

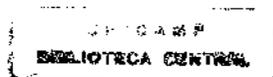
Tese de Doutorado

Escoamentos miscíveis em formações heterogêneas:
novos métodos numéricos e modelagem estocástica.

César Guilherme de Almeida

Campinas, 24 de janeiro de 2000

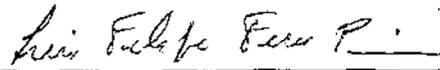
Pós-Graduação em Matemática Aplicada



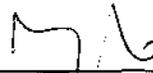
Escoamentos miscíveis em formações heterogêneas: novos métodos numéricos e modelagem estocástica.

Este exemplar corresponde à redação final da tese devidamente corrigida e defendida por César Guilherme de Almeida e aprovada pela comissão julgadora.

Campinas, 11 de janeiro de 2000



Prof. Dr.: Luis Felipe Feres Pereira
Orientador



Prof. Dr.: Milton da Costa Lopes
Filho
Co-orientador

Banca examinadora:

- 1 Luis Felipe Feres Pereira
- 2 Maria Cristina de Castro Cunha
- 3 Antônio Cláudio de França Corrêa
- 4 Márcio Arab Murad
- 5 Gastão de Almeida Braga

Tese apresentada ao Instituto de Matemática, Estatística e Computação - Científica, UNICAMP, como requisito parcial para a obtenção do Título de DOUTOR em Matemática Aplicada.

UNIDADE	B. C.
N.º CHAMADA:	T/UNICAMP
	AL64e
V.	Ex.
TOMPO BU/	40853
PROG.	2F8100
C	<input type="checkbox"/>
D	<input checked="" type="checkbox"/>
PREÇO	311,00
DATA	04104100
N.º CPD	

CM-00135159-1

FICHA CATALOGRÁFICA ELABORADA PELA BIBLIOTECA DO IMECC DA UNICAMP

Almeida, César Guilherme de

AL64e Escoamentos miscíveis em formações heterogêneas: novos métodos numéricos e modelagem estocástica / César Guilherme de Almeida – Campinas, [S.P. :s.n.], 2000.

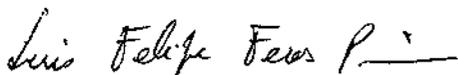
Orientador : Luis Felipe Feres Pereira

Tese (doutorado) - Universidade Estadual de Campinas, Instituto de Matemática, Estatística e Computação Científica.

1. Materiais porosos. 2. Métodos numéricos. 3. Dinâmica dos fluidos. 4. Métodos dos elementos finitos. I. Pereira, Luis Felipe Feres. II. Universidade Estadual de Campinas. Instituto de Matemática, Estatística e Computação Científica. III. Título.

Tese de Doutorado defendida em 11 de janeiro de 2000

e aprovada Pela Banca Examinadora composta pelos Profs. Drs.



Prof (a). Dr (a). LUIS FELIPE FERES PEREIRA



Prof (a). Dr (a). MARIA CRISTINA DE CASTRO CUNHA



Prof (a). Dr (a). ANTÔNIO CLÁUDIO DE FRANÇA CORRÊA



Prof (a). Dr (a). MÁRCIO ARAB MURAD



Prof (a). Dr (a). GASTÃO DE ALMEIDA BRAGA

Esta tese é dedicada à minha família: meus filhos e minha mulher Cláudia Valéria, mãe das duas figurinhas carimbadas: o Gabriel e a Janaína. E que fique aqui registrado: “É família de montão!”.

Também dedico esta aos meus pais, que, ao menos geneticamente, influenciaram na escolha de minha profissão, que é exercida com paixão: prazer e sofrimento, sofrimento e prazer.

Incluo uma dedicatória especial, por não ser usual, ao meu cão pastor, Ébano (capa preta). O melhor pastor que conheço: não dá sermões; muitas reflexões foram feitas caminhando ao seu lado.

O saber esperar é o que nos leva ao triunfo. A vida é uma breve espera. Depois, a eternidade.

Livro dos Provérbios de CGA (provérbio único, no momento)

Resumo

Nesta tese estudamos escoamentos miscíveis incompressíveis em meios porosos rígidos e heterogêneos. Na primeira parte desta tese consideramos as simulações numéricas deste tipo de escoamento e novos métodos numéricos são propostos, implementados e comparados com outros procedimentos numéricos já conhecidos. Na segunda parte deste trabalho estudamos a dinâmica que governa o processo de mistura macroscópica (a macrodispersão) na escala de campo. Novos resultados foram obtidos para problemas lineares e não lineares.

Os principais resultados da primeira parte deste trabalho são:

- Formulação de novos métodos do tipo Euleriano-Lagrangiano para a discretização temporal de equações do tipo transporte-difusão (equações associadas à concentração de um dos fluidos). Introduzimos o Método Modificado das Características com Ajuste de Massa no Passo de Transporte (*MMOCOA*) para escoamentos miscíveis. Este método permite uma conservação global de massa ao final de um estágio de transporte seguido por um passo de difusão. Este procedimento computacional é tão competitivo quanto o Método Modificado das Características (*MMOC*), que não conserva a massa dos fluidos como uma identidade. Em seguida introduzimos o Método Euleriano-Lagrangiano com Conservação Local de Massa (*LCELM*). Este método possui um estágio de transporte localmente conservativo, baseado na construção numérica de tubos no espaço tempo onde se dá o transporte dos fluidos.
- Formulação de novas técnicas de decomposição de domínios para equações elípticas de segunda ordem. Elementos finitos mistos e híbridos são usados para a discretização espacial destas equações. Os novos procedimentos de decomposição são propostos para tratar dos problemas de álgebra linear inerentes a cada passo de tempo de simulações numéricas. Estes procedimentos são naturalmente paralelizáveis. Introduzimos o Método dos Gradientes Conjugados com Pré Condicionamento, combinado com condições de interface (entre os subdomínios) do tipo Robin

(GCP-Robin). Este método usa a técnica de superposição entre os subdomínios e é empregado no cálculo do campo de velocidades que aparece nas equações que governam o escoamento. Verificamos a eficiência do esquema GCP-Robin comparando as simulações numéricas deste método com as do GCP usual. Para resolvermos o estágio difusivo da equação da concentração nós introduzimos um outro método numérico. Este método, de implementação simples, não apresenta superposição entre os subdomínios e é baseado em iterações por faces dos elementos.

Um novo simulador computacional, que faz uso dos novos métodos numéricos descritos acima, foi desenvolvido e utilizado na investigação do escoamento miscível em problemas na escala de campo. Este é o objeto da segunda parte deste trabalho. Os resultados abaixo foram estabelecidos por meio de uma metodologia que combina simulações numéricas com alta resolução e uma abordagem estocástica para a modelagem das propriedades geológicas dos meios porosos:

- Mostramos que a presença da dispersão hidrodinâmica no problema do traçador passivo não altera as leis de escala que governam o comportamento assintótico (no tempo) do crescimento da região de mistura.
- Mostramos que, dependendo da importância relativa entre as heterogeneidades geológicas e a não linearidade presente nas equações que modelam o escoamento, diferentes regimes de mistura podem ocorrer. Para formações rochosas muito heterogêneas determinamos que o escoamento miscível não linear apresenta as mesmas leis de escala, para o crescimento da região de mistura, que as leis já conhecidas para o problema linear. A importância destes resultados no contexto do problema de transferência de escalas para fluxos em meios porosos é discutida.

Abstract

In this thesis we study incompressible miscible displacement in rigid, heterogeneous porous media. In the first part of this thesis we consider numerical simulations of this type of displacement and new numerical methods are proposed, implemented and compared with known numerical procedures. In the second part of this work we study the dynamics of the growth of the size of the region where fluids mix macroscopically (the macrodispersion) in large scale (field) problems. New results have been obtained for both linear and nonlinear problems.

The most important results of the first part of this thesis are:

- Formulation of new Eulerian-Lagrangian methods for the time discretization of transport-diffusion equations (related to the concentration of one fluid in the mixture). We introduce the Modified Method of Characteristics with Adjusted Advection (*MMOCAA*) specifically designed for miscible displacement problems, allowing for a globally mass conserving procedure which inherits the computational competitiveness of the standard Modified Method of Characteristics (*MMOC*). The *MMOC* does not conserve the mass of fluids as an identity. Next, we introduce the Locally Conservative Eulerian-Lagrangian Method (*LCELM*). This method has a locally conservative transport step which is based in the numerical construction of space-time tubes for the transport of fluids.
- Formulation of new domain decomposition techniques for elliptic equations of second order. Hybridized mixed finite elements are used for the spatial discretization of these equations. The new techniques are proposed to handle in a naturally parallelizable fashion the linear algebraic problems arising at each time step of a simulation. The Robin-PCG domain decomposition method (Robin interface condition combined with the pre-conditioned Conjugated Gradient method) with overlap among

subdomains is proposed for the velocity field computation. The effectiveness of the Robin-PCG scheme is illustrated by numerical comparisons with the standard PCG method. A non-overlapping, edge-based procedure of simple implementation is introduced for the numerical solution of the diffusion step of the concentration equation.

A new simulator, which uses the new numerical methods described above, was developed and used in the investigation of field scale flow and transport problems. This is the object of the second part of this thesis. The following results have been established by a methodology which combines high resolution numerical simulations and a stochastic approach for the purpose of modeling the geological properties of porous media:

- We show that the hydrodynamic dispersion tensor in the passive tracer flow problem does not change the scaling laws governing the asymptotic behavior (in time) of the growth of the mixing region.
- We show that, depending on the relative importance between the geological heterogeneities and the nonlinearity which is present in the flow governing equations, distinct mixing regimes may occur. For heterogeneous formations with large heterogeneity strengths we determine that the nonlinear miscible displacement has the same scaling laws for the mixing region growth as the known scaling behavior for linear problems. The importance of these results for the scale-up problem of porous media flow are discussed.

