamento para se

obter soluções acuradas. O termo dominante deste erro é proporcional à segunda derivada da função nesta direção, ou seja, se comporta como um termo de difusão artificial, sendo por isto chamado de "difusão numérica", Roache (1972). Lembrando-se que o esquema de um ponto a montante só se justifica como alternativa ao central para altos valores do número de Peclet, ou seja, quando a difusão física é pequena, este valor de difusão artificial pode se tornar representativo, de forma a influenciar decisivamente a qualidade da solução.

O nome difusão numérica foi posteriormente associado ao efeito angular observado no problema de Wolfshtein (1968), transporte de um degrau sem difusão. Com a malha numérica formando um ângulo com o escoamento o degrau é artificialmente amortecido, como se tivesse difusão física presente, já com o ângulo igual a zero este amortecimento desaparece, estabelecendo-se então a associação entre a difusão numérica e o efeito de orientação da malha na solução numérica.

Estes resultados tornam compreensível o aparecimento de um esquema de um ponto a montante sempre na direção do escoamento, "skew upwind", desenvolvido por Raithby (1976). Outros esquemas surgiram com a mesma idéia ou como aprimoramento dela, por exemplo Lillington (1981), Busnaina et al. (1991) e Zheng et al. (1988), sendo este conceito bastante utilizado em programas comerciais de simulação, como por exemplo no Flotran e Phoenix.

Outra alternativa à instabilidade do esquema central a altos valores do número de Peclet são os esquemas exponenciais, sendo o primeiro desenvolvido por Allen e Southwell (1955), surgindo outros posteriormente, por exemplo, Dennis (1960) e Spalding (1972). Estes esquemas se baseiam em uma curva interpolante obtida através de uma aproximação unidimensional da própria equação diferencial parcial (EDP) a ser discretizada, possuindo a matriz da sua representação discreta estável e com erro assintótico de truncamento de segunda ordem, tendo porém dependência da solução com o ângulo da malha numérica com o escoamento.

Portanto, buscar um esquema com a mesma idéia do skew upwind, mas com um erro assintótico de truncamento de segunda ordem, se tornou interessante, surgindo então os esquemas exponenciais rotacionais, como por exemplo Raithby (1976), Baliga e Patankar (1983) e Figueiredo (1992).

Este trabalho se propõe a comparar alguns esquemas tradicionais, central e exponencial em diferenças e volumes finitos, com a equação na forma convectiva e divergente respectivamente, e o exponencial rotacional de seis pontos de Figueiredo (1992), que demonstrou excelentes resultados em um amplo espectro de soluções da equação do transporte convectivo-difusivo bidimensional em regime permanente no escoamento paralelo formando um ângulo com a malha numérica, (Figueiredo, 1992), e ainda no problema de um fluido escoando com velocidade angular constante (como um sólido) com um

termo fonte constante uniformemente distribuído, (Figueiredo, 1991), problema proposto por Lillington (1981).

O experimento que simularemos é o feito nas estruturas exploratórias de petróleo em geometria padrão cinco poços, que consiste basicamente em se injetar fluido continuamente através de um poço, chamado poço injetor, começando a produzir através de outro poço, chamado poço produtor, até que se estabeleça o regime permanente. Neste momento, passa-se a injetar o fluido junto com uma concentração definida de um traçador, observando-se a evolução no tempo da concentração do traçador no fluido efluente do poço produtor.

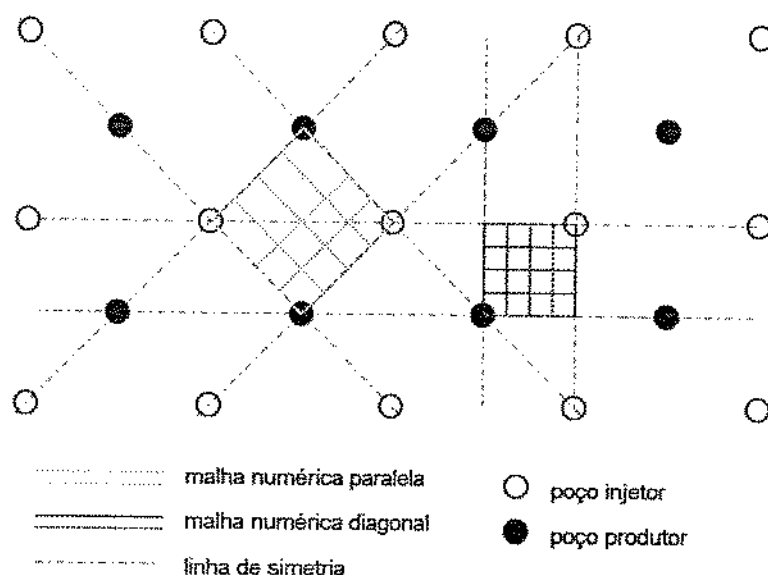


Figura 01 - Malhas numéricas.

Se o traçador ou contaminante juntamente com o fluido inicial formam uma só fase, ou seja, independente das proporções da mistura não se formam fronteiras, então temos que o problema é de deslocamento miscível (Lake, 1989).

Escolheu-se o problema de deslocamento miscível em meios porosos na malha padrão cinco-poços a altos valores do número de Peclet para se comparar os diversos esquemas, visto que diversos trabalhos (Santos, 1990; Almeida, 1990 e Pinto, 1991), acusam a existência de efeito de orientação da malha neste problema, sendo portanto este problema adequado para a investigação destas questões que estão intimamente ligadas a alternativas ao esquema central para a simulação acurada da equação de transporte convectivo-difusivo a altos valores do número de Peclet.

Os trabalhos acima citados caracterizam a difusão numérica pela dependência da solução numérica com a escolha da posição da malha numérica em relação ao escoamento. Tradicionalmente, neste problema, adota-se duas malhas numéricas padrões para se estudar tal dependência, sendo chamadas de malha paralela ou diagonal quando as retas que conectam poços produtores a poços injetores são respectivamente paralelas ou diagonal às linhas da malha, como se observa na figura 1.

Supondo haver um número infinito de poços produtores e injetores, todas as fronteiras, tanto na malha diagonal quanto na malha paralela, são linhas de simetria, sendo portanto todas as condições de contorno de derivada nula. O tratamento dos fluxos na região dos poços produtor e injetor é feito considerando termos fonte uniformemente distribuídos em torno do ponto numérico correspondente, de forma que mesmo

nas regiões dos poços teremos condição de contorno de derivada nula.

Com isto, todas as informações acerca do problema são em termos de fluxo, condições de contorno de fluxo e termos fonte substituindo os fluxos dos poços, fazendo com que se tornasse interessante a comparação entre os métodos baseados em diferenças finitas e em volumes finitos, pois o último é baseado no balanço de fluxos, de forma que a partir das considerações feitas, curvas interpolantes e variação do fluxo na face de um volume de controle, tem-se balanços das propriedades transportadas locais e globais iguais a zero, garantindo a conservatividade numérica dos fluxos.

Os trabalhos de Chow e Tien (1978) e Figueiredo (1988) indicam vantagem em certos problemas para os esquemas não conservativos, enquanto que outros autores priorizam o apelo do sentido físico da conservatividade, por exemplo Patankar (1980).

Por isto, resolvemos o problema usando os esquemas central e exponencial tanto para o método de diferenças finitas para a equação na forma convectiva como para o método de volumes finitos para a equação na forma divergente, permitindo que se faça a comparação entre os métodos não conservativos e conservativos respectivamente.

Porém, tem-se o esquema exponencial rotacional apenas em diferenças finitas com a equação na forma convectiva, pois tentou-se um esquema exponencial rotacional em volumes finitos com a equação na forma divergente nos mesmos moldes

do esquema em diferenças finitas de Figueiredo (1992), resultando singular em situações importantes além de apresentar matriz instável. Ressalta-se, entretanto, que alternativas a serem investigadas para a obtenção de tal esquema ainda não se esgotaram.

Os esquemas em volumes finitos de Baliga e Patankar (1983) e Raithby (1976) não foram usados por utilizarem a equação geratriz da curva interpolante homogênea, que segundo os autores (Raithby, 1976) compromete o esquema para problemas transitórios e com termo fonte.

1.1 - Difusão Numérica

O conceito da difusão numérica surgiu bastante associado ao efeito de orientação da malha graças ao esquema de um ponto a montante apresentar os dois fenômenos simultaneamente. Porém deve-se manter em mente a origem e efeitos de cada um isoladamente, pois eles não necessariamente estão ligados um ao outro.

A difusão numérica é basicamente um termo de difusão não física introduzido no fenômeno pelo erro conseqüente da resolução numérica de uma equação diferencial. Este erro pode ser obtido através da análise em série de Taylor do método numérico com seu esquema discretizante, sendo portanto este erro função do método e esquema utilizado. Por exemplo, sendo a expansão em série de Taylor em torno de x_0 de uma função genérica ϕ :

$$\frac{\partial \phi}{\partial x} = \frac{\phi(x) - \phi(x_0)}{(x - x_0)} - \frac{\partial^2 \phi}{\partial x^2} \cdot \frac{(x - x_0)}{2!} + O(2) + \dots$$

No esquema de um ponto a montante, upwind, tem-se :

$$\left. \frac{\partial \phi}{\partial x} \right|_{num} = \frac{\phi_s(x) - \phi_s(x_0)}{(x - x_0)}$$

Então, o erro assintótico de truncamento é

$$-\frac{\partial^2 \phi}{\partial x^2} \frac{(x-x_0)}{2!}$$

Portanto, o erro introduzido no problema pelo esquema de um ponto a montante é proporcional à segunda derivada da função ϕ . Porém, em esquemas como o exponencial de Allen e Southwell (Figueiredo 1988), central e de dois pontos a montante, o erro não é proporcional à segunda derivada, não podendo estes erros assintóticos de truncamento ser associados à idéia de difusão numérica

Entretando, o exponencial de Allen e Southwell também apresenta efeitos de orientação da malha similares ao esquema à montante em certos problemas, e neste sentido é às vezes referido como numericamente difusivo.

1.2 - Efeito de orientação de Malha

O efeito de orientação da malha no erro se manifesta de forma que caso se mude o ângulo da malha numérica com o escoamento teremos respostas numéricas diferentes, logo erros diferentes. O esquema upwind mostra no problema de Wolfshtein (1968) uma piora no comportamento com o aumento do ângulo, promovendo uma suavização não física ao degrau que se tenta representar.

Em Figueiredo (1988) tem-se um experimento numérico onde para os esquemas central e exponencial de Allen e Southwell se fez variar este ângulo, observando-se o comportamento do erro no espectro de soluções da equação de transporte convectivo-difusivo bidimensional sem termo fonte e com propriedades constantes.

O espectro de soluções é obtido através da solução da equação por separação de variáveis, obtendo-se todas as possíveis soluções para a equação, chamadas de soluções elementares A, B, C, D, CD e DC. Sendo portanto a solução de um problema com condições de contorno específicas uma combinação destas soluções.

Usando separadamente estas soluções elementares nas fronteiras como condições de contorno, as soluções no domínio serão as próprias soluções elementares. Desta forma pode-se fazer o comparativo entre as soluções analítica e numérica

para todas as possíveis soluções da equação diferencial, e não apenas para uma solução específica.

SOLUÇÃO TIPO	ÂNGULO	ERRO	
		CENTRAL	EXP. DE ALLEN
A	0	3,3E-5	3,9E-5
	22.5	1,3E-3	6,8E-3
	45	6,2E-5	1,0E-2
B	0	8E-2	-----
	22.5	1.0E-3	1,0E-9
	45	7E-5	-----
C	0	6,1E-5	7,2E-5
	22.5	9,6E-4	9,7E-3
	45	9E-5	1,6E-2
D	0	1,2E-1	-----
	22.5	1,2E-3	1,0E-9
	45		1,0E-9
D NORMAL.	0	8E-2	-----
	22.5		6E-8
	45		7E-7

Tabela 01.Desempenho da discretizações com o ângulo para $Pe=100$, $\sigma=\pi\frac{\sqrt{2}}{2}$ e malha de 10 X 10, Figueiredo (1988).

A tabela 01 mostra apenas um exemplo destes resultados para a constante definida no método de separação de variáveis, ou seja, a frequência, igual a $\pi\frac{\sqrt{2}}{2}$, $Pe=100$ e malha numérica 10x10, onde o esquema central mostra comportamento, em relação a dependência da solução com o ângulo da malha numérica com o escoamento, diferente do upwind, porém, para o esquema exponencial prevalece o comportamento similar ao do upwind.

Estas observações explicam o porque da literatura mostrar diversos esquemas rotacionais de um ponto a montante e exponenciais, pois estes esquemas rotacionais tentam usar sempre os melhores desempenhos destes esquemas, que normalmente é para zero graus de ângulo entre a malha numérica e o escoamento.

CAPÍTULO 2

MODELO MATEMÁTICO

Este capítulo descreve o modelo matemático que representa o problema físico que se quer resolver. O problema físico ou experimento em questão possui duas etapas encadeadas, sendo o final da primeira etapa condição inicial para a segunda. Cada uma destas etapas tem seu conjunto de equações diferenciais de governo juntamente com suas condições de contorno e condição inicial.

2.1 - Pressão e Velocidades

A primeira etapa do experimento é injetar um fluido no reservatório através de um poço chamado injetor até que a produção deste fluido através do poço chamado produtor chegue a regime permanente. Tem-se que o modelo matemático que representa esta etapa é composto pela equação da conservação da massa e a equação de Darcy para escoamento em meios porosos, que representa a equação da conservação da quantidade de movimento através de um modelo simplificado. Então

$$\frac{\partial(\phi \cdot \rho)}{\partial t} + \nabla(\rho \cdot \vec{V}) = q \cdot \rho \cdot \delta \quad (1)$$

$$\vec{V} = -\frac{k}{\mu} \cdot [\vec{\nabla} P - \rho \cdot g \cdot \vec{\nabla} D] \quad (2)$$

Sendo ϕ a porosidade, ρ a massa específica do fluido, t o tempo, $\vec{V}$ a velocidade do fluido, q a vazão volumétrica por unidade de volume do meio, k a permeabilidade absoluta do meio, μ a viscosidade dinâmica, P a pressão, g a aceleração da gravidade e D a profundidade vertical.

Como temos termo fonte apenas na região dos poços, é introduzido um coeficiente δ na equação, sendo $\delta = 0$ para todo o domínio exceto nas celas dos poços, onde vale 1 na região dos poços produtores e -1 na dos poços injetores.

Como o problema é bidimensional num plano horizontal, tem-se que $D = \text{const.}$, assumindo que $\frac{1}{\rho} \cdot \frac{d\rho}{dP} = c_f$, compressibilidade do fluido, e supondo ainda que $\nabla^2 P \gg c_f \cdot \left[\left(\frac{\partial P}{\partial x} \right)^2 + \left(\frac{\partial P}{\partial y} \right)^2 \right]$, teremos como resultado da associação da equação (1) e (2) :

$$\nabla^2 P = \frac{\phi \cdot \mu \cdot c_f}{k} \cdot \frac{\partial P}{\partial t} + \frac{\mu \cdot q \cdot \delta}{k} \quad (3)$$

Sendo esta equação conhecida como "Equação da Pressão". Uma vez resolvida, retorna-se com o campo de pressões à equação (2) para se calcular o campo de velocidades.

2.1.1 - Condições de Contorno e Condição Inicial

Apesar de se ter dois domínios numéricos distintos, um associado à malha diagonal e o outro à paralela, tem-se as mesmas condições de contorno para ambos domínios, pois como podemos ver na figura 01, todas as fronteiras dos dois domínios são linhas de simetria, uma vez que se considere uma série infinita de poços produtores e injetores. A representação dos poços, apesar de condição de contorno, é apresentada no item 2.3 .

Portanto, sendo Γ todas as fronteiras e η sua direção normal, as condições de contorno ficam :

$$\left. \frac{\partial P}{\partial \eta} \right|_{\Gamma} = 0 \qquad \qquad \left. \frac{\partial \bar{V}}{\partial \eta} \right|_{\Gamma} = 0$$

Como condição inicial tem-se $P = P_{\text{inicial}}$ em todo o domínio .

2.2 - Equação da Concentração

Na segunda etapa do experimento, ou seja, a partir do momento que se estabeleceu o regime permanente na primeira etapa, continua-se a injetar o fluido, mas agora com uma concentração definida e fixa de um componente, chamado de contaminante ou traçador.

Supõe-se que o contaminante e o fluido formem uma só fase, que ocorra um deslocamento miscível do contaminante no fluido no reservatório e que esta única fase possua as mesmas propriedades do fluido da primeira etapa do experimento. Desta forma os campos de pressão e velocidades estabelecidos na primeira etapa, regime permanente, não se alteram.

Segundo Lake et al. (1984), a equação da conservação da massa para o contaminante é:

$$\frac{\partial[\phi\rho\omega]}{\partial t} + \vec{\nabla} \cdot [\rho\omega\vec{V} - \phi\rho\vec{K} \cdot \vec{\nabla}\omega] = R \quad ; \quad (4)$$

sendo ω a fração em massa, $\vec{K}$ o tensor dispersividade e R o termo fonte de massa do contaminante.

Supondo-se que $\rho = \text{constante}$, que a dispersividade seja igual a constante K e sendo $\rho\omega = C$, concentração [massa do traçador/volume], a equação (4) fica :

$$\phi \frac{\partial C}{\partial t} + \vec{\nabla} \cdot [C\vec{V} - \phi K \vec{\nabla} C] = R \quad (5)$$

$$\text{e } R = \frac{-QC_{i,j}\delta}{vol} = -qC_{i,j}\delta \quad ;$$

sendo Q a vazão volumétrica que ocorre em um volume vol .

2.2.1 - Condições de Contorno e Condição Inicial

Da mesma forma que para as equações da primeira etapa do experimento, ou seja, devido à simetria do conjunto de poços, temos que as condições de contorno são :

$$\left. \frac{\partial C}{\partial \eta} \right|_{\Gamma} = 0$$

sendo Γ todas as fronteiras e η sua direção normal.

A condição inicial é $C = 0$, em todo o domínio.

2.3 - Tratamento dos Poços

A primeira alternativa pensada para a discretização nos pontos dos poços foi procurar representar o poço geometricamente, ou seja, deformar o domínio de forma que se tivesse as fronteiras do domínio circulares na região dos poços, através do qual se teria uma condição de contorno de fluxo. Claro que este domínio geraria uma malha não regular, dificultando o algoritmo. Portanto, somando-se ao fato de que dimensionalmente o poço é muito menor do que o domínio completo, pensou-se em colocar esta condição de contorno de fluxo em um domínio quadrado diretamente, representando o fluxo de entrada do poço, mas tendo-se parte do poço

geometricamente dentro do domínio, apesar de sua influência ser colocada através da condição de contorno.

Esta alternativa leva a uma condição de contorno especial para a discretização nos pontos dos poços. Adotou-se por isto uma outra alternativa, coloca-se este fluxo como um termo fonte na cela dos poços e mantém-se as condições de contorno do resto do domínio também nesta região.

Porém deve-se lembrar que este modelo para as celas dos poços é uma aproximação da situação física real, com isto devemos ter cautela ao interpretarmos os valores calculados nestes pontos. No caso da pressão, a pressão calculada no vértice do domínio representa a pressão na região do poço e não corresponde à pressão de fundo de poço, necessitando fazer-se uso do conceito do "raio equivalente", proposto por Peacemam (1978), para relacionar estas duas pressões, ou seja, a partir da pressão obtida numericamente no vértice do domínio, obter a pressão de fundo de poço. Esta metodologia e conceitos são detalhados no capítulo do procedimento numérico.

2.4 - Adimensionalização

2.4.1 - Equação da pressão

Adotam-se as seguintes variáveis adimensionais :

$$P_d = \frac{kh}{Q\mu} [P_i - P]$$

$$t_{d1} = \frac{kt}{\phi\mu c_i L^2}$$

$$x_d = \frac{x}{L}; y_d = \frac{y}{L}$$

Sendo P_i uma pressão de referência, L o lado do domínio de cálculo e h a altura vertical do domínio.

Substituindo na equação (3) obtêm-se :

$$\nabla^2 P_d = \frac{\partial P_d}{\partial t_{d1}} - \frac{\delta}{\Delta x_d \Delta y_d} \quad (6)$$

2.4.2 - Equação de Darcy

Sendo $\bar{V}_d = \bar{V} \cdot \frac{hL}{Q}$, a equação (2) fica :

$$\bar{V}_d = \bar{\nabla}_d P_d \quad (7)$$

2.4.3 - Equação da concentração

Fazendo

$$t_{d2} = \frac{tQ}{\phi L^2 h}$$

$$C_d = \frac{C}{C_{injetado}}$$

$$Pe = \frac{Q}{\phi Kh}$$

e substituindo na equação (5) temos

$$\frac{\partial C_d}{\partial t_{d2}} + \bar{V}_d \cdot \left[C_d \bar{V}_d - \frac{1}{Pe} \bar{\nabla}_d C_d \right] = - \frac{C_d \delta}{\Delta x_d \Delta y_d} \tag{8}$$

CAPÍTULO 3

PROCEDIMENTO NUMÉRICO

Neste capítulo será descrito o procedimento utilizado para a obtenção da solução numérica das equações diferenciais parciais (EDPs) descritas no capítulo 2.

Inicialmente define-se uma malha regular com $N \times N$ pontos, e discretizando as EDPs nestes pontos obtém-se um sistema de equações algébricas que resolvidas nos darão os valores discretos da função.

Todos os índices "d" colocados nas variáveis na secção 2.4, para indicar variáveis adimensionais, serão omitidos de agora em diante para simplificar a notação.

3.1 - Equação da Pressão

A solução da primeira etapa do experimento numérico, equações (6) e (7), não apresenta dificuldades, sendo resolvida diretamente pelo esquema tradicional de diferenças centradas (ou esquema central) para a discretização espacial, e implícito em direções alternadas para a

integração temporal, atualizando-se o campo a cada cálculo feito no tempo. Então, a partir da equação (6) tem-se :

$$\frac{P_{i+1,j}^k - 2 \cdot P_{i,j}^k + P_{i-1,j}^k}{\Delta x^2} + \frac{P_{i,j+1}^k - 2 \cdot P_{i,j}^k + P_{i,j-1}^k}{\Delta y^2} = \frac{P_{i,j}^{k+1} - P_{i,j}^k}{\Delta t} - \frac{\delta}{\Delta x \Delta y} \quad (9)$$

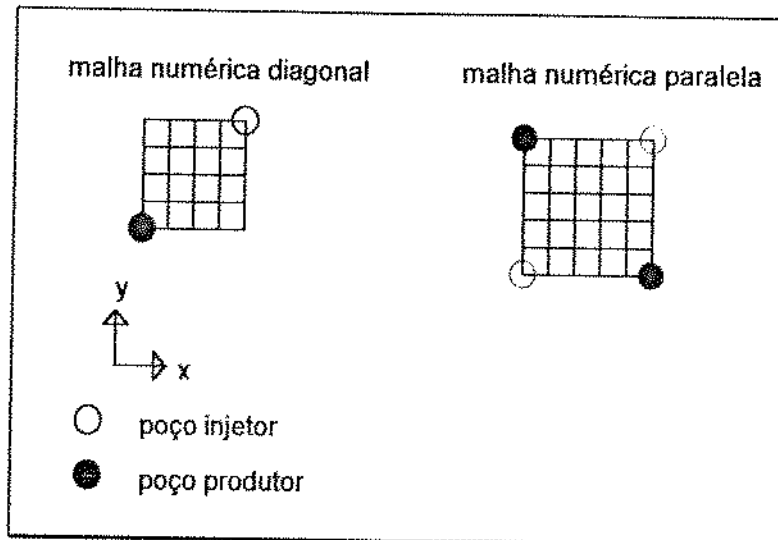


Figura 2 - Disposição dos domínios.

Fazendo a malha quadrada, tem-se $\Delta x = \Delta y$ e rearranjando a equação (9) para um esquema implícito no tempo apenas na direção x, obtém-se:

$$P_{i-1,j}^{k+1} + \left[-2 - \frac{\Delta x^2}{\Delta t} \right] \cdot P_{i,j}^{k+1} + P_{i+1,j}^{k+1} = -P_{i,j-1}^k + \left[2 - \frac{\Delta x^2}{\Delta t} \right] \cdot P_{i,j}^k - P_{i,j+1}^k - \delta$$

Da mesma forma para um esquema implícito no tempo apenas na direção y, obtém-se:

$$P_{i,j-1}^{k+2} + \left[-2 - \frac{\Delta x^2}{\Delta t} \right] \cdot P_{i,j}^{k+2} + P_{i,j+1}^{k+2} = -P_{i-1,j}^{k+1} + \left[2 - \frac{\Delta x^2}{\Delta t} \right] \cdot P_{i,j}^{k+1} - P_{i+1,j}^{k+1} - \delta$$

3.1.1 - Condições de Contorno

Como todas as fronteiras são linhas de simetria, temos que $\left. \frac{\partial P}{\partial \eta} \right|_{\Gamma} = 0$, portanto :

$$\text{para } j=1 \Rightarrow P_{i,0} = P_{i,2}$$

$$\text{para } j=N \Rightarrow P_{i,n-1} = P_{i,n+1}$$

$$\text{para } i=1 \Rightarrow P_{0,j} = P_{2,j}$$

$$\text{para } i=N \Rightarrow P_{n-1,j} = P_{n+1,j}$$

sendo os índices de acordo com a figura 3.

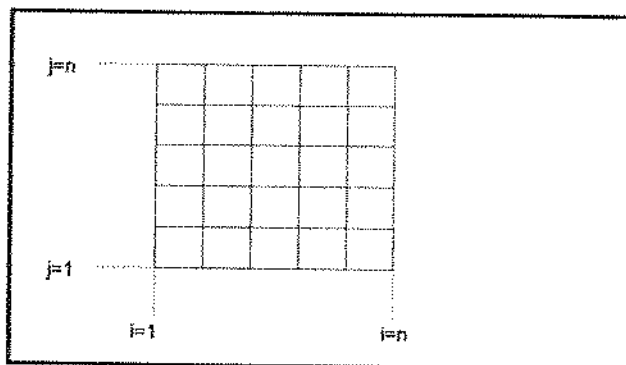


Figura 3 - Índices numéricos.

Desta forma, o sistema de equações em cada passo no tempo compõe uma matriz tridiagonal que é resolvida usando TDMA (tri-diagonal matrix algorithm), incrementando-se o

tempo até se estabelecer o regime permanente para o campo de pressão.

3.1.2 - Verificação do Campo de Pressão

A verificação do campo de pressão é feita utilizando-se a solução de Muskat (1937) para a queda de pressão entre os poços produtor e injetor na malha petrolífera padrão cinco-poços, dada por

$$\Delta P_{Muskat} = \frac{Q\mu}{\pi kh} \left[\ln \left(\frac{d}{r_w} \right) - 0.6190 \right] \quad (10)$$

sendo d a distância entre os poços e r_w o raio do poço.

Porém, como é largamente conhecido, as pressões numéricas obtidas nos pontos correspondentes aos poços não representam as pressões nos poços verdadeiros, não se podendo então comparar o ΔP calculado pela equação de Muskat, equação (10), para os poços verdadeiros com o ΔP numérico diretamente. Com isto, é necessário a utilização do conceito de raio equivalente para viabilizar esta comparação.

Raio equivalente é o raio para o qual a pressão neste ponto em torno de um poço verdadeiro é igual à pressão obtida numericamente. O conceito de raio equivalente foi

desenvolvido por Peacemam (1978) para se associar a pressão numérica com a pressão de poço.

Na região próxima ao poço, a aproximação de escoamento radial, que possui solução analítica, é admissível. Portanto o valor da função nos pontos próximos ao poço deve satisfazer a seguinte equação:

$$Q = \frac{2\pi kh}{\mu} \left[\frac{P - P_w}{\ln\left(\frac{r}{r_w}\right)} \right]$$

sendo P_w a pressão do poço.

Desta forma, a partir da definição de raio equivalente e com os resultados numéricos da função pode-se obter o valor do raio equivalente através do seguinte procedimento:

-Plotar $\left[\frac{P_{num}}{i,j} - P_{poço\ num} \right]$ versus $\left[\frac{raio}{\Delta x} \right]$ em diagrama linear - logarítmico.

-Aproximar uma reta nos pontos próximos ao poço, excluindo-se o ponto do poço.

-Extrapolar-se esta reta até cruzar o eixo do raio adimensional, o raio correspondente a esta intersecção é o raio equivalente, por definição, pois corresponde a $\left[P_{intersecção} - P_{poço\ num} \right] = 0$.

OBTENÇÃO DO RAI0 EQUIVALENTE

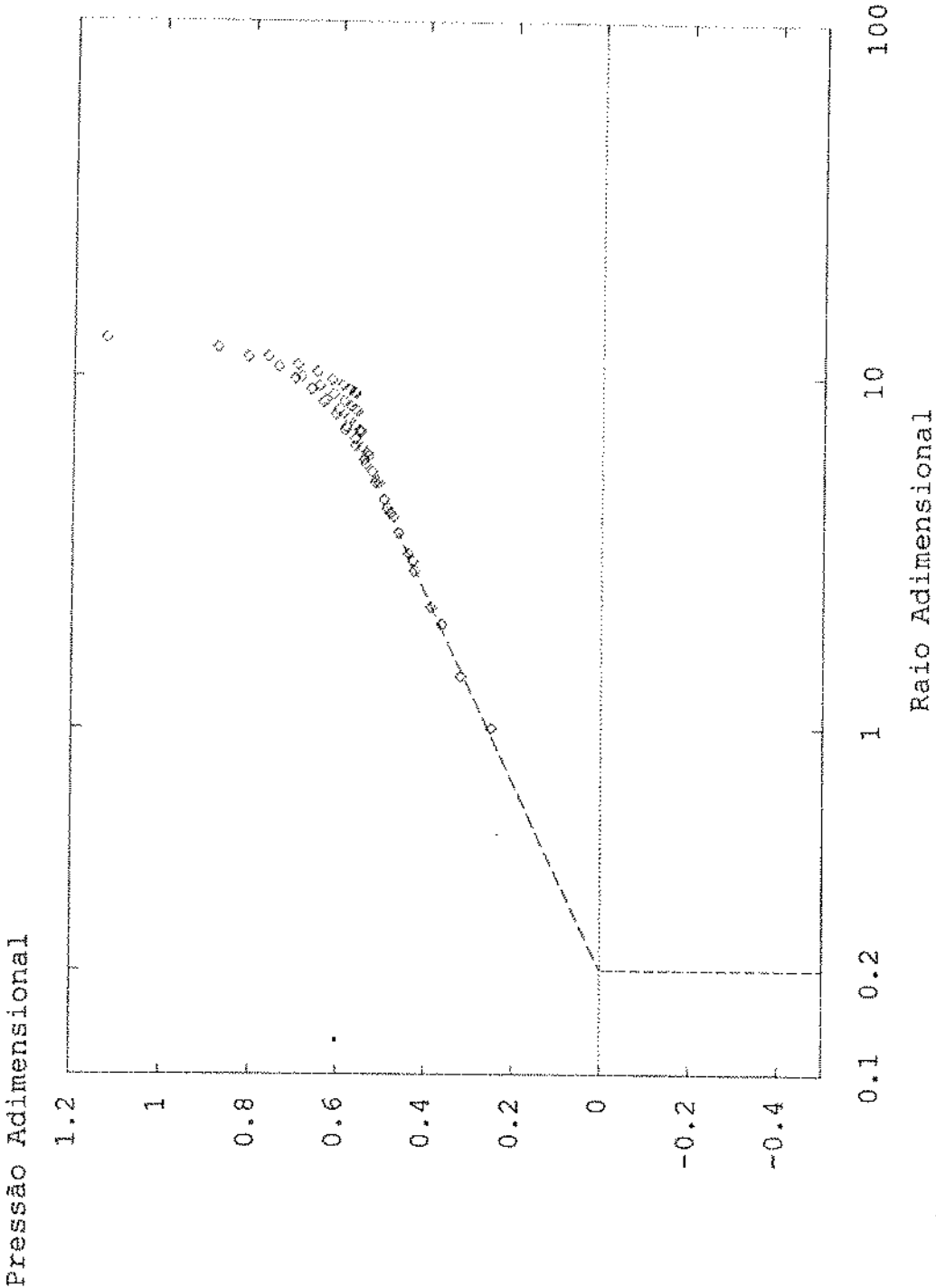


GRÁFICO 01

Através do gráfico 01 obtivemos a relação entre o raio equivalente e Δx de aproximadamente 0,2 , que confere com o consagrado resultado obtido por Peacemam (1978), mas difere dos obtidos por Almeida (1990) e Pinto (1991).

De posse do raio equivalente podemos usar a equação (10) usando o raio equivalente no lugar do raio do poço (r_w). Com isto, pela definição do raio equivalente, o ΔP obtido com a equação de Muskat corresponderá ao ΔP obtido numericamente.

Então, obteve-se para a malha diagonal com refinamento 10x10 uma diferença de pressão numérica de 1,1229, que comparada ao valor obtido pela equação de Muskat (1,1249) apresenta um erro relativo de 0,18 %. Conclui-se ,portanto ,que o resultado está suficientemente acurado já com a malha 10x10.

Além de permitir esta comparação, o raio equivalente também permite a obtenção da pressão de fundo de poço a partir da pressão numérica do poço. Isto é feito usando-se a solução para escoamento radial nos pontos do raio equivalente (pressão numérica do poço por definição) e do raio verdadeiro do poço (pressão de fundo de poço desejada).

Então

$$Q = \frac{2\pi kh}{\mu} \left[\frac{P_{\text{poço}} - P_{wf}}{\ln\left(\frac{r_o}{r_w}\right)} \right]$$

3.2 - Campo de Velocidades

Foram utilizadas duas opções para o posicionamento dos campos de velocidade, o campo deslocado e o campo colocalizado. O campo deslocado garante um campo conservativo de massa e a partir dele pode-se obter o campo colocalizado sem perda de informações. Já o campo colocalizado não garante um campo conservativo de massa e a partir dele não se obtém o campo deslocado.

Para os esquemas em volumes finitos com a equação na forma divergente usamos os campos deslocados, e para os esquemas em diferenças finitas com a equação na forma convectiva usamos os campos colocalizados.

Então, a partir da equação (7) e usando o esquema central temos

Campo colocalizado

$$U[i,j] = \frac{\partial P}{\partial x} \Big|_{i,j} = \frac{P_{i+1,j} - P_{i-1,j}}{2\Delta x}$$

$$V[i,j] = \frac{\partial P}{\partial y} \Big|_{i,j} = \frac{P_{i,j+1} - P_{i,j-1}}{2\Delta y}$$

Campo deslocado

$$U\left[i+\frac{1}{2},j\right] = \frac{\partial P}{\partial x} \Big|_{i+1/2,j} = \frac{P_{i+1,j} - P_{i,j}}{\Delta x}$$

$$V\left[i,j+\frac{1}{2}\right] = \frac{\partial P}{\partial y} \Big|_{i,j+1/2} = \frac{P_{i,j+1} - P_{i,j}}{\Delta y}$$

3.3 - Discretização da EDP da Concentração

A simulação da segunda etapa do experimento, que é a solução da equação da concentração a partir do campo de velocidades obtido anteriormente, é feita utilizando-se diversos esquemas discretizantes, com o objetivo de se fazer uma análise comparativa entre eles, ou seja, visando definir-se qual é o mais acurado em situações para altos valores do número de Peclet sob o ponto de vista do efeito de orientação da malha e estabilidade. Dentro desta análise, a questão de se optar por um esquema conservativo ou não também é avaliada.

Desta forma testamos os esquemas central, exponencial e exponencial rotacional em diferenças finitas com a equação

na forma convectiva, e os esquemas central e exponencial em volumes finitos com a equação na forma divergente. Para fechar as comparações seria conveniente um esquema exponencial rotacional em volumes finitos com a equação na forma divergente; isto foi tentado, mas a matriz dos coeficientes de influência resultou singular para diversos ângulos importantes, além de ser instável. Porém, as tentativas de construir um esquema exponencial direcional na forma divergente não estão esgotadas, mas transcendem o escopo deste trabalho.

O método de diferenças finitas pode ser aplicado para a equação da conservação tanto na forma convectiva como na forma divergente. Neste trabalho usaremos apenas diferenças finitas com a equação na forma convectiva. Portanto, quando mencionado diferenças finitas entenda-se automaticamente a equação na forma convectiva.

Já em volumes finitos, sempre se usa a equação na forma divergente, portanto fica implícita a forma da equação. Depois da equação integrada, a discretização dos termos de fluxo é feita de forma inteiramente semelhante a diferenças finitas, por isto costuma-se referenciar este método também como diferenças finitas, porém, neste trabalho, para se diferenciar os dois procedimentos, manteremos a nomenclatura de volumes finitos.

Nos primeiros esquemas implementados adotou-se o método implícito em direções alternadas e o esquema em diferenças finitas com a equação na forma convectiva, notando-se oscilações no tempo nas sucessivas mudanças da direção implícita. Devido à sobreposição desta questão com as questões da representação do poço, das discretizações espaciais, da conservatividade dos esquemas e do efeito de orientação da malha, resolveu-se adotar em todos os esquemas o método explícito por simplicidade, focalizando-se a atenção nas outras questões que se apresentavam.

3.3.1 - Discretizações em diferenças finitas com a equação na forma convectiva

A partir da EDP(8), usando-se a continuidade obtêm-se :

$$\frac{\partial C}{\partial t} + \bar{V} \cdot \bar{\nabla}[C] - \frac{1}{Pe} \nabla^2 C = -\frac{C_w \delta}{\Delta x \Delta y} \quad (11)$$

Devemos notar, contudo, que a equação (11) é incorreta nos pontos dos poços, pois $\nabla \cdot \bar{V} \neq 0$ neste ponto devido ao termo fonte que representa o próprio poço. Desta forma, neste ponto deveríamos incluir o termo $[C(\nabla \cdot \bar{V})]$. Então, lembrando que $\bar{V} = \bar{V}P$ teremos :

$$[C(\nabla \cdot \bar{V})] = C \nabla^2 P$$

que em termos discretos seria

$$CV^2P = C_{i,j} \left[\frac{P_{i+1,j} - 2P_{i,j} + P_{i-1,j}}{\Delta x^2} + \frac{P_{i,j+1} - 2P_{i,j} + P_{i,j-1}}{\Delta y^2} \right]$$

Nota-se porém, que caso se inclua este termo teremos que o mesmo irá anular o termo fonte, graças a equação (9).

Porém, ainda assim têm-se o problema de que na discretização em diferenças finitas com a equação na forma convectiva precisa-se das velocidades nos pontos dos poços, que são pontos de descontinuidade para as velocidades, devido ao fato de apenas nestas celas ser computado o termo fonte na equação da conservação, desviando a tendência de singularidade ($\bar{V} \rightarrow \infty$). Como veremos adiante, na discretização em volumes finitos com a equação na forma divergente não se precisará das velocidades nos pontos de descontinuidade (poços).

Devido a estas complicações, os esquemas em diferenças finitas baseados na equação na forma convectiva, equação (11), somente caminham para uma solução razoável fisicamente caso se use pelo menos nos pontos dos poços um esquema em volumes finitos com a equação na forma divergente, ou seja, um esquema conservativo. Caso contrário, o campo de concentrações alcança regime permanente com concentrações superiores a 1, o que não é admissível.

3.3.1.1 - Esquema Central

Consiste em se admitir um perfil da função como um polinômio do segundo grau em torno de cada ponto numérico e em cada direção. Então, a partir da EDP dada pela eq.(11)

$$\begin{aligned} \bar{C}_{i,j}^{k+1} = & \bar{C}_{i-1,j}^k \left[\frac{U[i,j]\Delta t}{2\Delta x} + \frac{\Delta t}{Pe\Delta x^2} \right] + \bar{C}_{i+1,j}^k \left[-\frac{U[i,j]\Delta t}{2\Delta x} + \frac{\Delta t}{Pe\Delta x^2} \right] \\ & + \bar{C}_{i,j-1}^k \left[\frac{V[i,j]\Delta t}{2\Delta y} + \frac{\Delta t}{Pe\Delta y^2} \right] + \bar{C}_{i,j+1}^k \left[-\frac{V[i,j]\Delta t}{2\Delta y} + \frac{\Delta t}{Pe\Delta y^2} \right] \\ & + \bar{C}_{i,j}^k \left[1 - \frac{2\Delta t}{Pe\Delta x^2} - \frac{2\Delta t}{Pe\Delta y^2} \right] - \frac{\delta\Delta t}{\Delta x\Delta y} \bar{C}_{i,j}^k \end{aligned}$$

Sendo largamente conhecido o fato do esquema central ser instável para altos valores de Peclet, usaremos a relação $\frac{\Delta t}{\Delta x^2} \leq 0,25$, por ser explícito, para garantir estabilidade para o esquema.

3.3.1.2 - Esquema Exponencial de Allen & Southwell:

O esquema de Allen & Southwell obtém a curva interpolante usada para se discretizar a EDP através da solução analítica de aproximações unidimensionais da própria EDP a ser discretizada. Tendo-se o seguinte procedimento :

- Separa-se o termo convectivo e difusivo em uma direção em um lado da equação, colocando-se todos os outros termos separados.
- Assume-se como uma constante o conjunto destes termos que estão separados, no sub-domínio, ou seja, em torno de um ponto nodal.
- Obtém-se a solução analítica unidimensional a partir desta equação.
- Usa-se esta solução analítica como curva interpolante nesta direção para discretizar a EDP original.
- Repete-se o procedimento para as outras direções.

Então, a partir da equação (11) tem-se

$$U \frac{\partial C}{\partial x} - \frac{1}{Pe} \frac{\partial^2 C}{\partial x^2} = \frac{C_{i,j} \delta}{\Delta x \Delta y} - \frac{\partial C}{\partial t} - V \frac{\partial C}{\partial y} + \frac{1}{Pe} \frac{\partial^2 C}{\partial y^2} = T$$

e assumindo-se $U = cte$ e $T = cte$ no subdomínio, a EDP se torna ordinária, obtendo-se a seguinte solução analítica para a equação :

$$C = \frac{T}{U} x + A + b \exp[PeUx] \quad ; \text{ e fazendo } \frac{T}{U} = J$$

$$C = Dx + A + b \exp[PeUx] \quad (12)$$

Como queremos discretizar $U \frac{\partial C}{\partial x} - \frac{1}{Pe} \frac{\partial^2 C}{\partial x^2}$, substitui-se

(12) neste operador, obtendo-se :

$$U \frac{\partial C}{\partial x} - \frac{1}{Pe} \frac{\partial^2 C}{\partial x^2} = U \cdot J$$

Usando como condição de contorno para a equação (12) o ponto $[i, j]$ e seus adjacentes na direção x , tem-se :

$$U \frac{\partial C}{\partial x} - \frac{1}{Pe} \frac{\partial^2 C}{\partial x^2} = U \cdot J = U \frac{\left[\left(C_{i+1,j} - C_{i,j} \right) + \left(C_{i-1,j} - C_{i,j} \right) \exp(PeU\Delta x) \right]}{\Delta x (1 - \exp(PeU\Delta x))}$$

Procedendo-se da mesma forma para a direção y obteremos resultado semelhante. Substituindo-se estes resultados na EDP (11), usando-se o esquema explícito e rearranjando-se obtemos :

$$C_{i,j}^{k+1} = C_{i,j}^k \left[1 - \frac{\Delta t \delta}{\Delta x \Delta y} - \left(\pi_{i+1,j} + \pi_{i-1,j} + \pi_{i,j+1} + \pi_{i,j-1} \right) \right] + C_{i+1,j}^k \cdot \pi_{i+1,j} + C_{i-1,j}^k \cdot \pi_{i-1,j} + C_{i,j+1}^k \cdot \pi_{i,j+1} + C_{i,j-1}^k \cdot \pi_{i,j-1}$$

onde

$$\pi_{i+1,j} = - \frac{\Delta t U[i,j]}{\Delta x (1 - \exp(PeU\Delta x))}$$

$$\pi_{i-1,j} = - \frac{\Delta t U[i,j] \exp(PeU\Delta x)}{\Delta x (1 - \exp(PeU\Delta x))}$$

$$\pi_{i,j+1} = - \frac{\Delta t V[i,j]}{\Delta y (1 - \exp(PeV\Delta y))}$$

$$\pi_{i,j+1} = - \frac{\Delta t V[i,j] \exp(Pe U \Delta y)}{\Delta y (1 - \exp(Pe U \Delta y))}$$

3.3.1.3 - Esquema Exponencial Rotacional de Figueiredo

A idéia de se fazer um esquema discretizante que use uma curva interpolante na direção do escoamento surgiu quando se estudava os esquemas exponenciais e de um ponto a montante, que foram as primeiras alternativas para substituir o esquema central, devido a sua instabilidade para altos valores de Peclet.