Agradecimentos

Agradeço à Universidade Federal de Uberlândia (UFU), especialmente ao Departamento de Matemática (DEMAT), por ter autorizado o meu afastamento integral para dedicação exclusiva ao doutoramento. Meus agradecimentos também, às instituições financiadoras de pesquisa: CAPES e CNPq; a bolsa “PICD” concedida a mim foi de vital importância para o desenvolvimento desse trabalho.

Três professores foram essenciais para o desenrolar dessa tese e por isso eu os agradeço imensamente. Os professores Milton Lopes e Frederico Furtado foram os meus orientadores assim que iniciei, na UNICAMP, o Programa de Doutorado em Matemática Aplicada. Com boa vontade, ensinaram-me a gostar um pouco mais dessa difícil arte: a matemática e suas aplicações. Os mesmos professores, com a mesma boa vontade, intimaram-me (!!!) a conhecer, ainda em Botafogo, o Laboratório Nacional de Computação Científica (e já ficam aqui os meus agradecimentos a esta instituição: o LNCC). Lá, eu comecei a trabalhar com o professor Felipe Pereira, meu atual orientador. Foi então que percebi que a computação científica é realmente uma arte muito difícil, porém, depois de concluída, nos proporciona muito prazer (e alívio também).

Devo agradecer mais uma vez ainda ao professor Frederico Furtado. Foi por seu intermédio que eu pude acessar os computadores do Departamento de Matemática da Universidade de Wyoming (Laramie) - duas máquinas “da pesada”: “everest” e “denali” (supercomputadores). Agradeço ao gerenciador de sistema, John Spitler, e a toda equipe de Wyoming que de alguma forma ajudaram-me com os resultados computacionais.

Os agradecimentos continuam e agora chegam a Nova Friburgo; cheguei sem ser convidado e, mesmo assim, fui bem recebido no Instituto Politécnico, que é vinculado à Universidade do Estado do Rio de Janeiro (UERJ). Eu estendo os agradecimentos a todos os funcionários e professores do Instituto (tudo gente boa), especialmente aos professores Joaquim Teixeira de Assis, Luiz Nélio Henderson e Nelza Barufatti. Agradeço também aos meus colegas do Laboratório de Alto Desempenho, que, assim como eu, perderam alguns

fos de cabelo e ficaram com a b... quadrada: os professores Diego Gervasio Frías Suarez e Luiz Carlos Roman.

Finalmente, agradeço aos professores do Departamento de Matemática da Universidade Estadual Paulista (UNESP), campus de Rio Claro, que me deram a formação básica em Matemática; ao professores da Pós Graduação em Matemática Computacional da Universidade de São Paulo (USP), campus de São Carlos, que me ajudaram a desvendar alguns mistérios da Matemática Aplicada e aos professores da Pós Graduação em Matemática Aplicada da Universidade de Campinas (UNICAMP), que me mostraram outros mistérios da Matemática Aplicada e ensinaram-me que de agora em diante eu estou preparado para enfrentar tantos outros. Até mesmo, quem sabe, preparado para desvendá-los sozinho.

Nomenclatura

- C_H - Solução das equações que descrevem o escoamento com um campo de permeabilidades constantes.
- C_V - Coeficiente de variação. É utilizado como uma medida (sem dimensão física) da heterogeneidade do campo de permeabilidades.
- D - Tensor de difusão-dispersão.
- \mathcal{D} - Tubo no espaço-tempo.
- $E_1(m, t)$ - Operador de extrapolação (nível de tempo para a pressão, t^m).
- $E(\Delta t)$ - Operador de extrapolação (nível de tempo para a concentração, t_n).
- \bar{K} - Base superior do tubo \mathcal{D} .
- \underline{K} - Base inferior do tubo \mathcal{D} .
- \mathcal{K} - Permeabilidade absoluta.
- M - Razão de viscosidades.
- \mathcal{N} - Determinante de D^{-1} (inverso do tensor de difusão-dispersão).
- V - Elemento de volume.
- V_j^c - Denota o espaço $H(\text{div}, \Omega_j^c)$.
- \widetilde{V}_j^p - Denota o espaço $H(\text{div}, \widetilde{\Omega}_j^p)$.
- W_j^c - Denota o espaço $L^2(\Omega_j^c)$.
- \widetilde{W}_j^p - Denota o espaço $L^2(\widetilde{\Omega}_j^p)$.
- $V^{c,h} \times W^{c,h}$ - Espaço de elementos finitos mistos sobre a partição fina $\{K_\alpha\}$.
- $V_j^{c,h} \times W_j^{c,h}$ - É a restrição de $V^{c,h} \times W^{c,h}$ ao subdomínio Ω_j^c ($V^{c,h}(\Omega_j^c) \times W^{c,h}(\Omega_j^c)$).
- $V^{p,h} \times W^{p,h}$ - Espaço de elemento finito misto (possivelmente diferente de $V^{c,h} \times W^{c,h}$), sobre a partição fina $\{K_\alpha\}$.
- $\widetilde{V}_j^{p,h} \times \widetilde{W}_j^{p,h}$ - É a restrição de $V^{p,h} \times W^{p,h}$ ao subdomínio $\widetilde{\Omega}_j^p$.
- b_c - Constante adimensional usada no método iterativo para a concentração.
- b_p - Constante adimensional usada no método iterativo para a pressão.
- c_o - Concentração do óleo.
- c_s - Concentração do solvente.
- d_ℓ - Coeficiente de dispersão hidrodinâmica longitudinal.

- d_m - Coeficiente de difusão molecular.
- d_t - Coeficiente de dispersão hidrodinâmica transversal.
- h_x - Incremento usado na discretização espacial (direção horizontal).
- h_y - Incremento usado na discretização espacial (direção vertical).
- $\ell(t)$ - É o *mixing length*.
- p - Pressão do fluido.
- q - Termo de fonte.
- t - Variável de tempo.
- u - Velocidade de Darcy.
- v - Campo de velocidades associado à equação da concentração.
- \mathbf{x} - Vetor da forma (x, y, z) , em \mathbf{R}^3 , ou da forma (x, y) , em \mathbf{R}^2 .
- w_χ - São as funções base do espaço de Raviart-Thomas de menor índice considerado aqui.

Letras Gregas

- Δt_p - Passo de tempo para a pressão.
- Δt_{cd} - Passo de tempo para a difusão da concentração.
- Δt_{ct} - Passo de tempo para o transporte da concentração.
- K_α - Elemento da partição fina de Ω .
- Ω - Domínio limitado que representa o reservatório.
- $\partial\Omega$ - Fronteira do domínio Ω .
- Ω_j^c - Subdomínios associados à partição grossa para a discretização da equação da concentração.
- Γ_j^c - Fronteira de Ω_j^c ($\partial\Omega_j^c$).
- Γ_{jk}^c - Interface entre dois subdomínios vizinhos ($\Gamma_j^c \cap \Gamma_k^c$).
- Ω_j^p - Subdomínios associados à partição grossa para a discretização da equação da pressão.
- $\tilde{\Omega}_j^p$ - Subdomínios estendidos associados a Ω_j^p .
- $\tilde{\Gamma}_j^p$ - Fronteira dos subdomínios estendidos ($\partial\tilde{\Omega}_j^p$).
- $\tilde{\Gamma}_{jk}^p$ - Interface entre dois subdomínios vizinhos ($\tilde{\Gamma}_j^p \cap \tilde{\Gamma}_k^p$).

- Λ_{jk}^c - Conjunto dos multiplicadores de Lagrange, ℓ_{jk}^c , definidos em Γ_{jk} .
- $\tilde{\Lambda}_{jk}^p$ - Conjunto dos multiplicadores de Lagrange, ℓ_{jk}^p , definidos sobre a interface $\{\tilde{\Gamma}_{jk}^p\}$.
- β_{jk}^c - Parâmetro que acelera a convergência do método iterativo para a equação da concentração. Definido nas interfaces dos subdomínios.
- β_{jk}^p - Parâmetro que acelera a convergência do método iterativo para a equação da pressão. Definido nas interfaces dos subdomínios.
- δ_{rs} - Tamanho da região de superposição.
- γ - Expoente que indica se o processo de mistura para o problema do traçador passivo é Fickiano ($\gamma = 1/2$), ou anômalo ($\gamma > 1/2$).
- $t_{n,\kappa}$ - Denota o tempo depois de κ micropassos de transporte de concentração ($t_n + \kappa\Delta t_{ct}$).
- μ - Viscosidade do fluido.
- ν_j^c - Normal exterior a Ω_j^c .
- $\tilde{\nu}_{jk}^p$ - Normal exterior a $\tilde{\Omega}_j^p$ sobre $\tilde{\Gamma}_{jk}^p$.
- ν_{kj}^p - É definido como $-\tilde{\nu}_{jk}^p$, $x \in \tilde{\Gamma}_{jk}^p$.
- ϕ - Porosidade.
- ψ - Função usada para introduzirmos diferenciação na direção característica (norma da direção τ).
- χ - Denota uma das faces de um elemento K_α e $\chi = L, R, B, T$, para as faces esquerda, direita, de baixo e de cima deste elemento.
- ρ - Densidade do fluido.
- τ - Direção associada à característica.
- ϱ - É o expoente de Hurst.
- ϑ - É a difusão molecular.

Lista de Tabelas

5.1	Erro relativo na conservação da massa (<i>LCELM</i>)	46
6.1	Malhas utilizadas nas simulações com o <i>GCP</i> -Robin.	67
8.1	Malhas utilizadas no problema do traçador.	87
8.2	Parâmetros utilizados nas simulações numéricas.	87
9.1	Malhas utilizadas.	96
9.2	$\varrho = \infty$ (Não correlacionado)	99
9.3	$\varrho = 0.5$ (Fractal)	99

Lista de Figuras

3.1	Subdomínios para a equação da concentração	16
3.2	Subdomínios para a equação da pressão	17
3.3	Subdomínios opcionais para a equação da pressão	19
4.1	Esquema de ajuste de advecção-difusão para o <i>MMOCAA</i>	30
4.2	Tubo unidimensional	33
4.3	Tubo bi-dimensional	33
4.4	Cálculo exato do conteúdo de solvente em \bar{K}_j	35
5.1	Refinamento de malha para o <i>MMOCAA</i> , $C_V = 0.99$	42
5.2	Refinamento de malha para o <i>LCELM</i> , $C_V = 0.99$	43
5.3	Refinamento de malha para o <i>MMOCAA</i> , $C_V = 3.53$	44
5.4	Refinamento de malha para o <i>LCELM</i> , $C_V = 3.53$	45
5.5	Refinamento de malha para o <i>LCELM</i> , $C_V = 0.99$	47
5.6	Refinamento de malha para o <i>MMOCAA</i> , $C_V = 0.99$	49
5.7	Refinamento de malha para o <i>LCELM</i> , $C_V = 0.99$	49
5.8	Perfis de concentração para um problema modelo	50
5.9	Problema do traçador, $C_V = 0.99$	52
5.10	Comparação dos métodos <i>MMOC</i> , <i>MMOCAA</i> e <i>LCELM</i>	53
5.11	Curvas de nível: <i>5-spot</i> , problema do traçador	55
5.12	Curvas de nível: <i>5-spot</i> , problema do traçador	56
5.13	Problema do traçador em um meio heterogêneo.	57
7.1	Dois exemplos de realizações de campos de permeabilidades	78
8.1	<i>Mixing length</i> : estudo de validação para $\varrho = 0.5$	90
8.2	<i>Mixing length</i> : estudo de validação para $\varrho = \infty$	91
8.3	<i>Mixing length</i> : $\varrho = 0.5$, efeitos de dispersão	92
8.4	<i>Mixing length</i> : $\varrho = \infty$, efeitos de dispersão	93
8.5	Problema do traçador, $C_V = 3.53$	94
9.1	Meio homogêneo: efeitos das não linearidades	101

9.2 Regimes de mistura: $\varrho = \infty$ 102

9.3 Perfis dos regimes de mistura para $\varrho = \infty$ 103

9.4 Comportamento (*NS*): perfis para $\varrho = \infty$ 104

9.5 Regimes de mistura: $\varrho = 0.5$ 105

9.6 Perfis dos regimes de mistura para $\varrho = 0.5$ 106

9.7 Comportamento (*NS*): perfis para $\varrho = 0.5$ 107

9.8 “Diagrama de fase” 108

Sumário

1	Introdução	1
2	Modelo para o Escoamento Miscível	6
2.1	Introdução	6
2.2	Discussão do processo físico	7
2.3	Derivação do sistema diferencial	9
3	Discretização Espacial	14
3.1	Introdução	14
3.2	Decomposição de domínio	15
3.2.1	Equação da concentração	15
3.2.2	Equação da pressão	18
3.3	Elementos finitos mistos	20
3.3.1	Sistema para a concentração	20
3.3.2	Sistema para a pressão	21
4	Métodos Euleriano-Lagrangianos	23
4.1	Introdução	23
4.2	Discretização temporal	24
4.3	O procedimento <i>MMOCAA</i>	24
4.3.1	Identidades de conservação	25
4.3.2	O <i>MMOC</i> usual	26
4.3.3	Esquema do ajuste de advecção	27
4.3.4	Esquema de ajuste de advecção-difusão	29
4.4	O procedimento <i>LCELM</i>	31
5	Simulações Numéricas	38
5.1	Introdução	38
5.2	Algoritmos computacionais	39
5.3	Justificativa dos métodos	41
5.4	Resultados numéricos comparativos	51

6	Métodos Iterativos	58
6.1	Introdução	58
6.2	Uma iteração por faces para a concentração	58
6.2.1	Expressando fluxo em termos de multiplicadores de Lagrange	59
6.2.2	O procedimento iterativo face-por-face	60
6.2.3	Escolha de β_{cx}	61
6.3	Iteração GCP-Robin para a pressão	62
6.3.1	Diferenças finitas para a pressão	63
6.3.1.1	Diferença finita centrada para elementos interiores	63
6.3.1.2	Condição de interface para faces na fronteira	64
6.3.2	Uma iteração a dois níveis	65
6.3.3	Experimentos numéricos	66
6.3.4	Tabelas de resultados de algumas simulações com o esquema GCP-Robin	68
7	Macrodispersão	74
7.1	Introdução	74
7.2	Modelagem estocástica	75
7.3	O problema de transferência de escalas	78
7.4	A região de mistura	79
7.5	Regimes de mistura: efeitos isolados	81
7.5.1	O efeito das não linearidades	82
7.5.2	O efeito das heterogeneidades	83
8	O Traçador Passivo e os Efeitos de Dispersão	84
8.1	Introdução	84
8.2	Validação do procedimento numérico	85
8.2.1	Estudo numérico do traçador passivo	86
8.3	Estudo dos efeitos do tensor hidrodinâmico no comportamento do <i>mixing length</i>	88
8.3.1	Tensor com efeitos difusivos elevados	88
8.4	Conclusões	89
9	Regimes de Mistura	95
9.1	Introdução	95
9.2	Escoamento em um meio homogêneo: o efeito das não linearidades	97
9.3	Efeitos combinados da heterogeneidade e da não linearidade	98
9.3.1	Descrição das simulações	98

Sumário	xxi
9.3.2 Sumário dos resultados	98
10 Conclusões e Trabalhos Futuros	109
A Um Problema Modelo	122
A.1 Introdução	122
A.2 Apresentação do problema	123
A.3 Expressões para as funções erro	124
A.4 Análise das funções erro	125
A.5 Estudo com quatro subdomínios	131
A.6 Conclusão	133

Capítulo 1

Introdução

Aplicações científicas e tecnológicas em contextos tais como recuperação terciária em reservatórios de petróleo e transporte de contaminantes em aquíferos têm motivado pesquisas que visam o desenvolvimento de simuladores para o estudo de escoamentos de fluidos miscíveis em meios porosos com o auxílio de métodos numéricos precisos.

A motivação para os estudos realizados nesta tese são os resultados recentes, na área de Matemática Computacional (veja [27, 55, 56]), relacionados à investigação computacional do problema da macrodispersão (processo de mistura de fluidos na escala macroscópica, ou de campo) em escoamentos multifásicos em reservatórios de petróleo e aquíferos heterogêneos. Nos trabalhos mencionados acima o escoamento bifásico (água-óleo), imiscível e incompressível foi investigado detalhadamente.

Um dos principais objetivos deste trabalho é a apresentação de resultados importantes no contexto de Matemática Computacional, visando o entendimento detalhado das leis da Física que governam o processo de recuperação terciária de petróleo, que é feita através da injeção de solventes nos reservatórios. Daremos ênfase à descrição de novos métodos numéricos precisos, apropriados para o desenvolvimento de simuladores que façam uso efetivo da computação de alto desempenho. Além disto, resultados novos obtidos através do uso de tais simuladores na investigação do escoamento miscível, solvente-óleo, em meios porosos naturais, serão apresentados. Os métodos numéricos descritos nesta tese permitiram um entendimento muito refinado dos fenômenos estudados.

Para a análise matemática dos modelos para o escoamento de fluidos em meios porosos aqui investigados, sugerimos que a referência [12] seja consultada.

Novos métodos numéricos foram introduzidos na primeira parte deste

trabalho. Eles foram desenvolvidos para o modelo padrão de deslocamento de dois fluidos miscíveis e incompressíveis. Este modelo é constituído por equações diferenciais parciais acopladas que resultam num sistema não linear: uma equação elíptica de segunda ordem para a pressão é acoplada a uma equação de convecção-difusão (ou transporte-difusão), dominada pela parte convectiva, para a concentração de um dos fluidos. A derivação destas equações está feita no Capítulo 2.

Os métodos numéricos propostos nesta tese foram desenvolvidos levando-se em conta a tradição dos trabalhos de Douglas, Ewing, Russell e Wheeler e seus colaboradores [22, 24, 25, 26, 40, 45, 46, 47, 50, 83, 84]. Nestes trabalhos, elementos finitos mistos foram identificados como um método apropriado para o cálculo numérico preciso de campos de velocidades na presença de heterogeneidades geológicas. O Método Modificado das Características (*MMOC*) surgiu ([40]) como um procedimento computacionalmente eficiente para a discretização da variável tempo nas equações de transporte-difusão. O *MMOC* apresenta várias vantagens quando comparado com técnicas de uso comum na indústria de petróleo, como os esquemas de discretização do tipo *upwind*. Estes esquemas, que se baseiam na introdução de difusão artificial na solução numérica, apresentam forte dependência da solução na orientação da malha computacional e suavização artificial de saltos abruptos. Estes problemas são minimizados com o uso do *MMOC*, que, além disto, permite ainda o uso de passos grandes de tempo para o transporte. O *MMOC* tem, contudo, uma falha fundamental: não preserva a massa total das duas componentes do fluxo como uma identidade algébrica. A conservação de massa é uma propriedade importante e deve ser preservada pelos métodos numéricos, para uma correta descrição dos fenômenos físicos modelados.

A falta de conservação de massa do *MMOC* usual motivou pesquisas em esquemas conservativos, baseados em características, que conduziram ao desenvolvimento de procedimentos que conservam a massa dos fluidos localmente. Eles são conhecidos genericamente por *Eulerian Lagrangian Localized Adjoint Methods (ELLAM)* (Métodos Adjuntos Localizados Euleriano Lagrangianos). Veja, para maiores informações, por exemplo: [4, 8, 10, 11, 67]. O custo computacional desses métodos é significativamente maior do que o do procedimento *MMOC*, particularmente em dimensão espacial igual a três. Portanto, existe o interesse no desenvolvimento de métodos alternativos que tenham baixo custo computacional.