Os esquemas exponenciais e de um ponto a montante mostraram uma grande anisotropia do erro com o ângulo formado entre a curva interpolante e o escoamento, sendo a situação mais favorável para zero graus.

Portanto, a idéia se resume em tentar usar sempre o melhor desempenho dos esquemas exponenciais e de um ponto a montante, ou seja, que estas curvas interpolantes estejam sempre alinhadas ao escoamento.

Com esta idéia, surgiu o esquema exponencial rotacional de seis pontos de Figueiredo, em diferenças finitas com a equação na forma convectiva, que propõe uma superfície interpolante na forma :

$$\phi = C_1 + C_2 n + C_3 n^2 + C_4 s + C_5 \exp[Pe l/s] + C_6 s n \quad (13)$$

$$\text{sendo} \quad s = x \cos \alpha + y \sin \alpha \quad (13.1)$$

$$n = -x \sin \alpha + y \cos \alpha \quad (13.2)$$

e α o ângulo do escoamento com o eixo x , conforme mostra a figura (4).

Usando as equações 13.1 e 13.2 na equação (13) obtêm-se a superfície interpolante em função dos eixos numéricos. Como se tem 6 constantes a serem determinadas, são usados o ponto $[i,j]$ e os seus quatro adjacentes, $[i+1,j]$, $[i-1,j]$, $[i,j+1]$, $[i,j-1]$, sendo o sexto ponto o mais a montante entre $[i+1,j+1]$, $[i-1,j+1]$, $[i+1,j-1]$ ou $[i-1,j-1]$, o que permite a obtenção do perfil ϕ em função destes pontos discretos, podendo-se então usar este perfil para obter a representação discreta da EDP (11).

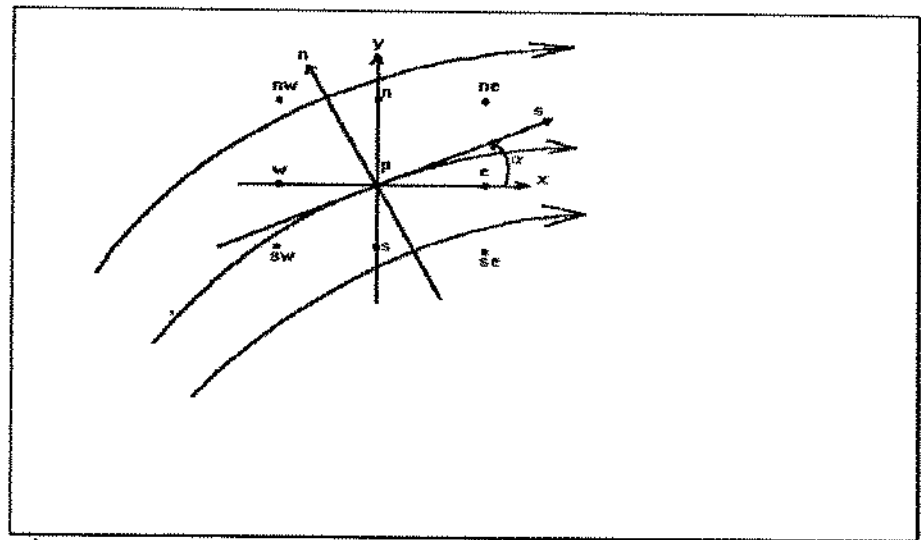


Figura 4 - Nomenclatura para o esquema exponencial.

Para o operador do transporte convectivo-difusivo temos os seguintes coeficientes de influência:

$$L(C) = \vec{u} \cdot (\vec{\nabla} C) - \frac{1}{Pe} \nabla^2 C = \frac{-1}{Pe \Delta x \Delta y} [\pi_e \phi_e + \pi_w \phi_w + \pi_n \phi_n + \pi_s \phi_s + \pi_p \phi_p + \pi_{nc} \phi_{nc}]$$

sendo:

$$\pi_e = \left(1 - \frac{\Delta P_x}{2} + G \cos^2 \alpha\right) \cdot \left(\frac{\Delta y}{\Delta x}\right) + (-\psi_{se} - \psi_{ne}) \pi_{nc}$$

$$\pi_w = \left(1 + \frac{\Delta P_x}{2} + G \cos^2 \alpha\right) \cdot \left(\frac{\Delta y}{\Delta x}\right) + (-\psi_{sw} - \psi_{nw}) \pi_{nc}$$

$$\pi_n = \left(1 - \frac{\Delta P_y}{2} + G \sin^2 \alpha\right) \cdot \left(\frac{\Delta x}{\Delta y}\right) + (-\psi_{nw} - \psi_{ne}) \pi_{nc}$$

$$\pi_s = \left(1 + \frac{\Delta P_y}{2} + G \sin^2 \alpha\right) \cdot \left(\frac{\Delta x}{\Delta y}\right) + (-\psi_{sw} - \psi_{se}) \pi_{nc}$$

$$\Delta P e_x = p \cdot \cos \alpha \cdot \Delta x$$

$$\Delta P e_y = p \cdot \sin \alpha \cdot \Delta y$$

$$p = Pe \cdot |\vec{u}|$$

$$\pi_{nc} = 2 \cdot F \cdot \sin \alpha \cdot \cos \alpha \cdot (\psi_{sw} - \psi_{se} - \psi_{nw} + \psi_{ne})$$

$$\pi_p = -(\pi_e + \pi_w + \pi_n + \pi_s + \pi_{nc})$$

$$\psi_{qq} = \begin{cases} 1 & \text{se } qq=nc \\ 0 & \text{se } qq \neq nc \end{cases}$$

$$G = \frac{[(E_e - E_w) \Delta P_x / 2 - (E_e + E_w)] \cdot \Delta y / \Delta x + [(E_n - E_s) \Delta P_y / 2 - (E_n + E_s)] \cdot \Delta x / \Delta y}{(E_e + E_w) \cdot \cos^2 \alpha \cdot \Delta y / \Delta x + (E_n + E_s) \cdot \sin^2 \alpha \cdot \Delta x / \Delta y + EE_{mt} \cdot 2 \cdot \sin \alpha \cdot \cos \alpha}$$

$$EE_{mt} = \begin{cases} (E_e \cdot E_w) & \text{se } nc = sw \\ (-E_s \cdot E_e) & \text{se } nc = se \\ (E_n \cdot E_s) & \text{se } nc = ne \\ (-E_n \cdot E_w) & \text{se } nc = nw \end{cases}$$

$$E_e = \exp(p \Delta x \cos \alpha) - 1$$

$$E_w = \exp(-p \Delta x \cos \alpha) - 1$$

$$E_n = \exp(p\Delta y \sin \alpha) - 1$$

$$E_s = \exp(-p\Delta y \sin \alpha) - 1$$

3.3.2 - Discretizações em volumes finitos com a equação na forma divergente

A partir da equação (8), que está na forma divergente, integra-se em um volume de controle e em um intervalo de tempo, discretizando-se então a equação nesta forma, sendo esta metodologia conhecida como volumes finitos. Fazer isto é, em outras palavras, fazer-se um balanço da propriedade transportada em torno deste volume de controle e neste intervalo de tempo.

Para se discretizar a equação, escolhe-se uma curva interpolante para avaliar os fluxos nas fronteiras do volume de controle, e admitindo-se que a mesma curva interpolante seja usada para o fluxo que sai de um volume de controle e para o fluxo que entra no volume de controle subsequente, teremos que o esquema desenvolvido apresenta a propriedade de ser conservativo, ou seja, que os balanços da propriedade transportada são satisfeitos, não só em cada volume de controle, mas em todo o domínio.

Esta propriedade é bastante atraente por vincular o método numérico com o princípio físico que a equação representa, ou seja, a conservação da propriedade. Porém,

esta propriedade não nos leva diretamente à conclusão de que o erro numérico associado às aproximações feitas seja menor do que em outros esquemas. Ela apenas nos diz que os valores discretos da função possuem um inter-relacionamento tal que os balanços são satisfeitos, independentemente do refinamento da malha, ou seja, a conservatividade é independente da análise do erro.

Na discretização feita em diferenças finitas com a equação na forma convectiva, avalia-se diretamente os termos da equação diferencial parcial no ponto, não se avaliando fluxos ou se fazendo balanços da propriedade transportada, por isso tal discretização não garante a conservatividade, senão com o refinamento da malha.

Para se avaliar o erro associado ao esquema deve-se fazer uma análise por série de Taylor ou mesmo por experimento numérico, comparando-se com soluções conhecidas ou bastante refinadas. Neste aspecto, a análise de erro por série de Taylor é mais explorada nos métodos que discretizam a equação em diferenças finitas, tendo-se porém em Figueiredo (1988) uma análise dos dois métodos .

Então, integrando-se a equação (8) obtêm-se :

$$\int \int \int \frac{\partial C}{\partial t} dtdV + \int \int \int \nabla \left[C\bar{v} - \frac{1}{Pe} \bar{\nabla} C \right] dtdV = \int \int \int -\frac{C_{i,j}}{\Delta x \Delta y} \delta dtdV \quad (14)$$

Termo Temporal :

$$\int \int \int \int_V \frac{\partial C}{\partial t} dt dV \cong \left[C_{i,j}^{k+1} - C_{i,j}^k \right] \Delta V = \left[C_{i,j}^{k+1} - C_{i,j}^k \right] \Delta x \Delta y h \quad (14.1)$$

Termo Fonte :

$$\int \int \int \int_V -\frac{C_{i,j}}{\Delta x \Delta y} \delta t dV \cong -C_{i,j} \delta \Delta t h \quad (14.2)$$

Termo de Transporte Convectivo-Difusivo :

Utilizando-se o teorema de Gauss para transformar a integral de volume em uma integral de superfície, obtêm-se

$$\int \int \int \int_V \nabla \left[C \bar{v} - \frac{1}{Pe} \bar{\nabla} C \right] dt dV = \int \int \int \int_{S.C.} \left[C \bar{v} - \frac{1}{Pe} \bar{\nabla} C \right] \cdot d\bar{A} dt = \int \int \int \int_{S.C.} [\bar{F} \cdot d\bar{A}] dt$$

Assumindo-se um perfil linear nas faces do volume de controle para o fluxo na direção normal a ele, obtêm-se

$$\int \int \int \int_{S.C.} [\bar{F} \cdot d\bar{A}] dt = \Delta t \left[(F_e \Delta y h - F_w \Delta y h) + (F_n \Delta x h - F_s \Delta x h) \right]$$

$$\text{sendo} \quad F_e = \left[CU - \frac{1}{Pe} \frac{\partial C}{\partial x} \right]_{i+1/2,j} ; \quad (15)$$

obtendo-se F_w, F_n e F_s de forma similar. Teremos portanto um balanço da propriedade neste volume de controle de acordo com a figura 05 abaixo.

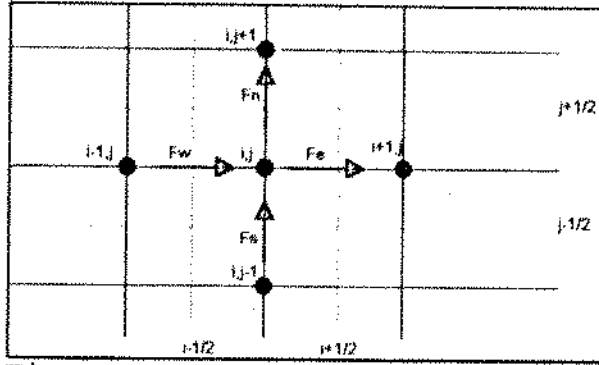


Figura 05 - Fluxos no volume de controle i, j .

3.3.2.1 - Esquema Central

O esquema central para a discretização da equação na forma divergente consiste em se supor um perfil linear por partes entre o ponto $[i, j]$ e cada um de seus adjacentes, portanto o fluxo F_e fica :

$$F_e = U_{i+1/2,j} \left[\frac{C_{i+1,j} + C_{i,j}}{2} \right] - \frac{1}{Pe} \left[\frac{C_{i+1,j} - C_{i,j}}{\Delta x} \right]$$

Fazendo-se o mesmo para F_w, F_n e F_s e substituindo tudo em (14.3) obtêm-se a representação discreta do termo convectivo-difusivo. Substituindo este resultado junto com (14.1) e (14.2) em (14) e rearranjando obtêm-se :

$$\begin{aligned} \bar{C}_{i,j}^{k+1} = & \bar{C}_{i,j}^k \left[1 - \frac{2\Delta t}{Pe\Delta x^2} - \frac{2\Delta t}{Pe\Delta y^2} - \left(\frac{U_{i+1/2,j} - U_{i-1/2,j}}{2\Delta x} + \frac{V_{i,j+1/2} - V_{i,j-1/2}}{2\Delta y} \right) \frac{\Delta t}{\Delta x\Delta y} \right] + \\ & \bar{C}_{i-1,j}^k \left[\frac{U_{i-1/2,j} \Delta t}{2\Delta x} + \frac{\Delta t}{Pe\Delta x^2} \right] + \bar{C}_{i+1,j}^k \left[-\frac{U_{i+1/2,j} \Delta t}{2\Delta x} + \frac{\Delta t}{Pe\Delta x^2} \right] + \\ & \bar{C}_{i,j-1}^k \left[\frac{V_{i,j-1/2} \Delta t}{2\Delta y} + \frac{\Delta t}{Pe\Delta y^2} \right] + \bar{C}_{i,j+1}^k \left[-\frac{V_{i,j+1/2} \Delta t}{2\Delta y} + \frac{\Delta t}{Pe\Delta y^2} \right] - \frac{\delta\Delta t}{\Delta x\Delta y} \bar{C}_{i,j}^k \end{aligned}$$

Normalmente se elimina o termo $\left(\frac{U}{i+1/2,j} - \frac{U}{i-1/2,j} + \frac{V}{i,j+1/2} - \frac{V}{i,j-1/2} \right)$ devido à equação da continuidade, porém nos pontos onde temos termo fonte, pontos dos poços, não podemos fazê-lo pois $V\bar{u} \neq 0$.

3.3.2.2 - Esquema Exponencial

O esquema exponencial para a equação na forma divergente utiliza a solução analítica de uma equação aproximada como curva interpolante, diferindo do esquema de Allen-Southwell pelo fato de usar a solução de uma equação homogênea como curva interpolante. Este procedimento pode ser entendido como uma aproximação unidimensional da equação de transporte convectivo-difusivo sem termo fonte e em regime permanente. A equação geratriz é:

$$\frac{d}{dx}[CU] - \frac{1}{Pe} \frac{d^2 C}{dx^2} = 0 \quad ;$$

que possui solução analítica conhecida. Usando-se os pontos $[i,j]$ e $[i+1,j]$ como condições de contorno para a solução analítica obtêm-se :

$$C = C_{i,j} + \left[\frac{C_{i+1,j} - C_{i,j}}{\exp(\Delta x U Pe) - 1} \right] \frac{[\exp(x U Pe) - 1]}{x} \quad ; \quad (16)$$

que será a curva interpolante para se obter a representação discreta do fluxo.

Portanto, a partir de (16) obtêm-se $\frac{\partial C}{\partial x}$ e substituindo-se juntamente com (16) na equação (15) tem-se :

$$F_e = U_{i+1/2,j} \left[C_{i,j} + \frac{(C_{i,j} - C_{i+1,j})}{(\exp(\Delta x U / Pe) - 1)} \right]$$

Aproxima-se da mesma forma F_w, F_n e F_s e substituindo tudo em (14.3) obtêm-se o fluxo convectivo-difusivo discretizado. Substituindo-se então este resultado junto com (14.1) e (14.2) em (14) teremos a equação discreta da EDP (8) integrada. Então ,

$$\begin{aligned} \bar{C}_{i,j}^{k+1} = & \bar{C}_{i,j}^k \left[1 - \frac{U_{i+1/2,j} \Delta t \exp(\Delta x U_{i+1/2,j} / Pe)}{\Delta x (\exp(\Delta x U_{i+1/2,j} / Pe) - 1)} + \frac{U_{i-1/2,j} \Delta t \exp(-\Delta x U_{i-1/2,j} / Pe)}{\Delta x (\exp(-\Delta x U_{i-1/2,j} / Pe) - 1)} \right] + \\ & \bar{C}_{i,j}^k \left[- \frac{V_{i,j+1/2} \Delta t \exp(\Delta y V_{i,j+1/2} / Pe)}{\Delta y (\exp(\Delta y V_{i,j+1/2} / Pe) - 1)} + \frac{V_{i,j-1/2} \Delta t \exp(-\Delta y V_{i,j-1/2} / Pe)}{\Delta y (\exp(-\Delta y V_{i,j-1/2} / Pe) - 1)} \right] + \\ & \bar{C}_{i-1,j}^k \left[- \frac{U_{i-1/2,j} \Delta t}{\Delta x (\exp(-\Delta x U_{i-1/2,j} / Pe) - 1)} \right] + \bar{C}_{i+1,j}^k \left[\frac{U_{i+1/2,j} \Delta t}{\Delta x (\exp(\Delta x U_{i+1/2,j} / Pe) - 1)} \right] + \\ & \bar{C}_{i,j-1}^k \left[- \frac{V_{i,j-1/2} \Delta t}{\Delta y (\exp(-\Delta y V_{i,j-1/2} / Pe) - 1)} \right] + \bar{C}_{i,j+1}^k \left[\frac{V_{i,j+1/2} \Delta t}{\Delta y (\exp(\Delta y V_{i,j+1/2} / Pe) - 1)} \right] - \frac{\delta \Delta t}{\Delta x \Delta y} \bar{C}_{i,j}^k \end{aligned}$$

CAPÍTULO 4

RESULTADOS

Os resultados das simulações numéricas feitas são compactados em gráficos para que se possa visualizar facilmente todo o conjunto de dados, permitindo uma comparação entre os diversos esquemas utilizados, viabilizando conclusões e o entendimento dos fenômenos físicos e numéricos envolvidos.

Tem-se três tipos de gráficos distintos. O primeiro é a concentração adimensional do efluente (concentração no poço produtor) versus tempo adimensional. O segundo é a concentração ao longo da "diagonal" em um dado instante de tempo, definindo-se esta "diagonal" como a linha que liga um poço injetor a um poço produtor, que é a própria diagonal para o domínio de malha diagonal, e um lado para o domínio de malha paralela. O objetivo deste gráfico é poder ter-se uma comparação entre os campos de concentração para os dois tipos de posicionamento da malha, visto que é difícil a visualização simultânea de diversas superfícies em um gráfico tridimensional, que representariam os campos de concentração ao longo de todo o domínio.

O terceiro tipo de gráfico é a concentração no domínio em um dado instante de tempo, ou seja, plotar $C(x,y)$, permitindo que se observe a coerência física da solução como um todo. Pode-se também neste gráfico observar as curvas de isoconcentração ou as frentes de concentração ao longo do domínio, visualizando-se sua forma e comportamento. As isoconcentrações são mostradas apenas quando são elucidativas, pois nas situações onde a frente de concentração já está bastante avançada, ou quando a mesma é bastante abrupta, as isoconcentrações praticamente coincidem, não permitindo que se obtenha informações com sua visualização. Quando apresentadas, as curvas correspondem aos valores indicados no eixo da concentração.

Os resultados são apresentados para valores de Peclet 10, 100 e 1000 para o refinamento de 10×10 para a malha diagonal e 14×14 para a malha paralela para todos os valores de Peclet, sendo referenciados nos gráficos como resultados para malha grosseira. Resultados com o refinamento de 20×20 para malha diagonal e 28×28 para a malha paralela são apresentados para Peclet 100 e 1000, e referenciados nos gráficos como resultados para malha refinada.

A diferença entre o refinamento usado para a malha paralela e diagonal objetiva manter o mesmo grau de refinamento real, pois deve-se lembrar que os dois domínios são de tamanhos diferentes, apesar de relacionados, pois a diagonal do domínio de malha diagonal é o lado do domínio de malha paralela.

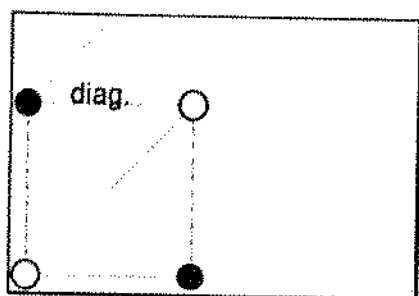


Figura 06 - Relação dimensional entre os dois domínios.

Então, a partir da figura 05, obtém-se

$$\frac{\text{lado da malha diagonal}}{\text{lado da malha paralela}} = \frac{1}{\sqrt{2}} \approx \frac{10}{14} = \frac{20}{28}$$

Os intervalos de tempo e instantes em que se fez os gráficos da concentração em todo o domínio e da concentração na diagonal utilizados durante as simulações estão resumidos na tabela 02, sendo a unidade de tempo de acordo com adimensionalização feita no item 2.4.3 . Note-se que cada malha tem um tempo adimensional diferente, por isto a diferenciação nos tempos dos gráficos para cada tipo de malha, além de todos os gráficos do transitório usarem o tempo adimensional da malha diagonal. Porém estes tempos adimensionais são correlacionados, ou seja, $t_{\text{malha diagonal}} = t_{\text{malha paralela}} / 2$, devido a relação entre os lados dos dois domínios.

	Peclet 10		Peclet 100	Peclet 1000	
	tempo	Δt	Δt	tempo	Δt
malha diagonal 10 X 10	6	1e-2	1e-2	3,75	3e-3
malha diagonal 20 X 20			6e-4	3,75	6e-4
malha paralela 14 X 14	12	1e-3	1e-3	7,5	1.5e-3
malha paralela 28 X 28			3e-4	7,5	3e-4

Tabela 02 - Resumo dos valores de Δt e tempos a que se referem os resultados apresentados.

Exceto para Peclet 10, fez-se a escolha do incremento do tempo de forma a garantir a relação $\frac{\Delta t}{\Delta x^2} \leq 0.25$ para se tentar obter soluções estáveis para o esquema central. Procurou-se também um Δt no qual não se tenha mais ganho de acuidade com sua diminuição, para se estudar apenas as questões relativas à discretização espacial.

4.1 - Peclet 10

4.1.1 - Concentração do efluente X Tempo

Nota-se no gráfico 02 uma muito pequena discordância entre os resultados para malha diagonal e paralela, mostrando que os esquemas central, exponencial e exponencial rotacional em diferenças finitas com a equação na forma convectiva apresentam boa independência da solução com a escolha da

posição da malha nesta situação. Observa-se também que todos esquemas são coincidentes, tanto para malha diagonal quanto para malha paralela.

No gráfico 03 observa-se perfeita concordância entre os esquemas central e exponencial em volumes finitos com a equação na forma divergente bem como entre as malhas diagonal e paralela. Apesar do gráfico 02 mostrar bons resultados para os esquemas em diferenças finitas, o gráfico 03 mostra resultados ainda melhores para os esquemas em volumes finitos.

Sendo o gráfico 04 a comparação entre o esquema exponencial em diferenças finitas com a equação na forma convectiva e volumes finitos com a equação na forma divergente na malha diagonal, pode-se notar que apesar de não haver coincidência nas curvas, tem-se uma boa concordância, observando-se portanto uma pequena discrepância quando se varia o método utilizado, ou seja, diferenças finitas ou volumes finitos. Porém, apesar de pequena, esta diferença é maior do que as diferenças observadas na comparação entre os esquemas discretizantes dentro dos métodos, gráficos 02 e 03.

PECLET 10 - ESQUEMAS EM DIFERENÇAS FINITAS

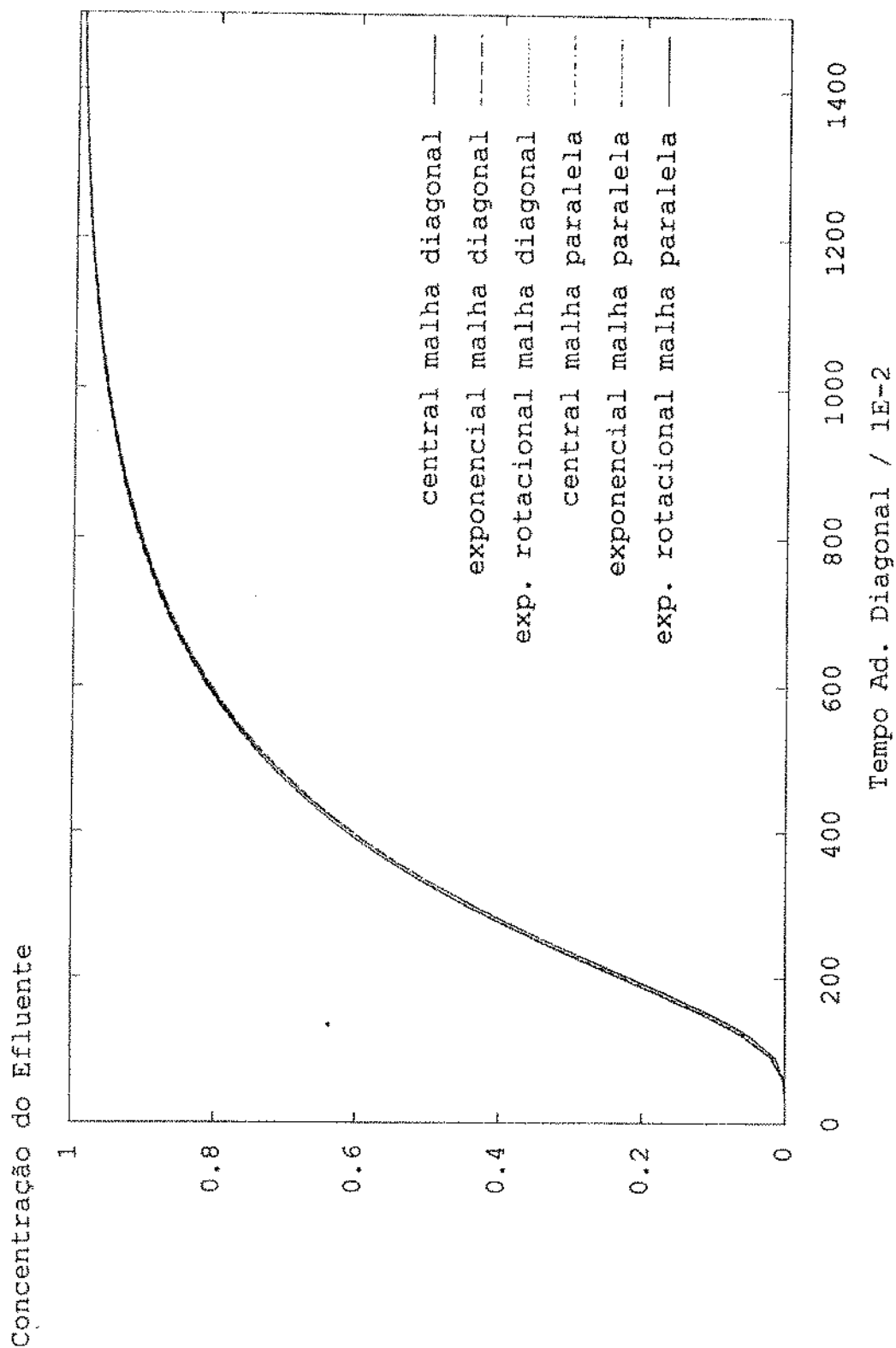


GRÁFICO 2

PECLET 10 - ESQUEMAS EM VOLUMES FINITOS

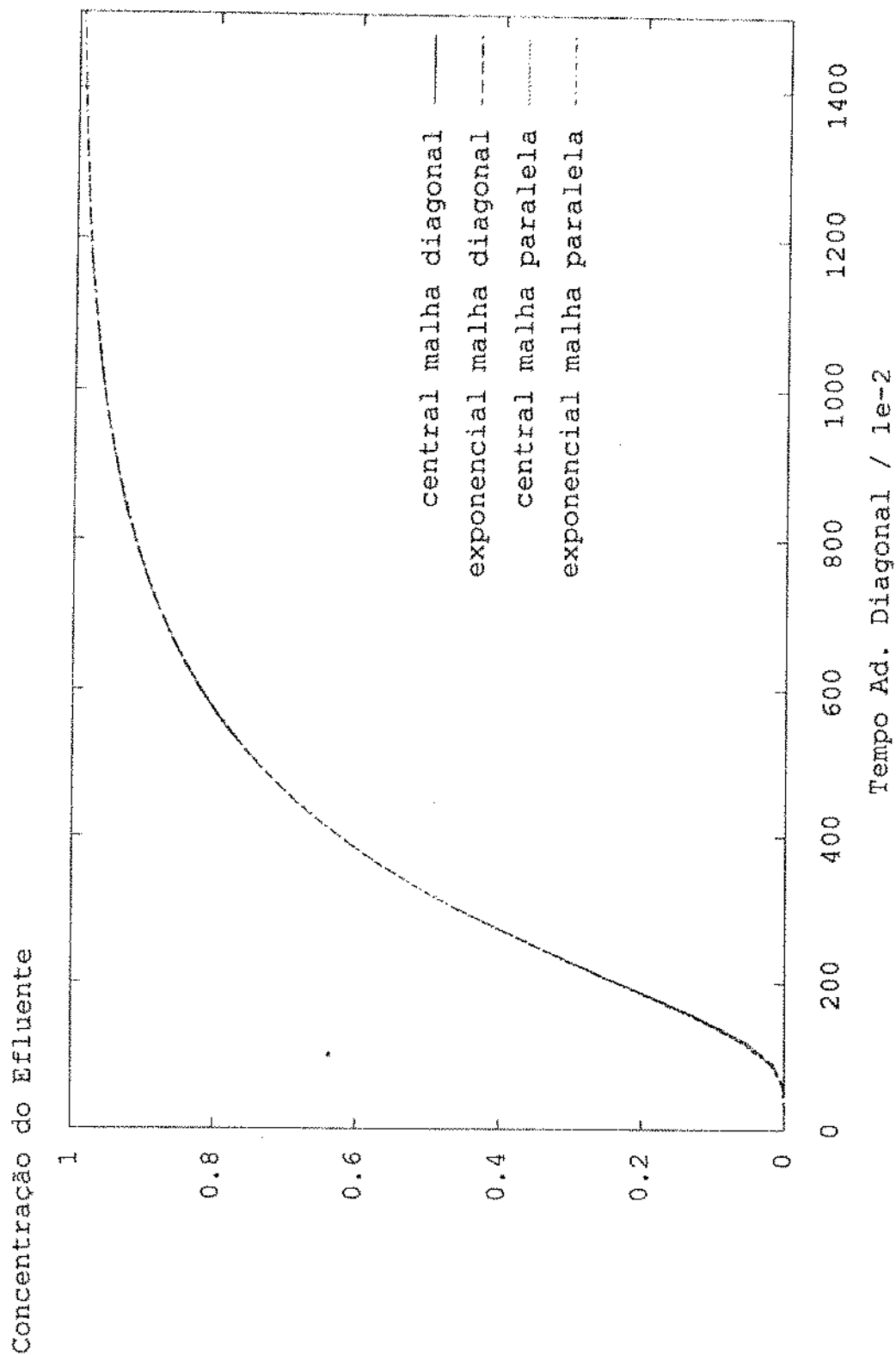


GRÁFICO 3

PECLET 10 - ESQUEMAS EXPONENCIAIS MALHA DIAGONAL

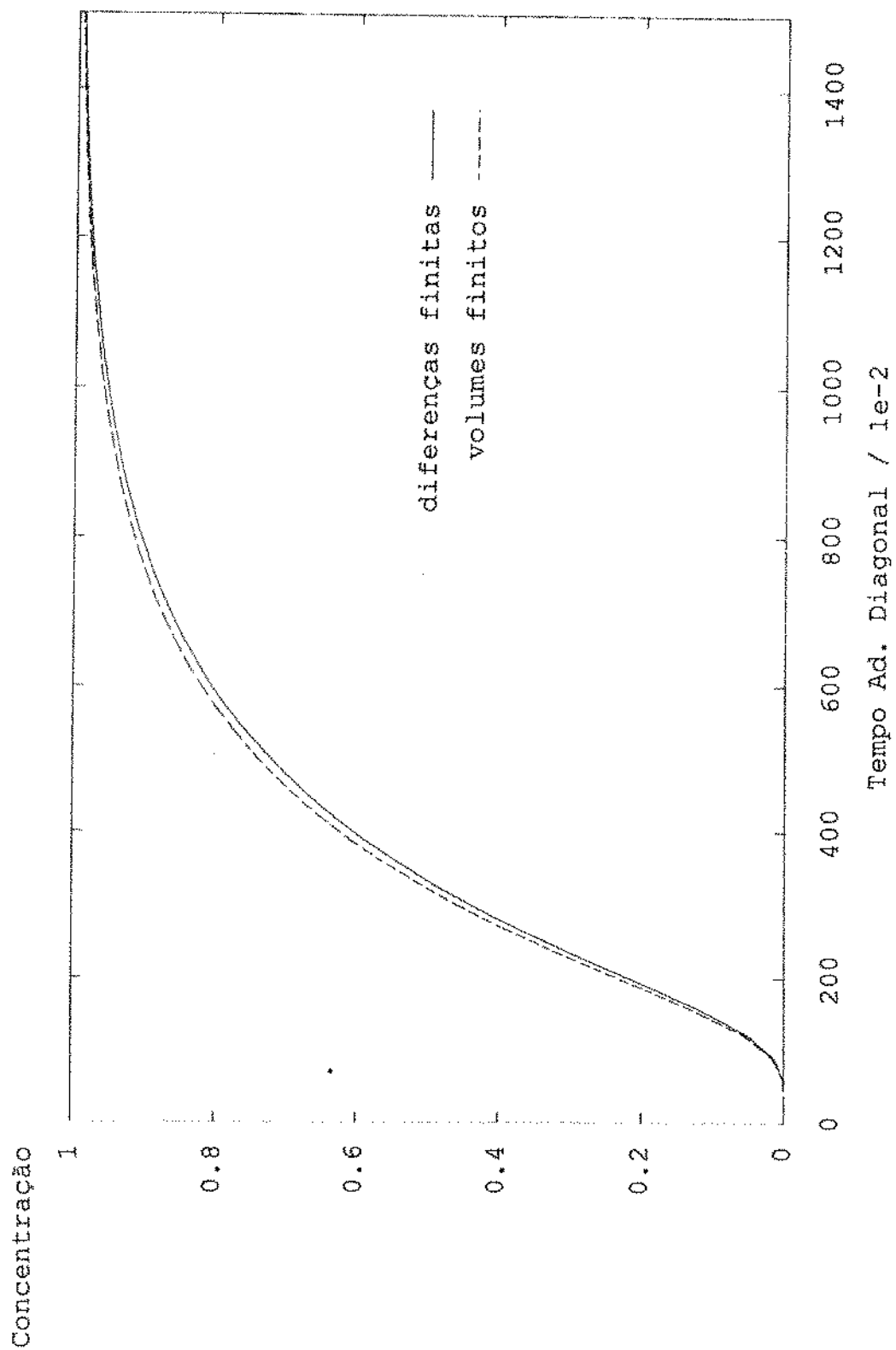


GRÁFICO 4

4.1.2 - Concentração x Diagonal

O gráfico 05 mostra uma discrepância pequena tanto entre a malha numérica escolhida como entre os esquemas discretizantes, porém o gráfico 06 reafirma que a diferença é menor para os esquemas em volumes finitos do que para os esquemas em diferenças finitas (gráfico 05). O gráfico 07 mostra que a diferença observada entre os métodos também é pequena.

4.1.3 - Concentração em todo o domínio

O gráfico 08 mostra boa concordância entre os esquemas central e exponencial, e o gráfico 09 mostra concordância ainda melhor entre o exponencial e o exponencial rotacional. Nota-se que as curvas de isoconcentração são aproximadamente circulares na região perto do poço injetor, o que é razoável fisicamente. Nota-se também que as curvas de isoconcentração apresentam uma discordância maior entre os esquemas do que os planos propriamente ditos, isto é devido às superfícies serem quase horizontais em algumas regiões, pois as isoconcentrações são formadas pela intersecção de um plano realmente horizontal com estas superfícies, portanto uma pequena diferença entre planos quase horizontais pode gerar grandes deslocamentos nas curvas de isoconcentração.

O gráfico 10 confirma novamente que os esquemas em volumes finitos são praticamente coincidentes, podendo-se

notar isto também nas curvas de isoconcentração. O gráfico 11 nos mostra a diferença entre os campos para o esquema exponencial em diferenças e volumes finitos, evidenciando a grande diferença no último par de isoconcentrações, devido a esta ser uma região quase horizontal.

Os gráficos de 12 a 16 apresentam os campos de concentração na malha paralela para os cinco esquemas diferentes, mostrando novamente o formato circular das linhas de isoconcentração, além da suavidade da solução em todo o domínio.