Nesta tese dois novos métodos para a discretização temporal são introduzidos e comparados com o *MMOC* usual. Eles são baseados em decomposição de operador (*operator splitting*) em dois estágios. No primeiro estágio o campo de velocidades, associado à equação elíptica para a pressão, e a concentração da mistura são calculados sequencialmente. No segundo estágio

os passos de transporte e de difusão, associados à equação de transporte-difusão para a concentração, são também calculados seqüencialmente. Tal divisão permite-nos usar passos de tempo para o cálculo da pressão maiores do que os passos usados na parte difusiva do cálculo da concentração, que por sua vez podem ser maiores do que aqueles usados na parte do transporte. Os novos métodos estão relacionados a recentes trabalhos de Douglas, Pereira e seus colaboradores [28, 30, 31, 36, 37, 38].

Os métodos introduzidos nesta tese são os seguintes: i) o Método Modificado das Características com Ajuste de Massa no Passo de Transporte, denotado por *MMOCAA*. Este é um procedimento de discretização do tempo que conserva a massa dos fluidos globalmente, mas não necessariamente localmente. ii) o Método Euleriano-Lagrangiano com Conservação Local de Massa, denotado por *LCELM*. No Capítulo 4 explicamos com detalhes os esquemas *MMOCAA* e *LCELM*.

As novas técnicas de decomposição de domínios desenvolvidas neste trabalho são utilizadas para se obter solução de equações elípticas de segunda ordem que aparecem no modelo de escoamento considerado aqui. Elementos finitos mistos e híbridos são usados para a discretização espacial destas equações. Esta discretização encontra-se no Capítulo 3. Os seguintes métodos de decomposição de domínio são introduzidos neste trabalho: i) O Método dos Gradientes Conjugados com Pré-Condicionamento combinado com condições de interface do tipo Robin (GCP-Robin). Este tipo de decomposição de domínio foi introduzido em [73] e investigado por diversos autores [20, 21, 34, 35, 39]. O GCP-Robin motivou a análise dos métodos que fazem uso de superposição entre subdomínios discutidos em [33]. Técnicas de decomposição de domínio para métodos mistos, distintas desta usada aqui, podem ser encontradas em [15, 48, 49, 64, 65]. Utilizamos o GCP-Robin no cálculo do campo de velocidades que aparece nas equações que governam o escoamento. Verificamos a eficiência desse esquema comparando-o com o GCP usual. Este material está apresentado no Capítulo 6. ii) Para a resolução numérica do problema de álgebra linear que aparece no estágio difusivo da equação da concentração, introduzimos um método, de fácil implementação, que também utiliza as condições de interface de Robin. Este método não apresenta superposição entre os subdomínios e é baseado em iterações por face. Este esquema constitui uma extensão do método de [33, 35] para equações com coeficientes dados na forma tensorial. Este material também está apresentado no Capítulo 6.

Um novo simulador computacional, que faz uso dos novos métodos numéricos descritos acima, foi desenvolvido e utilizado na investigação do escoamento miscível em problemas na escala de campo. Este é o objeto da segunda parte deste trabalho. Nesta parte da tese tratamos da modelagem estocástica

de escoamentos miscíveis em meios porosos heterogêneos. Passamos a discutir agora o contexto onde a modelagem estocástica é relevante.

Escoamentos multifásicos em meios porosos naturais são, tipicamente, governados por equações não-lineares e apresentam comportamento complexo e caótico, fortemente influenciado pelos detalhes das heterogeneidades geológicas destes meios. Estas heterogeneidades ocorrem em múltiplas escalas, desde a escala microscópica dos poros até a escala de campo ou regional, que se estende por quilômetros. Esta multiplicidade de escalas de heterogeneidades impossibilita o conhecimento preciso e detalhado das variações das propriedades das rochas e dos fluidos no subsolo, de forma que modelos mecânicos determinísticos devem incorporar esta noção de incerteza. Esta incerteza é comumente modelada através dos coeficientes das equações que governam o fluxo (por exemplo, porosidade e permeabilidade absoluta), que são considerados funções aleatórias da posição. Como resultado, modelos realistas típicos para fluxos multifásicos em formações heterogêneas são expressos em termos de sistemas de equações diferenciais parciais estocásticas acopladas e não-lineares com um forte caráter hiperbólico.

As teorias matemáticas existentes são insuficientes para uma descrição rigorosa das soluções destes sistemas. Conseqüentemente, métodos alternativos de investigação têm que ser usados na busca de um entendimento da estrutura dos espaços de soluções destes sistemas estocásticos. Técnicas apropriadas neste contexto incluem o uso de campos aleatórios, médias sobre realizações de campos aleatórios, relações de fechamento, expansões e teoria de perturbação, métodos do grupo de renormalização e simulação numérica direta.

Baseado nos trabalhos [52, 53, 54], apresentaremos aqui uma metodologia efetiva, tanto do ponto de vista teórico quanto computacional, para o estudo de fenômenos multiescala em fluxos multifásicos em meios porosos. Problemas de contaminação e remediação de aquíferos, de grande impacto para a ecologia do meio ambiente, e processos de recuperação secundária e terciária de petróleo podem ser considerados neste contexto.

Simulações numéricas com alta resolução e detalhadas são utilizadas para a exploração da física dos fenômenos multiescala visando, em última instância, uma descrição precisa dos fluxos multifásicos em escalas de campo (escalas macroscópicas). Matematicamente este problema consiste no entendimento do mapeamento que leva a micro-física (escala de laboratório), considerada fundamental, à macro-física, mais apropriada para uma descrição prática do problema. Neste mapeamento os detalhes das soluções são resolvidos e apenas seus efeitos são incorporados na descrição macroscópica. No contexto de dinâmica dos fluidos em meios porosos este mapeamento é conhecido como *upscaling* e sua construção constitui um dos problemas mais

importantes nesta área.

Especificamente, em nossa abordagem do problema de *upscaling*, momentos estatísticos relevantes das soluções dos sistemas de equações diferenciais parciais estocásticas governantes serão construídos diretamente através de médias de conjuntos de simulações numéricas precisas. Os resultados mais importantes relacionados a este estudo são descritos abaixo:

- Mostramos que a presença da dispersão hidrodinâmica no problema do traçador passivo não altera as leis de escala que governam o comportamento assintótico (no tempo) do crescimento da região de mistura.
- Mostramos que, dependendo da importância relativa entre as heterogeneidades geológicas e a não linearidade presente nas equações que modelam o escoamento, diferentes regimes de mistura podem ocorrer. Para formações rochosas muito heterogêneas determinamos que o escoamento miscível não linear apresenta as mesmas leis de escala, para o crescimento da região de mistura, que as leis já conhecidas para o problema linear.

Uma discussão do problema da macrodispersão em meios porosos aparece no Capítulo 7. No Capítulo 8 estudamos o efeito da dispersão hidrodinâmica no problema do traçador passivo. O estudo do problema miscível não linear aparece no Capítulo 9, onde os novos regimes de mistura identificados neste trabalho são discutidos.

Capítulo 2

Modelo para o Escoamento Miscível

2.1 Introdução

O deslocamento miscível é um processo de recuperação de petróleo de alto custo, que tem atraído atenção considerável da indústria de petróleo nos últimos 40 anos. Este processo envolve a injeção de um solvente em certos poços num reservatório de petróleo, com a intenção de deslocar o óleo residente para outros poços, chamados de produção. Este óleo pode ter sido deixado para trás depois de uma produção primária devido à pressão existente no reservatório e depois de uma produção secundária por injeção de água no reservatório. A economia do processo é precária porque exige uma etapa química muito cara para separar as componentes da mistura (óleo mais solvente) e ainda por cima o sucesso do deslocamento não é garantido. Um comportamento físico complexo determinará se a recuperação de petróleo será suficientemente boa justificando então o alto investimento do processo.

Matematicamente o processo de recuperação terciária é descrito por uma equação diferencial parcial parabólica dominada por convecção, para cada componente química no sistema. Estas equações são não lineares e fortemente acopladas. Somando-se as equações componentes, nós podemos obter uma equação que determina a pressão no sistema. Esta equação não linear é elíptica ou parabólica, dependendo se o sistema é incompressível ou compressível. Então, neste problema encontramos uma equação elíptica, ou parabólica, acoplada a uma equação aproximadamente hiperbólica, tendo este sistema um comportamento não linear complicado. É um problema de difícil aproximação numérica, e bons modelos numéricos são primordiais

para a indústria, pois as previsões de custo de um projeto tem como base simulações numéricas precisas.

2.2 Discussão do processo físico

O primeiro passo para se iniciar simulações de um reservatório consiste no desenvolvimento de um bom modelo físico, que descreva adequadamente e de forma significativa o fenômeno de escoamento de um fluido. É a natureza do modelo físico que indicará quais os modelos matemáticos e numéricos que são mais convenientes. Nosso modelo matemático para o processo de deslocamento miscível em meio poroso consiste em equações diferenciais parciais do tipo convecção-difusão, cujas soluções apresentam o movimento das frentes de ondas, que são bem acentuadas, porém contínuas.

A lei ou correlação mais amplamente usada e que pode ser incorporada em modelos analíticos de escoamento em meios porosos é a lei de Darcy, descoberta em 1856 pelo engenheiro francês Henry D'Arcy. Embora os experimentos de D'Arcy tratassem somente de escoamento laminar em vários meios, eles estabeleceram a relação básica entre a taxa de escoamento e o gradiente de pressão. Esta relação pode ser modificada de várias maneiras para modelar uma ampla variedade de escoamentos em diferentes regimes. A lei de Darcy afirma que a taxa de fluxo volumétrico, Q , de um fluido homogêneo em um meio poroso é proporcional ao gradiente de pressão, ou gradiente hidráulico, e à área da seção transversal, A , normal à direção do fluxo e inversamente proporcional à viscosidade μ do fluido. A lei define o conceito de permeabilidade \mathcal{K} da rocha, que quantifica a capacidade da rocha em transmitir fluido. Nós podemos escrever a velocidade de fluido superficial (velocidade u de Darcy) como

$$u = \frac{Q}{A} = -\frac{\mathcal{K}}{\mu}(\nabla p - \rho g \nabla Z), \quad (2.1)$$

onde p é a pressão do fluido, ρ é a densidade do fluido, g é a magnitude da aceleração da gravidade, a profundidade Z é uma função vetorial de $\mathbf{x} = (x, y, z)$ apontando na direção da gravidade, \mathcal{K} é um tensor de permeabilidade absoluta com unidades de darcies (comprimento ao quadrado) e μ é a viscosidade do fluido.

O deslocamento miscível, assim como o imiscível, envolve convecção, ou transporte físico, dos fluidos através do meio poroso. A nível macroscópico (escala de laboratório), este processo é governado pela lei de Darcy. Devemos salientar que a nível microscópico, na escala de um poro, a convecção é altamente irregular. Na verdade, a lei de Darcy foi derivada rigorosamente a

partir das equações de Stokes por um processo de médias sobre amostras de volumes. O comprimento característico desses volumes deve ser muito maior que o comprimento de um poro (em torno de 10^{-4} metros) e muito menor que o comprimento de um reservatório (10^2 a 10^3 metros).

Em um escoamento miscível, a variável de maior interesse é a concentração do solvente na mistura, $c(\mathbf{x}, t)$, $0 \leq c \leq 1$. A viscosidade da mistura depende da concentração e no caso de um escoamento com duas componentes podemos expressá-la (assumindo que ela obedece a uma lei de potência de ordem quatro) em função da concentração do solvente como

$$\mu(c) = \{(1 - c) + (M)^{1/4}c\}^{-4}\mu_o; \quad M = \mu_o/\mu_s, \quad (2.2)$$

onde μ_s e μ_o são as viscosidades do solvente e do óleo. O parâmetro adimensional M é uma razão de viscosidades.

O deslocamento miscível é também caracterizado pelos processos de difusão e dispersão. Difusão de um fluido sobre o outro, que é causada pelo movimento aleatório de moléculas, é governada pela lei de Fick

$$\frac{\partial V}{\partial t} = -d_m A \frac{\partial c}{\partial x}, \quad (2.3)$$

onde V é o volume de um fluido localizado em uma região onde os valores de “ x ” são positivos. Esta região possui uma área “ A ” de seção transversal que é normal à direção do eixo “ x ”; c é a concentração deste fluido e d_m é o coeficiente de difusão molecular (unidades: *comprimento*²/*tempo*) em um meio não poroso. Em um meio poroso, d_m é multiplicado por F/ϕ , onde F é o fator de resistividade elétrica e ϕ é a porosidade. Em geral F pode ser aproximado por ϕ^2 , assim o coeficiente em meio poroso torna-se ϕd_m , que tipicamente é da ordem de $10^{-5} \text{ cm}^2/\text{s}$ ou $10^{-3} \text{ pés}^2/\text{dia}$, que é muito pequeno.

Dispersão a nível macroscópico (escala de laboratório) é um mecanismo físico importante para o processo de mistura em nosso estudo. Uma das causas que levam ao surgimento deste fenômeno é a variação macroscópica na permeabilidade da rocha e na porosidade do meio. Neste caso, a dispersão causa variações na velocidade do fluido à medida que ele se move através da rocha. Em meios porosos, quanto maior for a distância percorrida pelo fluido maior será o efeito dispersivo no processo de mistura. Devido à similaridade qualitativa deste processo e o de mistura mecânica a nível microscópico (escala de um poro), é possível representar a dispersão macroscópica por um termo como o da difusão, com coeficiente proporcional à velocidade do fluido. Em geral, observa-se que a mistura mecânica e a dispersão macroscópica, por analogia, têm dois termos: um paralelo (longitudinal) e o outro normal (transversal) ao fluxo. Os coeficientes associados a estes termos são tais que o longitudinal pode ser 30 vezes maior que o transversal.

Mais detalhes sobre dispersão podem ser encontrados em [85].

2.3 Derivação do sistema diferencial, com duas componentes, para o deslocamento miscível incompressível

Para a derivação das equações diferenciais parciais que descrevem o deslocamento miscível, faremos uso da lei de Darcy e da lei de conservação de massa. Consideramos um sistema com duas componentes (óleo e solvente denotados pelos subscritos “o” e “s”, respectivamente) que escoam juntas, formando uma única fase. Utilizaremos a conservação de massa para cada componente em vez da conservação de massa da fase. O escoamento da mistura deve ser tratado levando-se em conta os efeitos difusivos e dispersivos de uma componente sobre a outra.

Considere um elemento V de volume, que, no mínimo, deve ter a mesma escala que a do comprimento característico de volumes discutido na seção anterior. A porosidade é a fração do volume V que está disponível para o escoamento. O elemento de volume poroso, V_{poroso} , é a porção de V onde ocorre a mistura. Denote a porosidade por $\phi = V_{poroso}/V$. Então a taxa de acúmulo de massa da componente i em V é dada por

$$\frac{d}{dt} \int_V \phi \rho_i c_i(\mathbf{x}, t) \, d\mathbf{x}, \quad i = o, s, \quad (2.4)$$

onde $c_i \in [0, 1]$ é a concentração da componente i na fase única e ρ_i é a densidade do fluido restrita a esta componente.

A lei de Darcy (2.1) fornece a taxa de escoamento convectivo da mistura por unidade de área de seção transversal. Nós vamos restringir esta lei à componente i da mistura para obter a seguinte relação:

$$u_i = -c_i \frac{\mathcal{K}}{\mu} (\nabla p - \rho g \nabla Z) = c_i u, \quad i = o, s. \quad (2.5)$$

Note que a seguinte relação deve ser satisfeita:

$$c_o + c_s = 1; \quad (2.6)$$

observe que dessa forma obtemos

$$u_o + u_s = u. \quad (2.7)$$

Da lei de Fick, modificada para meios porosos, nós obtemos a taxa de escoamento difusivo relativa à componente i da mistura

$$u_{i,dif} = -\phi d_m \nabla c_i. \quad (2.8)$$

Como já dissemos anteriormente, na discussão física do problema, a dispersão possui duas componentes, uma paralela e a outra transversa ao fluxo, que se comportam como um termo difusivo com coeficientes proporcionais à velocidade de Darcy (u). Usaremos uma lei de potência de primeira ordem para obter tal proporcionalidade. Digamos que as direções longitudinais e transversais ao fluxo sejam indicadas pelos vetores unitários e_ℓ e e_t , respectivamente (em duas dimensões). Então obtemos a seguinte taxa de fluxo dispersivo, escrita na base ortonormal $\{e_\ell, e_t\}$:

$$u_{i,disp} = -d_\ell |u| \frac{\partial c_i}{\partial e_\ell} e_\ell - d_t |u| \frac{\partial c_i}{\partial e_t} e_t. \quad (2.9)$$

Observe que em três dimensões teríamos um termo a mais relacionado com a direção transversal ao fluxo.

Agora nós vamos escrever o vetor $u_{i,disp}$ na base usual $\{e_1, e_2\}$ do \mathbb{R}^2 . Para isto, considere as seguintes relações:

$$\begin{aligned} e_\ell &= e_1 \cos\theta + e_2 \text{sen}\theta, \\ e_t &= -e_1 \text{sen}\theta + e_2 \cos\theta, \\ \cos\theta &= u_1/|u|, \\ \text{sen}\theta &= u_2/|u|, \end{aligned} \quad (2.10)$$

onde θ é o ângulo entre e_ℓ e e_1 , e $u = (u_1, u_2)$. Lembre-se de que $\frac{\partial c_i}{\partial e_\ell} = \nabla c_i \cdot e_\ell$ e $\frac{\partial c_i}{\partial e_t} = \nabla c_i \cdot e_t$. Dessa forma podemos escrever

$$\begin{aligned} u_{i,disp} &= -\frac{d_\ell}{|u|} \left[\left(u_1^2 \frac{\partial c_i}{\partial x} + u_1 u_2 \frac{\partial c_i}{\partial y} \right) e_1 + \left(u_2^2 \frac{\partial c_i}{\partial y} + u_1 u_2 \frac{\partial c_i}{\partial x} \right) e_2 \right] \\ &\quad - \frac{d_t}{|u|} \left[\left(u_2^2 \frac{\partial c_i}{\partial x} - u_1 u_2 \frac{\partial c_i}{\partial y} \right) e_1 + \left(u_1^2 \frac{\partial c_i}{\partial y} - u_1 u_2 \frac{\partial c_i}{\partial x} \right) e_2 \right]. \end{aligned} \quad (2.11)$$

Lembrando que conservação de massa implica que a taxa de massa acumulada dentro de um elemento de volume V é igual a taxa de fluxo de massa através da fronteira de V mais a quantidade de massa injetada (ou residente) em V . Desta forma, obtemos a seguinte relação

$$\frac{d}{dt} \int_V \phi \rho c_i dx = - \int_{\partial V} \rho U_i \cdot \nu dS + \int_V \rho \tilde{c}_{iq} dx, \quad (2.12)$$

onde U_i é o vetor que combina todas as componentes de velocidade do fluxo

$$U_i = u_i + u_{i,dif} + u_{i,disp}. \quad (2.13)$$

Na equação (2.12), ν é o vetor normal exterior à ∂V , \tilde{c}_i é a concentração da componente i especificada no poço de injeção e a concentração residente no poço de produção, q é a taxa de fluxo volumétrico por unidade de volume.