PECLET 10 - ESQUEMAS EM DIFERENÇAS FINITAS

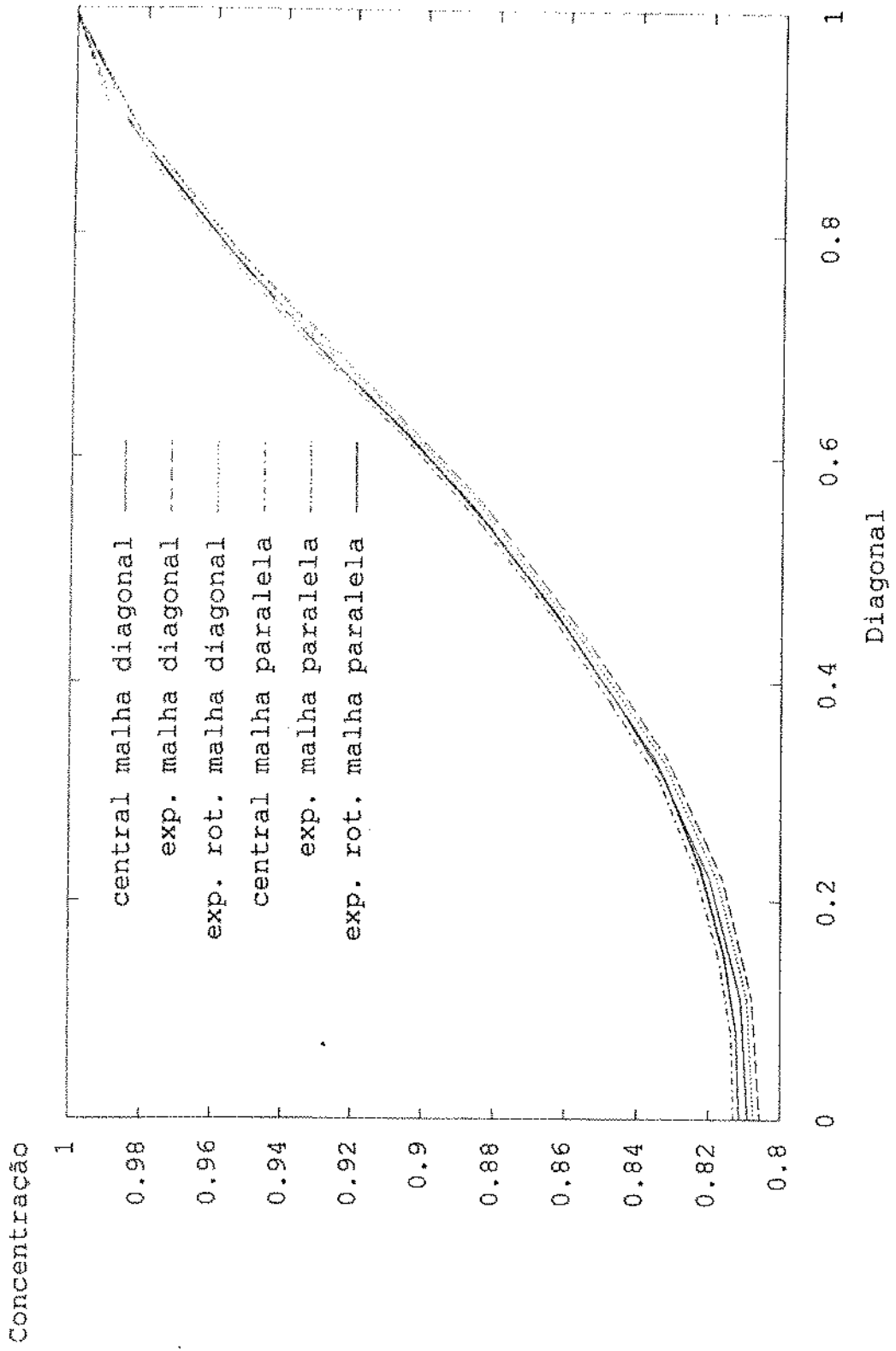


GRÁFICO 5

PECLET 10 - ESQUEMAS EM VOLUMES FINITOS

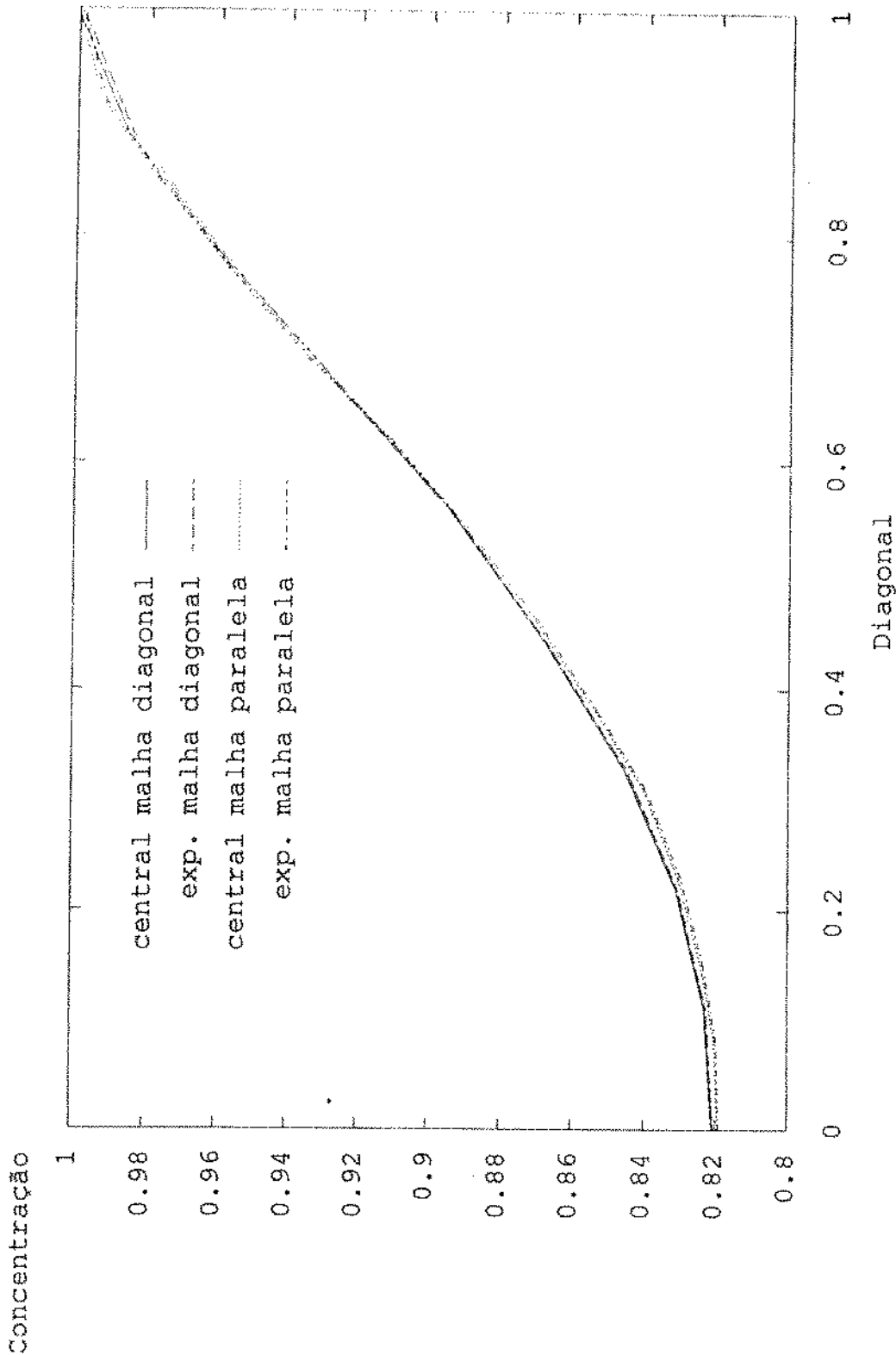


GRÁFICO 6

PECLET 10 - ESQUEMAS EXPONENCIAIS MALHA PARALELA

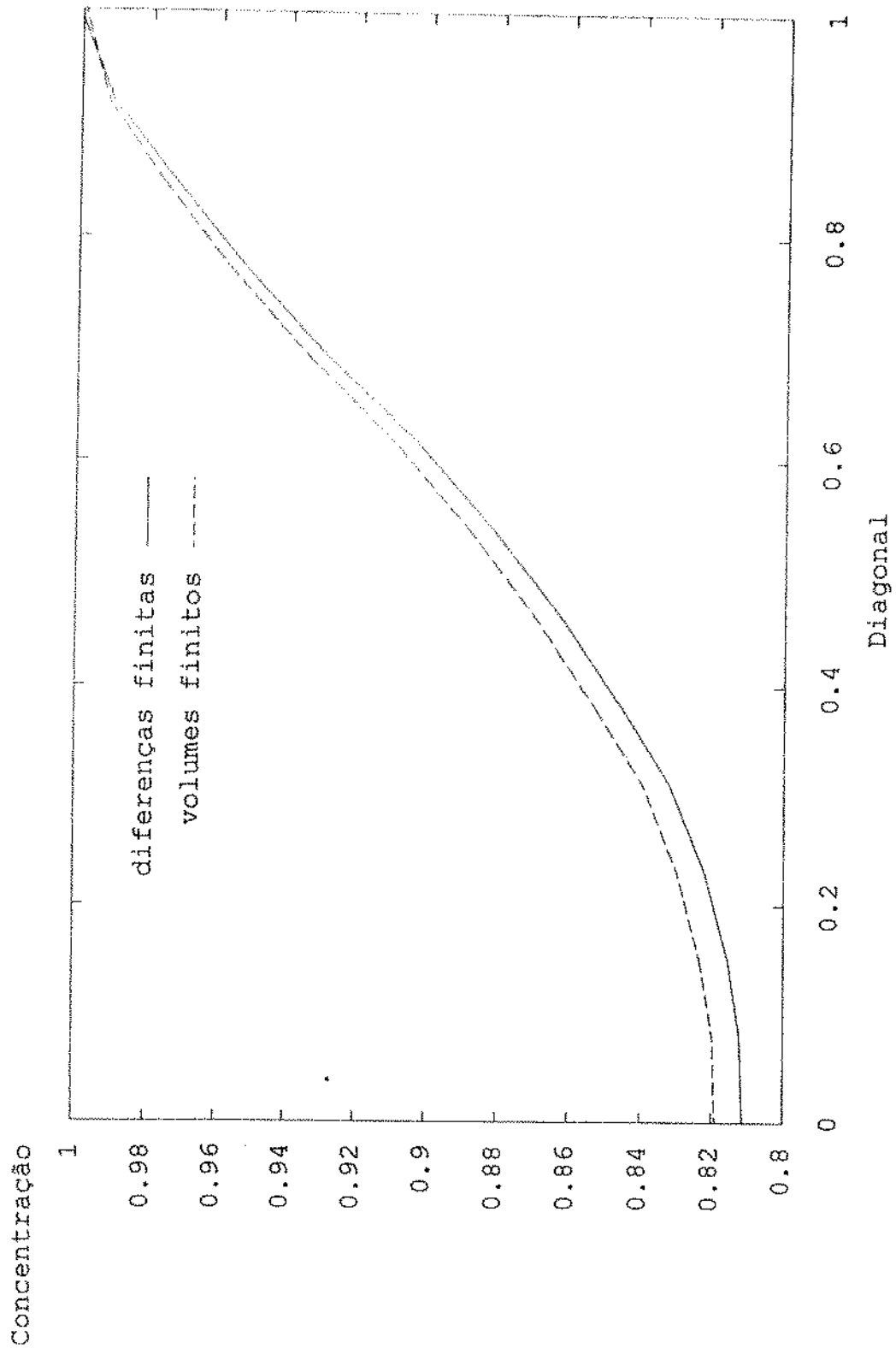


GRÁFICO 7

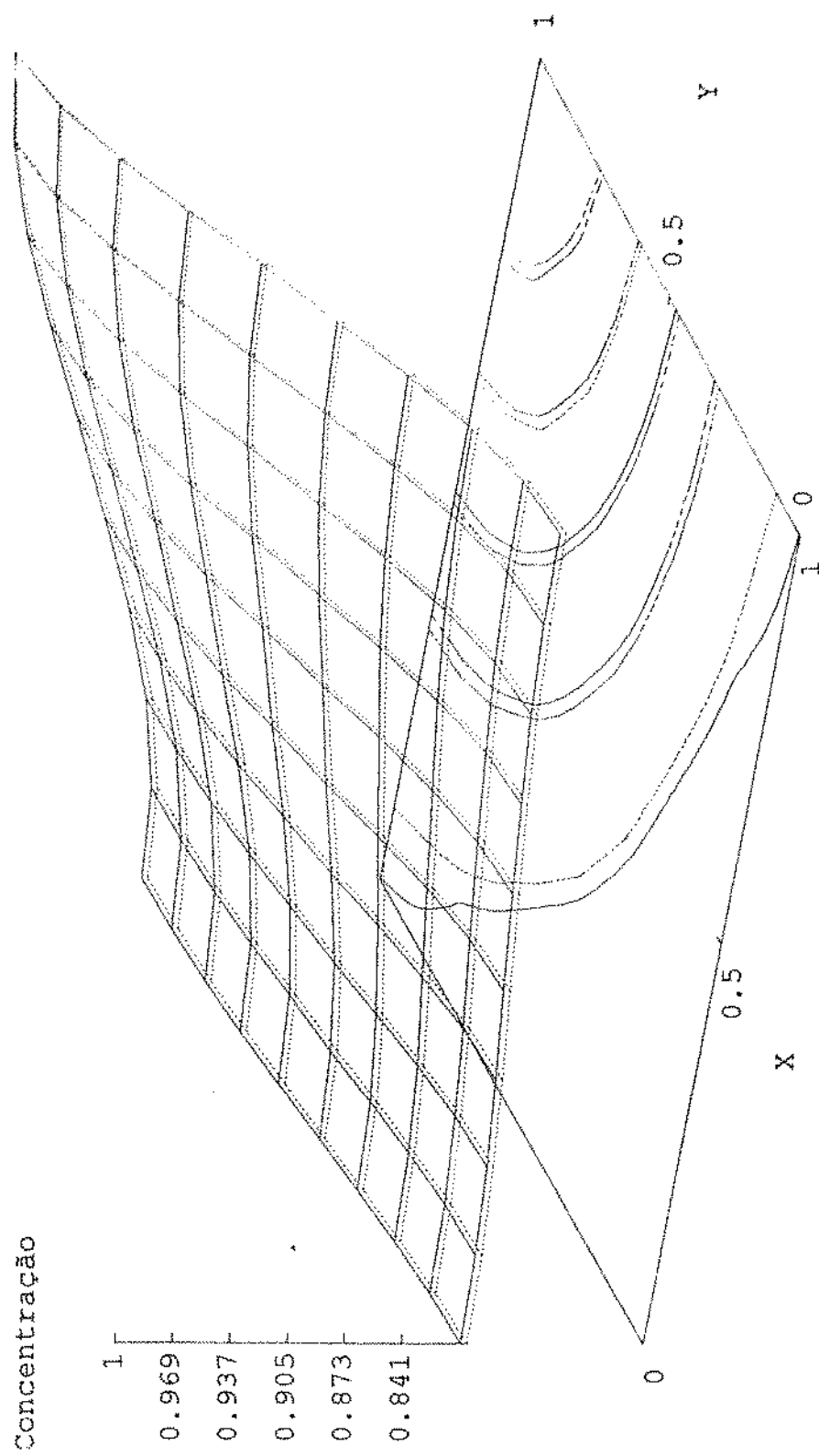


GRÁFICO 8

PECLET 10 - ESQUEMAS EXP. E EXP. ROT. EM DIFERENÇAS FINITAS MALHA DIAGONAL 10 x 10

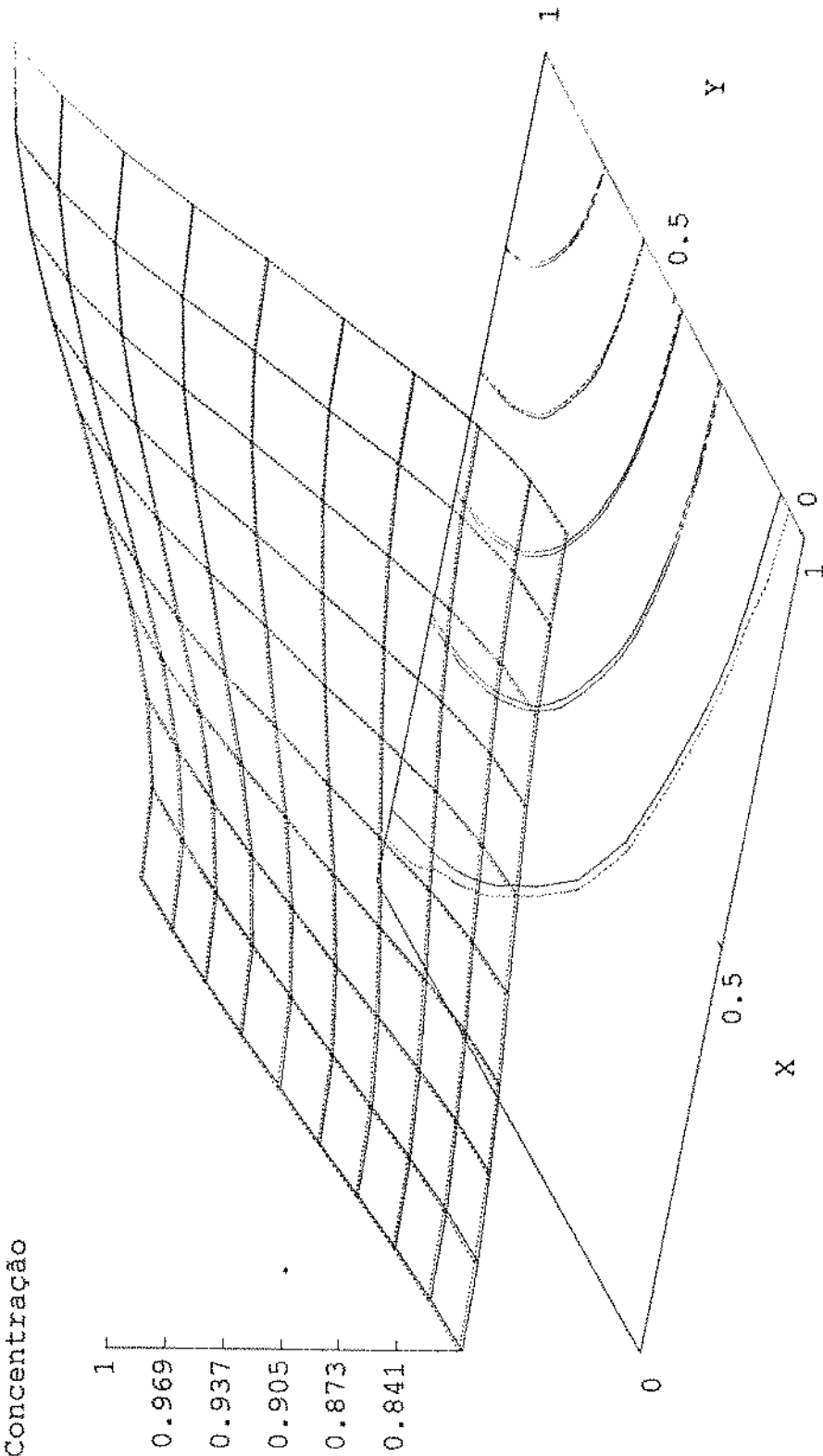


GRÁFICO 9

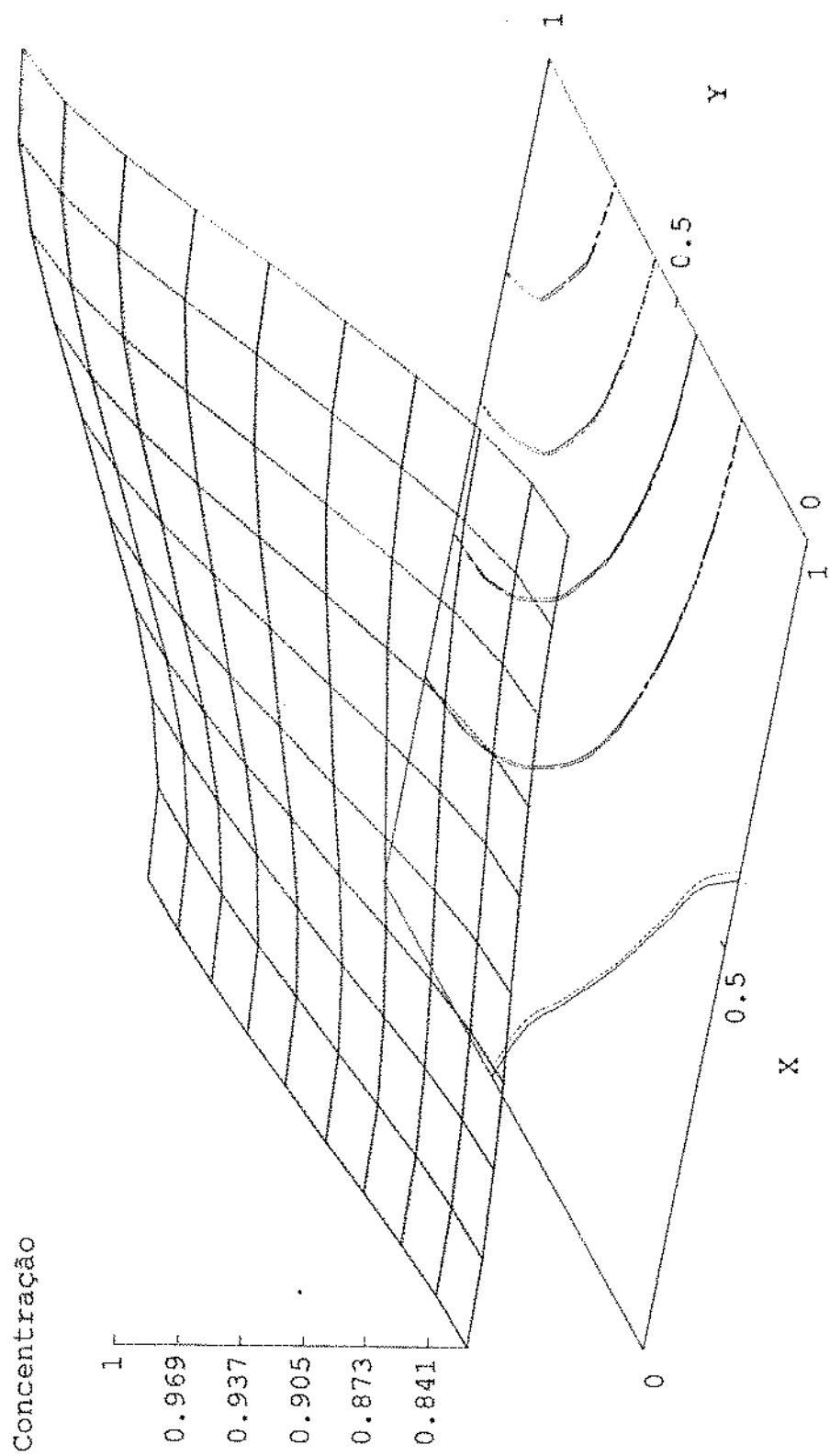


GRÁFICO 10

PECLET 10 - ESQUEMA EXP. EM DIFERENÇAS E VOLUMES FINITOS MALHA DIAGONAL 10 x 10

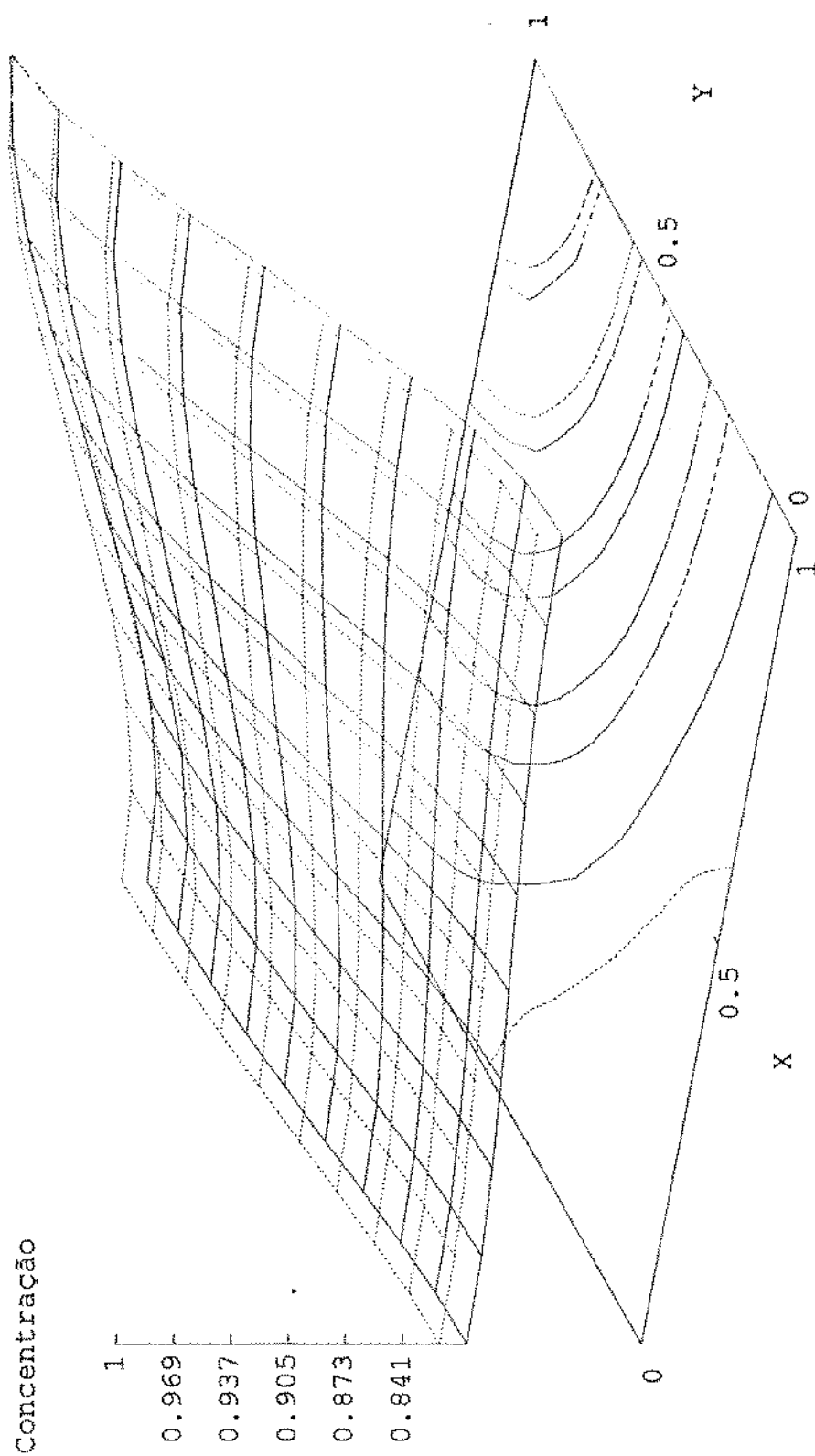


GRÁFICO 11

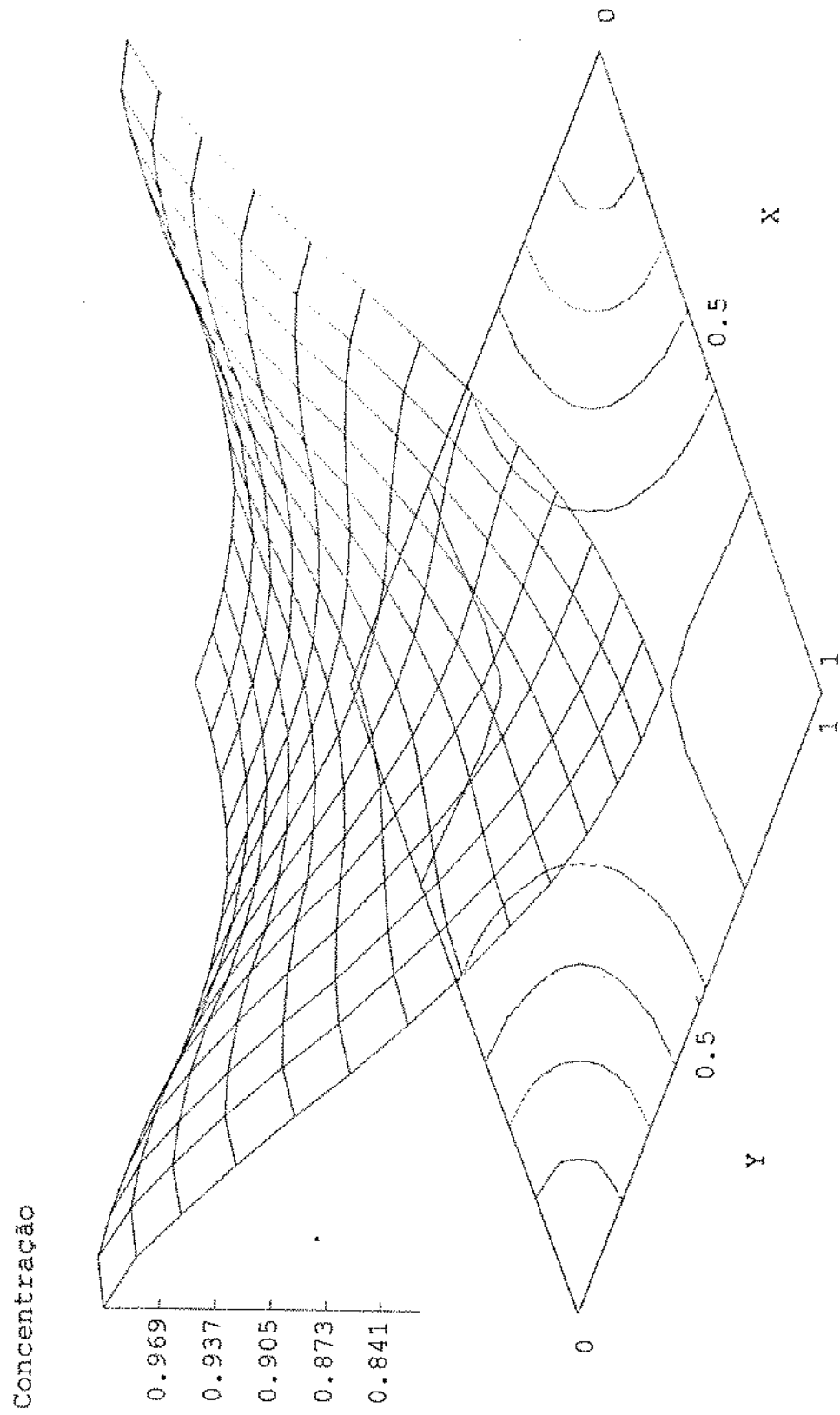


GRÁFICO 12

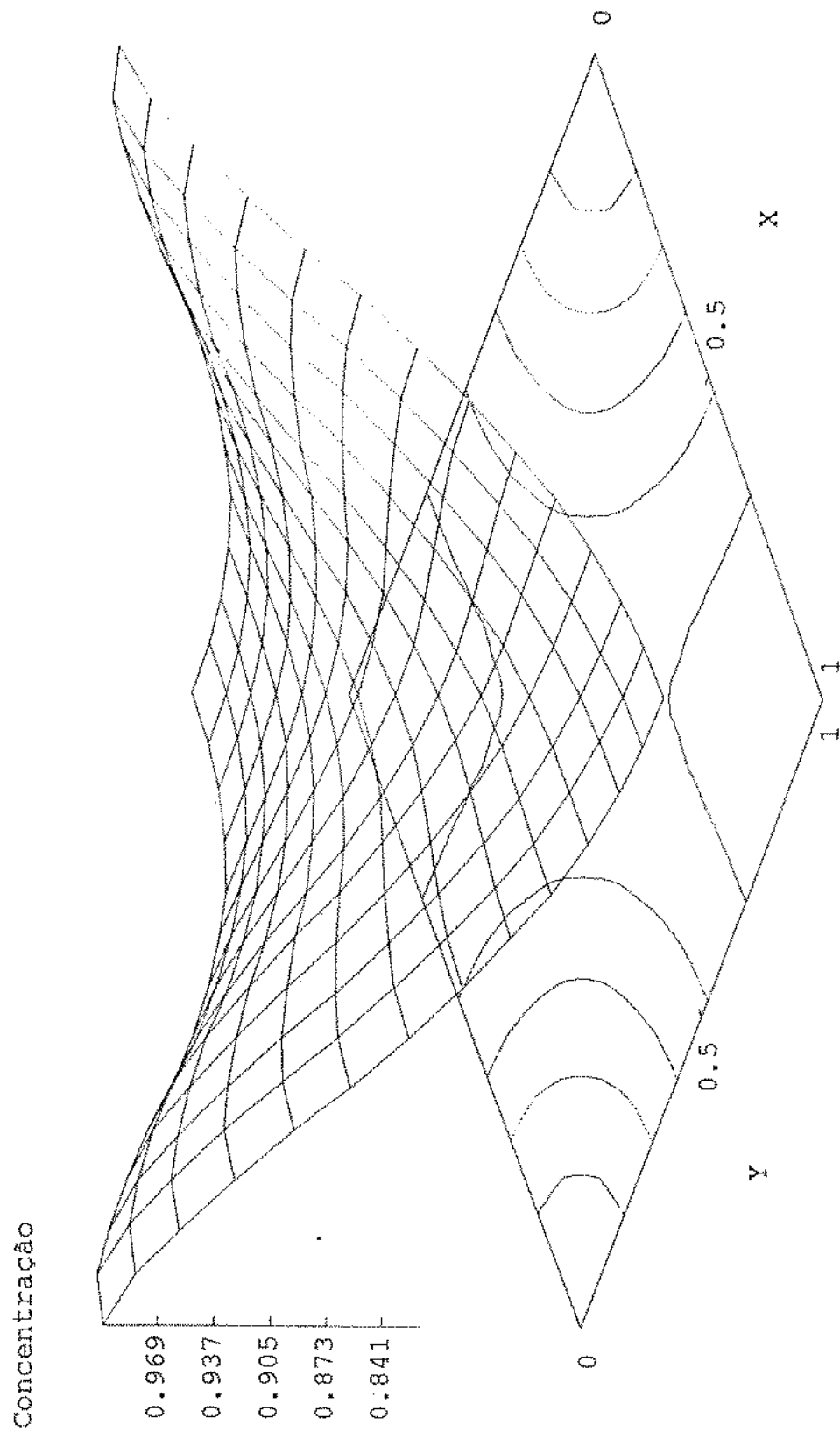


GRÁFICO 13

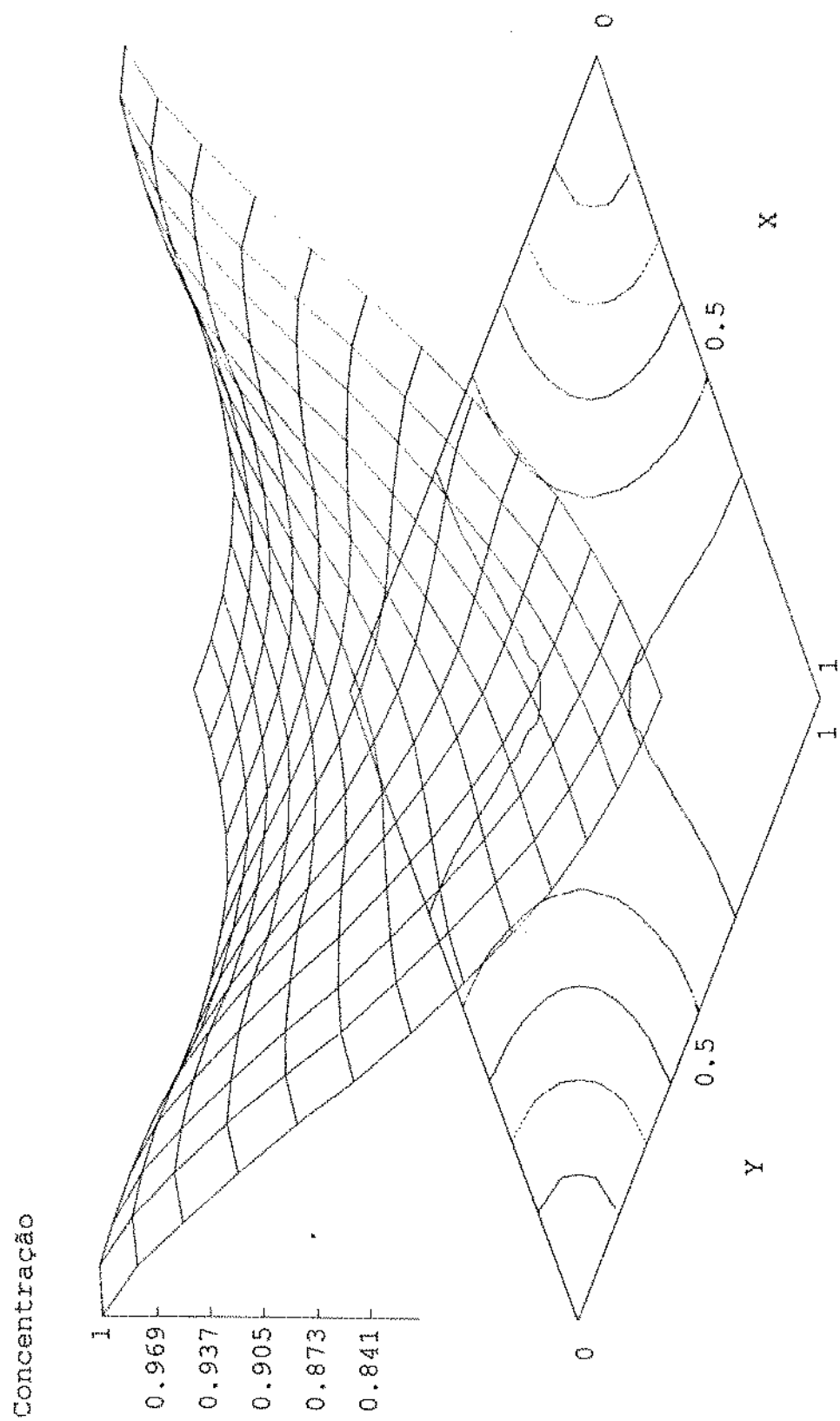


GRÁFICO 14

Concentração

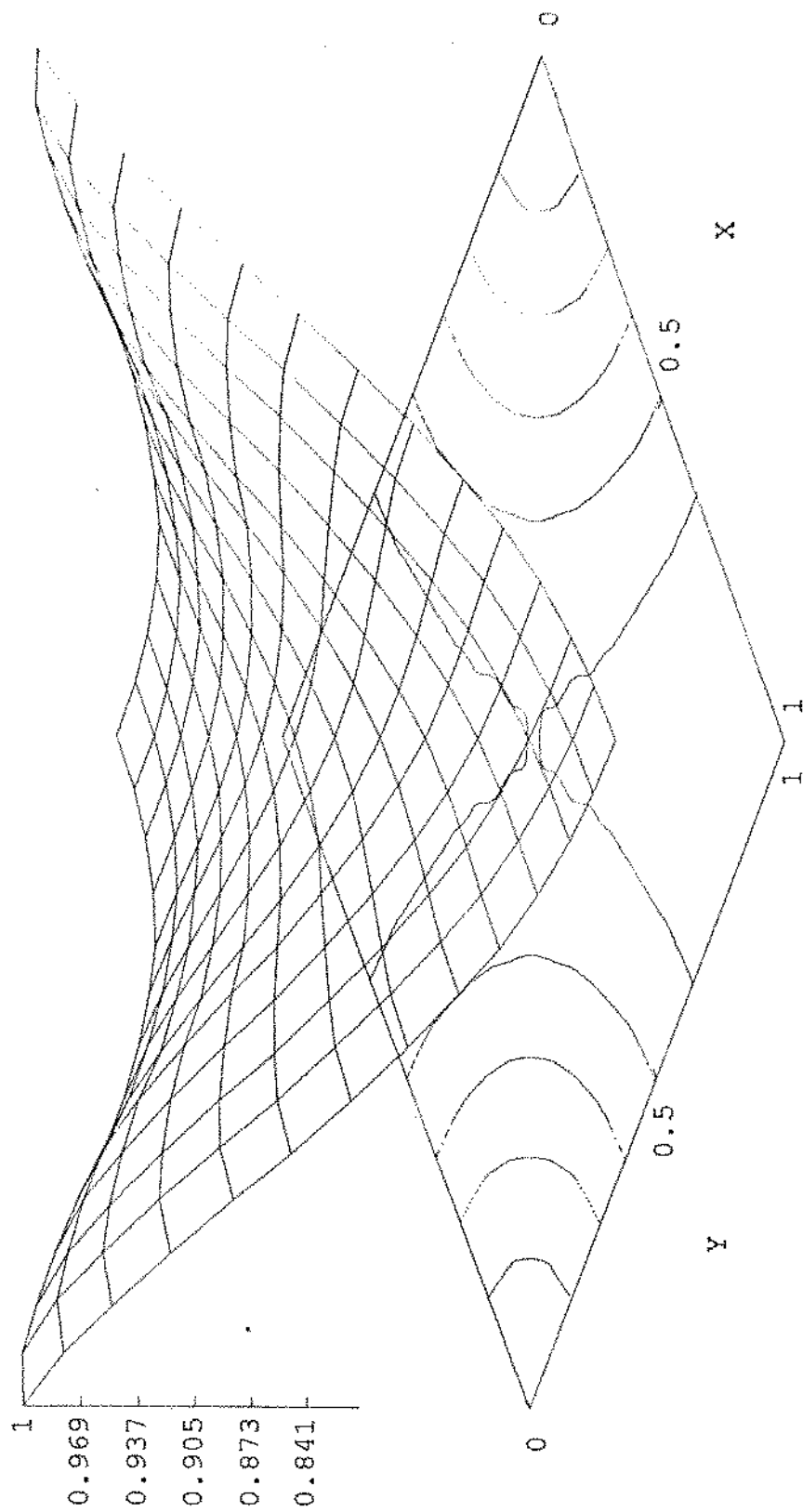


GRÁFICO 15

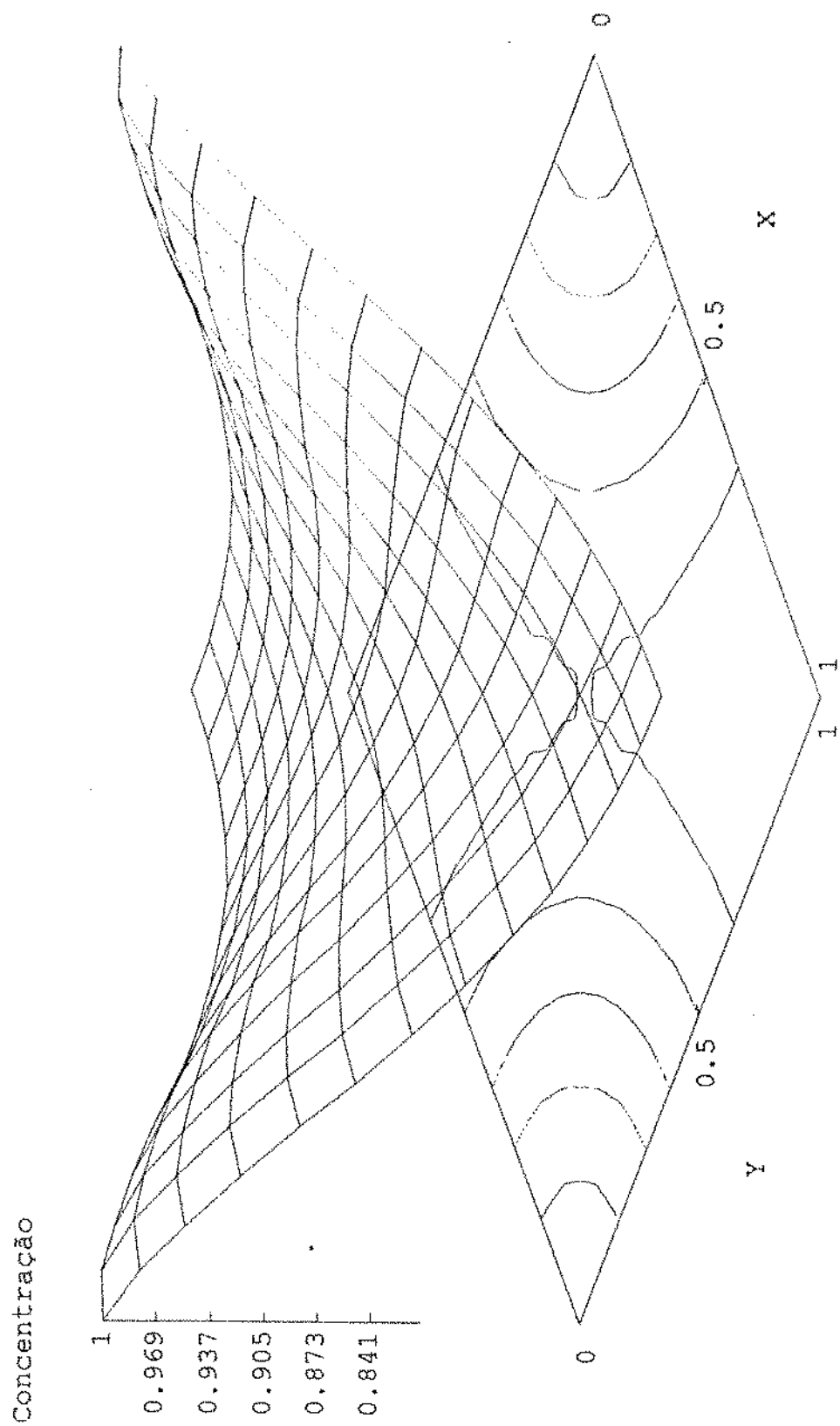


GRÁFICO 16

4.2 - Peclet 100 - Concentração do efluente x Tempo

Os gráficos 17 e 18 apresentam resultados dos esquemas em diferenças finitas, mostrando que há grande diferença entre os resultados para a malha numérica diagonal e paralela, e muito menor diferença entre os esquemas discretizantes, porém fica claro no gráfico 18 a convergência das soluções para as duas malhas com o refinamento.

Nos gráficos 19 a 21 mostra-se a convergência com o refinamento para os três esquemas discretizantes em diferenças finitas, notando-se comportamento bastante semelhante.

O gráfico 22 mostra diferenças para a malha diagonal e paralela da mesma ordem de grandeza para o esquema central e exponencial em volumes finitos. Com malhas refinadas de 20x20 e 28x28, gráfico 23, já se obtêm muito boa concordância das soluções. Nos gráficos 24 e 25 observa-se que o esquema central com malha grosseira já estava mais próximo das soluções para malha refinada do que o esquema exponencial, porém ambos os esquemas apresentam uma grande diminuição na diferença entre as soluções para as duas malhas numéricas, concordando entre si e entre os esquemas, gráfico 23.

Os gráficos 26 e 27 comparam as soluções para o esquema exponencial para malhas grosseira e refinada, mostrando que a diferença diminui com o refinamento tanto entre as malhas

diagonal e paralela, quanto em relação aos métodos diferenças e volumes finitos.

PECLET 100 - ESQUEMAS EM DIFERENÇAS FINITAS - MALHA GROSSEIRA

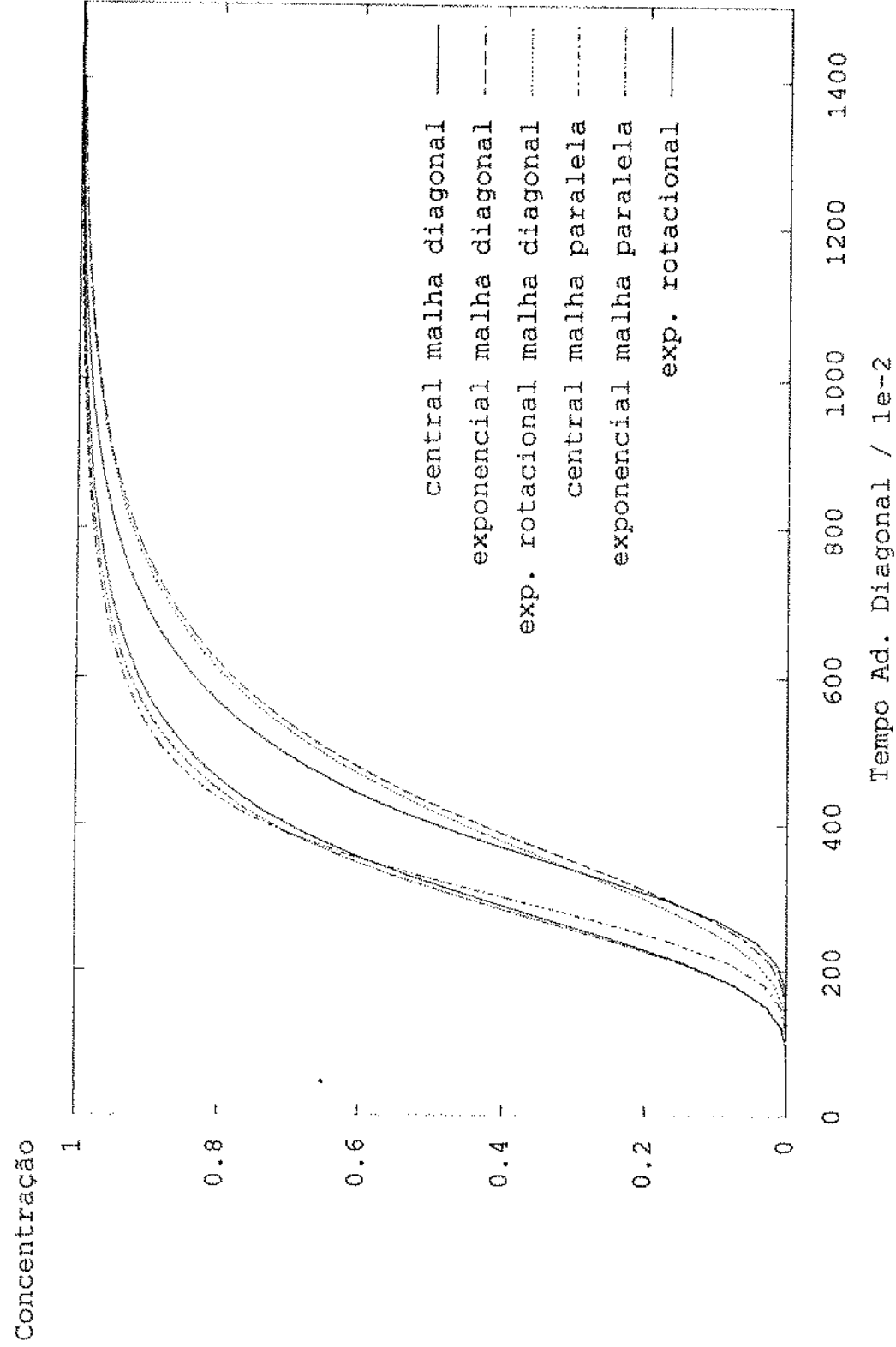


GRÁFICO 17

PECLET 100 - ESQUEMAS EM DIFERENÇAS FINITAS - MALHA REFINADA

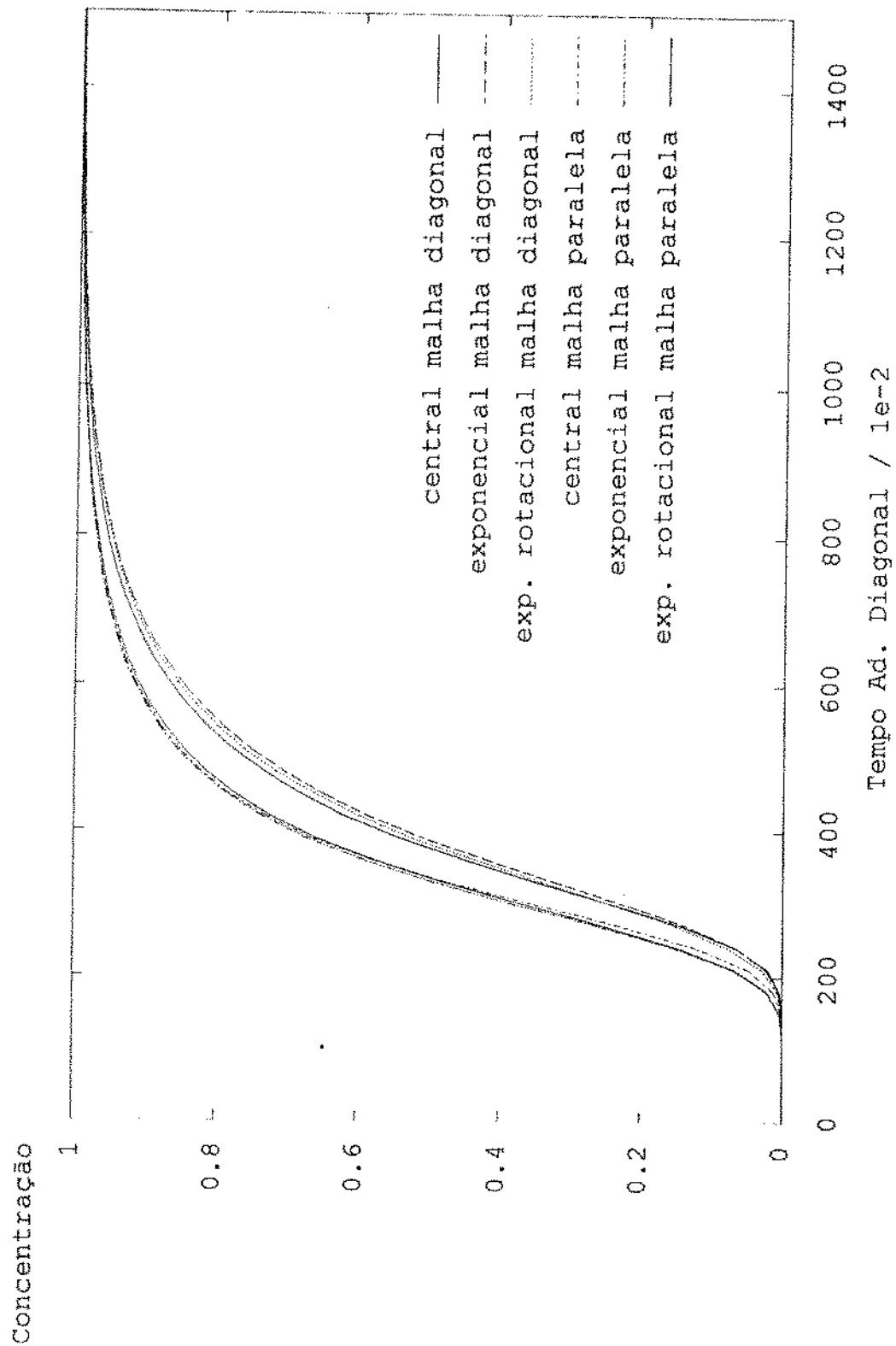


GRÁFICO 18

PECLET 100 - CONVERGÊNCIA DO ESQUEMA CENTRAL EM DIFERENÇAS FINITAS

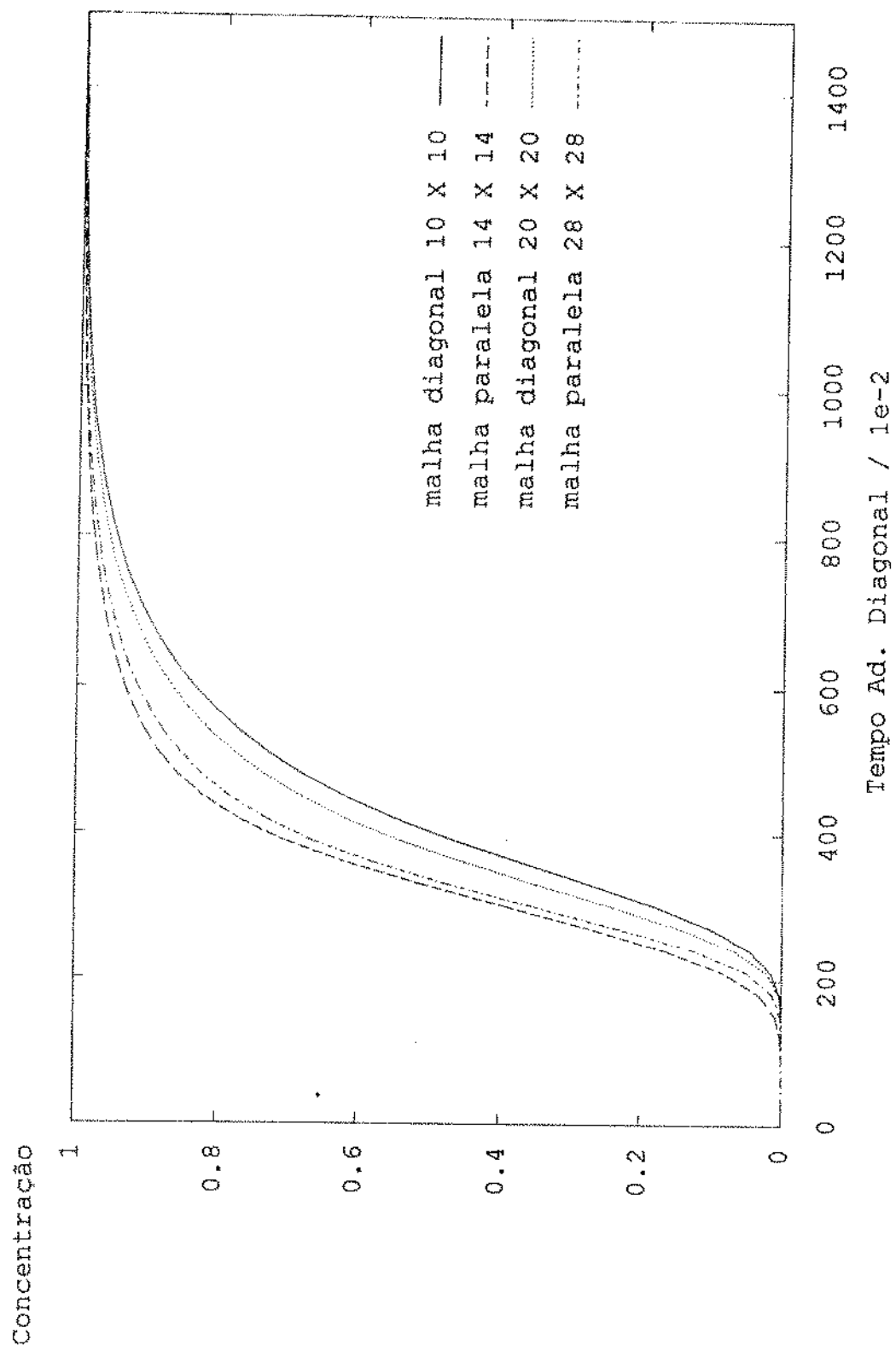


GRÁFICO 19

PECLET 100 - CONVERGÊNCIA DO ESQUEMA EXPONENCIAL EM DIFERENÇAS FINITAS

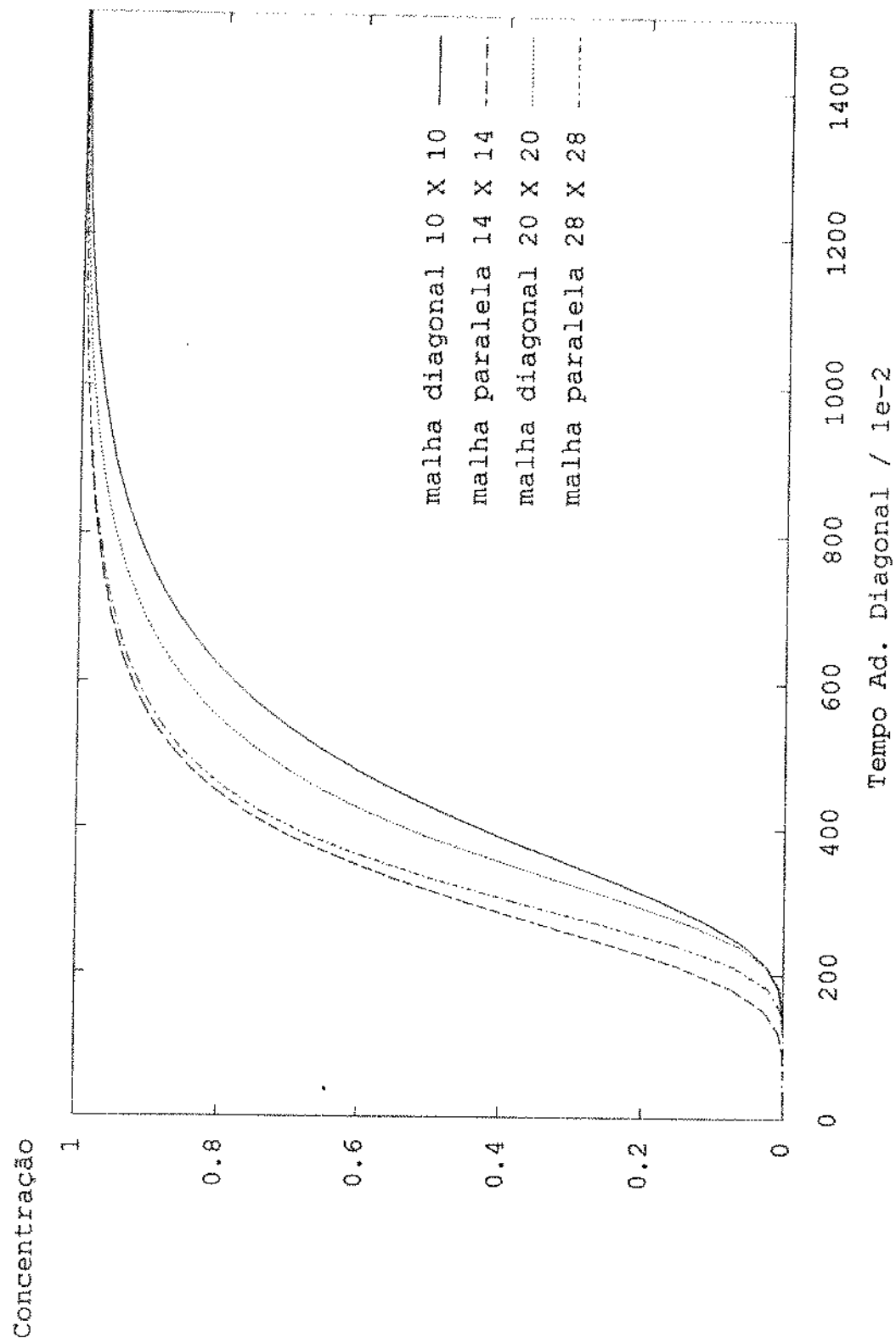


GRÁFICO 20

PECLET 100 - CONVERGÊNCIA DO ESQUEMA EXP. ROT. EM DIFERENÇAS FINITAS

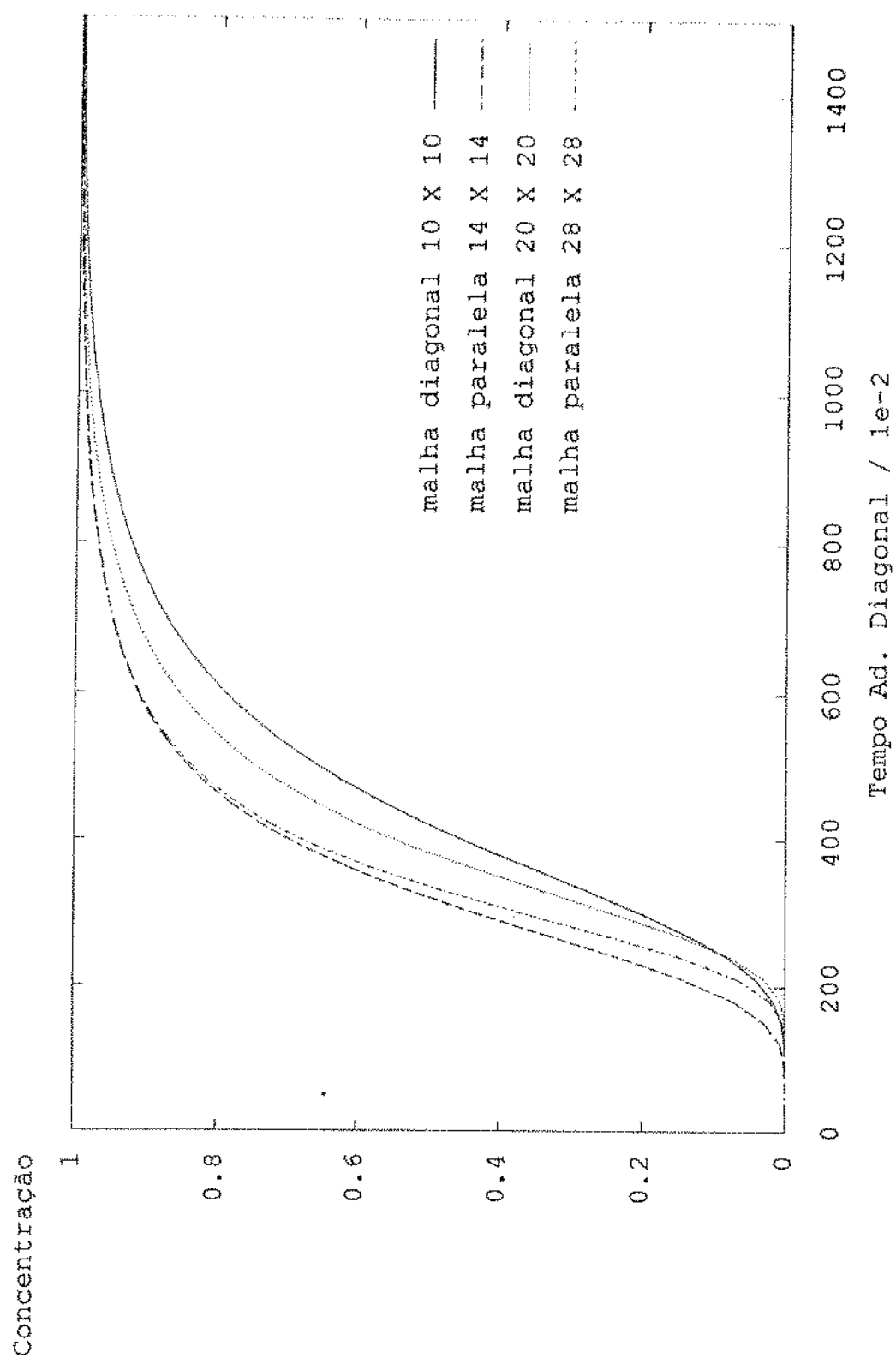


GRÁFICO 21

PECLET 100 - ESQUEMAS EM VOLUMES FINITOS - MALHA GROSSEIRA

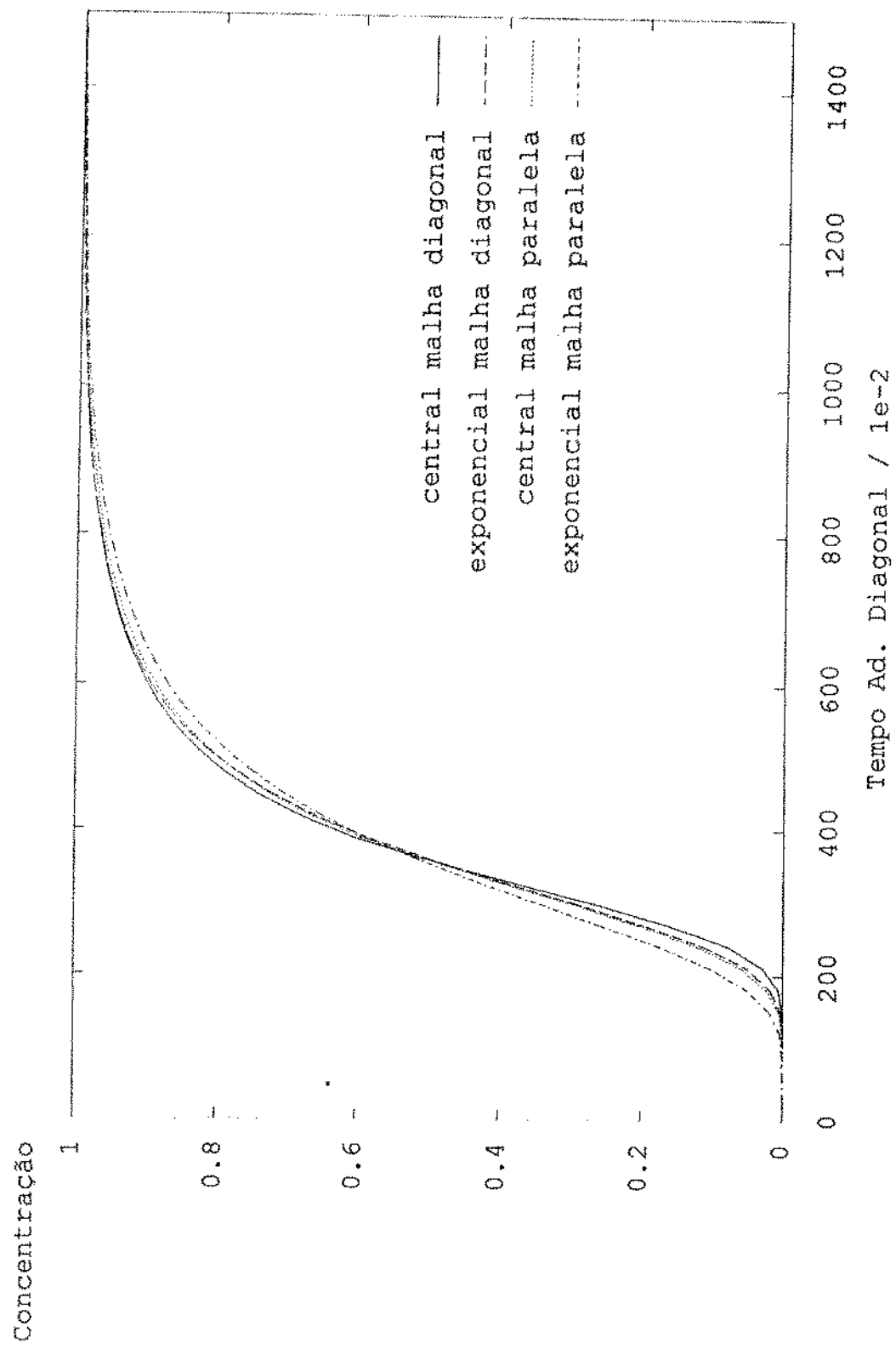


GRÁFICO 22

PECLET 100 - ESQUEMAS EM VOLUMES FINITOS - MALHA REFINADA

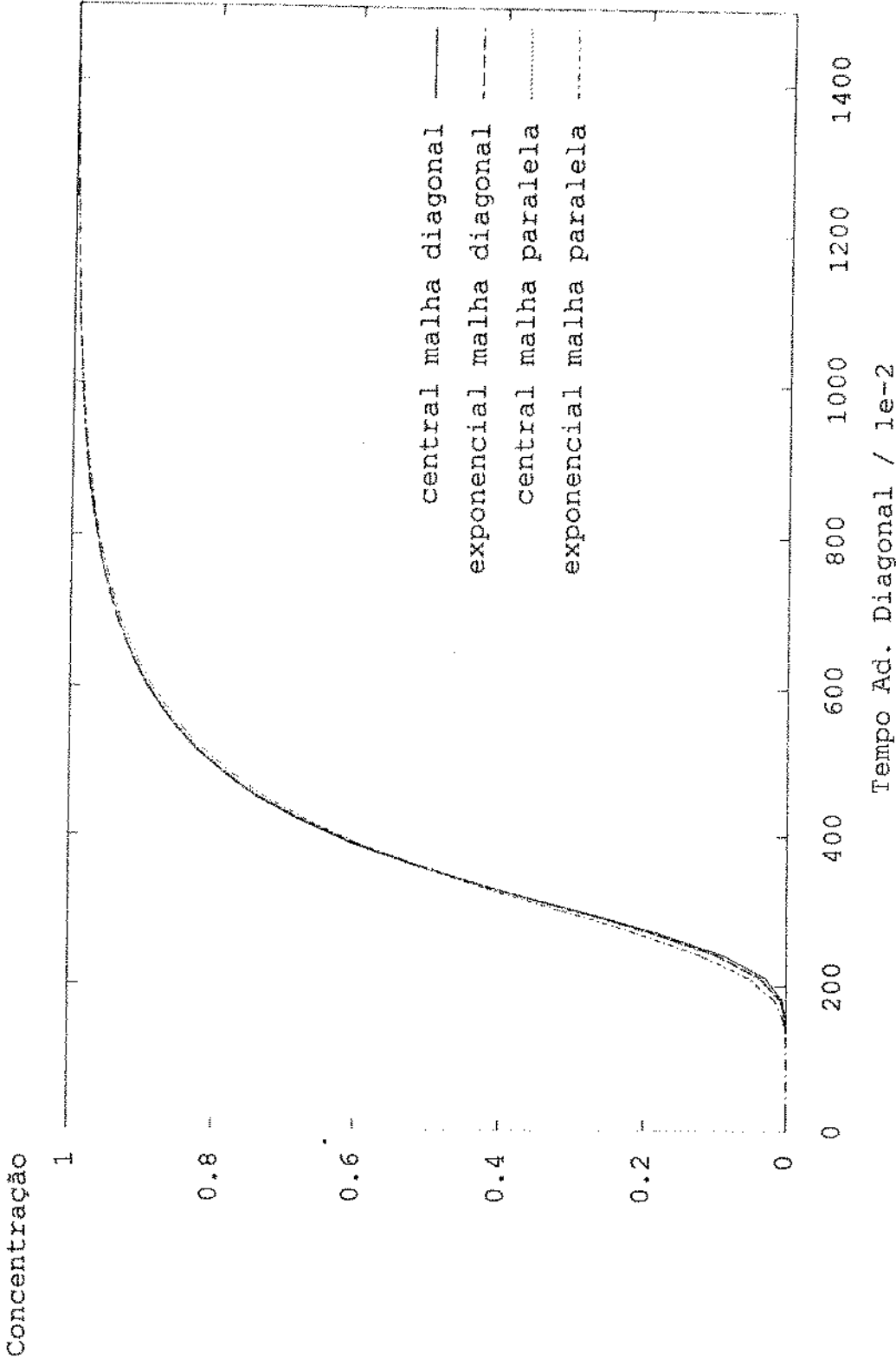


GRÁFICO 23

PECLET 100 - CONVERGÊNCIA DO ESQUEMA CENTRAL EM VOLUMES FINITOS

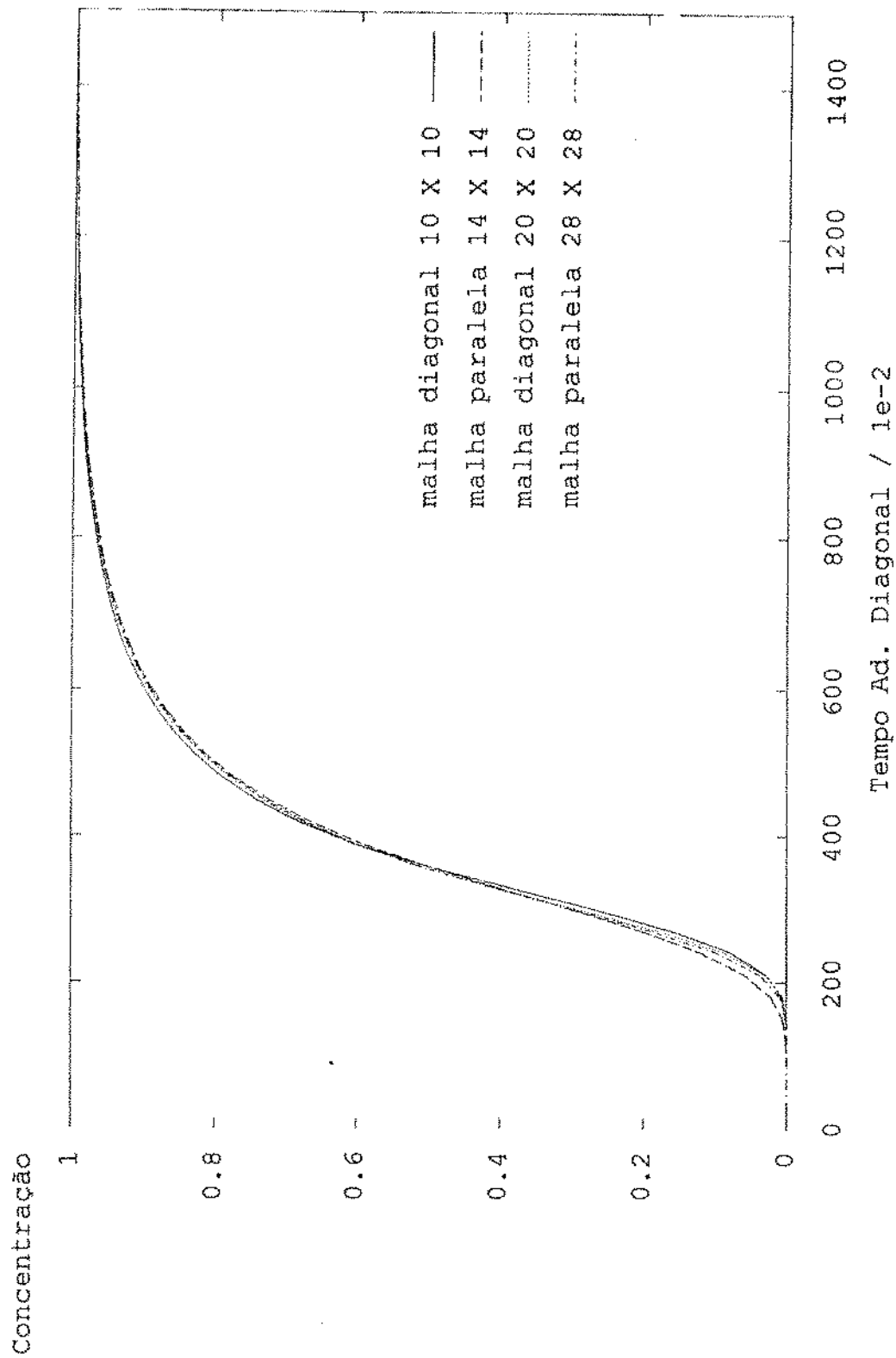


GRÁFICO 24

PECLET 100 - CONVERGÊNCIA DO ESQUEMA EXPONENCIAL EM VOLUMES FINITOS

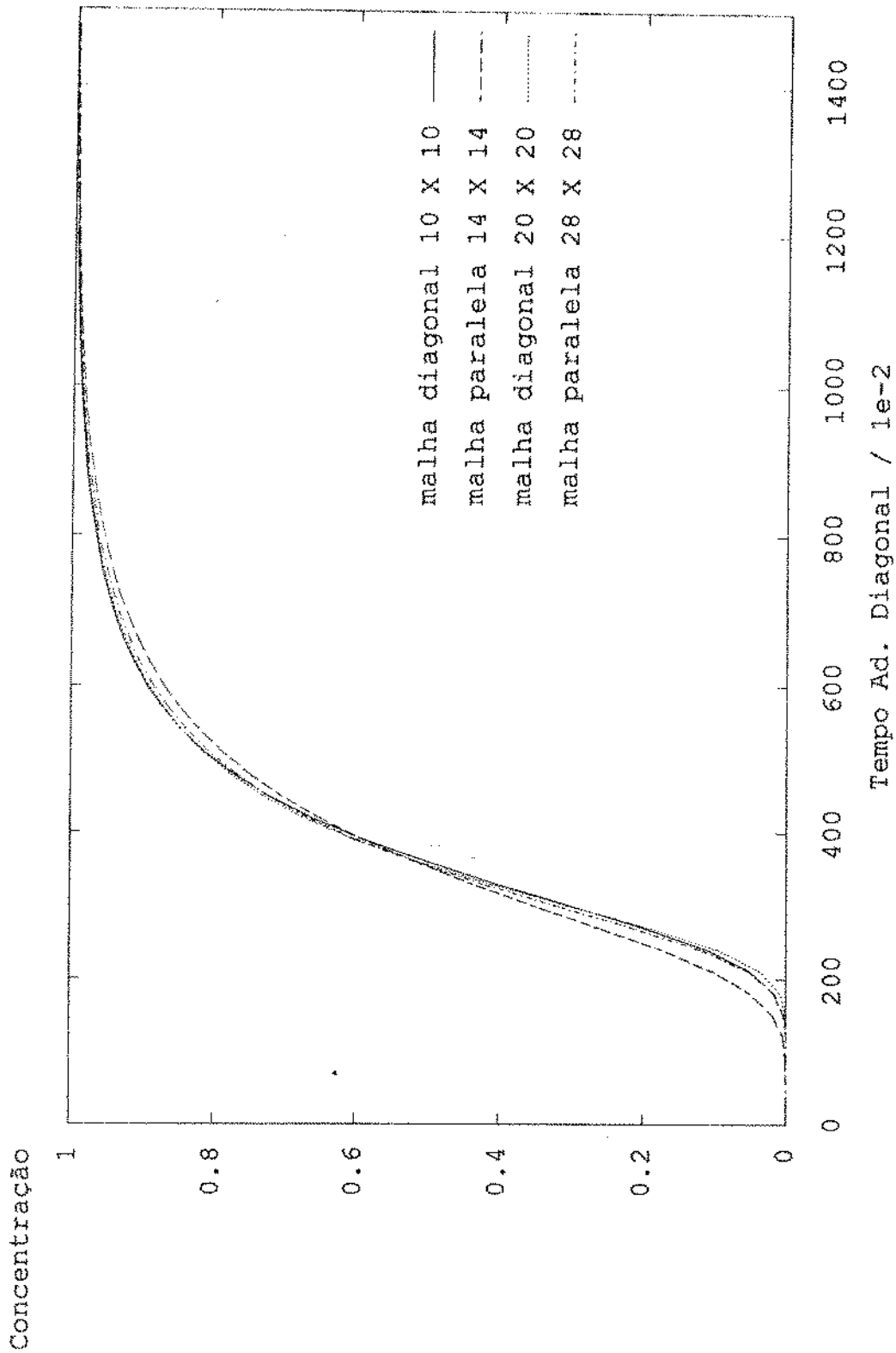


GRÁFICO 25

PECLET 100 - ESQUEMA EXP. EM DIF. E VOL. FINITOS MALHA GROSSEIRA

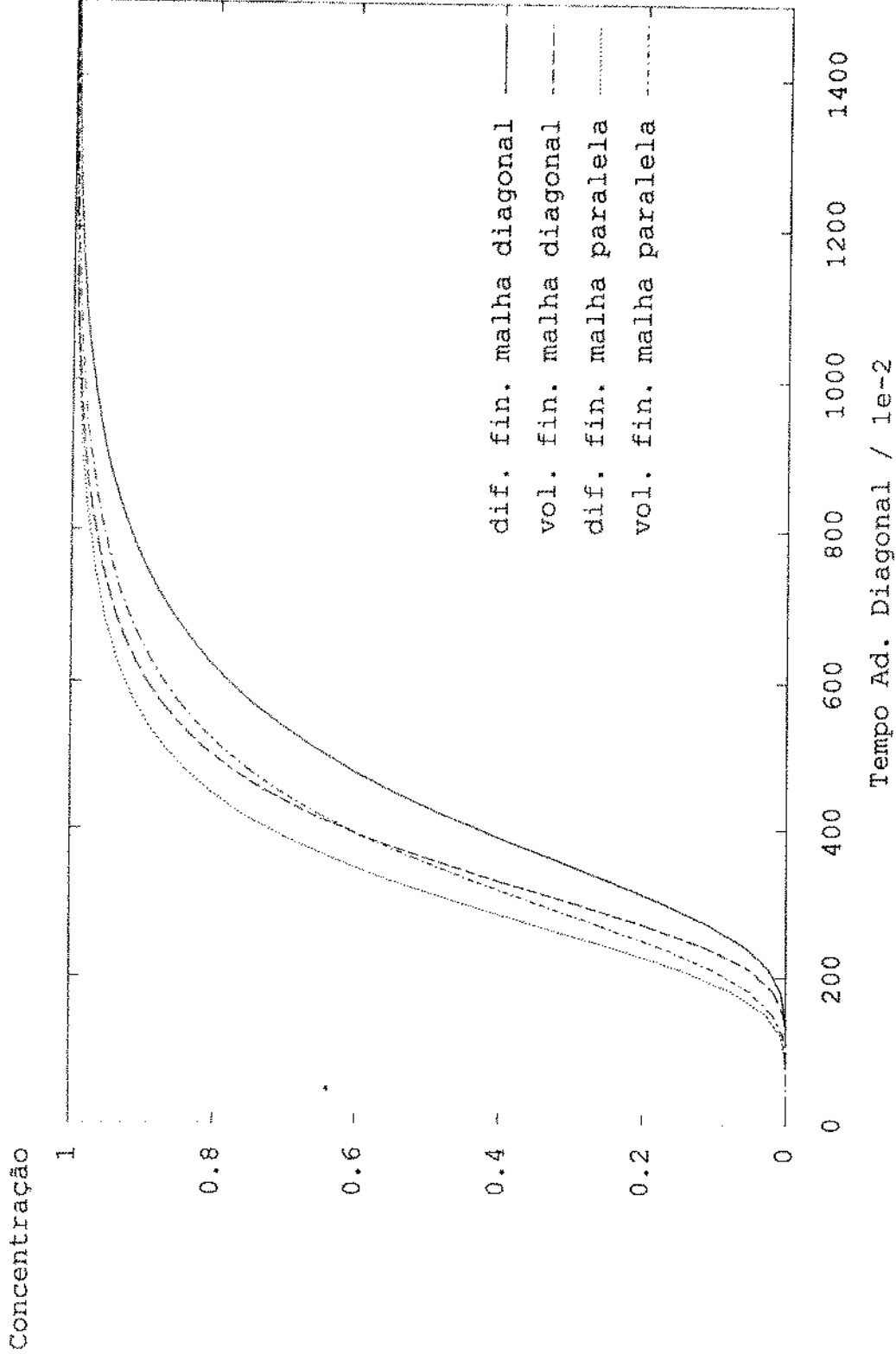


GRÁFICO 26

PECLET 100 - ESQUEMA EXP. EM DIF. E VOL. FINITOS MALHA REFINADA

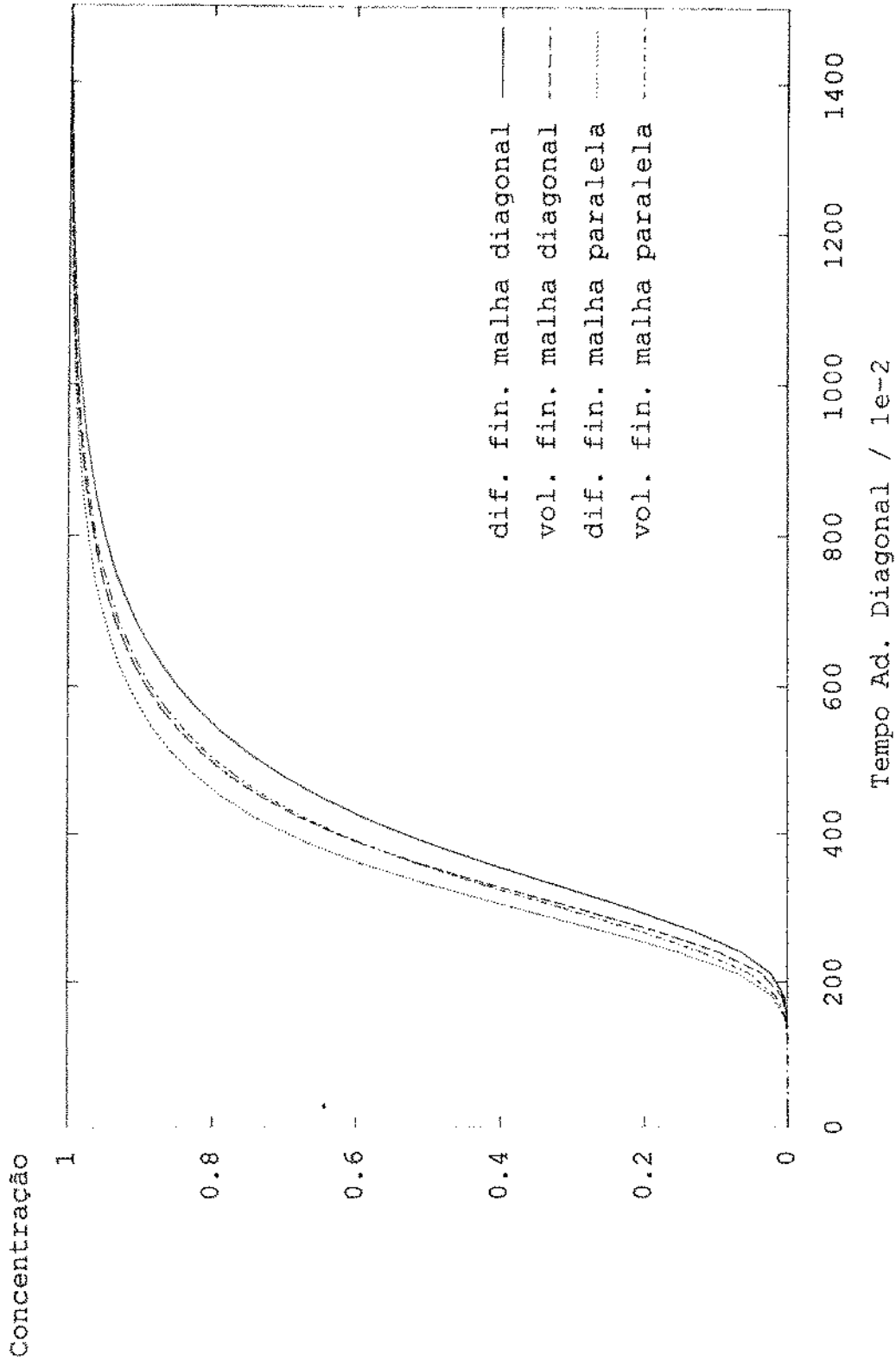


GRÁFICO 27

4.3 - Peclet 1000

4.3.1 - Concentração do Efluente x Tempo

O gráfico 28 mostra que a Peclet 1000 com malha 10x10 e 14x14, para as malhas diagonal e paralela respectivamente, o esquema central em diferenças finitas apresenta oscilações não realistas fisicamente, porém no gráfico 29 podemos verificar a diminuição deste fenômeno com refinamento. O gráfico 29 mostra também que com o refinamento diminui a dependência da solução em relação ao posicionamento da malha, porém confirma-se mais uma vez que os esquemas em diferenças finitas apresentam grande discrepância entre as soluções para malha diagonal e paralela, efeito que vem se agravando com o aumento do número de Peclet. Nota-se também, nos gráficos 28 e 29, grande concordância entre os esquemas exponencial de Allen-Southwell e o exponencial rotacional de seis pontos, indicando ligeira vantagem ao exponencial rotacional.

Os gráficos 30 a 32 mostram a tendência de convergência das soluções com o refinamento para os três esquemas discretizantes, sendo que no gráfico 30 nota-se claramente a diminuição das oscilações do esquema central com o refinamento.

No esquema central em volumes finitos também observa-se, gráfico 33, oscilações, apesar de menores em relação às

observadas no esquema central em diferenças finitas no gráfico 28. No gráfico 34 nota-se o quase desaparecimento destas oscilações já com a malha 20 X 20 e 28 X 28.

Nos gráficos 33 e 34 nota-se que o esquema exponencial é sempre suave, não apresentando essas oscilações. No gráfico 34 observa-se já uma boa concordância entre os esquemas e entre as malhas numéricas, mostrando já uma razoável independência da solução com o posicionamento da malha neste gráfico.

Os gráficos 35 e 36 apresentam o processo de convergência para os esquemas central e exponencial, sendo que no gráfico 35 pode-se observar a diminuição das oscilações com o refinamento, mostrando que o esquema central possui um comportamento bem melhor em volumes finitos, assim como o esquema exponencial, gráfico 36.

A comparação entre os esquemas exponencial em diferenças e volumes finitos é feita nos gráficos 37 e 38, mostrando a grande vantagem para o esquema em volumes finitos, que já apresenta resultados bastante coerentes e independentes do posicionamento da malha, enquanto que no esquema em diferenças finitas precisaríamos ir muito mais longe no refinamento para podermos esperar um resultado de qualidade semelhante.