Usando o teorema da divergência, a fórmula (2.11) e considerando a incompressibilidade dos fluidos (ρ é constante) e da rocha, nós podemos reescrever (2.12) como

$$\int_V \left[\phi \frac{\partial c_i}{\partial t} - \nabla \cdot (D \nabla c_i - u c_i) \right] dx = \int_V \tilde{c}_i q dx, \quad i = o, s, \quad (2.14)$$

onde D é um tensor de difusão-dispersão (tensor inversível - seu inverso será denotado por D^{-1}) dado por

$$D = D(u) = \phi d_m I + \frac{d_\ell}{|u|} \begin{pmatrix} u_1^2 & u_1 u_2 \\ u_1 u_2 & u_2^2 \end{pmatrix} + \frac{d_t}{|u|} \begin{pmatrix} u_2^2 & -u_1 u_2 \\ -u_1 u_2 & u_1^2 \end{pmatrix}. \quad (2.15)$$

Nós gostaríamos de eliminar o sinal de integração na fórmula (2.14) reduzindo V a um ponto arbitrário, mas isto requer justificações já que V deve ter, no mínimo, a mesma escala que a do comprimento característico de volumes. Os trabalhos de Whitaker e Gray, [90] e [66], respectivamente, apresentam tais justificações. Portanto, nós ficamos com o seguinte sistema acoplado

$$\phi \frac{\partial c_i}{\partial t} - \nabla \cdot (D \nabla c_i - u c_i) = \tilde{c}_i q, \quad i = o, s. \quad (2.16)$$

As variáveis são u , c_o e c_s , com a restrição adicional (2.6). Uma equação é a do óleo e a outra é a do solvente.

Uma manipulação comum com este sistema consiste na troca de uma das equações (a do óleo, por exemplo) pela soma das duas. Isto nos conduz ao seguinte sistema de equações

$$-\nabla \cdot \left(\frac{\mathcal{K}}{\mu(c)} (\nabla p - \rho g \nabla Z) \right) \equiv \nabla \cdot u = q; \quad (\text{equação da pressão}) \quad (2.17)$$

$$\phi \frac{\partial c}{\partial t} - \nabla \cdot (D(u) \nabla c - u c) = \tilde{c} q, \quad (\text{equação da concentração}) \quad (2.18)$$

onde $c = c_s$, $\tilde{c} = \tilde{c}_s$. A primeira equação acima, (2.17), representa a conservação de massa para o fluido total, enquanto a segunda representa a conservação de massa para a componente de solvente. A primeira equação é freqüentemente chamada de equação da pressão; seus coeficientes dependem da concentração do solvente. A segunda equação, da concentração, é usualmente uma equação parabólica, dominada por convecção; seus coeficientes dependem da pressão, através da velocidade de Darcy.

O comportamento de μ como função de c é muito importante para entendermos a formação de canais preferenciais de escoamento. Estes canais assemelham-se a dedos compridos e devido a isto são comumente denominados, em inglês, por *viscous fingering*. O comportamento de μ depende da razão de viscosidades, $M = \mu_o/\mu_s$. Se $M > 1$, o deslocamento é dito ter razão de viscosidades adversa e a formação de *viscous fingering* é esperada (veja, por exemplo, [68]).

O sistema (2.17-2.18) está definido sobre um domínio limitado $\Omega \subset \mathbf{R}^2$, representando um reservatório ou parte de um reservatório, num intervalo de tempo $J = [0, T]$. Este sistema requer condições iniciais e de fronteira. As condições de fronteira que usaremos são as de fluxo nulo, representando uma fronteira impermeável, que são as mais comuns na prática:

$$u \cdot n = 0, \quad \forall \mathbf{x} \in \partial\Omega, \quad \forall t \in J, \quad (2.19)$$

$$(D\nabla c) \cdot n - c(u \cdot n) = 0, \quad \forall \mathbf{x} \in \partial\Omega, \quad \forall t \in J, \quad (2.20)$$

onde n é o unitário normal exterior à fronteira de Ω .

Precisamos de uma condição de compatibilidade que é dada por

$$\int_{\Omega} q \, d\mathbf{x} = \int_{\Omega} \nabla \cdot u \, d\mathbf{x} = \int_{\partial\Omega} u \cdot n \, ds = 0. \quad (2.21)$$

A condição inicial é dada por

$$c(\mathbf{x}, 0) = c_0(\mathbf{x}), \quad \forall \mathbf{x} \in \Omega, \quad (2.22)$$

enquanto os valores iniciais de p são determinados pela equação (2.17) e pela condição inicial (2.22). Se o sistema fosse compressível nós necessitaríamos de uma condição inicial para p também.

O sistema formado pelas equações (2.17)–(2.20) e (2.22) está na forma divergente. Para certos procedimentos numéricos nós devemos considerar uma forma alternativa, do tipo não-divergente. Para isto, note que

$$\nabla \cdot (uc) = u \cdot \nabla c + c(\nabla \cdot u) = u \cdot \nabla c + cq, \quad (2.23)$$

tal que o sistema (2.17-2.18) pode ser reescrito como

$$\begin{aligned} \nabla \cdot u &= q, \\ \phi \frac{\partial c}{\partial t} + u \cdot \nabla c - \nabla \cdot (D\nabla c) &= (\tilde{c} - c)q. \end{aligned} \quad (2.24)$$

Para qualquer taxa de injeção razoável de solvente o fluxo é essencialmente ao longo da característica associada ao transporte

$$\phi \frac{\partial c}{\partial t} + u \cdot \nabla c. \quad (2.25)$$

Então, é apropriado introduzirmos diferenciação na direção característica. Sendo assim, defina

$$\psi(\mathbf{x}, u) = [\phi(\mathbf{x})^2 + |u|^2]^{\frac{1}{2}}, \quad (2.26)$$

$$\frac{\partial}{\partial \tau} = \psi^{-1} \left\{ \phi \frac{\partial}{\partial t} + u \cdot \nabla \right\}. \quad (2.27)$$

Observe que a direção τ depende do espaço e da velocidade do fluido, que varia tanto no tempo quanto no espaço.

O nosso trabalho não vai levar em conta os efeitos de gravidade. A inclusão destes efeitos pode ser feita sem maiores dificuldades conceituais, embora determine algumas complicações no que se refere a desenvolvimento de métodos numéricos e códigos computacionais.

Apresentamos a seguir a maneira conveniente de se reescrever o sistema (2.17-2.18), a qual será usada em nossas discretizações espaciais e temporais

$$\nabla \cdot u = q, \quad u = \frac{-\mathcal{K}(\mathbf{x})}{\mu(c)} \nabla p, \quad (2.28)$$

$$\psi \frac{\partial c}{\partial \tau} + \nabla \cdot v = (\tilde{c} - c)q \equiv g(c), \quad v = -D(u) \nabla c. \quad (2.29)$$

A análise matemática do sistema (2.28)-(2.29) foi considerada em [51], onde mostrou-se a unicidade local e existência global de solução.

Capítulo 3

Discretização Espacial

3.1 Introdução

Neste Capítulo nós consideramos a discretização espacial do sistema (2.28-2.29) por elementos finitos mistos, mantendo a variável tempo contínua. Nossa intenção é usar procedimentos iterativos para a solução dos problemas de álgebra linear resultantes da discretização espacial. Um deles é baseado em decomposição de domínio com superposição de subdomínios, que resolve as equações discretas para a pressão, em cada nível de tempo. O outro baseado em decomposição de domínio sem superposição, que resolve cada passo difusivo envolvido no esquema de decomposição de operador (*operator-splitting*), que é aplicado à equação da concentração. É possível utilizar partições (finas) totalmente diferentes para a pressão e para a concentração (veja por exemplo [25, 26, 41], onde tais partições foram usadas), mas com o propósito de simplificar a apresentação, nós discutiremos aqui o uso de um modelo comum de partição fina para as duas equações. Contudo, dentro de cada subdomínio, dependendo do procedimento iterativo baseado em decomposição de domínio, nós vamos admitir o uso de partições grossas distintas para as equações da pressão e da concentração. De fato, nós utilizaremos subdomínios para a pressão maiores do que aqueles para a concentração. Isto acontece porque, próximo de sua singularidade, a equação da pressão (elíptica) é difícil de ser resolvida, pois não apresenta o decaimento exponencial característico das equações parabólicas.

Nós apresentamos também as formulações fracas da equação da concentração e da pressão. A referência [35] nos fornece uma análise de convergência de um método iterativo baseado em formulação análoga às aquelas presentes na seção seguinte.

3.2 Decomposição de domínio

Seja $\Omega \subset \mathbf{R}^2$ um domínio limitado com uma fronteira Lipschitz, $\partial\Omega$. Então defina uma partição fina de modo que ela seja uma decomposição de Ω em elementos K_α tais que

$$\bar{\Omega} = \bigcup_{\alpha \in A} \bar{K}_\alpha, \quad K_\alpha \cap K_a = \phi, \quad \alpha \neq a,$$

onde A é um conjunto finito de índices. Os elementos devem ser do tipo retangular e com as modificações óbvias para ajustar a fronteira, $\partial\Omega = \Gamma$. Um exemplo de tal partição é dado na Figura 3.1.