PECLET 1000 - ESQUEMAS EM DIFERENÇAS FINITAS - MALHA GROSSEIRA

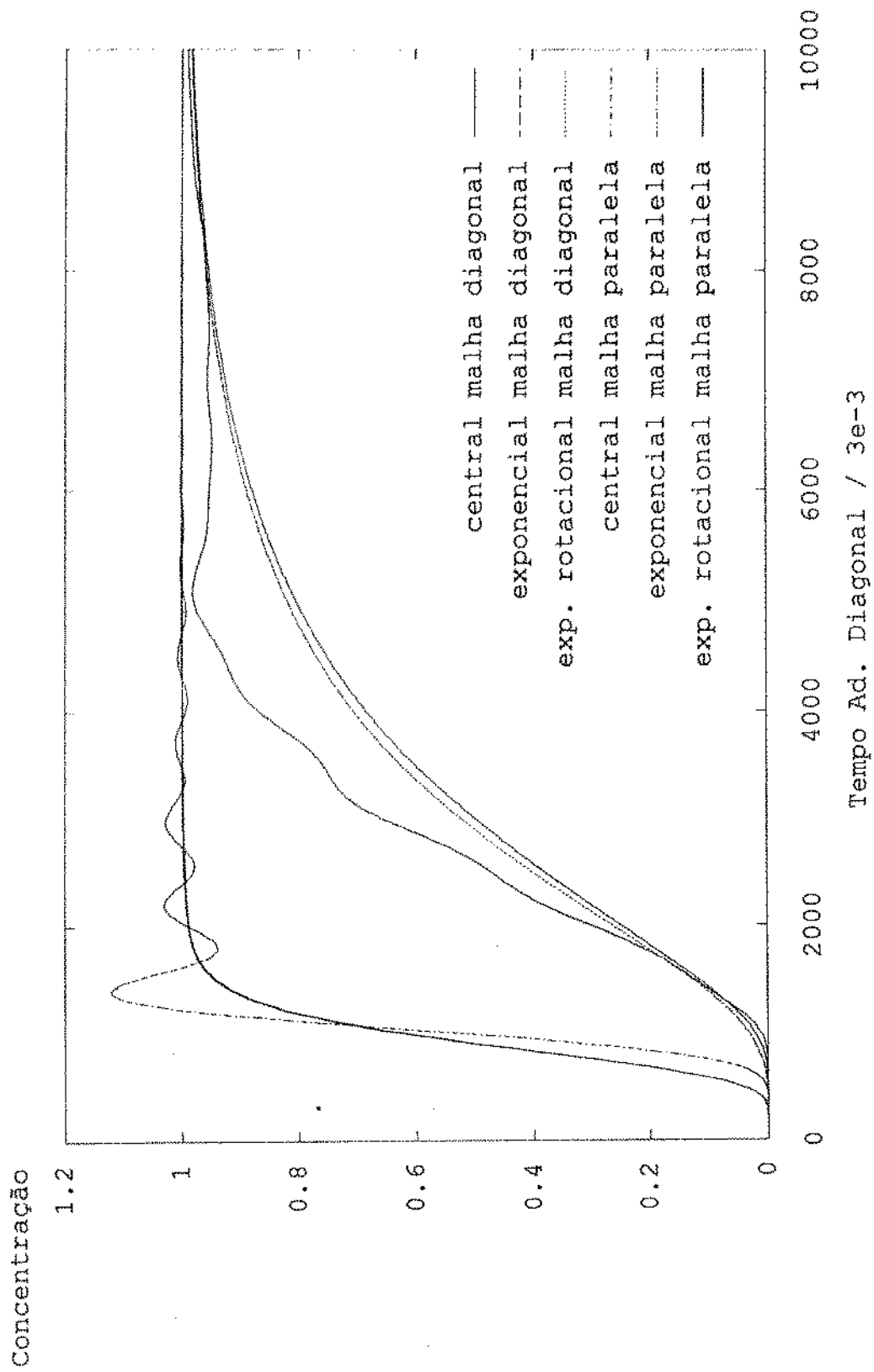


GRÁFICO 28

PECLET 1000 - ESQUEMAS EM DIFERENÇAS FINITAS - MALHA REFINADA

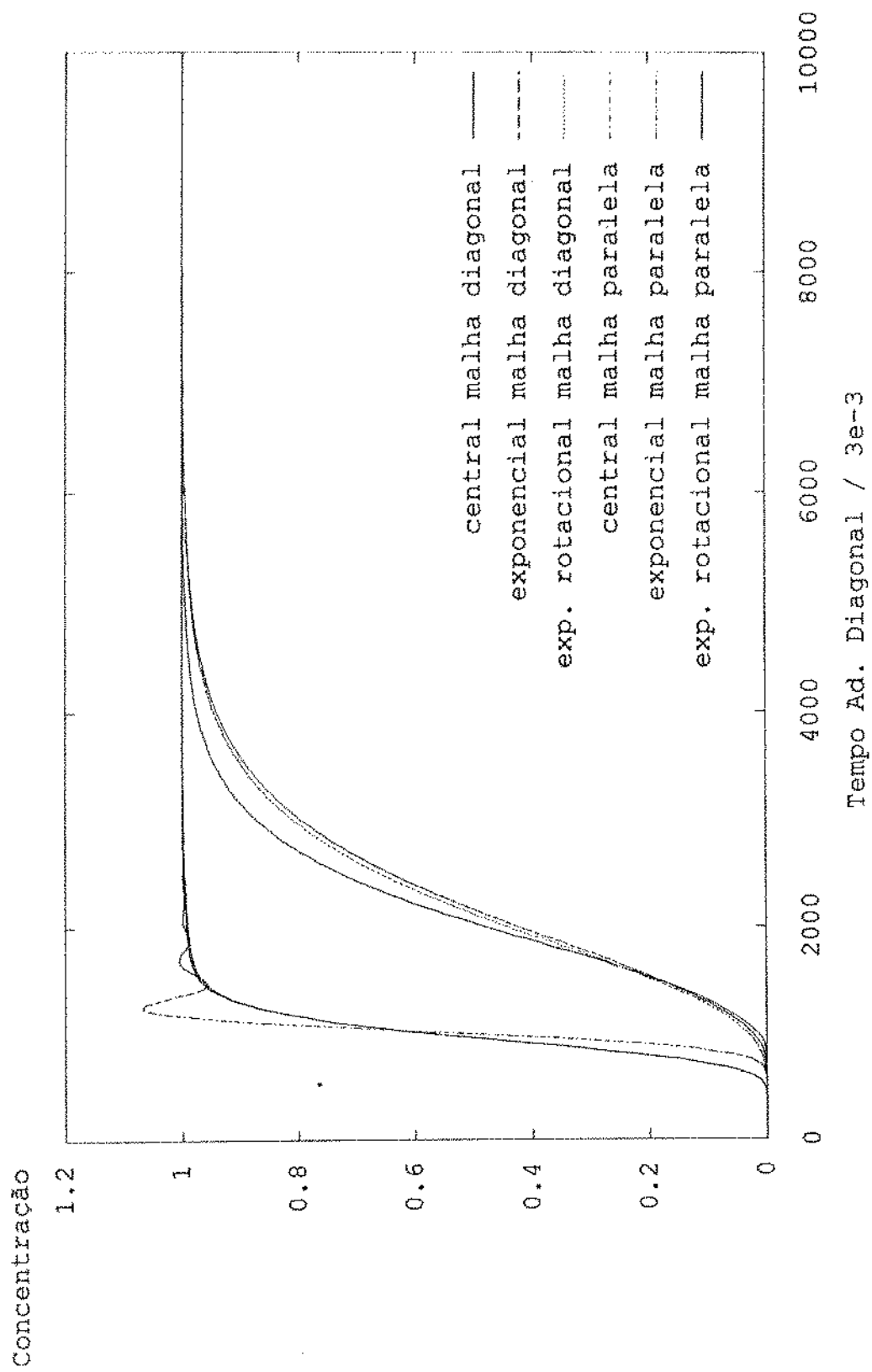


GRÁFICO 29

PECLET 1000 - CONVERGÊNCIA DO ESQUEMA CENTRAL EM DIFERENÇAS FINITAS

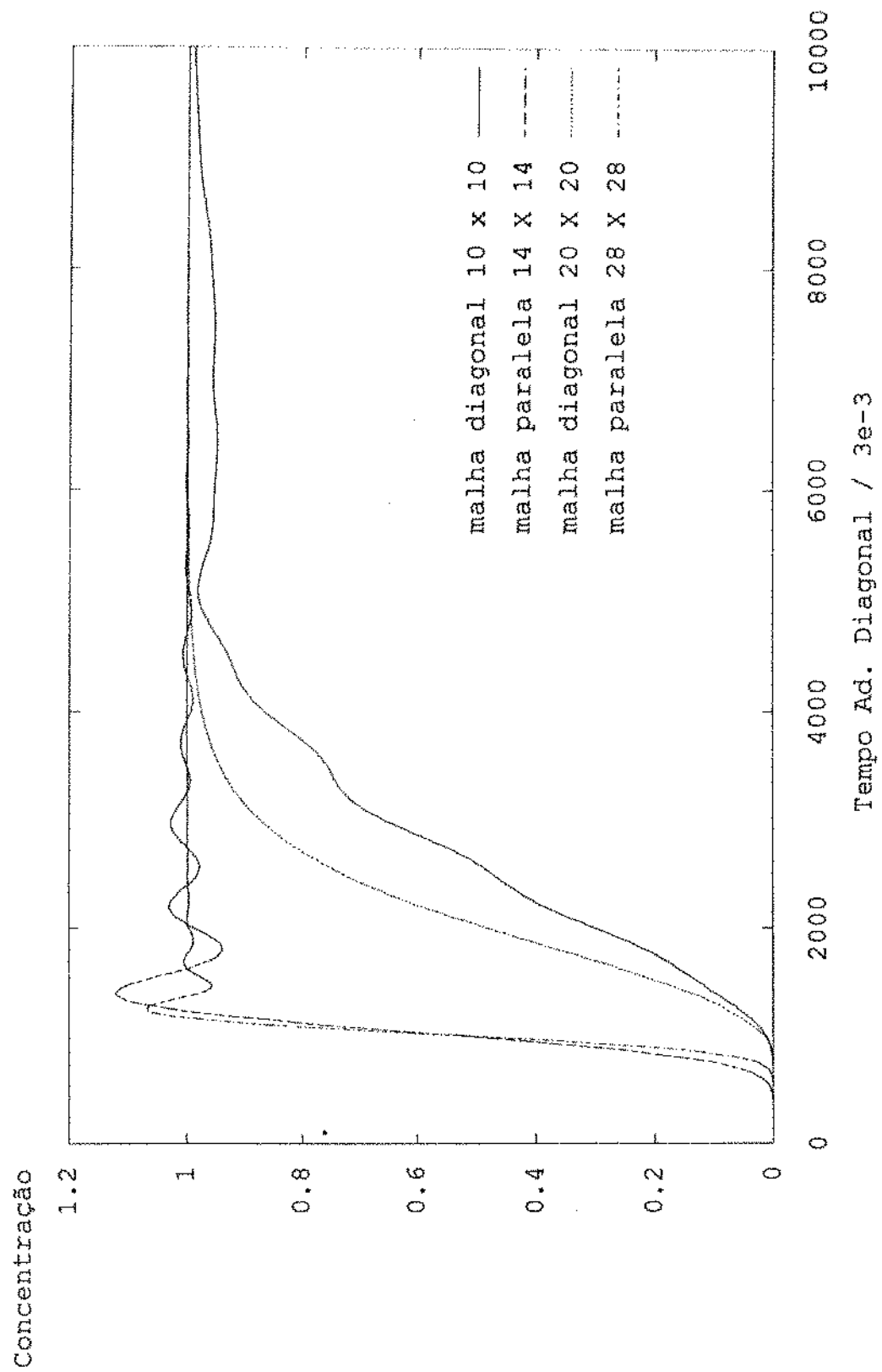


GRÁFICO 30

PECIET 1000 - CONVERGÊNCIA DO ESQUEMA EXPONENCIAL EM DIFERENÇAS FINITAS

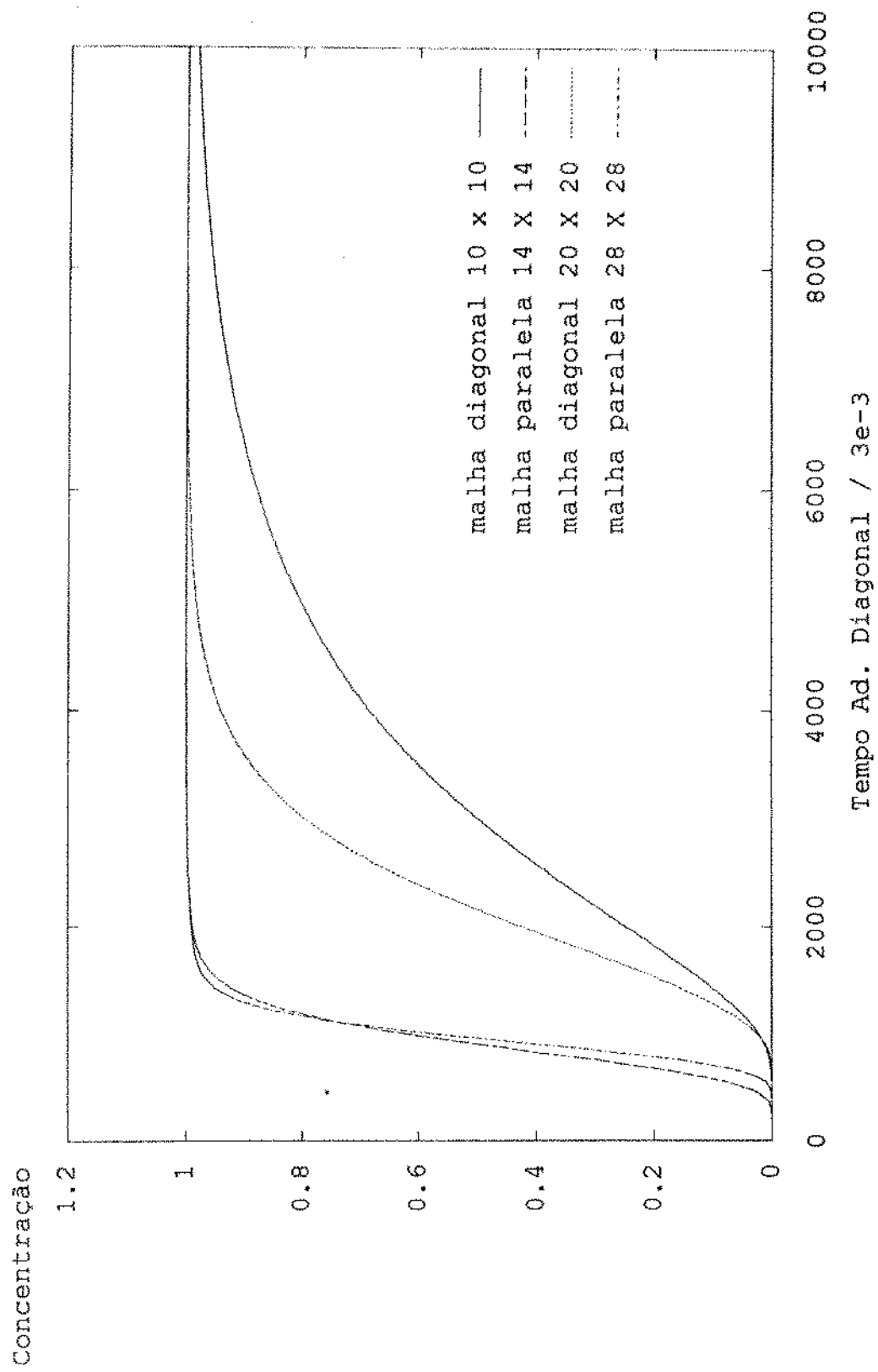


GRÁFICO 31

PECLET 1000 - CONVERGÊNCIA DO ESQUEMA EXP. ROT. EM DIFERENÇAS FINITAS

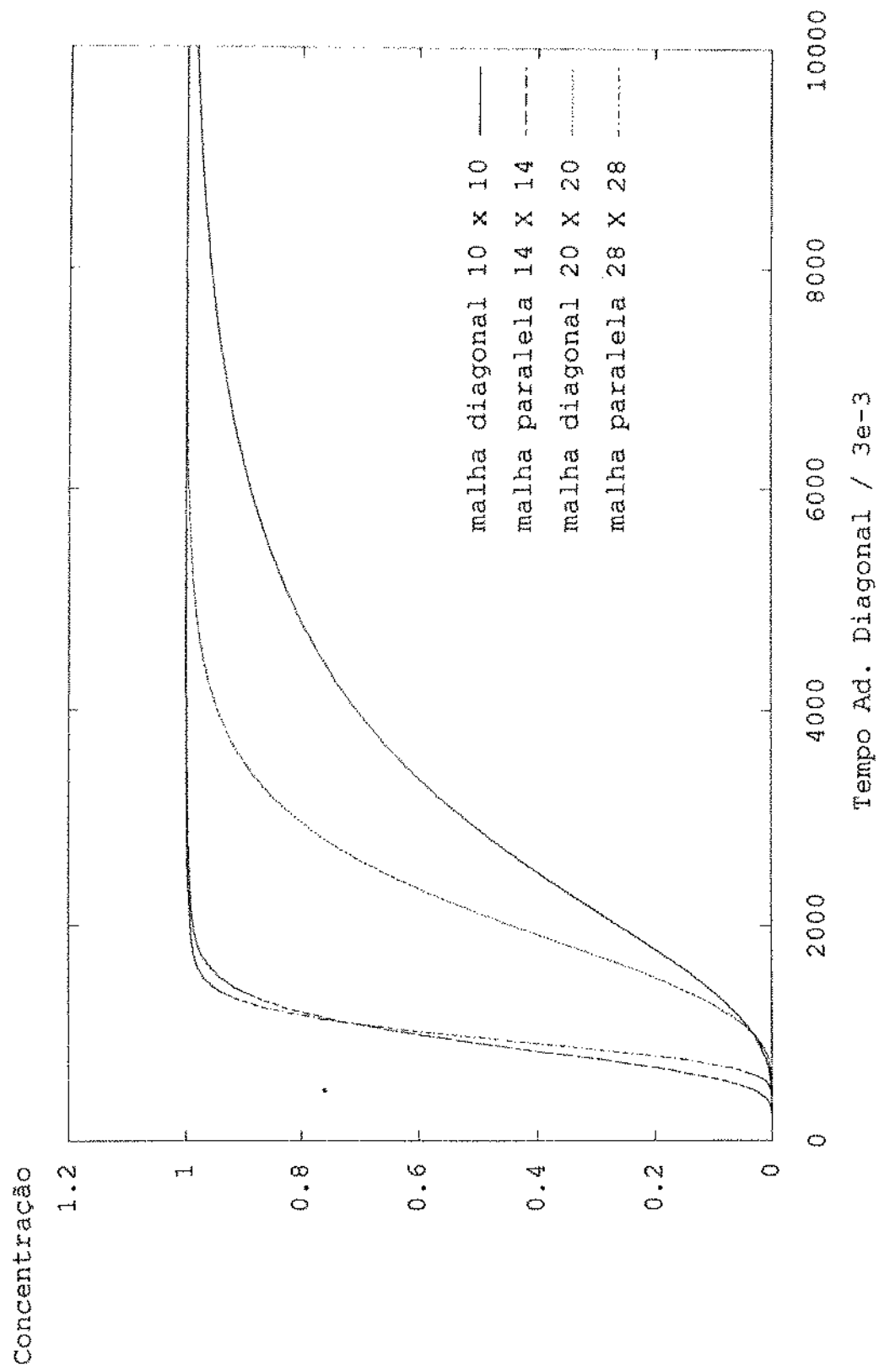


GRÁFICO 32

PECLET 1000 - ESQUEMAS EM VOLUMES FINITOS - MALHA GROSSEIRA

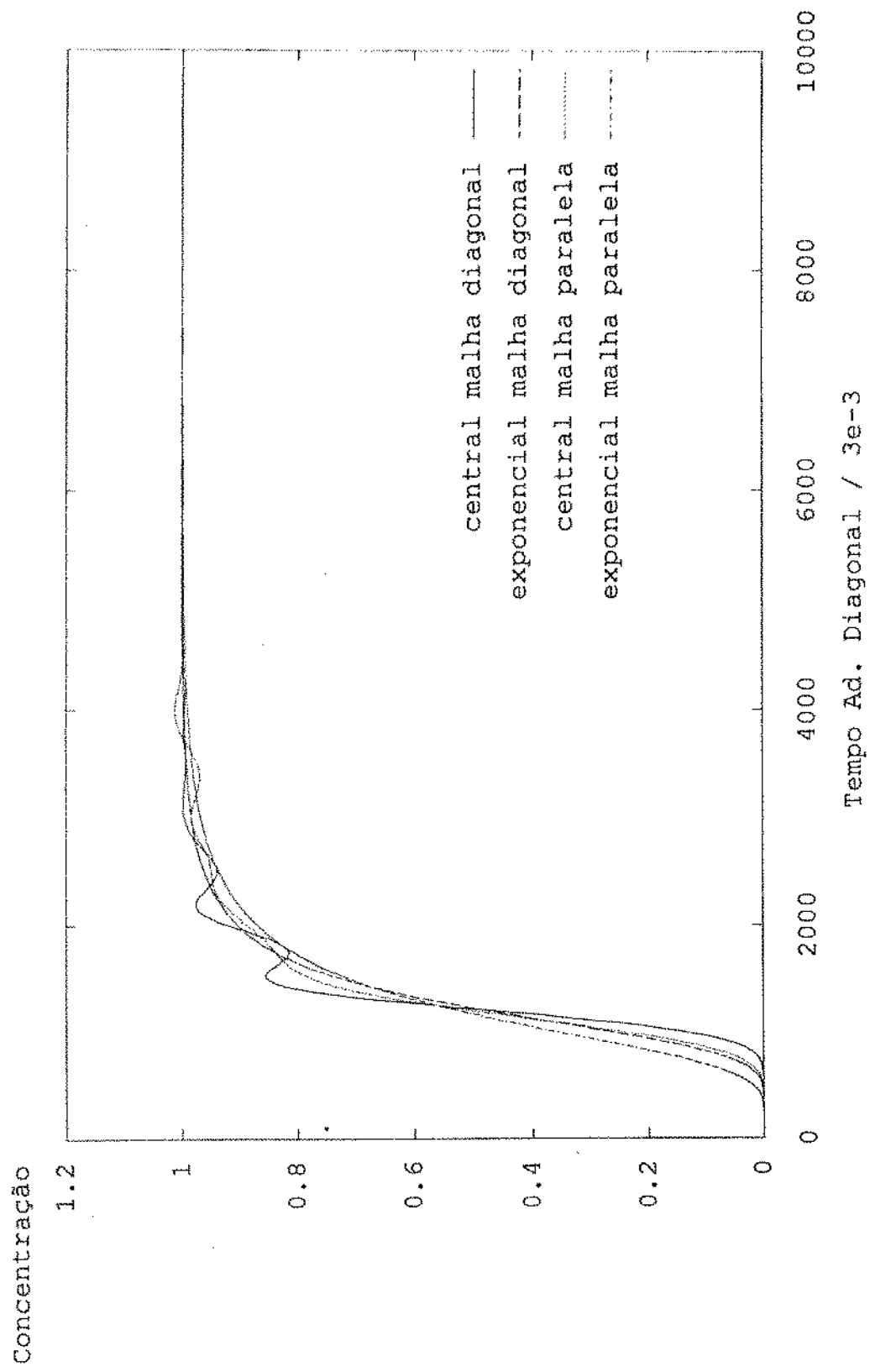


GRÁFICO 33

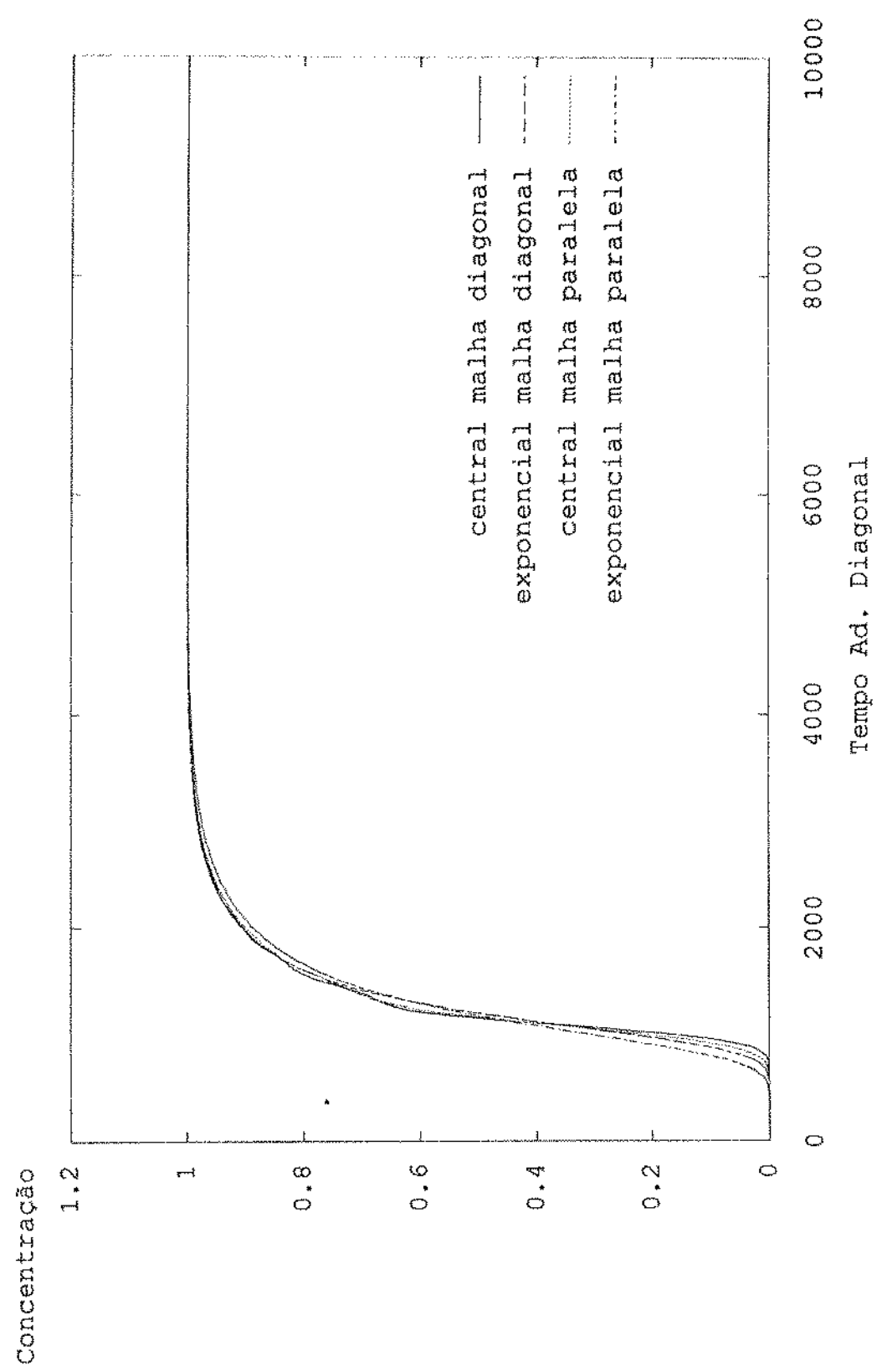


GRÁFICO 34

PECLET 1000 - CONVERGÊNCIA DO ESQUEMA CENTRAL EM VOLUMES FINITOS

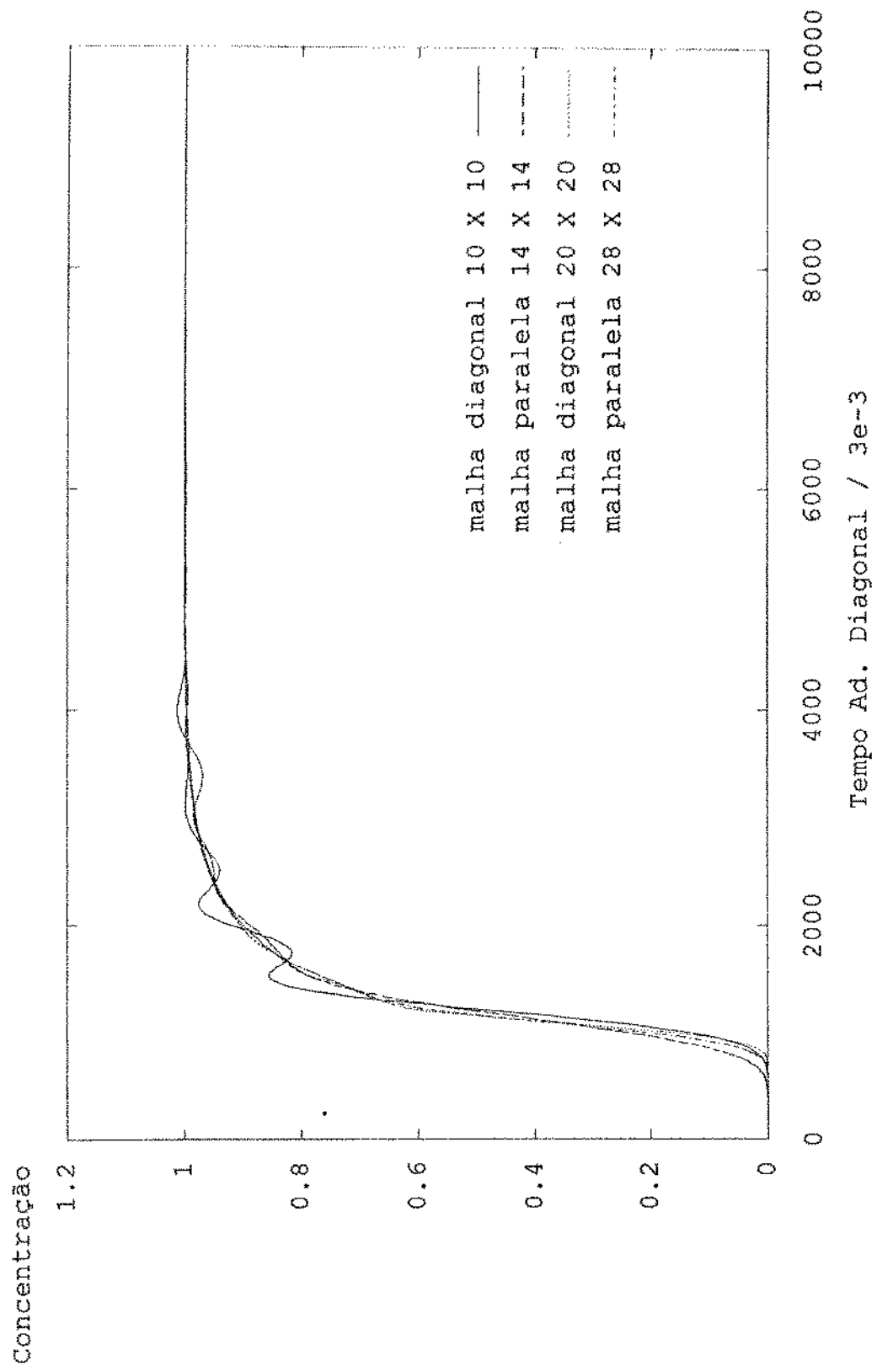


GRÁFICO 35

PECLET 1000 - CONVERGÊNCIA DO ESQUEMA EXPONENCIAL EM VOLUMES FINITOS

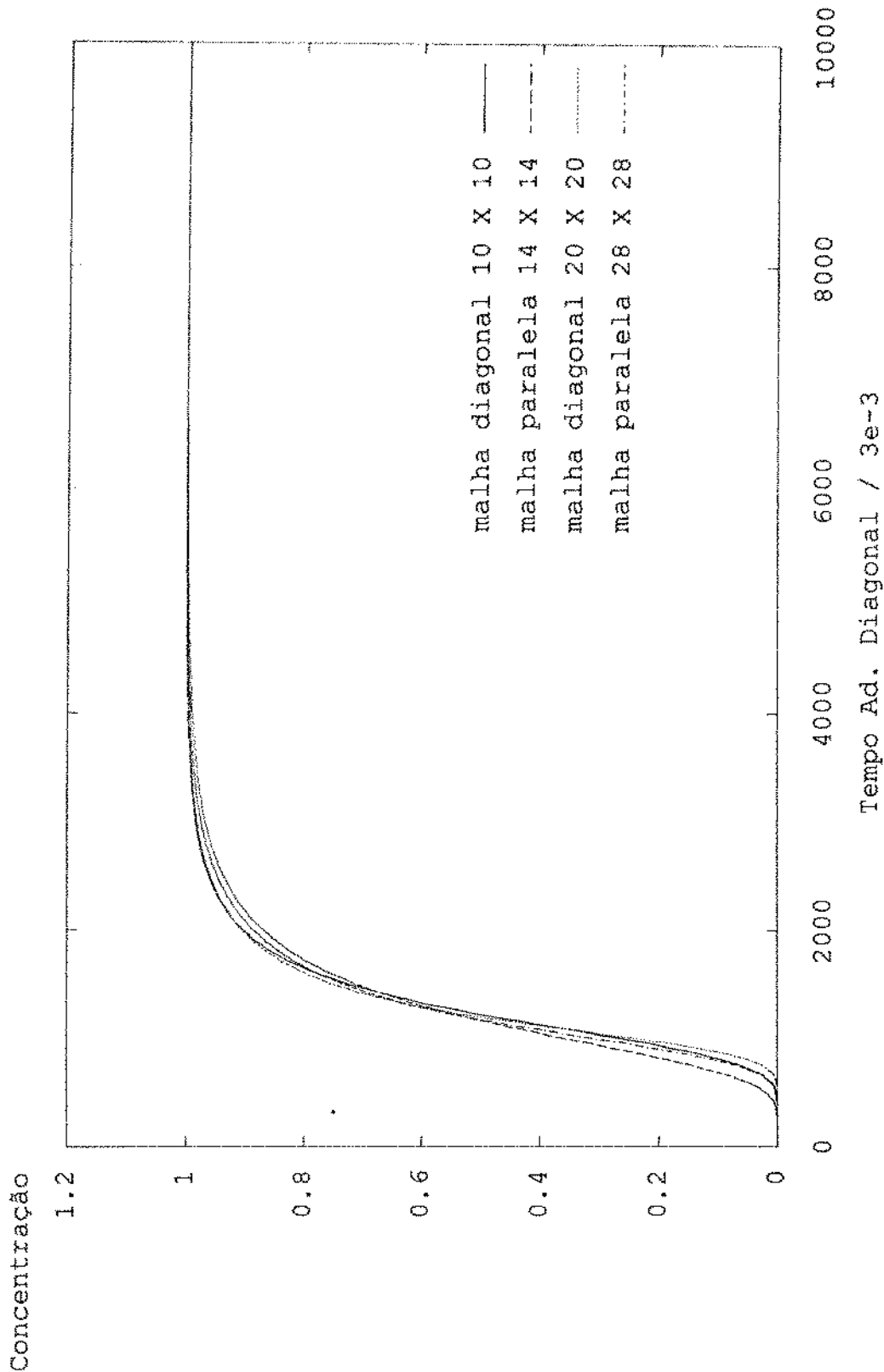


GRÁFICO 36

PECLET 1000 - ESQUEMA EXPONENCIAL EM DIF. E VOL. FINITOS MALHA GROSSEIRA

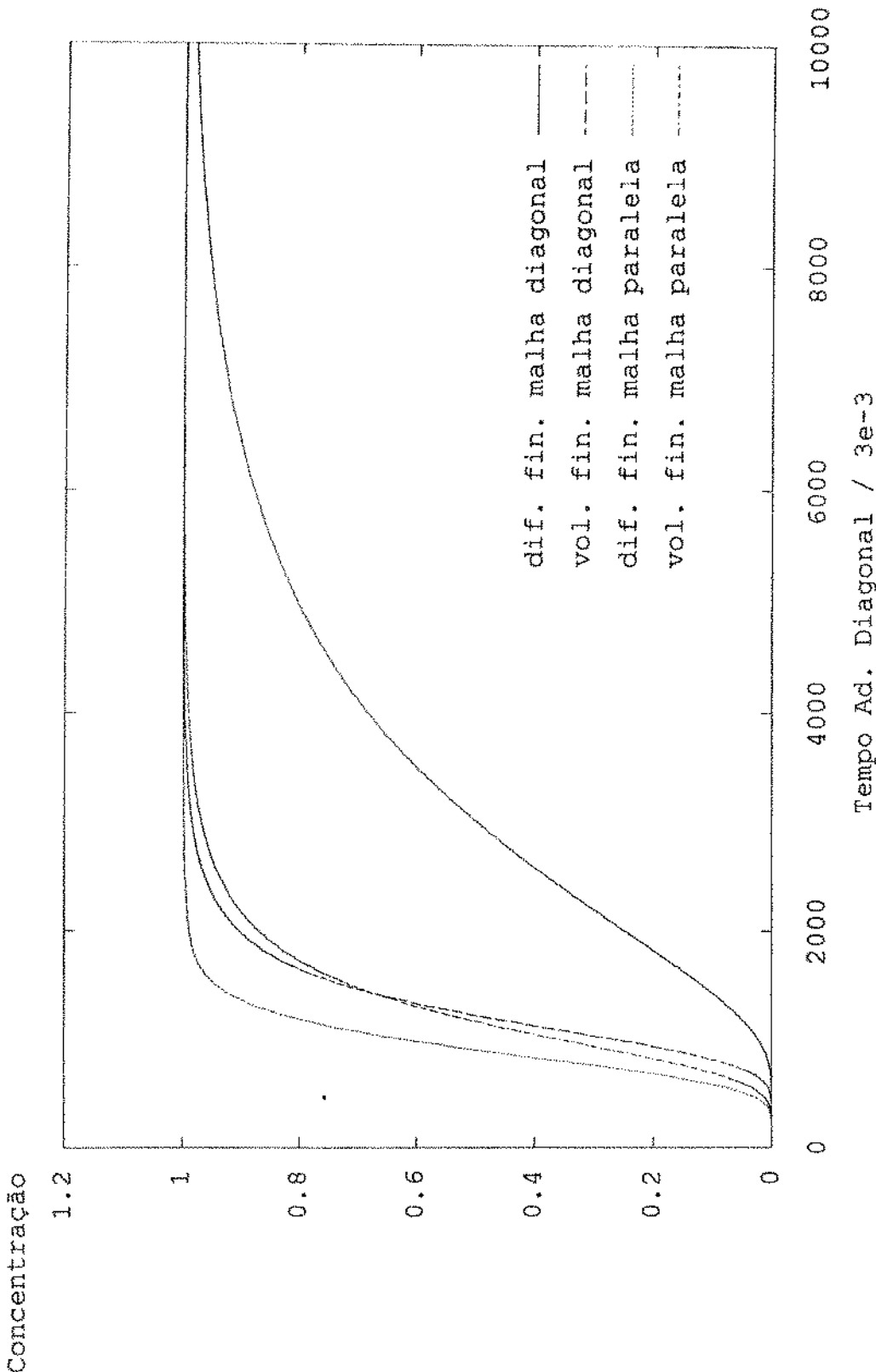


GRÁFICO 37

PECLET 1000 - ESQUEMA EXPONENCIAL EM DIF. E VOL. FINITOS MALHA REFINADA

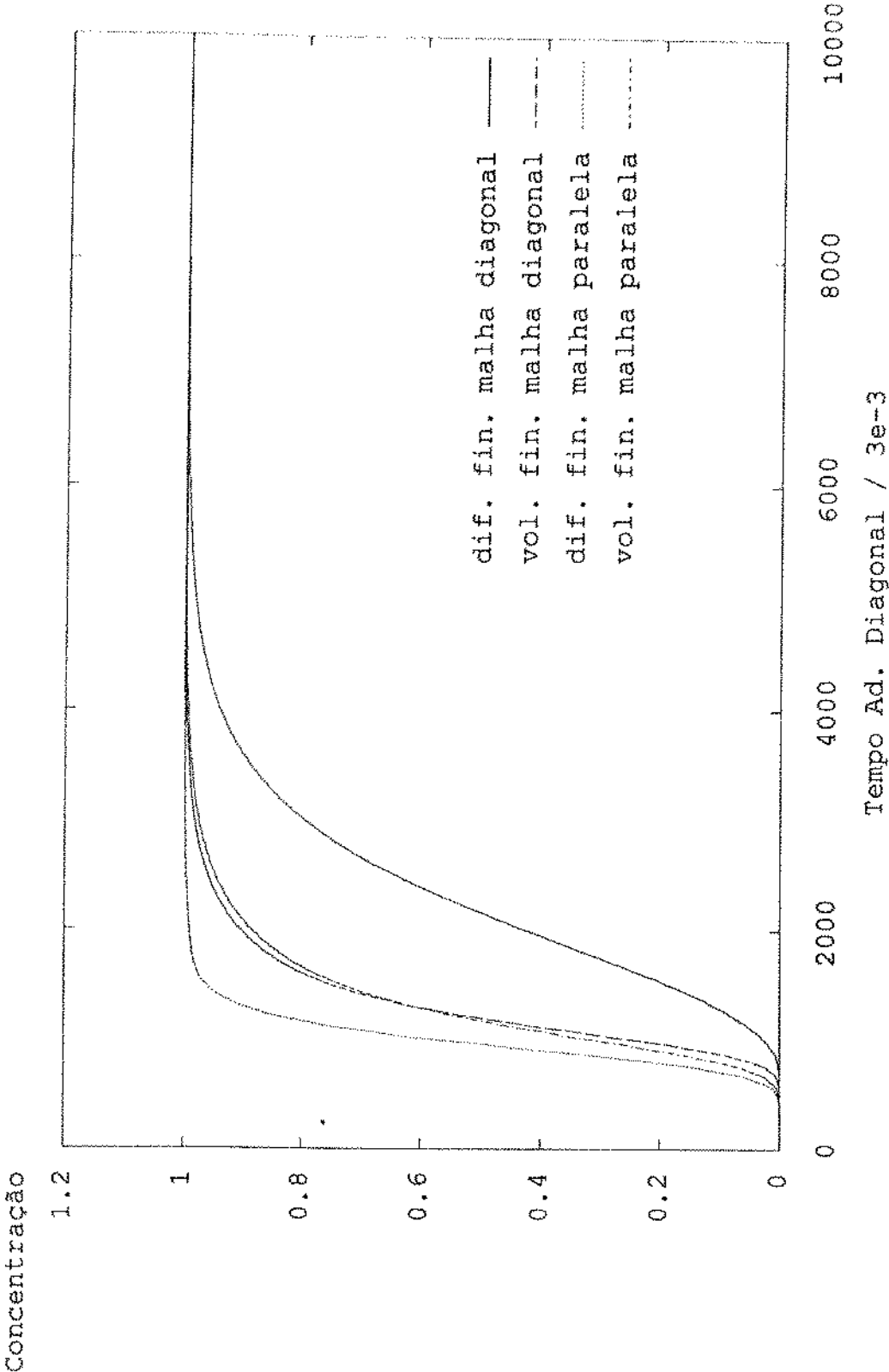


GRÁFICO 38

4.3.2 - Concentração X Diagonal

Os gráficos 39 e 40 mostram a grande dependência da solução com a escolha do posicionamento da malha numérica para os esquemas em diferenças finitas. No gráfico 41 nota-se a diminuição das oscilações do esquema central com o refinamento, ficando estas oscilações restritas à região mais próxima do poço produtor (diagonal $\cong 0$), porém o pico máximo desta oscilação não diminui com o refinamento, pelo contrário, aumenta.

O esquema exponencial de Allen-Southwell é suave, gráfico 42, mas apresenta grande efeito de orientação de malha (GOE) na região próxima ao ponto de diagonal zero, apresentando comportamento bastante semelhante ao esquema exponencial rotacional, gráfico 43, sendo que no exponencial rotacional a discordância entre os resultados fica mais restrita ainda ao ponto de diagonal zero, tendo-se grande discordância praticamente apenas no último ponto numérico. Este comportamento indica que o problema das discretizações exponenciais está restrito à representação da região próxima ao poço produtor.

Nos gráficos 44 e 45 observa-se boa concordância entre os esquemas central e exponencial, exceto na região onde se tem oscilações não realistas no esquema central, apesar de que no ponto do poço produtor (diagonal $= 0$) tem-se boa concordância também.

No gráfico 46 notamos a pequena dependência da solução com a malha escolhida para o esquema exponencial em volumes finitos, tendo porém, ainda uma grande discrepância entre as curvas com malhas 10x10 e 14x14 com as malhas 20x20 e 28x28, contudo esta discrepância não reflete uma grande diferença no ponto do poço produtor (diagonal = 0).

No gráfico 47 observamos com o esquema central em volumes finitos comportamento semelhante ao central convectivo, ou seja, com o refinamento reduz-se a região sujeita a oscilações, porém aumenta-se o pico máximo dessas oscilações.

O gráfico 48 mostra claramente a vantagem do esquema exponencial em volumes finitos em relação ao exponencial em diferenças finitas, em termos da dependência da solução com a escolha da malha ser diagonal ou paralela.

PECLET 1000 - ESQUEMAS EM DIFERENÇAS FINITAS - MALHA REFINADA

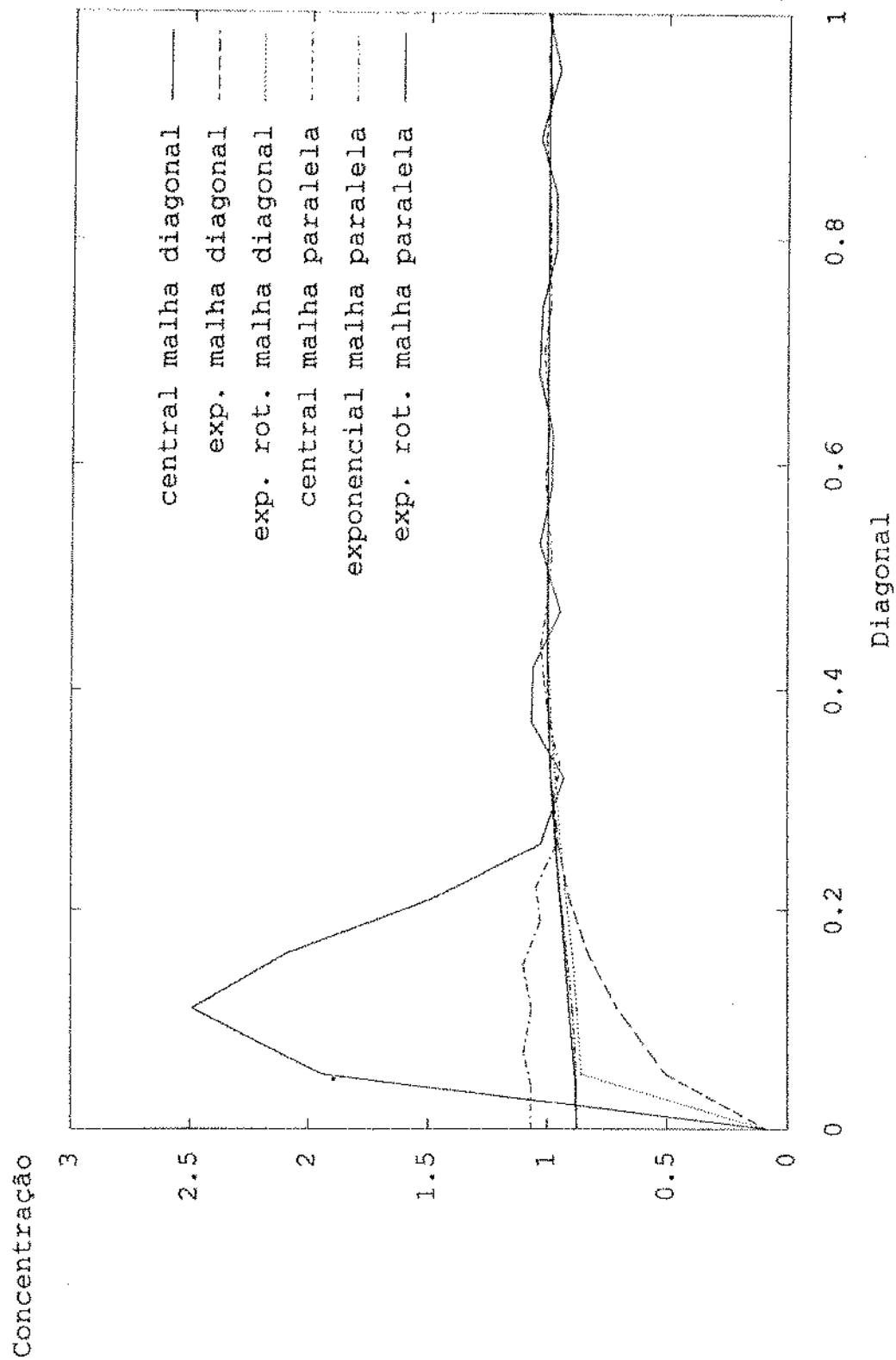


GRÁFICO 39

PECLET 1000 - ESQUEMAS EM DIFERENÇAS FINITAS - MALHA GROSSEIRA

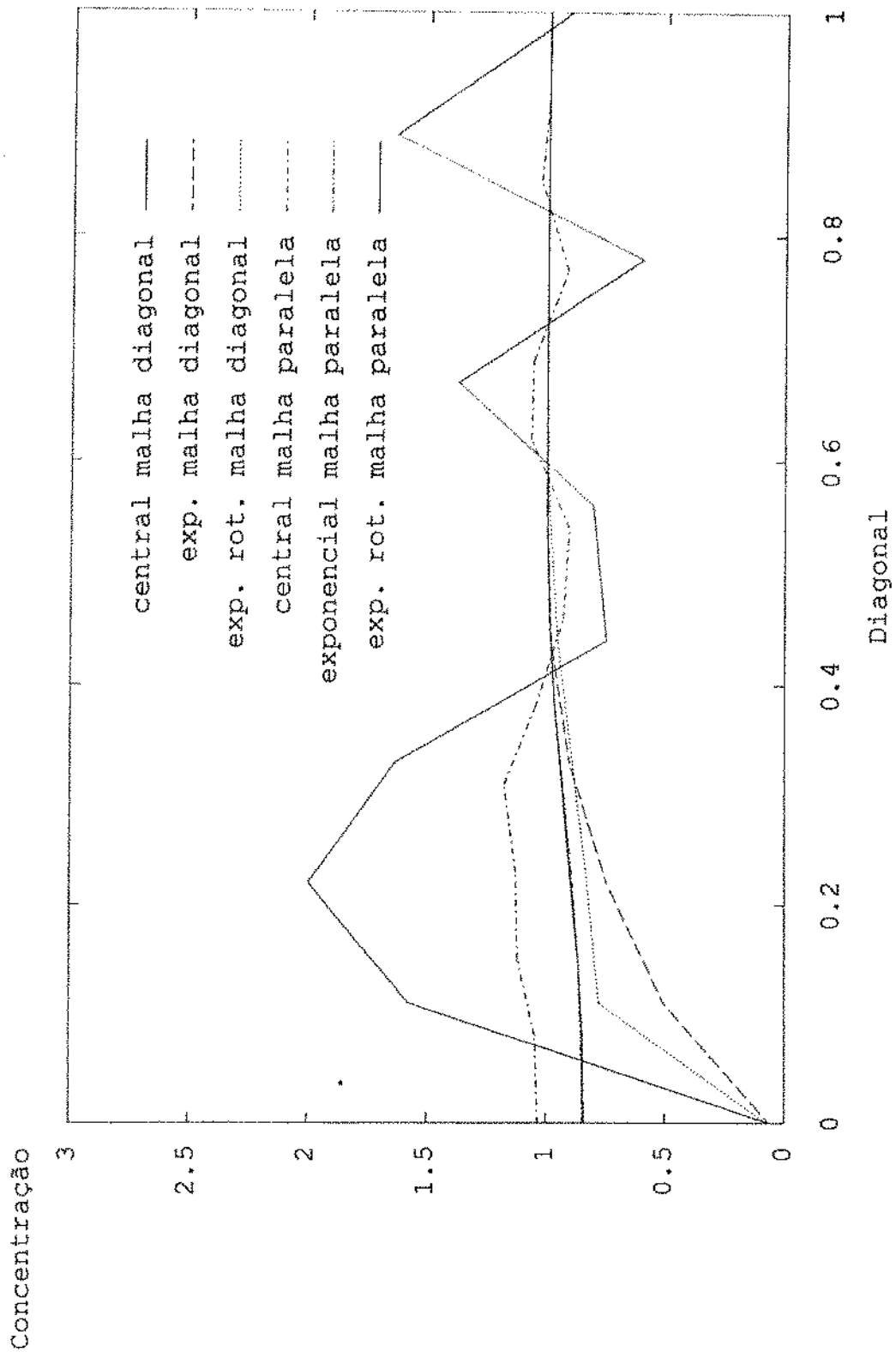


GRÁFICO 40

PECLET 1000 - CONVERGÊNCIA DO ESQUEMA CENTRAL EM DIFERENÇAS FINITAS

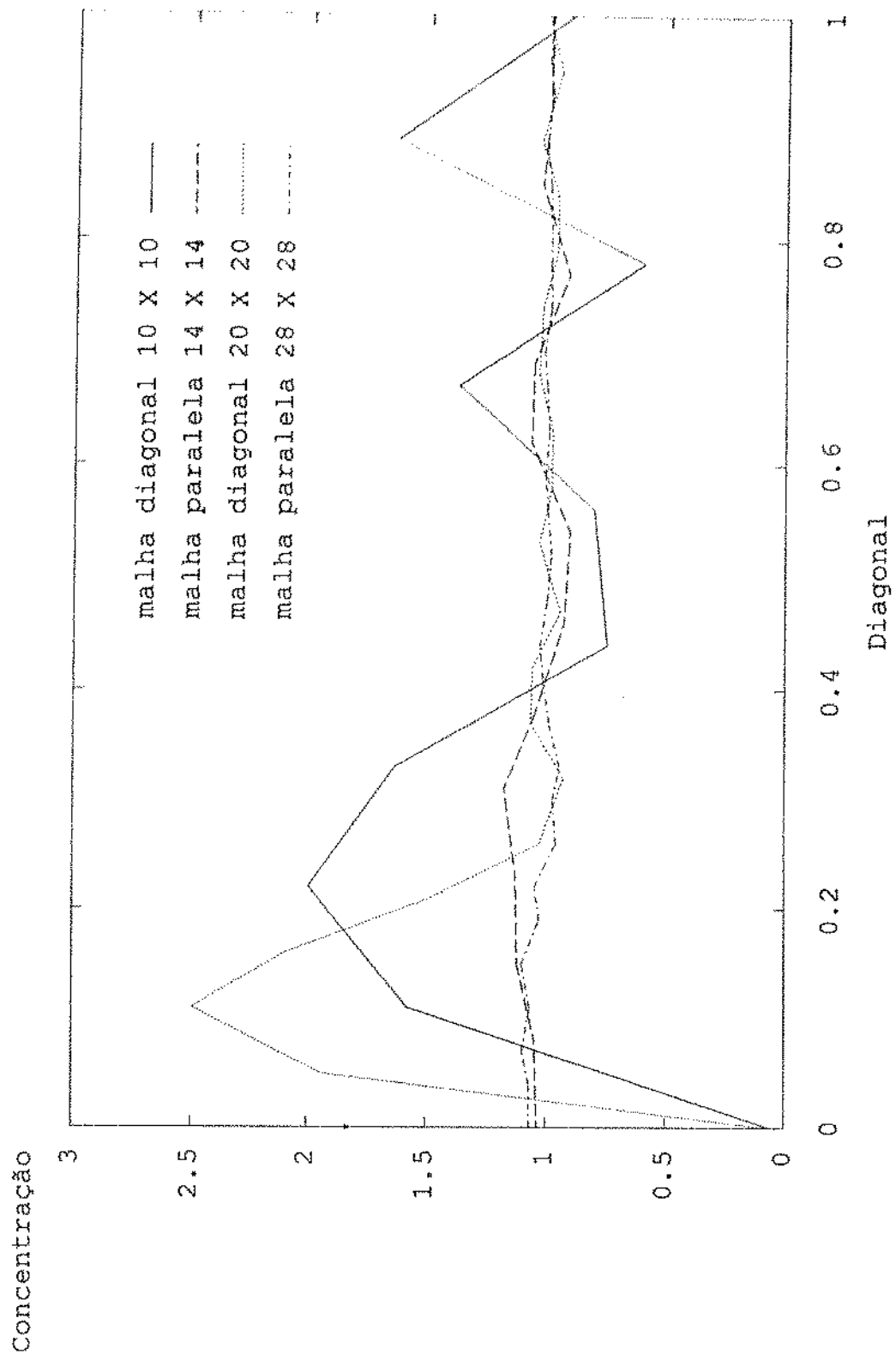


GRÁFICO 41

PECLET 1000 - CONVERGÊNCIA DO ESQUEMA EXPONENCIAL EM DIFERENÇAS FINITAS

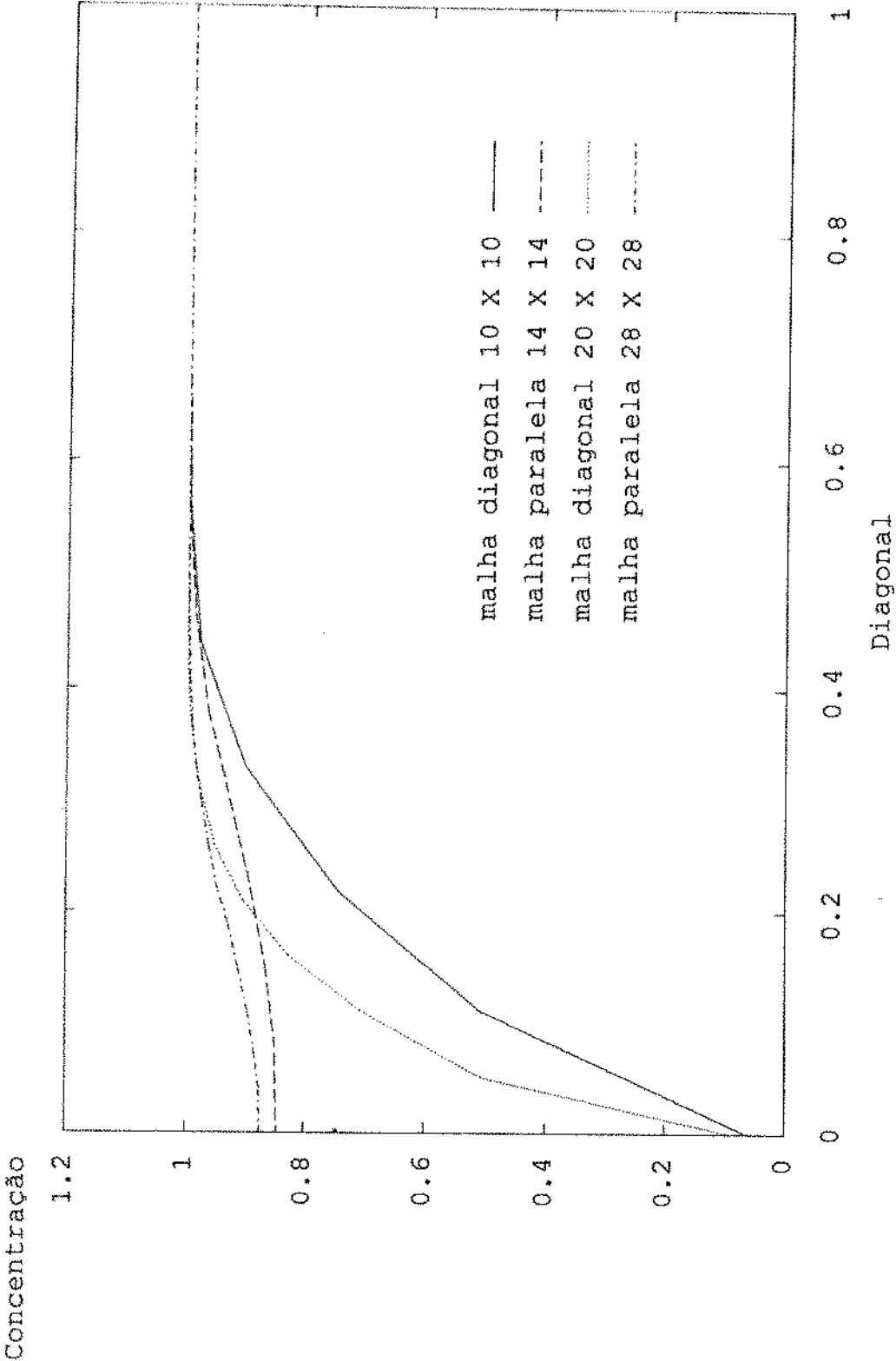


GRÁFICO 42

PECLET 1000 - CONVERGÊNCIA DO ESQUEMA EXP. ROT. EM DIFERENÇAS FINITAS

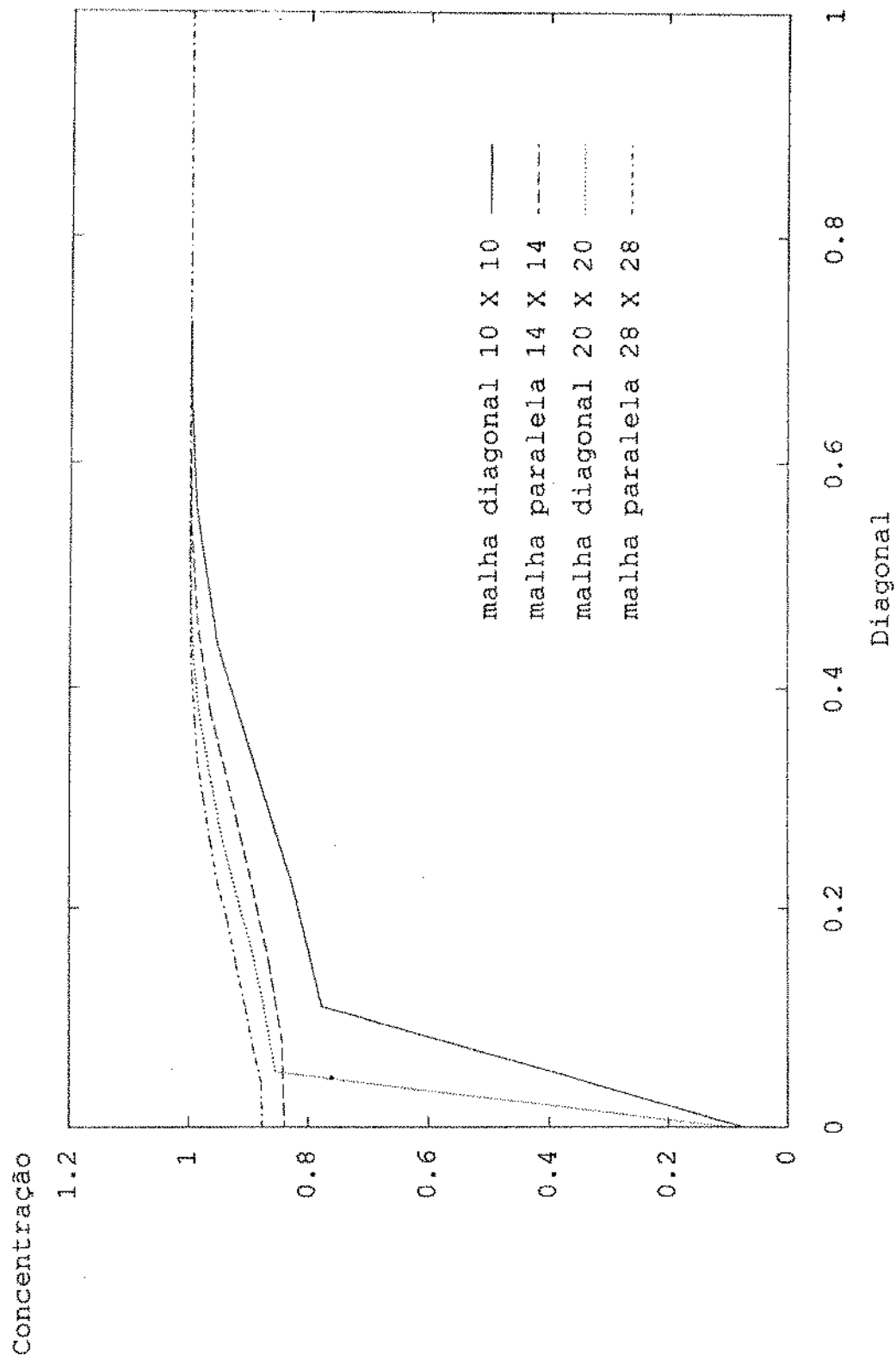


GRÁFICO 43

PECLET 1000 - ESQUEMAS EM VOLUMES FINITOS - MALHA REFINADA

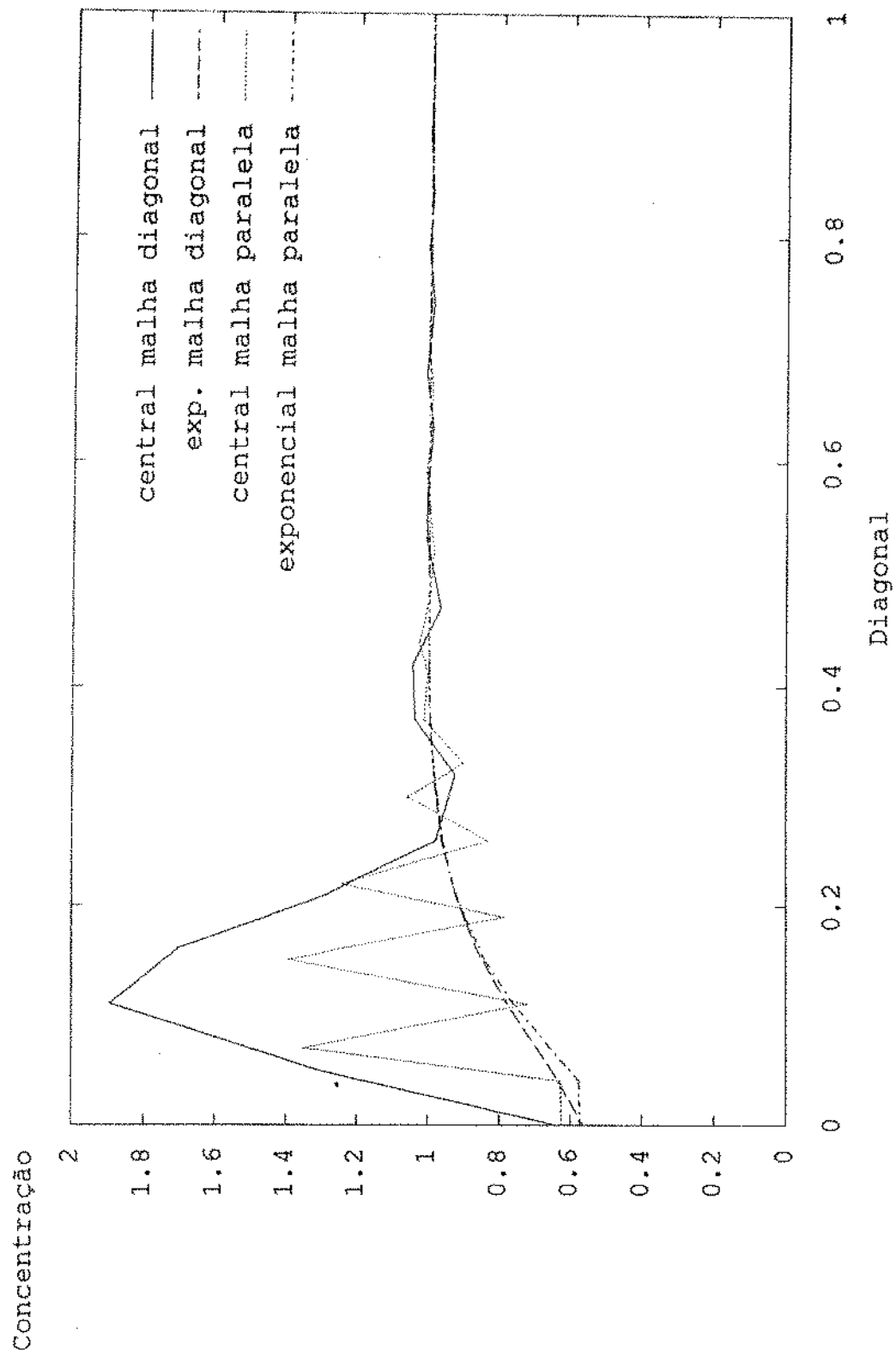


GRÁFICO 44

PECLET 1000 - ESQUEMAS EM VOLUMES FINITOS - MALHA GROSSEIRA

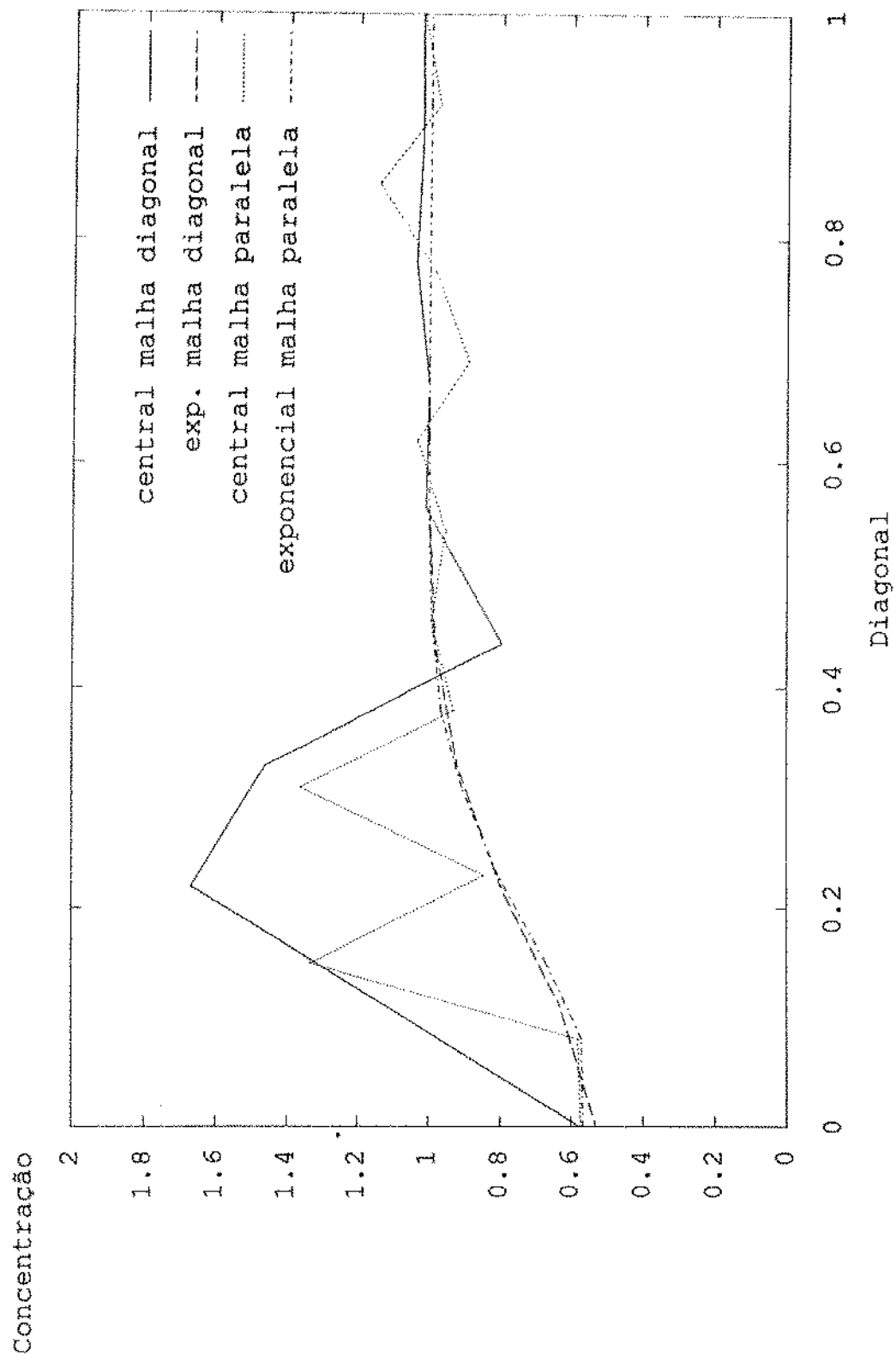


GRÁFICO 45

PECLET 1000 - CONVERGÊNCIA DO ESQUEMA EXPONENCIAL EM VOLUMES FINITOS

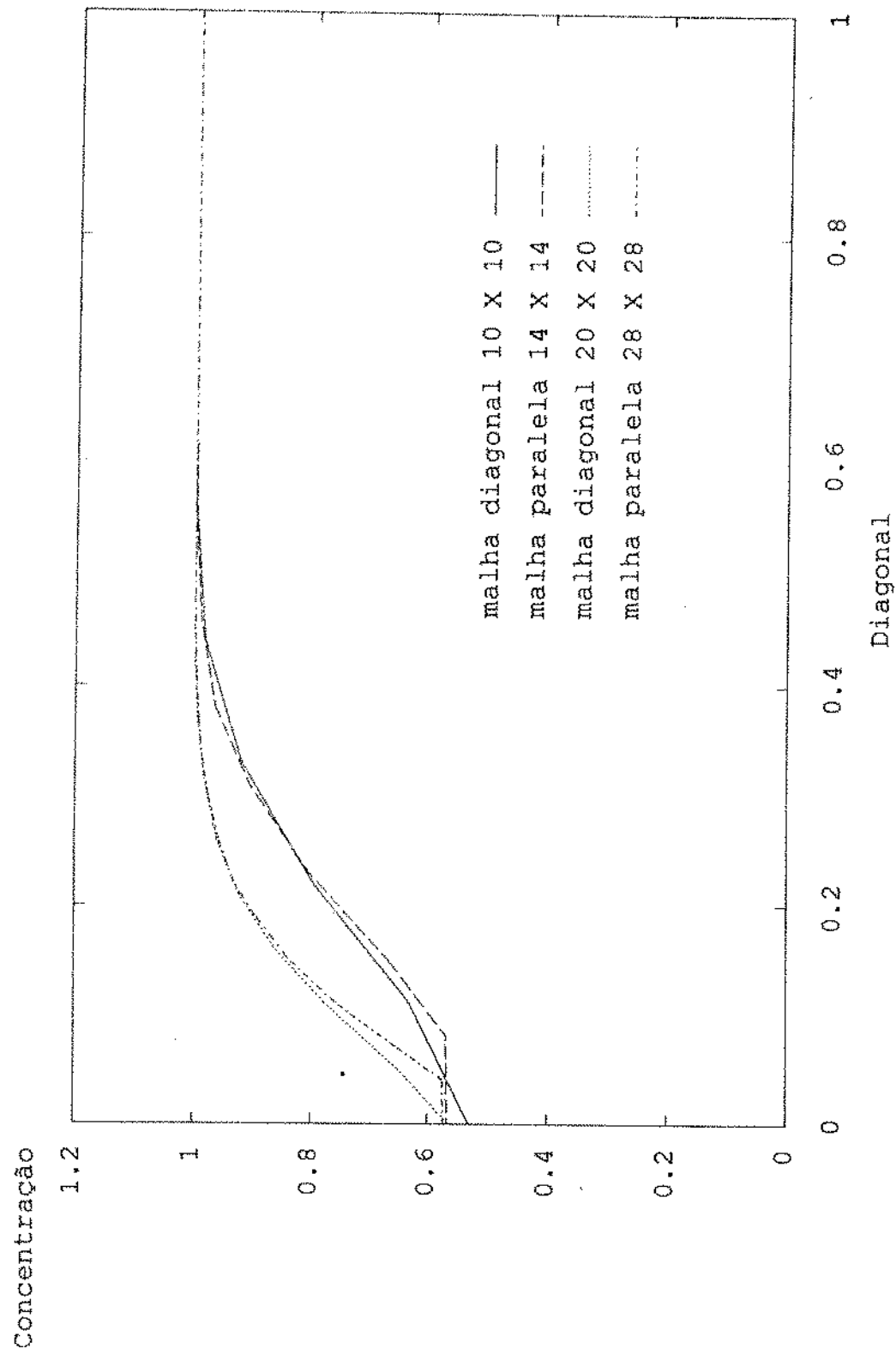


GRÁFICO 46

PECLET 1000 - CONVERGÊNCIA DO ESQUEMA CENTRAL EM VOLUMES FINITOS

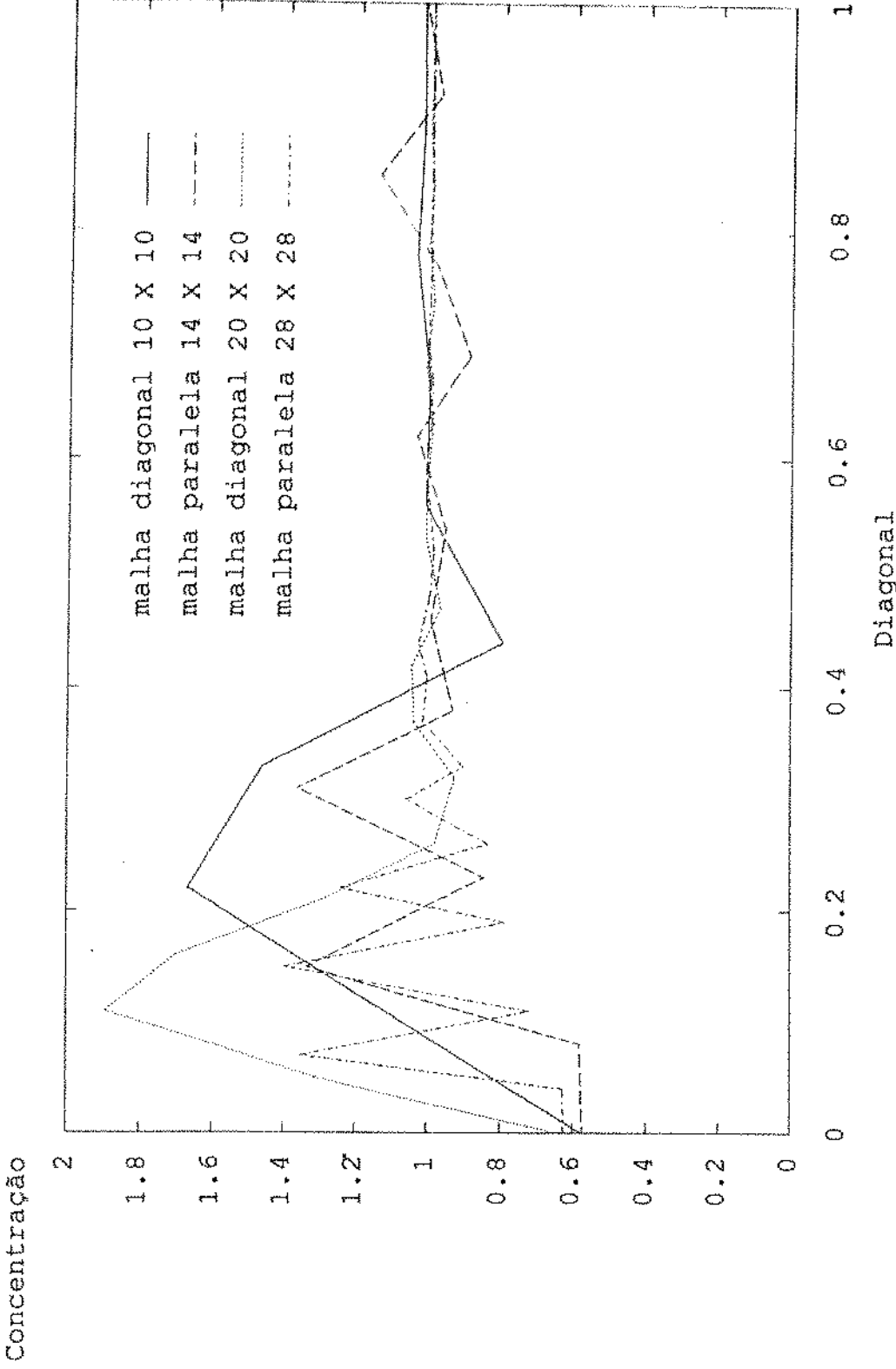


GRÁFICO 47

PECLET 1000 - ESQUEMA EXPONENCIAL EM DIF. E VOL. FINITOS MALHA REFINADA

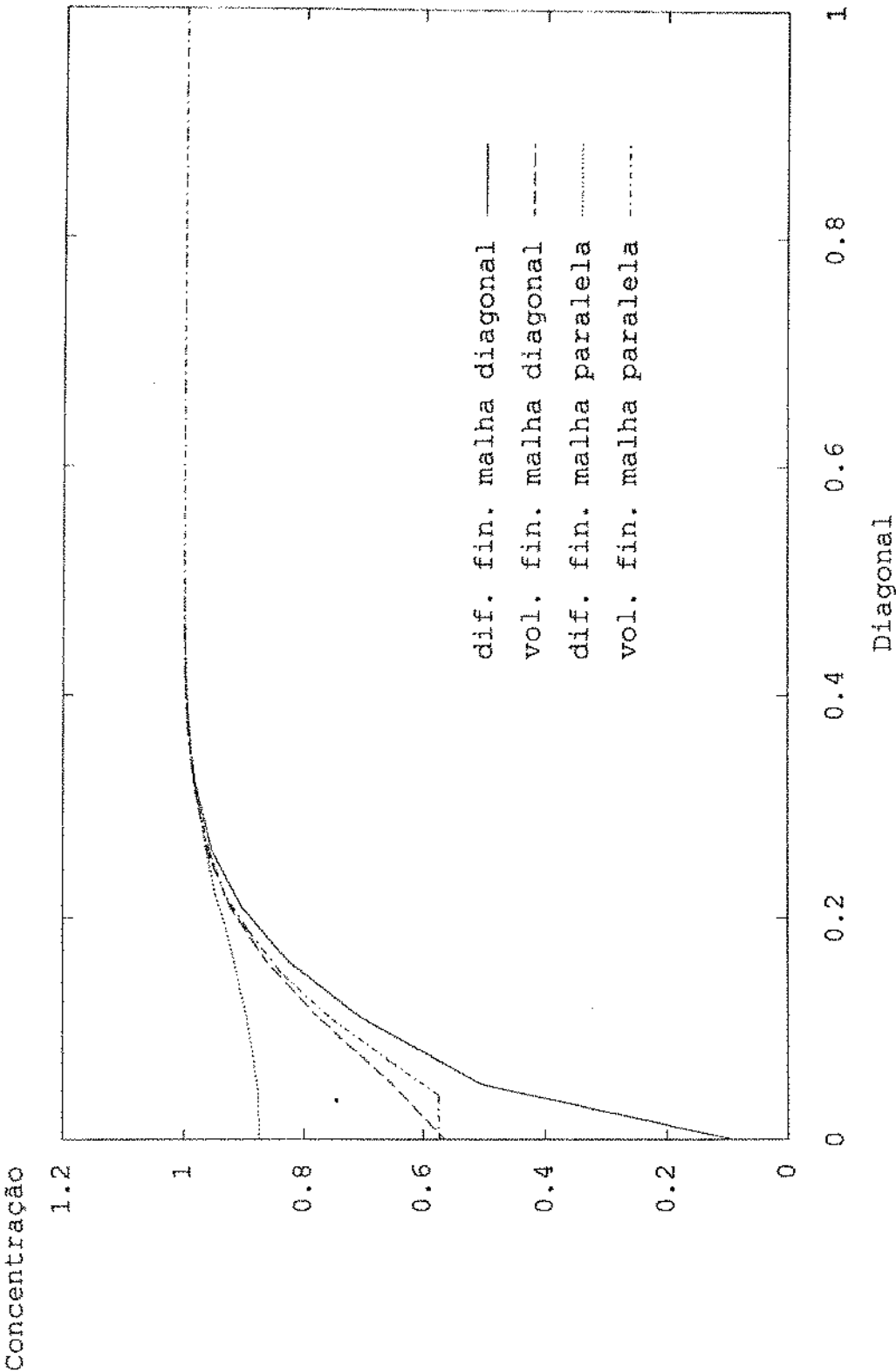


GRÁFICO 48

4.3.3 - Concentração em todo o domínio

Os gráficos 49 a 52 confirmam a tendência do esquema central já observada nos gráficos anteriores, aqui porém pode-se observar melhor como há uma diminuição da região de oscilações, ou pelo menos a diminuição dos picos das oscilações na maior parte do domínio, com o refinamento, ficando porém clara também a tendência do aumento da amplitude das oscilações na região mais próxima ao poço produtor.

Nos gráficos 53 a 58 pode-se observar comportamentos semelhantes para os dois esquemas exponenciais, sendo porém o esquema exponencial simples com soluções mais suaves, pois o exponencial rotacional, gráfico 55, chega a apresentar um pequeno comportamento oscilatório na região próxima ao poço produtor.

Nos gráficos 59 a 62, confirma-se em todo o domínio a tendência já observada para o esquema central em volumes finitos, ou seja, possuir menos oscilações que o central em diferenças finitas, manifestando porém a mesma tendência em relação aos picos das oscilações com o refinamento.

Os gráficos 63 a 65 mostram claramente a não existência de tendências oscilatórias no esquema exponencial em volumes finitos em todo o domínio, caracterizando soluções suaves, tendência esta mantida com o refinamento.