Nas próximas subseções necessitaremos das definições de alguns espaços de funções Lebesgue integráveis com seus respectivos produtos internos. Considere então:

$L^2(\Omega)$: espaço das funções que possuem quadrado integrável;

$$(f, g)_\Omega = \int_\Omega f(\mathbf{x})g(\mathbf{x}) \, d\mathbf{x}, \quad \forall f, g \in L^2(\Omega);$$

$$H(\text{div}, \Omega) = \{F = (f, g) \in L^2(\Omega) \times L^2(\Omega) \mid \nabla \cdot F \in L^2(\Omega)\};$$

$$(F, G)_\Omega = \int_\Omega F(\mathbf{x}) \cdot G(\mathbf{x}) \, d\mathbf{x}, \quad \forall F, G \in H(\text{div}, \Omega).$$

A notação para produto interno do tipo $\langle \cdot, \cdot \rangle$ estará associada às funções que estão definidas na fronteira de um dado domínio (ou subdomínio).

3.2.1 Equação da concentração

Vamos definir agora uma partição grossa, sem superposição de subdomínios, que será utilizada na discretização da equação da concentração (veja a Figura 3.1). O índice (super ou subíndice) c presente nas expressões seguintes referem-se à concentração. Seja

$$A = \bigcup_{j=1}^{M_c} A_j, \quad \text{onde } A_j \cap A_k = \phi \text{ para } j \neq k, \text{ e } \bar{\Omega}_j^c = \bigcup_{\alpha \in A_j} \bar{K}_\alpha;$$

os subdomínios Ω_j^c (=Interior ($\bar{\Omega}_j^c$)) devem ser simplesmente conexos, com formas razoáveis, preferencialmente convexos.

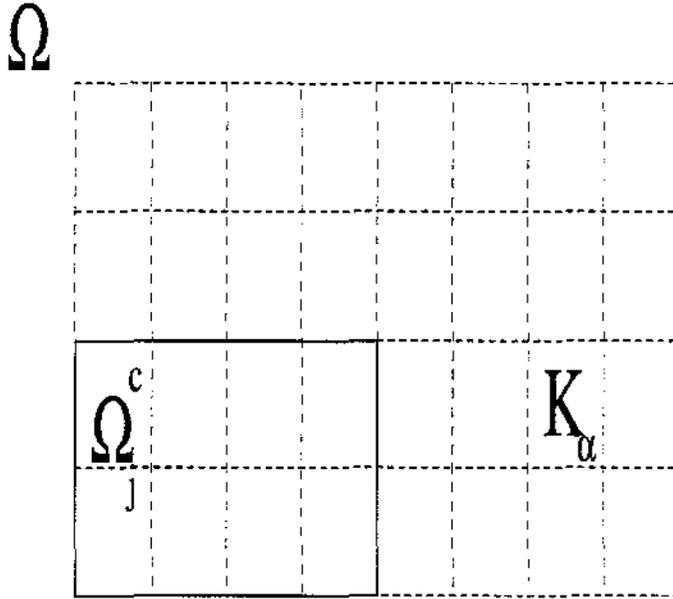


Figura 3.1: Subdomínios para a equação da concentração.

Seja

$$\Gamma_j^c = \partial\Omega_j^c, \quad \text{e} \quad \Gamma_{jk}^c = \Gamma_{kj}^c = \Gamma_j^c \cap \Gamma_k^c,$$

e denote a normal exterior a Ω_j^c por ν_j^c . Sejam $c_j = c|_{\Omega_j^c}$ e $v_j = v|_{\Omega_j^c}$. Então, o caminho usual para se impor as condições de consistência na interface através de Γ_{jk}^c é requerer que

$$\begin{aligned} c_j &= c_k, & \forall \mathbf{x} \in \Gamma_{jk}^c, \\ v_j \cdot \nu_j + v_k \cdot \nu_k &= 0, & \forall \mathbf{x} \in \Gamma_{jk}^c. \end{aligned}$$

Contudo, com o objetivo de definirmos métodos iterativos, é conveniente utilizarmos as seguintes condições equivalentes, conhecidas como condição de transmissão de Robin (veja [73])

$$c_j - \beta_{jk}^c v_j \cdot \nu_j^c = c_k + \beta_{jk}^c v_k \cdot \nu_k^c, \quad \forall \mathbf{x} \in \Gamma_{jk}^c, \quad (3.1)$$

$$c_k - \beta_{jk}^c v_k \cdot \nu_k^c = c_j + \beta_{jk}^c v_j \cdot \nu_j^c, \quad \forall \mathbf{x} \in \Gamma_{kj}^c; \quad (3.2)$$

onde $\beta_{jk}^c = \beta_{kj}^c > 0$, será especificado mais tarde.

A equação (3.1) será utilizada quando o sistema diferencial for considerado sobre Ω_j^c . Se ele for considerado sobre Ω_k^c , então a equação (3.2) será utilizada.

Seja $V_j^c = H(\text{div}, \Omega_j^c)$ e $W_j^c = L^2(\Omega_j^c)$ para $j = 1, \dots, M_c$. A formulação fraca para a equação (2.29), cujo domínio foi decomposto em subdomínios

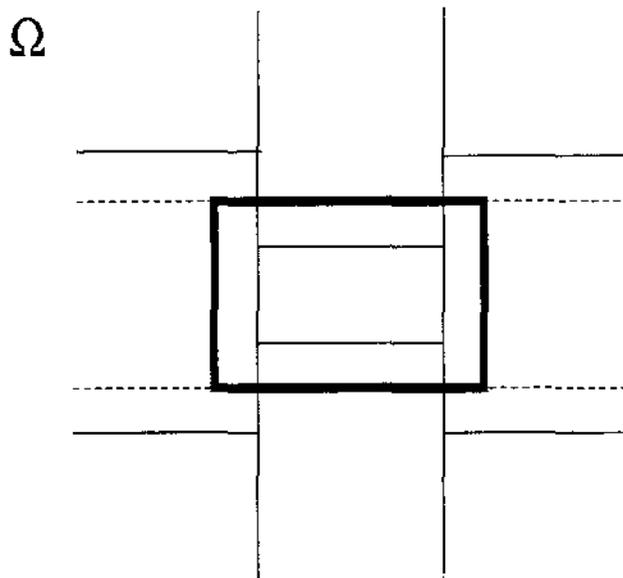


Figura 3.2: Subdomínios para a equação da pressão. O retângulo com linhas grossas é um subdomínio $\tilde{\Omega}_j^p$ que possui componentes retangulares que são reuniões de elementos K_α . As linhas pontilhadas estão localizadas em subdomínios vizinhos, $\tilde{\Omega}_k^p$, tais que $\tilde{\Gamma}_{jk}^p \cap \tilde{\Gamma}_{kj}^p$ possui apenas dois pontos: os pontos de interseção da linha grossa com a linha fina.

$\{\Omega_j^c\}$ utilizando-se as condições de consistência (3.1-3.2), consiste em procurar $\{c_j, v_j\} \in W_j^c \times V_j^c$, $j = 1, \dots, M_c$, tais que

$$\begin{aligned} (\psi \partial c / \partial \tau, \tilde{c})_{\Omega_j^c} + (\nabla \cdot v, \tilde{c})_{\Omega_j^c} &= (g, \tilde{c})_{\Omega_j^c}, & \forall \tilde{c} \in W_j^c, \\ (D^{-1}v, \tilde{v})_{\Omega_j^c} - (c, \nabla \cdot \tilde{v})_{\Omega_j^c} + \sum_{k \neq j} \langle c_j, \tilde{v} \cdot \nu_j^c \rangle_{\Gamma_{jk}^c} &= 0, & \forall \tilde{v} \in V_j^c. \end{aligned}$$

Estas expressões, quando sujeitas à condição de consistência (3.1), tomam a seguinte forma

$$(\psi \partial c / \partial \tau, \tilde{c})_{\Omega_j^c} + (\nabla \cdot v, \tilde{c})_{\Omega_j^c} = (g, \tilde{c})_{\Omega_j^c}, \quad \forall \tilde{c} \in W_j^c, \quad (3.3)$$

$$\begin{aligned} (D^{-1}v, \tilde{v})_{\Omega_j^c} - (c, \nabla \cdot \tilde{v})_{\Omega_j^c} + \sum_{k \neq j} \langle \beta_{jk}^c v_j \cdot \nu_j^c, \tilde{v} \cdot \nu_j^c \rangle_{\Gamma_{jk}^c} \\ = - \sum_{k \neq j} \langle c_k + \beta_{jk}^c v_k \cdot \nu_k^c, \tilde{v} \cdot \nu_j^c \rangle_{\Gamma_{jk}^c}, \quad \forall \tilde{v} \in V_j^c. \end{aligned} \quad (3.4)$$

3.2.2 Equação da pressão

A partição grossa para a pressão requer uma definição com dois passos. O índice (super ou subíndice) p presente nas expressões seguintes referem-se à pressão. Primeiro, seja

$$A = \bigcup_{j=1}^{M_p} B_j, \text{ onde } B_j \cap B_k = \phi \text{ para } j \neq k, \text{ e } \bar{\Omega}_j^p = \bigcup_{\alpha \in B_j} \bar{K}_\alpha,$$

com Ω_j^p (= Interior ($\bar{\Omega}_j^p$)) simplesmente conexo, de forma razoável, novamente preferencialmente convexo. Agora, nós desejamos estender cada Ω_j^p para obter uma decomposição de Ω com superposição de subdomínios. Para uma partição retangular fina, tais como aquelas que serão consideradas em nossos estudos computacionais, nós ilustramos nas Figuras 3.2 e 3.3 possíveis extensões $\tilde{\Omega}_j^p$ de um subdomínio Ω_j^p . Ambas as possibilidades são compatíveis com esquemas paralelizáveis inerentes à decomposição utilizada. Para isto empregamos iterações que são realizadas simultaneamente dentro de cada subdomínio.