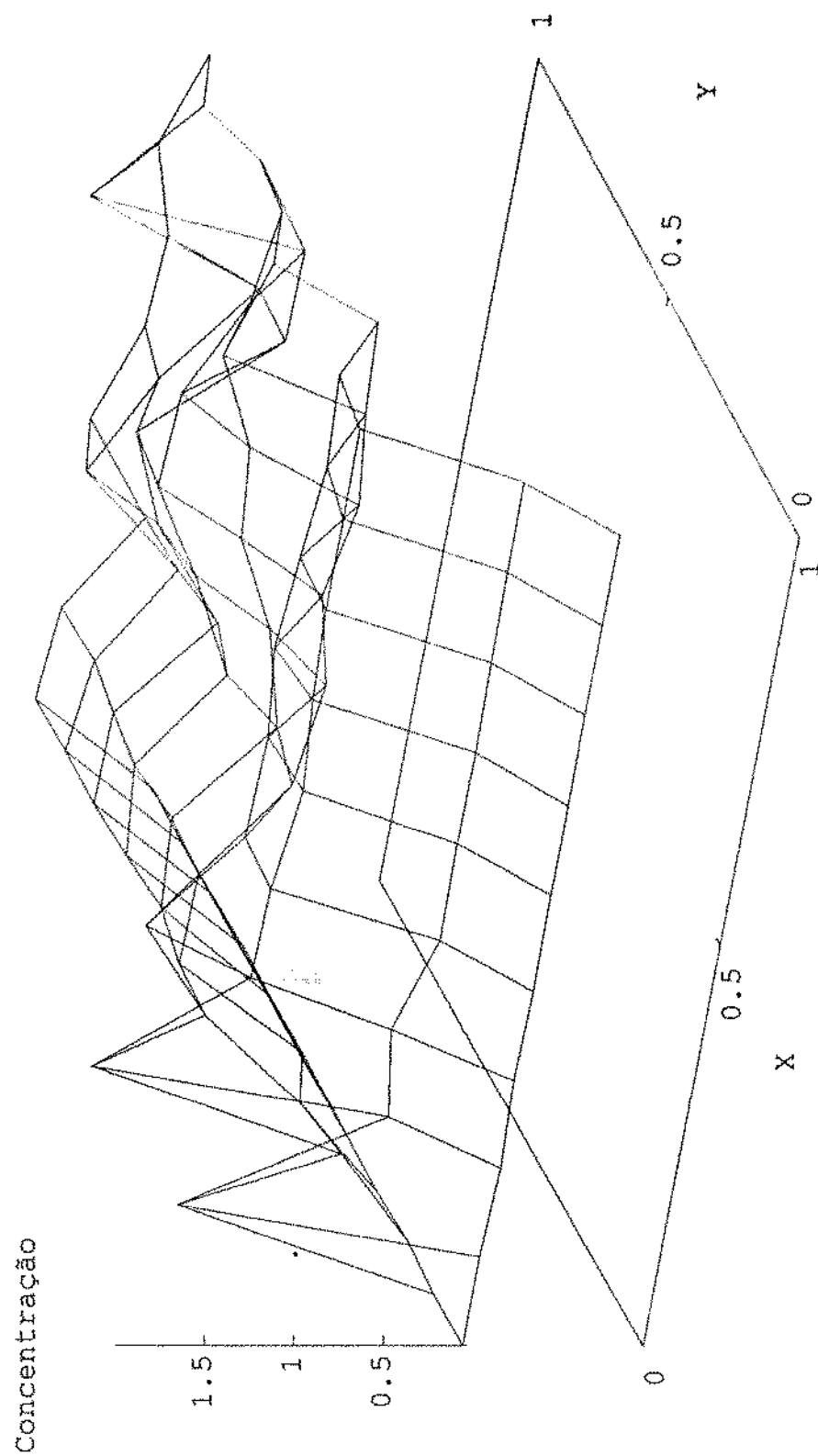


GRÁFICO 49

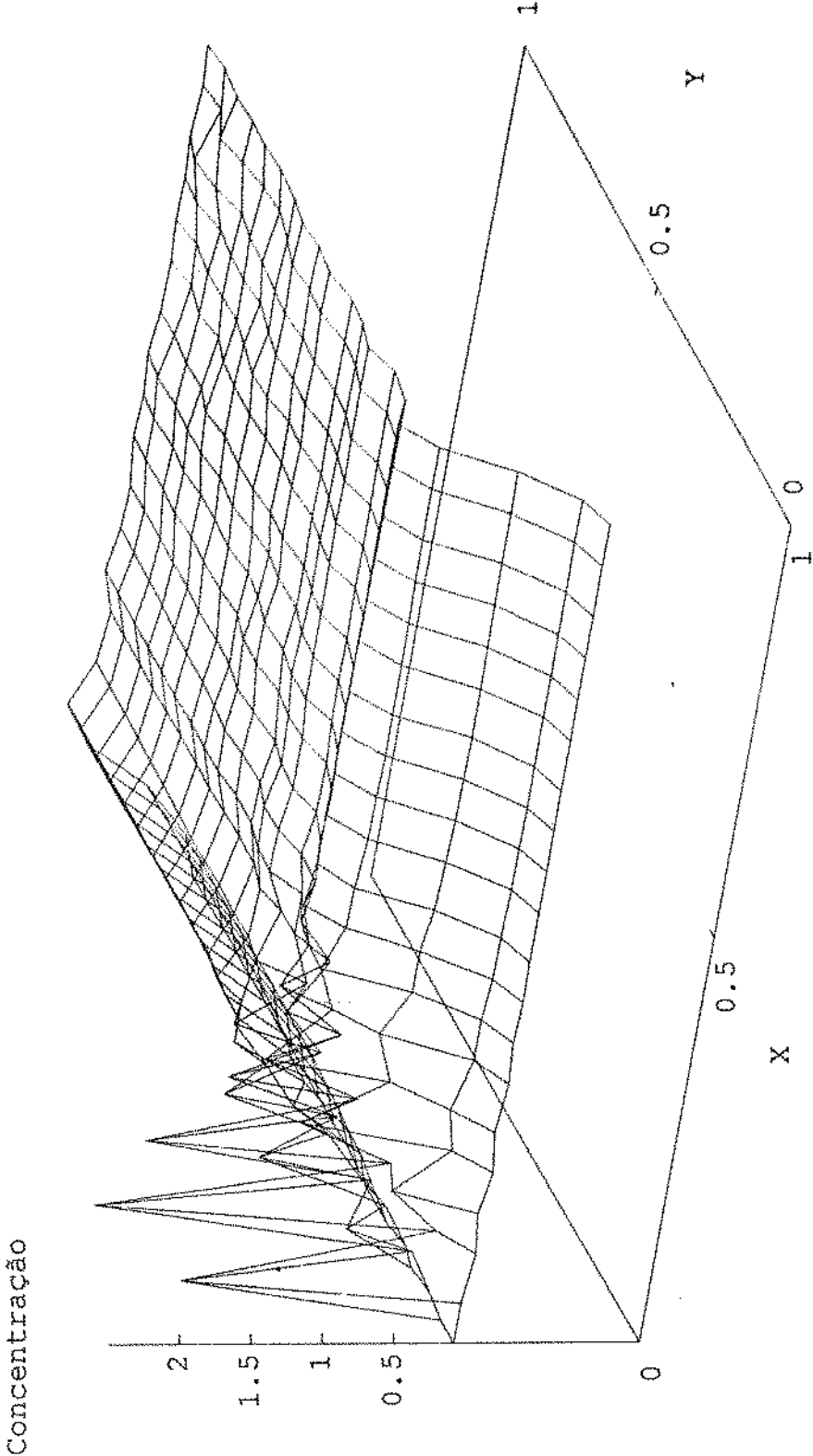


GRÁFICO 50

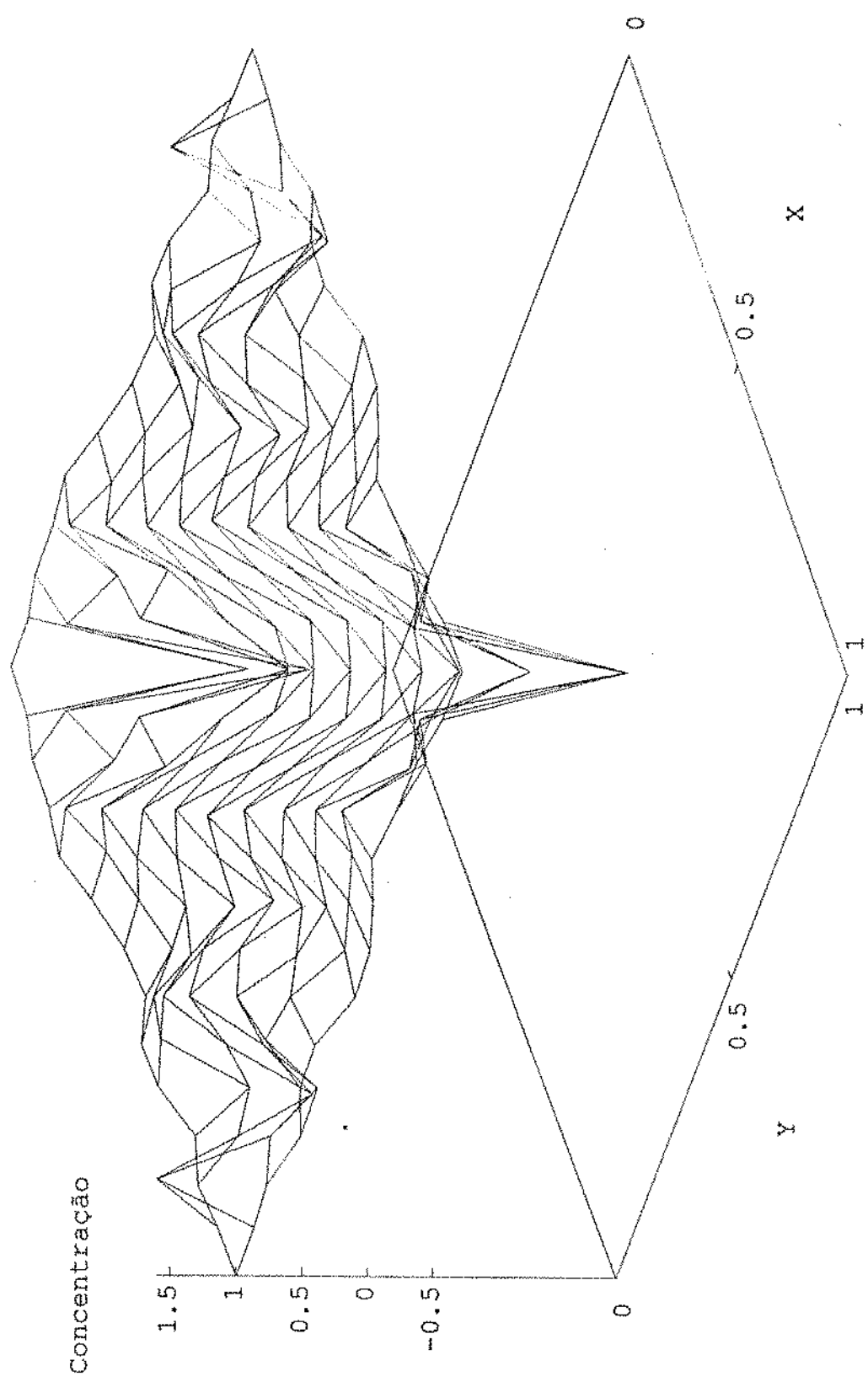


GRÁFICO 51

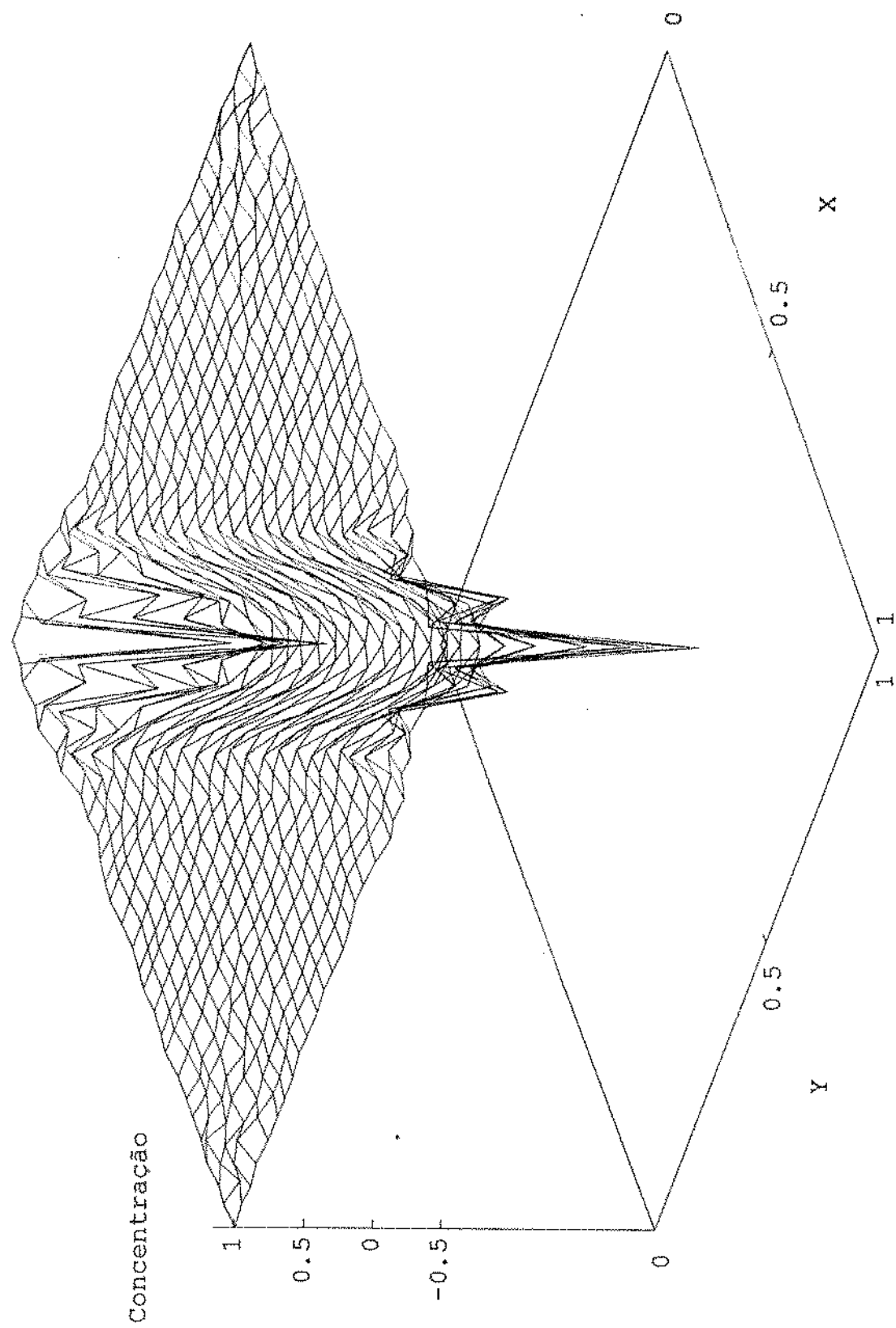


GRÁFICO 52

PECLET 1000 - ESQUEMA EXPONENCIAL EM DIFERENÇAS FINITAS MALHA DIAGONAL

malha 10 X 10 ———
malha 20 X 20 ·····

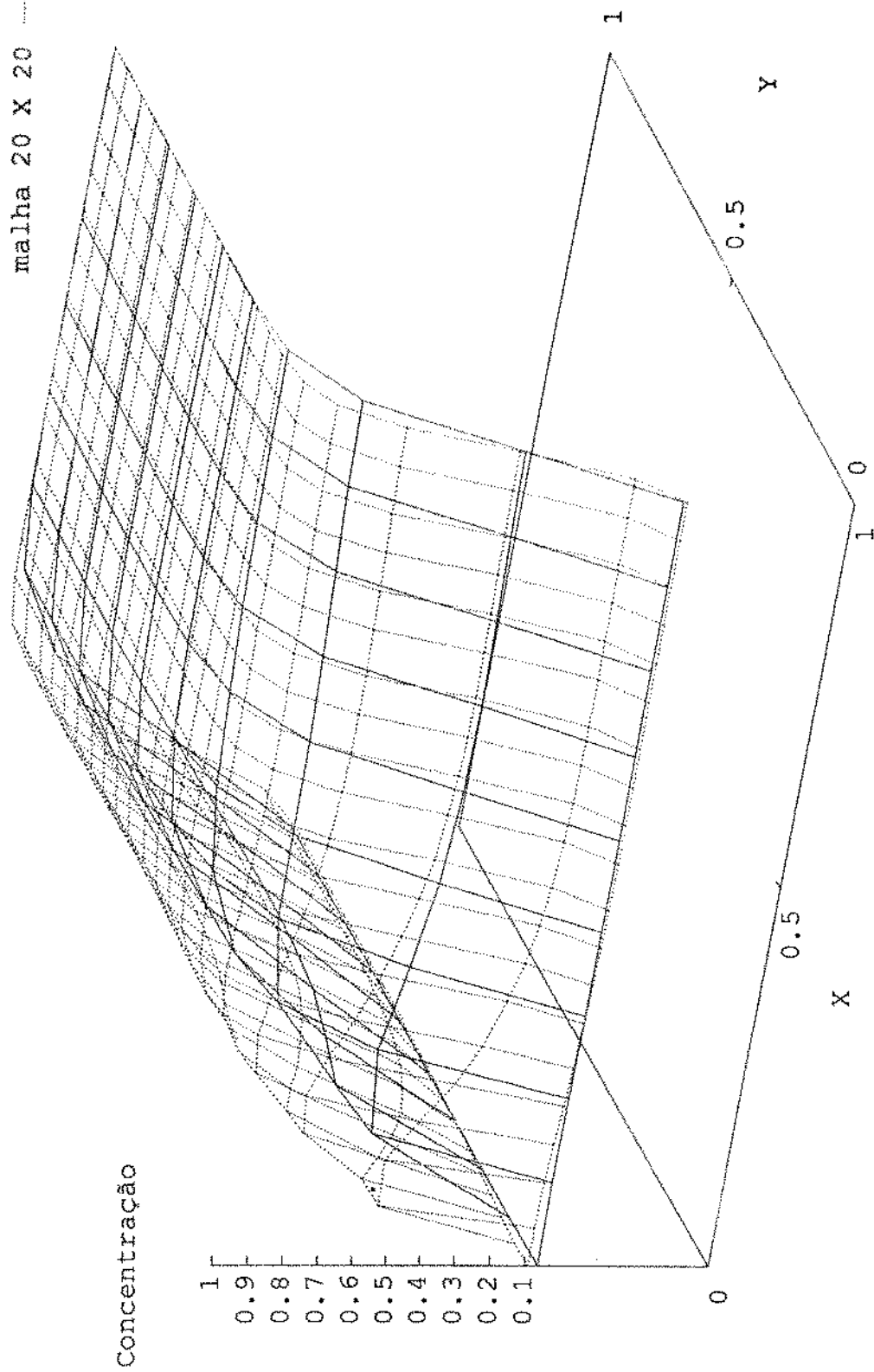


GRÁFICO 53

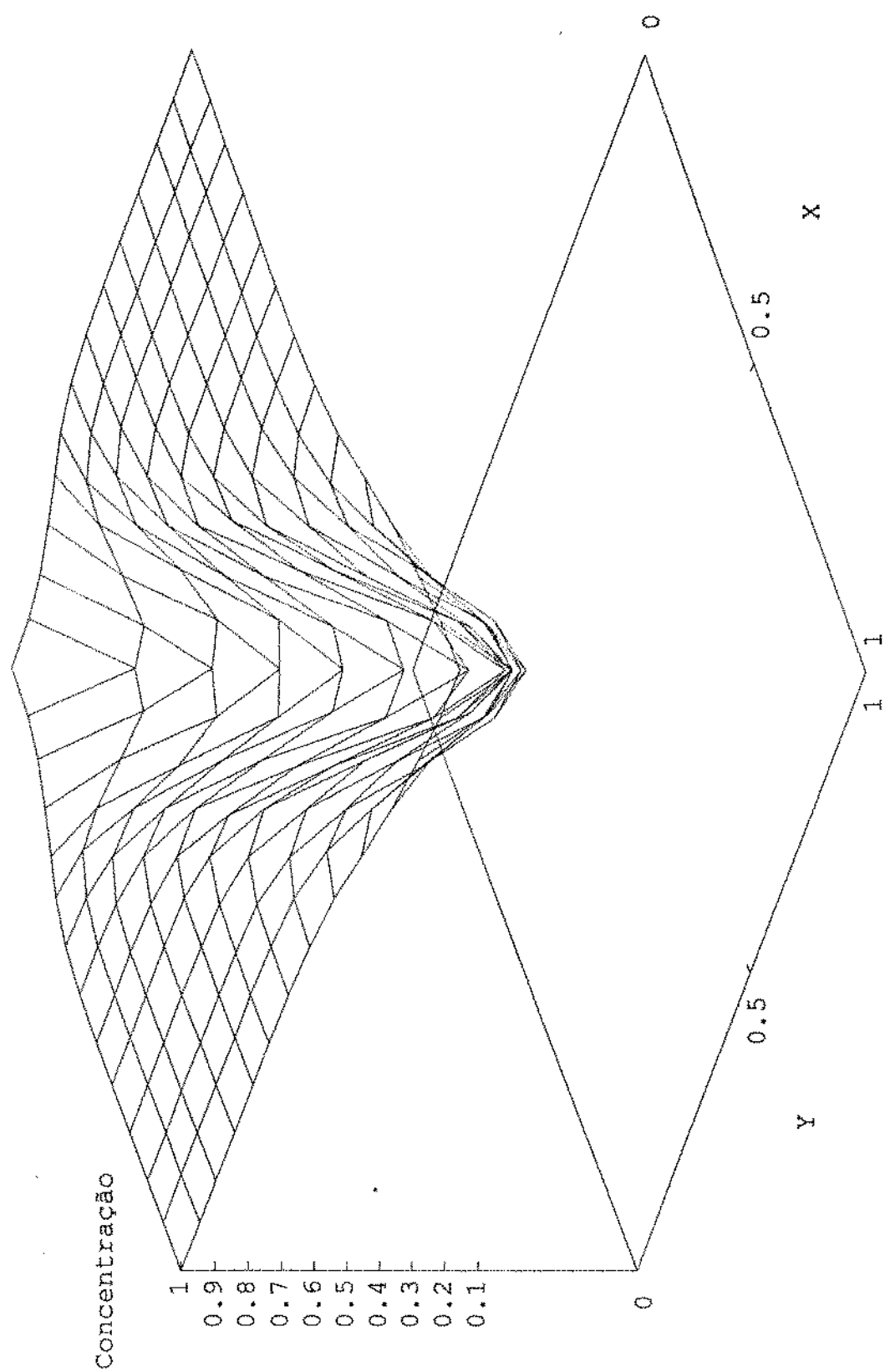


GRÁFICO 54

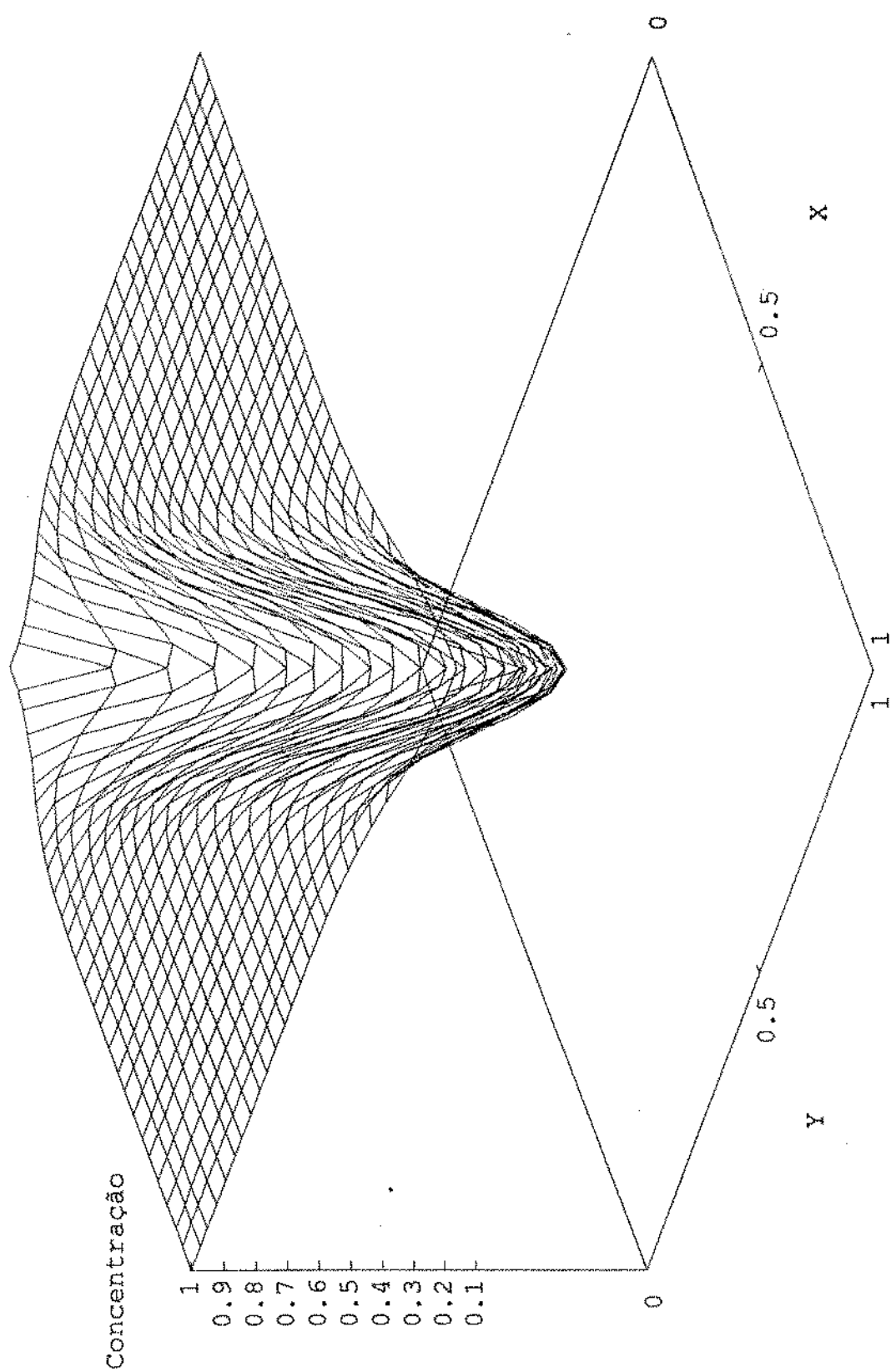


GRÁFICO 55

malha 10 X 10 —
malha 20 X 20

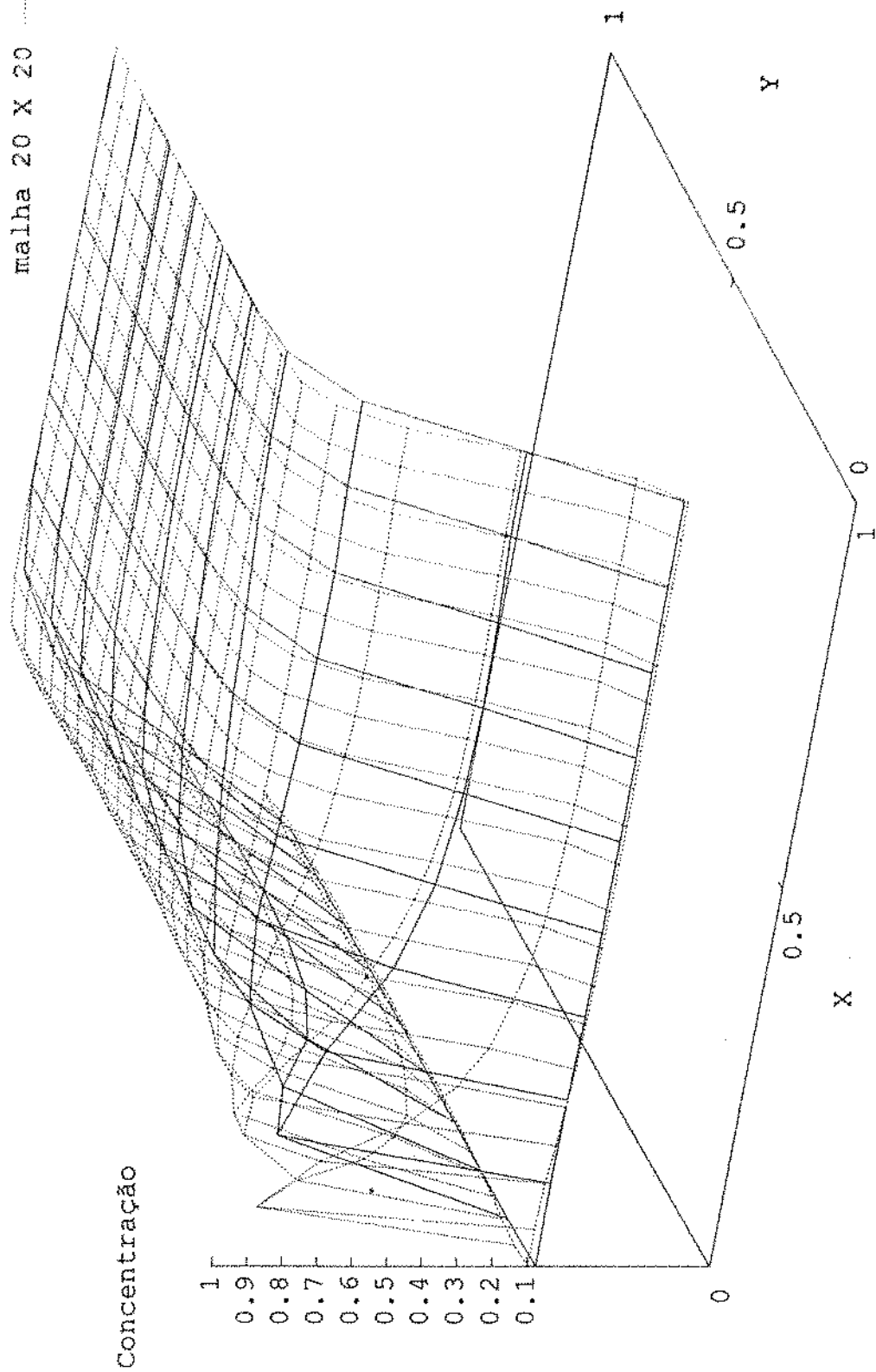


GRÁFICO 56

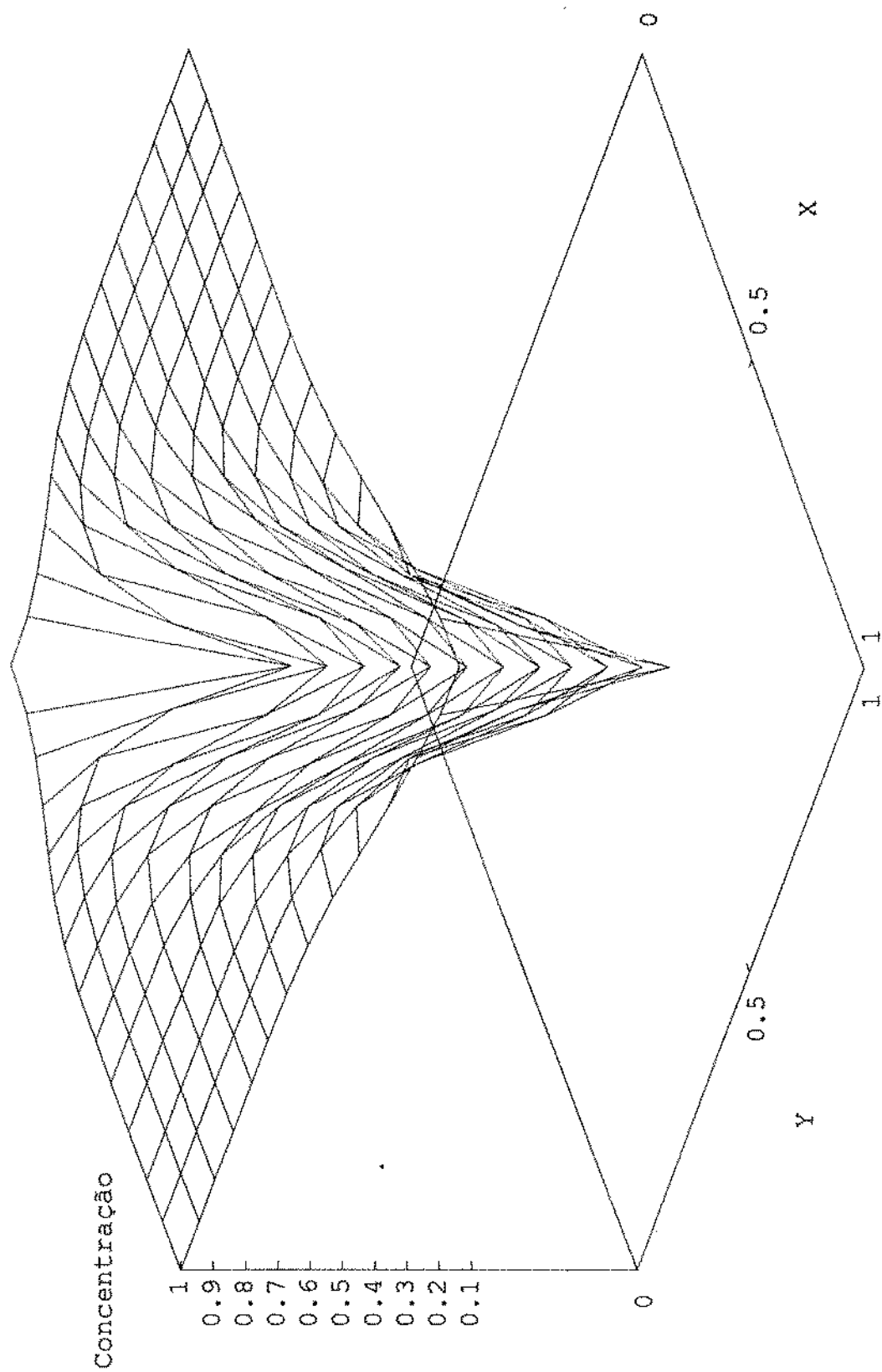


GRÁFICO 57

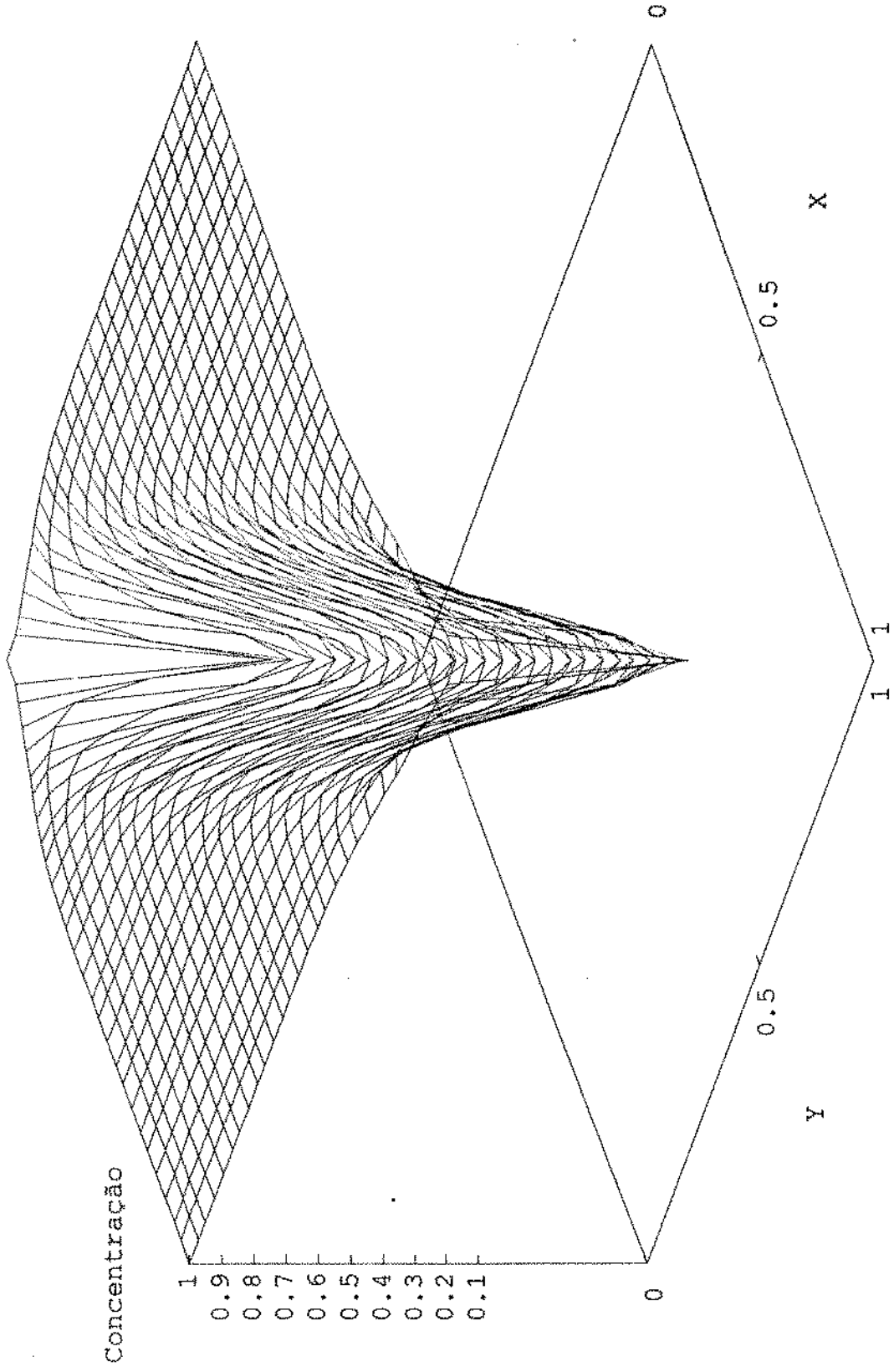


GRÁFICO 58

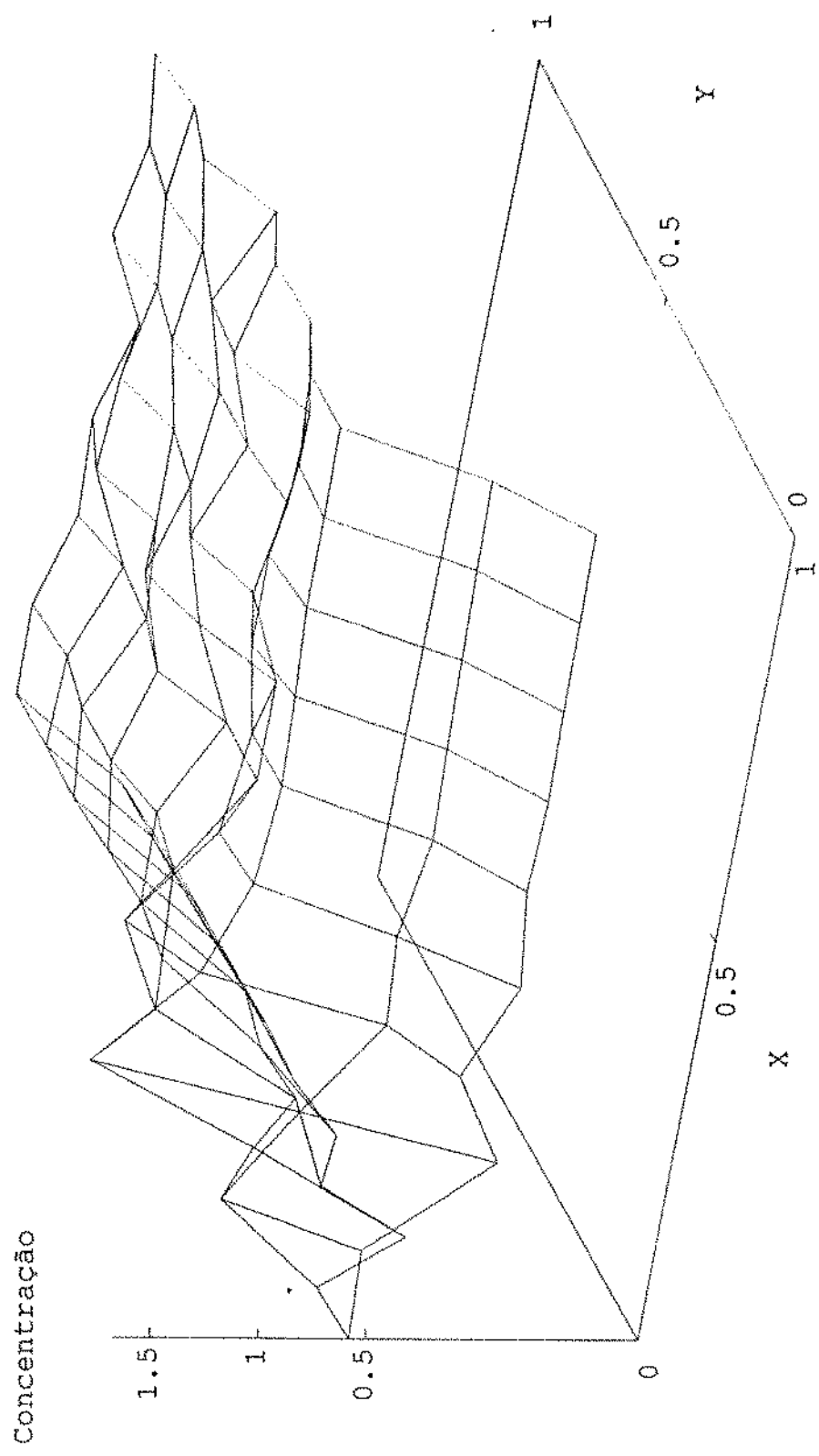


GRÁFICO 59

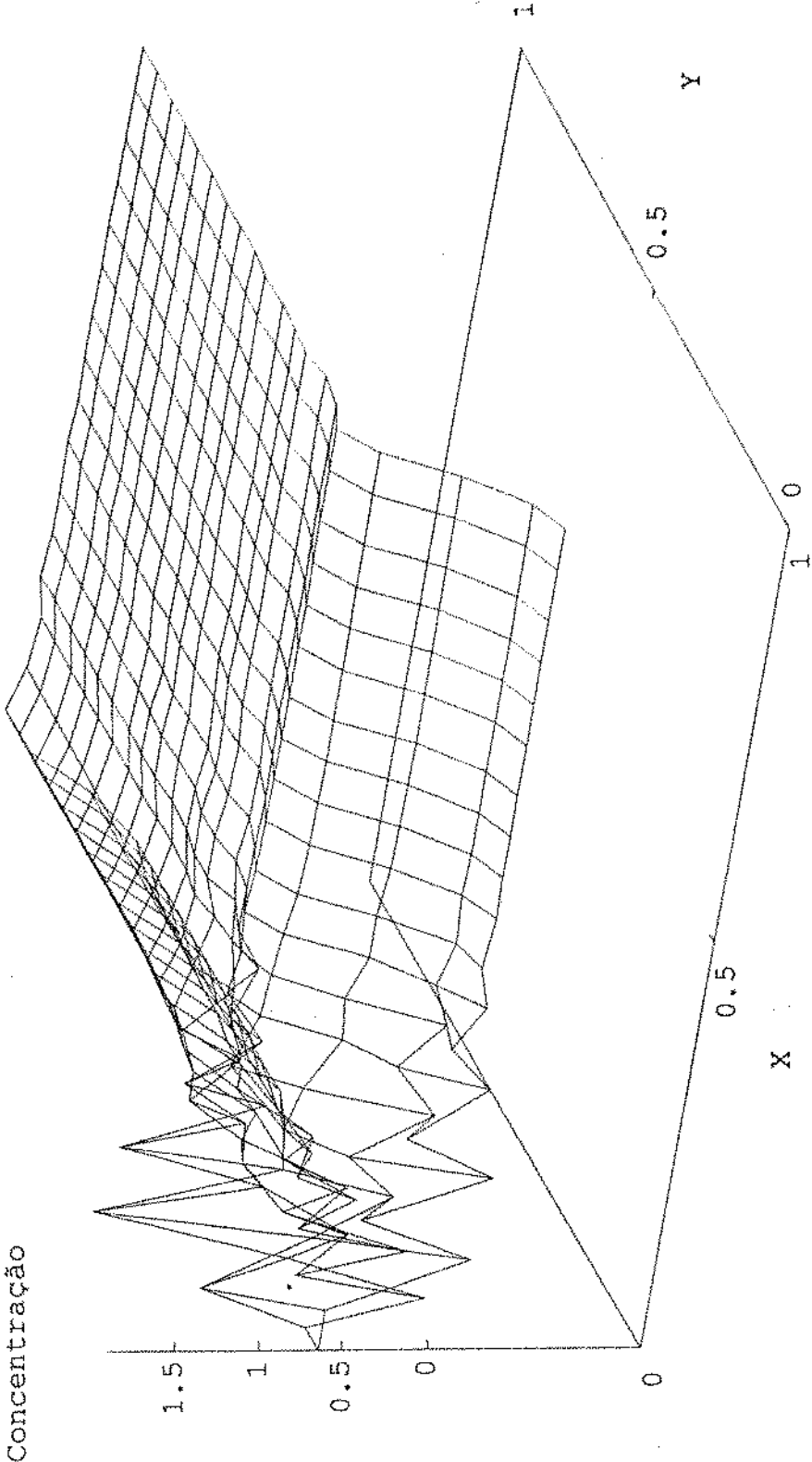


GRÁFICO 60

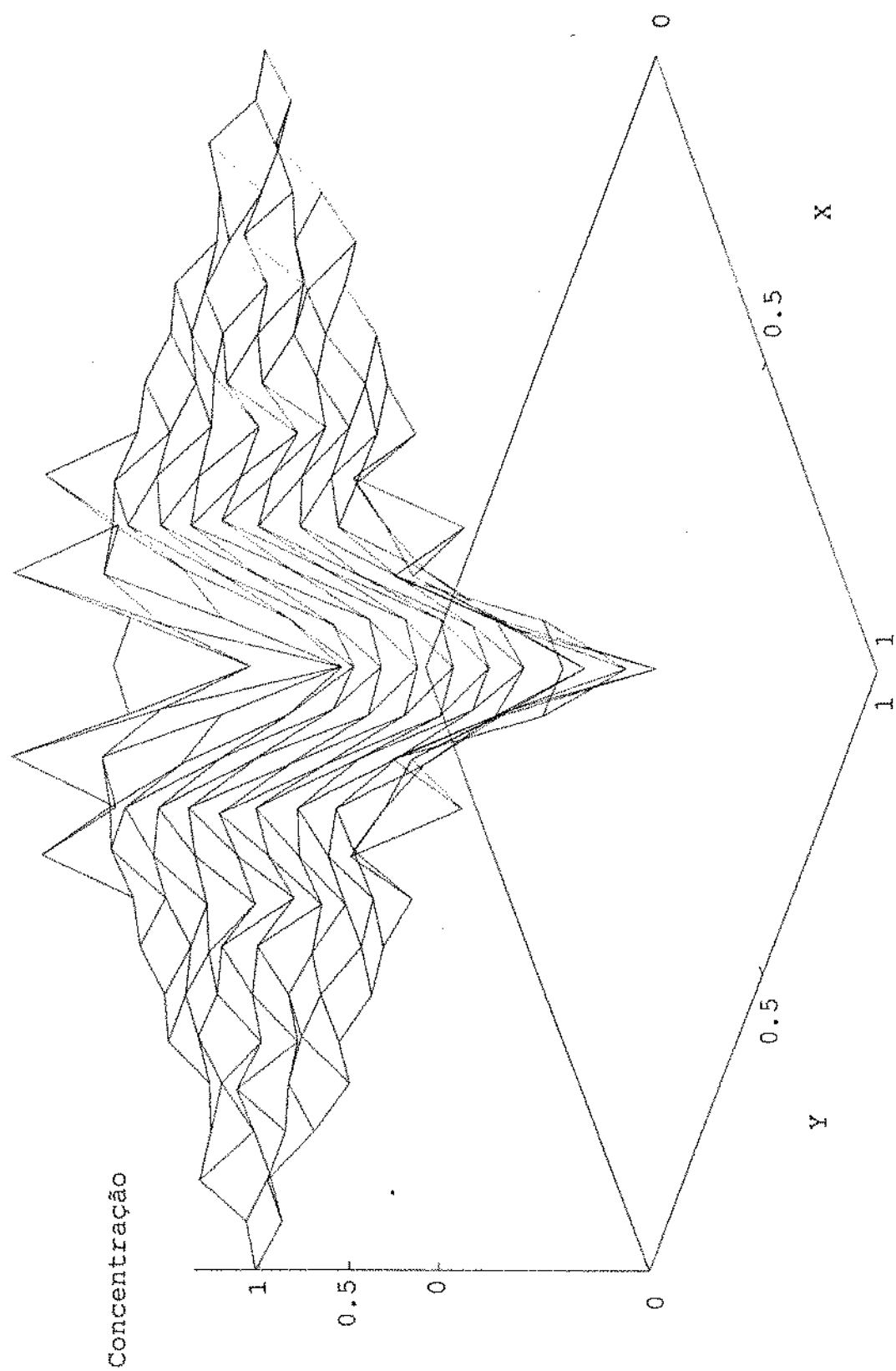


GRÁFICO 61

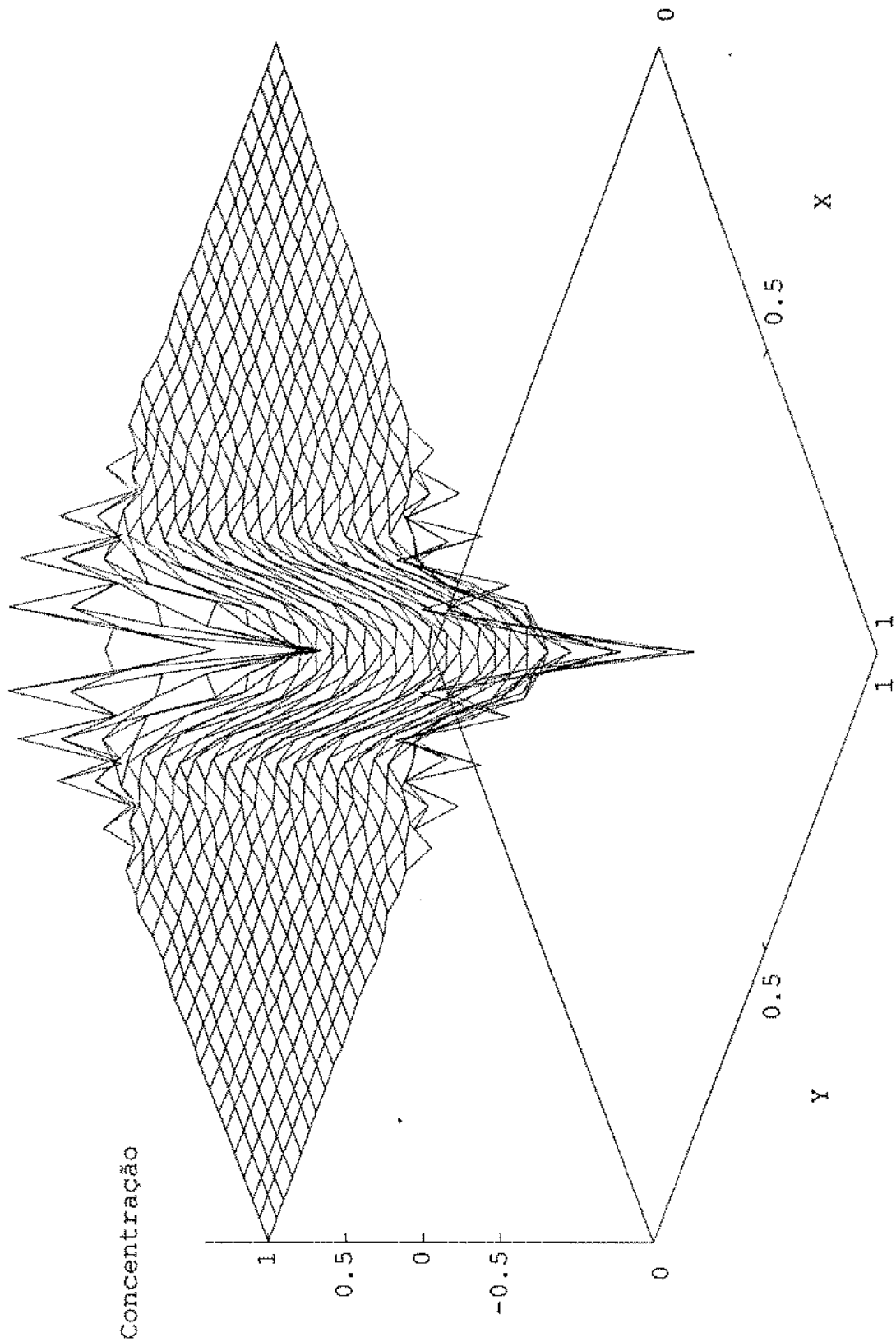


GRÁFICO 62

PECLET 1000 - ESQUEMA EXPONENCIAL EM VOLUMES FINITOS MALHA DIAGONAL

malha 10 X 10 —————
malha 20 X 20 ···········

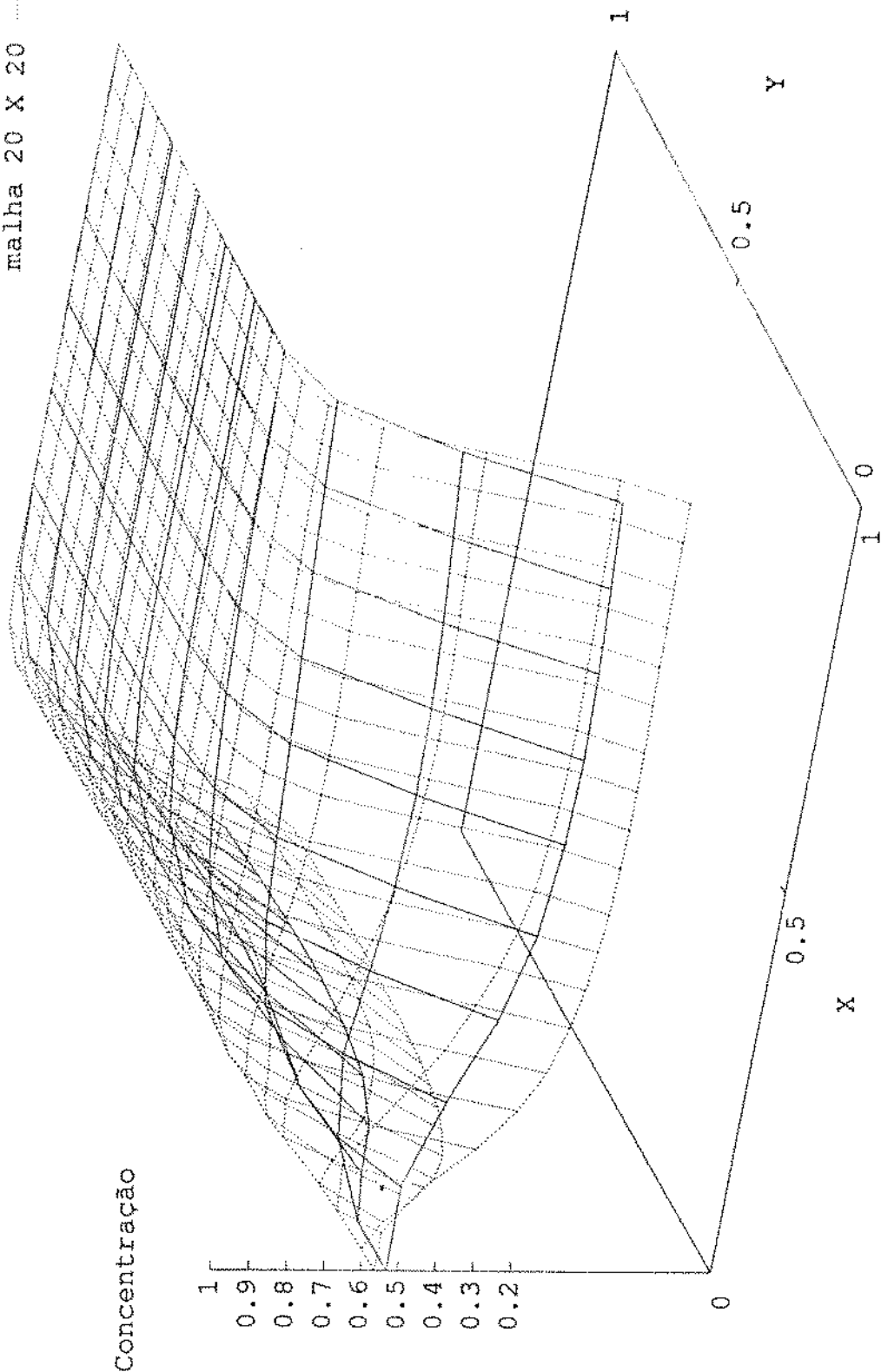


GRÁFICO 63

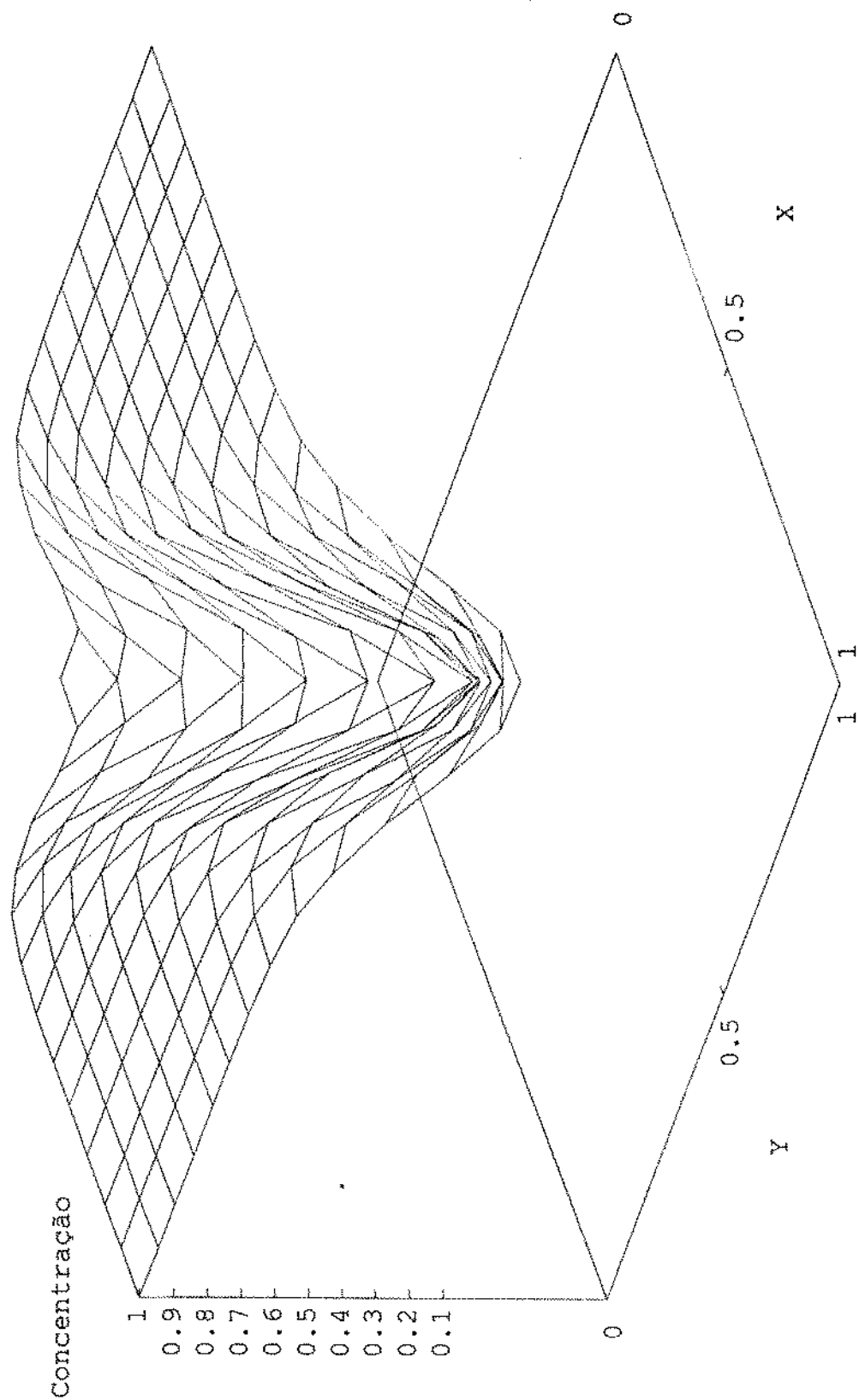


GRÁFICO 64

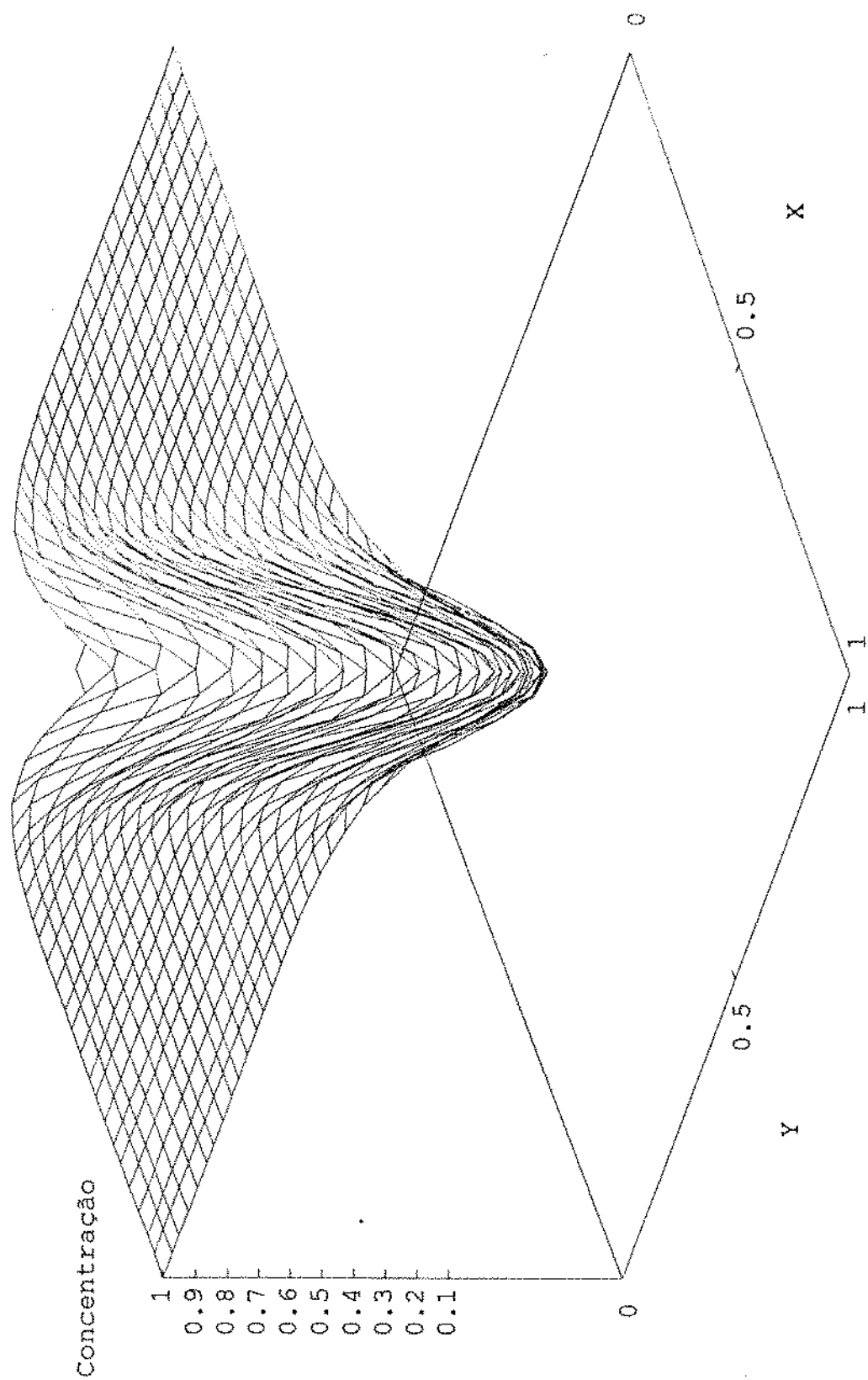


GRÁFICO 65

CAPÍTULO 5

DESLOCAMENTO MISCÍVEL COM DESTRUIÇÃO DE MATÉRIA

A destruição da matéria pode ocorrer devido a capacidade das rochas de absorver o traçador ou contaminante durante o deslocamento miscível, ou devido à vida média das partículas no caso de um traçador radioativo.

Esta simulação é uma extensão natural das simulações até agora apresentadas. Por isto adotou-se o esquema exponencial em volumes finitos com a equação na forma divergente que mostrou resultados satisfatórios.

No modelo matemático inclui-se um termo sorvedouro na equação (5), representando adequadamente o decaimento radioativo, sendo porém uma aproximação para o caso de absorção do contaminante em rocha, não fazendo parte do escopo deste trabalho o detalhamento desta questão.

Então, a equação (5) fica :

$$\phi \frac{\partial C}{\partial t} + \vec{V} \cdot [C\vec{V} - \phi \vec{V}C] = -\frac{QC\delta}{hL^2} - \gamma \cdot C \quad (17)$$

onde γ é o inverso da vida média.

Lembrando as variáveis adimensionais do item 2.4.3, adimensionaliza-se a equação (17). Então :

$$\frac{\partial C}{\partial \bar{a}} + \bar{V} \cdot \left[C\bar{V} - \frac{1}{Pe} \bar{V}C \right] = -\frac{C\delta}{\Delta x \Delta y} - \lambda \cdot C \quad ;$$

sendo agora todas as variáveis adimensionais e $\lambda = \gamma \frac{L^2 h}{Q}$.

Na solução numérica usamos o esquema exponencial em volumes finitos com a equação na forma divergente, explícito no tempo para os valores 100 e 1000 do número de Peclet e malha numérica 10x10, fazendo-se uma varredura na faixa de valores de λ de forma que se observe o comportamento e sensibilidade da solução com este parâmetro.

Observamos no gráfico 66 que para $\lambda=0,001$ tem-se que a solução fica estacionária em zero, ou seja, toda massa de contaminante que entra no domínio é absorvida ou destruída. Já com $\lambda=0$ a solução não se altera, pois efetivamente não se tem destruição de matéria.

No gráfico 67 observa-se que a faixa de λ que afeta a solução muda, sendo de zero a 3.10^{-5} . Portanto, observa-se que com o aumento da número de Peclet a faixa de λ fica mais restrita, ou seja, a solução é mais sensível a este parâmetro.

PECLET 100 - ESQUEMA EXPONENCIAL EM VOLUMES FINITOS COM DESTRUIÇÃO DE MATÉRIA

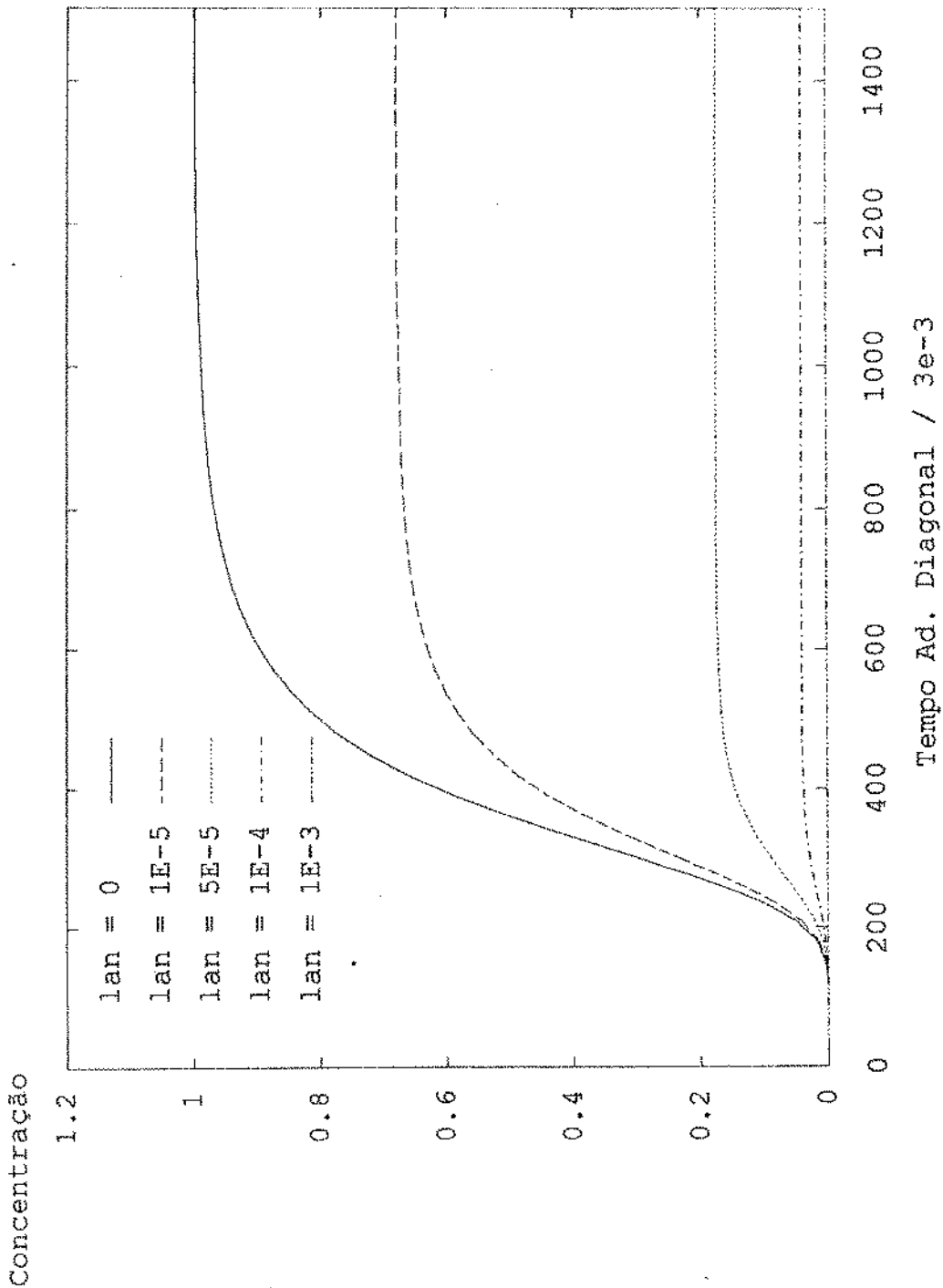


GRÁFICO 66

PECLET 1000 - ESQUEMA EXPONENCIAL EM VOLUMES FINITOS COM DESTRUIÇÃO DE MATÉRIA

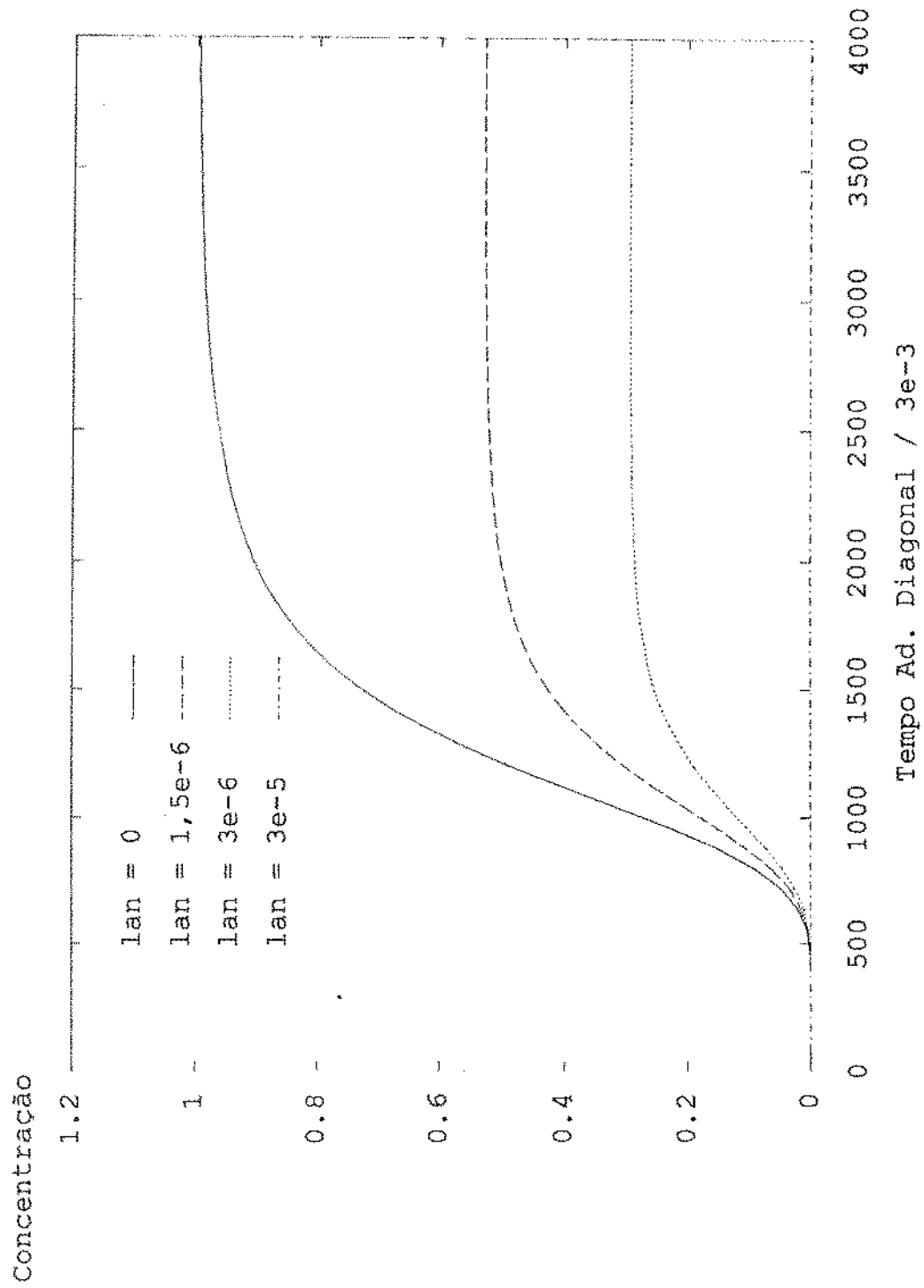


GRÁFICO 67

CAPÍTULO 6

CONCLUSÃO

A análise dos resultados mostram que neste problema a superioridade dos esquemas baseados em volumes finitos com a equação na forma divergente em relação a diferenças finitas com a equação na forma convectiva é grande e evidente, indicando que a propriedade conservatividade do esquema é fundamental neste caso.

Esta conclusão é reforçada pelo fato de apenas quando se usou um esquema conservativo, no ponto dos poços, se obteve uma solução com um mínimo de coerência física com os esquemas em diferenças finitas com a equação na forma convectiva, mostrando que nestes pontos a conservatividade não é apenas superior, mas sim uma necessidade.

O esquema central tanto em diferenças finitas como em volumes finitos mostrou-se inadequado para este problema para altos valores do número de Peclet, pois nos pontos dos poços, mesmo com o refinamento, o valor do número de Peclet celular não diminui, não se conseguindo atingir valores que permitam estabilidade.

Os esquemas exponenciais mostram resultados suaves, porém nos esquemas em diferenças finitas ocorre uma grande dependência da solução com a escolha da malha numérica na região próxima ao poço produtor. A explicação para a falha dos esquema em diferenças finitas nesta região está provavelmente relacionada com o termo fonte variável que se tem no ponto do poço produtor, que é o único diferencial desta região em relação às outras do domínio.

O efeito de orientação de malha mostrou ser muito mais dependente da conservatividade do que da curva interpolante propriamente dita, e não associada à difusão numérica com vinha sendo colocado, mas sim associado à variação do erro com o ângulo entre a malha numérica e o escoamento.

Nos esquemas em diferenças finitas com a equação na forma convectiva, o esquema exponencial rotacional mostrou alguma vantagem sobre o esquema exponencial de Allen-Southwell, indicando que o desenvolvimento de um esquema exponencial rotacional conservativo com esta mesma idéia pode levar a um esquema melhor do que o exponencial comum.

A importância da conservatividade para o método numérico neste problema pode estar associado ao fato de todas as condições de contorno serem de fluxo, pois o método de volumes finitos é basicamente um balanço de fluxos. Esta questão será abordada em trabalho futuro.

REFERÊNCIAS BIBLIOGRÁFICAS

Almeida, J.F.G. (1990) "Simulação de Deslocamento Miscível em Meio Poroso pelo Método dos Elementos Finitos", Tese de Mestrado, Universidade Estadual de Campinas, SP .

Aziz, K. (1979) "Petroleum Reservoir Simulation", Applied Science Publishers LTD, New York.

Baliga, B.R.; Patankar, S.V. (1983) "A Control Volume Finite-Element Method for Two-Dimensional Fluid Flow and Heat Transfer", Numer. Heat Transfer, 6, pp 245-261.

Bird, R.B. ; Stewart, W.E. ; Lighfoot, E.N. (1960) "Transport Phenomena", J. Wiley & Sons, New York.

Busnaina, A.A.; Zheng, X. (1991-a) "A Modified Skew Upwind Scheme for Fluid Flow and Heat Transfer Computations", Appl. Math. Modelling, vol. 15, pp 425-432.

Chow, L.C.; Tien, C.L. (1978) "An Examination of Four Differencing Schemes for Some Elliptic-Type Convection Equations", Numer. Heat Transfer, 1, pp 87-100.

Dake, L.P. (1978) "Fundamental of Reservoir Engineering", Elsevier Scientific Publishing Company, New York.

Figueiredo, J.R. (1992) "Esquema Exponencial Direcional para Equação de Transporte Convectivo-Difusivo Bidimensional", Anais do IV Encontro Nacional de Ciências Térmicas.

Figueiredo, J.R. (1991) "Esquema Exponencial Direcional para Equação de Transporte Convectivo-Difusivo Bidimensional em meio Fluido", Relatório do Convênio 502-Petrobras, Unicamp-Fem-DE.

Figueiredo, J.R. (1988) "Generalização e Aproximação do Esquema Discretizante de Allen para Equações de Transporte em Fluidos", Tese de Doutorado, Universidade Estadual de Campinas, Campinas, SP.

Lake, W.L. (1989) "Enhanced Oil Recovery", Prentice Hall, Englewood Cliffs, New Jersey 07632.

Lake, L.W.; Pope, G.A.; Carey, G.F.; Sepehrnoori, K. (1984) "Isothermal, Multiphase, Multicomponent Fluid Flow in Permeable Media", In Situ, Vol 8, N.1, pp 1-40.

Lillington, J.N. (1981) "A Vector Upstream Differencing Scheme for Problems in Fluid Flow Involving Significant

Source Term in Steady-State Linear Systems", Int. J. Numer. Meth. Fluid Flow, 1, pp 3-16.

Muskat, M. (1937) "The Flow of Homogeneous Fluids Through Porous Media", McGraw-Hill Book Co., Inc., New York.

Patankar, S.V. (1980) "Numerical Heat Transfer and Fluid Flow", Hemisphere Publishing Corporation.

Peaceman, D.W. (1977) "Interpretation of Well-Block Pressures in Numerical Reservoir Simulation", Society of Petroleum Engineers, SPE 6893.

Pinto, A.C.C. (1991) "Esquemas de Alta Resolução para Controle da Dispersão Numérica em Simulação de Reservatórios", Tese de Mestrado, Universidade Estadual de Campinas, Campinas, SP .

Raithby, G.D. (1976) "Skew Upstream Differencing Schemes for Problems Involving Fluid Flow", Computer Meth. Applied Mech. Eng. pp 153-164.

Roache, P.J. (1972) "Computational Fluid Dynamics", Hermosa Publishers, Albuquerque, New Mexico.

Santos, R.L.A.; Corrêa, A.C.F.; Pedrosa Jr., O.A. (1990) "Tratamento Numérico da Equação de Difusão-Convecção para

Modelo Padrão Cinco-Poços", Anais do III Encontro Nacional de Ciências Térmicas.

Shen, Y. ; Bottoni, M. ;Sha, W.T. (1991) "Implementaion of the Flow_Modulated Skew-Upwind Difference Scheme in the Momentum Equation of the COMMIX-1C Program: A First Assessment", Argone National Laboratory, 9700 South Cass Avenue, Argonne, Illinois 60439 .

Smith, G.D. (1965) "Numerical Solution of Partial Differential Equations", Clarendon Press, Oxford.

Wolfshtein, M. (1968) "Numerical Smearing in One-Sided Difference Aproximations to the Equations of Non-Viscous Flow", Report EF/TN/A/#, Imperial College, Mech. Eng. Dept., London.

Zheng, X.; Busnaina, A.A. (1988) "Second Order Skew Upwind Scheme for Fluid Flow and Heat Transfer Computaions", Compt. Eng. 1988 Proc. Publ. by ASME, New York, NY, USA, pp 423-435.

APÊNDICE A - LISTAGEM DO PROGRAMA FONTE

Esquema Exponencial Rotacional de Seis Pontos

```
program concentracao;
```

```
{
  Programa que calcula o campo de pressoes , de velocidades
  e de concentracoes. O campo de concentracoes e' calculado
  explicitamente. O esquema usado e' o convectivo (d.f.) e a curva interpolante e' a
  exponencial rotacional proposta por Figueiredo ( convenio Petrobras ). Todas as
  variaveis dependentes sao avaliadas nos mesmos pontos !
  Neste programa estou usando uma formulação conservativa nos pontos dos pocos !!
  A malha usada e' a diagonal !!
}
```

```
const
```

```
  tammaxvet = 100;
  delt1 = 6e-4;
  delt = 6e-4;
  numpts = 20;
  peclet = 100;
  pi = 3.14159;
```

```
type
```

```
  vetortdma = array[1..tammaxvet] of real;
```

```
procedure tdma( var x : vetortdma ; n : integer ; a,b,c ,k : vetortdma);
```

```
{ X e o vetor que retornara os resultados ----- }
{ n e o numero de equacoes do sistema }
{ a,b,c sao os vetores que definem a matriz tri-diagonal .....}
{ k e o vetor que armazena a parte nao-homogenea das equacoes }
```

```
var
```

```
  m : real;
  i : integer;
```

```
begin
```

```
  for i := 2 to n do
```

```
    begin
```

```
      m := -a[i] / b[i-1];
```

```
      b[i] := b[i] + m * c[i-1];
```

```
      k[i] := k[i] + m * k[i-1];
```

```
    end;
```

```
    x[n] := k[n] / b[n];
```

```
    for i := n-1 downto 1 do
```

```
      x[i] := (k[i] - c[i] * x[i+1]) / b[i];
```

```

end;

procedure calcula_pis( var pin,pis,pie,piw,pinc : real; var inc,jnc : integer;
                      pe,delx,dely,alfa : real);

var
  cosalfa,sinalfa,epy,epx,ee,ew,en,
  es,eemt,delpex,delpy,nff,dff,ff: real;
  delsw,delse,delnw,delne : integer;
{ Calulo dos Es e Pis }
begin

  cosalfa := cos(alfa);
  sinalfa := sin(alfa);
  delsw := 0;
  delse := 0;
  delnw := 0;
  delne := 0;
  epy := exp( pe * dely * sinalfa );
  epx := exp( pe * delx * cosalfa );
  ee := epx - 1;
  ew := 1 / epx - 1;
  en := epy - 1;
  es := 1 / epy - 1;
  if ( cosalfa > 0 ) and ( sinalfa >= 0 ) then
    begin
      delsw := 1;
      eemt := es * ew
    end
  else if ( cosalfa <= 0 ) and ( sinalfa > 0 ) then
    begin
      delse := 1;
      eemt := -es * ee
    end
  else if ( cosalfa < 0 ) and ( sinalfa <= 0 ) then
    begin
      delne := 1;
      eemt := en * ee
    end
  else
    begin
      delnw := 1;
      eemt := en * ew
    end
  end;

```

```

inc := -delsw - delnw + delse + delne;
jnc := -delsw - delse + delne + delnw;
delpex := pe * cosalfa * delx;
delpey := pe * sinalfa * dely;
inc := -delsw - delnw + delse + delne;
jnc := -delsw - delse + delne + delnw;
if abs(pe) >= 1e-15 then
begin
  nff := ( (ee - ew) * delpex / 2 - (ee + ew) ) * dely / delx +
    ( (en - es) * delpey / 2 - (en + es) ) * delx / dely;
  dff := ( (ee + ew) * cosalfa * cosalfa * dely / delx +
    (en + es) * sinalfa * sinalfa * delx / dely +
    eemt * 2 * sinalfa * cosalfa );
  end
else
begin
  nff := -sqr(pe) * ( sqr(delx) * sqr(cosalfa) * sqr(cosalfa) +
    sqr(dely) * sqr(sinalfa) * sqr(sinalfa) ) / 12;
  dff := 1 - pe * sqr(sinalfa) * sqr(cosalfa) *
    ( delx * abs(cosalfa) + dely * abs(sinalfa) );
end;
ff := nff/dff;
pinc := ff * 2 * sinalfa * cosalfa * (delsw - delse - delnw + delne);
pie := ( 1 - delpex / 2 + ff * cosalfa * cosalfa ) * ( dely / delx ) +
  ( -delse - delne ) * pinc;
piw := ( 1 + delpex / 2 + ff * cosalfa * cosalfa ) * ( dely / delx ) +
  ( -delsw - delnw ) * pinc;
pin := ( 1 - delpey / 2 + ff * sinalfa * sinalfa ) * ( delx / dely ) +
  ( -delnw - delne ) * pinc;
pis := ( 1 + delpey / 2 + ff * sinalfa * sinalfa ) * ( delx / dely ) +
  ( -delsw - delse ) * pinc;
end;

```

{ Fim do calculo dos Es e Pis }

```

var
  i,j,k,z,delta,inc,jnc: integer;
  difmax,delx,dely,pin,pis,pie,piw,pinc,p,beta,alfa,vn,vs,ve,vw : real;
  u,v,mod_vel : array[1..numpts,1..numpts] of real;
  f,fold,conc : array[0..(numpts + 1) , 0..(numpts + 1)] of real;
  a,b,c,d,x : vetortdma;

```

```

resultados,conc_exp,eflu : text;

begin

  delx := 1 / ( numpts -1 );
  dely := delx;
  rewrite(resultados,'pveldfrodiag100m20.dat');
  { Inicializar a matriz }
  for i:=0 to (numpts + 1) do
  for j:= 0 to (numpts + 1) do
    f[i,j] := 1;

  { Iteracao completa do ADI }
  k := 1;
  repeat

  { Parte implicita em x }
  j := 1;
  repeat
    for i:=1 to numpts do
      begin
        a[i] := 1;
        b[i] := -2 - sqr(delx) / delt1;
        c[i] := 1 ;
        d[i] := ( 2 - sqr(delx) / delt1 ) * f[i,j] - f[i,j-1] - f[i,j+1];
      end;
    if j=1 then d[1] := d[1] - 1;
    if j=numpts then d[numpts] := d[numpts] + 1;
    c[1] := c[1] + 1;
    a[numpts] := a[numpts] + 1;
    tdma(x,numpts,a,b,c,d);
    for i:=1 to numpts do
      begin
        fold[i,j] := f[i,j];
        f[i,j] := x[i];
      {   writeln(i:4,j:4,' funcao = ',f[i,j]:8:5); }
      end;
      j := j + 1;
    {   writeln(' parte implicita em x, linha = ',j-1); }
  until j = (numpts + 1);

  { Condição de simetria }

  for i:=1 to numpts do
    begin

```

```

    f[i,0] := f[i,2];
    f[i,numpts + 1] := f[i,numpts - 1];
    f[0,i] := f[2,i];
    f[numpts + 1,i] := f[numpts - 1,i]
end;

{ Fim da parte implicita em x }

{ Comeco da parte implicita em y }

i := 1;
repeat
  for j:=1 to numpts do
    begin
      a[j] := 1;
      b[j] := -2 - sqr(deltx) / delt1;
      c[j] := 1;
      d[j] := ( 2 - sqr(deltx) / delt1 ) * f[i,j] - f[i+1,j] - f[i-1,j];
    end;
    if i=1 then d[1] := d[1] - 1;
    if i=numpts then d[numpts] := d[numpts] + 1;
    c[1] := c[1] + 1;
    a[numpts] := a[numpts] + 1;
    tdma(x,numpts,a,b,c,d);
    for j:=1 to numpts do
      begin
        fold[i,j] := f[i,j];
        f[i,j] := x[j];
      end;
    {   writeln(i:4,j:4,' funcao = ',f[i,j]:8:5); }
    {   writeln(' parte implicita em y, coluna = ',i); }
    i := i + 1;
  until i = numpts + 1;

  { Condição de simetria }

  for i:=1 to numpts do
    begin
      f[i,0] := f[i,2];
      f[i,numpts + 1] := f[i,numpts - 1];
      f[0,i] := f[2,i];
      f[numpts + 1,i] := f[numpts - 1,i]
    end;

```

```

{ Fim da parte implicita em y }

difmax := 0;
for i:=1 to numpts do
  for j:= 1 to numpts do
    if difmax < abs( fold[i,j] - f[i,j] ) then
      difmax := abs( fold[i,j] - f[i,j] );
  {   writeln("");
    writeln(' iteracao numero ',k);
    writeln(""); }
  k := k + 1;
until difmax < 1e-9;

{ Fim da iteracao completa do ADI }

{ CALCULO DO CAMPO DE VELOCIDADES A PARTIR DO CAMPO DE
PRESSOES }

for i:=1 to numpts do
  for j:=1 to numpts do
    begin
      u[i,j] := ( f[i+1,j] - f[i-1,j] ) * (numpts - 1) / 2;
      v[i,j] := ( f[i,j+1] - f[i,j-1] ) * (numpts - 1) / 2;
      mod_vel[i,j] := sqrt( sqr( u[i,j] ) + sqr( v[i,j] ) )
    end;

{ IMPRESSAO DOS RESULTADOS EM FORMA MATRICIAL }

{ IMPRESSAO DO CAMPO DE PRESSOES }

writeln(resultados,' CAMPO DE PRESSOES ');
write(resultados,' ');
for i:= 1 to numpts do
  write(resultados,' ',i:4);
for j:= 1 to numpts do
  begin
    writeln(resultados);
    write(resultados,j:2);
    for i:=1 to numpts do
      write(resultados,' ',f[i,j]:7:4);
    end;

{ IMPRESSAO DO CAMPO DE VELOCIDADES U }

writeln(resultados,"");

```

```

writeln(resultados,"");
writeln(resultados,' CAMPO DE VELOCIDADES U ');
write(resultados,' ');
for i:= 1 to numpts do
  write(resultados,' ',i:4);
for j:= 1 to numpts do
begin
  writeln(resultados);
  write(resultados,j:2);
  for i:=1 to numpts do
    write(resultados,' ',u[i,j]:7:4);
  end;

{ IMPRESSAO DO CAMPO DE VELOCIDADES V }

writeln(resultados,"");
writeln(resultados,"");
writeln(resultados,' CAMPO DE VELOCIDADES V ');
write(resultados,' ');
for i:= 1 to numpts do
  write(resultados,' ',i:4);
for j:= 1 to numpts do
begin
  writeln(resultados);
  write(resultados,j:2);
  for i:=1 to numpts do
    write(resultados,' ',v[i,j]:7:4);
  end;

{ IMPRESSAO DOS RESULTADOS NA FORMA (P. - P.CELULAR DO POCO) X (
RAIO/DELTA X ) }

{
for i:=1 to numpts do
for j:=1 to numpts do
  writeln( resultados , sqrt( sqr(i-1) + sqr(j-1) ) :6:3 , -(f[i,j] - f[1,1]):9:5 );
}

close(resultados);

{ INICIO DO CALCULO DO CAMPO DE CONCENTRACOES }

```

```

rewrite(eflu,'efludfrodiag100m20.dat');
{ rewrite(conc_exp,'codfrodiag100m20.dat');}
{ Inicializar a matriz }
for i:=0 to (numpts + 1) do
for j:=0 to (numpts + 1) do
  fold[i,j] := 0;
fold[numpts,numpts] := 0;
beta := delx * dely * peclet / delt;
for z:=1 to 50 do
begin
for k:= 1 to 500 do
begin
for i:=1 to numpts do
for j:=1 to numpts do
begin

  p := sqrt( sqr(u[i,j]) + sqr(v[i,j]) ) * peclet;

  if u[i,j]=0 then
    if v[i,j]>0 then alfa := pi / 2 else alfa := 3 * pi / 2
  else
    alfa := arctan( v[i,j] / u[i,j] );
  if u[i,j]<0 then alfa := alfa + pi; { verificar se o arctan trabalha na faixa de -pi/2 a pi/2 }

  calcula_pis( pin,pis,pie,piw,pinc,inc,jnc,p,delx,dely,alfa );

  conc[i,j] := fold[i,j] + ( - fold[i,j] * ( pin + pis + pie + piw + pinc ) +
    fold[i-1,j] * ( piw ) +
    fold[i+1,j] * ( pie ) +
    fold[i,j-1] * ( pis ) +
    fold[i,j+1] * ( pin ) +
    fold[i + inc,j + jnc] * ( pinc ) ) / beta ;

  if (i=1) and (j=1) then
  begin

{ Equacao para o ponto do poco nz forma divergente !! }

    vn := ( f[1,2] - f[1,1] ) / delx;
    vs := - vn ;
    ve := ( f[2,1] - f[1,1] ) / delx;
    vw := - ve ;

```



```

    conc[i,j] := conc[i,j] + sqr( numpts - 1 ) * delt ;
end;

end;

{ Condicao de simetria }

for i:=1 to numpts do
begin
    conc[i,0] := conc[i,2];
    conc[i,numpts + 1] := conc[i,numpts - 1];
    conc[0,i] := conc[2,i];
    conc[numpts + 1,i] := conc[numpts - 1,i]
end;
for i:=1 to numpts do
for j:=1 to numpts do
begin
{   conc[i,j] := conc[i,j] / conc[numpts,numpts]; }
    fold := conc
end;
end;

{ IMPRESSAO DA CONCENTRACAO DO EFLUENTE DE KMAX EM KMAX
VEZES }

writeln(eflu, (z * 500) * 6e-2 :5:0,conc[1,1]:7:4);

{ IMPRESSAO DO CAMPO DE CONCENTRACOES }
{
    writeln(conc_exp,' ');
    writeln(conc_exp,' iteracao numero ',k * z);
    writeln(conc_exp,' ');
    writeln(conc_exp,' CAMPO DE CONCENTRACOES ');
    write(conc_exp,' ');
    for i:= 1 to numpts do
        write(conc_exp,' ',i:4);
    for j:= 1 to numpts do
    begin
        writeln(conc_exp,' ');
        write(conc_exp,j:2);

```

```

    for i:=1 to numpts do
    {   write(conc_exp,' ',conc[i,j] / conc[numpts,numpts]:7:4); }
    {   write(conc_exp,' ',conc[i,j]:7:4);
    end;
    writeln(conc_exp,' ');
    }
{ FIM DA IMPRESSAO }

end;
{ close(conc_exp); }
close(eflu);
end.

```