Mais formalmente, seja

$$A = \bigcup_{j=1}^{M_p} \tilde{B}_j \quad \text{e} \quad \tilde{\Omega}_j^p = \bigcup_{\alpha \in \tilde{B}_j} \bar{K}_\alpha,$$

e defina $\tilde{\Omega}_j^p = \text{Interior}(\tilde{\bar{\Omega}}_j^p)$. Novamente, assuma que $\tilde{\Omega}_j^p$ é simplesmente conexo, de forma razoável, porém não necessariamente convexo. Então, seja

$$\tilde{\Gamma}_j^p = \partial \tilde{\Omega}_j^p \quad \text{e} \quad \tilde{\Gamma}_{jk}^p = \tilde{\Gamma}_j^p \cap \tilde{\Omega}_k^p, \quad k \neq j.$$

Nós lembramos a necessidade de exigir que $\tilde{\Gamma}_{jk}^p$ seja uma união de faces de elementos K_α ; nenhum ponto interior a qualquer K_α pode pertencer a $\tilde{\Gamma}_{jk}^p$. Agora, denotemos por $\tilde{\nu}_{jk}^p$ o unitário normal exterior a $\tilde{\Omega}_j^p$ sobre $\tilde{\Gamma}_{jk}^p$, e seja

$$\nu_{kj}^p = -\tilde{\nu}_{jk}^p, \quad \forall x \in \tilde{\Gamma}_{jk}^p.$$

Para que o procedimento de decomposição de domínio definido acima seja compatível com o problema global para a equação da pressão, nós devemos exigir que $Q_{jk} = \tilde{\Omega}_j^p \cap \tilde{\Omega}_k^p$, se for não vazio, seja simplesmente conexo e tal que

$$\partial Q_{jk} = \tilde{\Gamma}_{jk}^p \cup \tilde{\Gamma}_{kj}^p \cup (\bar{Q}_{jk} \cap \partial \Omega).$$

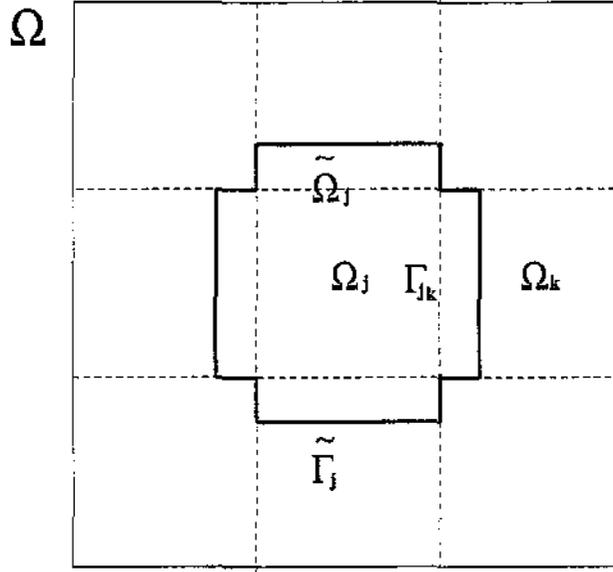


Figura 3.3: Subdomínios opcionais para a equação da pressão.

Além disto, assumamos que $\tilde{\Gamma}_{jk}^p \cap \tilde{\Gamma}_{kj}^p$ consiste (no caso bi-dimensional) de um número finito de pontos isolados. Nos exemplos mostrados nas Figuras 3.2 e 3.3, Q_{jk} é um retângulo.

Considere os espaços $\tilde{V}_j^p = H(\text{div}, \tilde{\Omega}_j^p)$ e $\tilde{W}_j^p = L^2(\tilde{\Omega}_j^p)$, para $j = 1, \dots, M_p$. Para obtermos a formulação fraca de (2.28), sobre $\{\tilde{\Omega}_j^p\}$, nós devemos impor condições de consistência sobre as interfaces $\tilde{\Gamma}_{jk}^p$. Já que $\tilde{\Gamma}_{jk}^p \neq \tilde{\Gamma}_{kj}^p$, somente uma condição pode ser especificada em $\tilde{\Gamma}_{jk}^p$. Nós escolhemos impor a condição de transmissão de Robin. Seja $\beta_{jk}^p > 0$ (não é necessário que $\beta_{jk}^p = \beta_{kj}^p$, mas nós faremos esta escolha em nossos cálculos). Neste caso, a condição de Robin é dada por

$$p_j - \beta_{jk}^p u_j \cdot \tilde{\nu}_{jk}^p = p_k + \beta_{jk}^p u_k \cdot \nu_{kj}^p, \quad \forall \mathbf{x} \in \tilde{\Gamma}_{jk}^p, \quad k \neq j. \quad (3.5)$$

Assim, nós procuramos $\{p_j, u_j\} \in \tilde{W}_j^p \times \tilde{V}_j^p$, $j = 1, \dots, M_p$, tais que

$$\begin{aligned} (\nabla \cdot u_j, \tilde{p})_{\tilde{\Omega}_j^p} &= (q, \tilde{p})_{\tilde{\Omega}_j^p}, & \forall \tilde{p} \in \tilde{W}_j^p, \\ (\mu \mathcal{K}^{-1} u_j, \tilde{u})_{\tilde{\Omega}_j^p} - (p_j, \nabla \cdot \tilde{u})_{\tilde{\Omega}_j^p} + \sum_{k \neq j} (p_j, \tilde{u} \cdot \tilde{\nu}_{jk}^p)_{\tilde{\Gamma}_{jk}^p} &= 0, & \forall \tilde{u} \in \tilde{V}_j^p. \end{aligned}$$

Então, impondo a condição (3.5), chegamos ao seguinte sistema para a pressão

$$(\nabla \cdot u_j, \tilde{p})_{\tilde{\Omega}_j^p} = (q, \tilde{p})_{\tilde{\Omega}_j^p}, \quad \forall \tilde{p} \in \widetilde{W}_j^p, \quad (3.6)$$

$$\begin{aligned} & (\mu \mathcal{K}^{-1} u_j, \tilde{u})_{\tilde{\Omega}_j^p} - (p_j, \nabla \cdot \tilde{u})_{\tilde{\Omega}_j^p} + \sum_{k \neq j} (\beta_{jk}^p u_j \cdot \tilde{\nu}_{jk}^p, \tilde{u} \cdot \tilde{\nu}_{jk}^p)_{\tilde{\Gamma}_{jk}^p} \\ & = - \sum_{k \neq j} (p_k + \beta_{jk}^p u_k \cdot \nu_{kj}^p, \tilde{u} \cdot \tilde{\nu}_{jk}^p)_{\tilde{\Gamma}_{jk}^p}, \quad \forall \tilde{u} \in \tilde{V}_j^p. \end{aligned} \quad (3.7)$$

3.3 Elementos finitos mistos

O espaço de elementos finitos que utilizaremos em nossos métodos iterativos (Capítulo 6) considerarão o espaço de Raviart-Thomas de mais baixa ordem definido sobre a partição fina $\{K_\alpha\}$ - as funções escalares definidas sobre o domínio $\bar{\Omega} = \bigcup_{\alpha \in A} \bar{K}_\alpha$ são constante por partes. Este espaço, definido sobre um único elemento do tipo $K = [0, h] \times [0, h]$, possui dimensão quatro e é gerado pelas quatro funções (vetoriais) base definidas sobre este elemento:

$$w_R = \left(\frac{x}{h}, 0 \right), \quad w_L = \left(\frac{x}{h} - 1, 0 \right),$$

$$w_T = \left(0, \frac{y}{h} \right), \quad w_B = \left(0, \frac{y}{h} - 1 \right).$$

Note que as letras R, L, T e B são referentes às arestas direita, esquerda, de cima e de baixo, respectivamente, do elemento K .

3.3.1 Sistema para a concentração

Seja $V^{c,h} \times W^{c,h}$ um espaço de elementos finitos mistos sobre a partição fina $\{K_\alpha\}$ [9, 75, 82], e seja $V_j^{c,h} \times W_j^{c,h} = V^{c,h}(\Omega_j^c) \times W^{c,h}(\Omega_j^c)$ a restrição deste espaço ao subdomínio Ω_j^c . Uma vez que nenhuma condição de continuidade através das interfaces foi assumida sobre $W^{c,h}$, as condições de consistência (3.1-3.2) podem ser impostas através da introdução de multiplicadores de Lagrange ℓ_{jk}^c para os valores de c^h em Γ_{jk} . Assuma, como é o caso mais comum, que $v_j^h \cdot \nu_j^c, v_j^h \in V_j^{c,h}$, é um polinômio de grau σ_c em $\bar{K}_\alpha \cap \Gamma_{jk}^c$ e que σ_c é independente de j e k . Então, defina P_{σ_c} como o conjunto dos polinômios de grau σ_c e considere os conjuntos

$$\Lambda_{jk}^c = \left\{ \ell : \ell|_{\bar{K}_\alpha \cap \Gamma_{jk}^c} \in P_{\sigma_c}, \Gamma_{jk}^c \neq \emptyset \right\} \quad \text{e} \quad \Lambda^c = \left\{ \ell : \ell|_{\Gamma_{jk}^c} \in \Lambda_{jk}^c \right\}.$$

Note que dois espaços de multiplicadores de Lagrange, Λ_{jk}^c e Λ_{kj}^c , são definidos sobre a interface Γ_{jk}^c . Por motivo de consistência, os multiplicadores sobre Γ_{jk} devem coincidir.

A primeira forma discretizada da equação da concentração é dada procurando-se

$$\{c_j, v_j, \ell_{jk}^c, \ell_{kj}^c\} \in W_j^{c,h} \times V_j^{c,h} \times \Lambda_{jk}^c \times \Lambda_{kj}^c$$

tais que

$$(\psi \partial c_j / \partial \tau, \check{c})_{\Omega_j^c} + (\nabla \cdot v_j, \check{c})_{\Omega_j^c} = (g, \check{c})_{\Omega_j^c}, \quad \forall \check{c} \in W_j^{c,h} \quad (3.8)$$

$$(D^{-1} v_j, \check{v})_{\Omega_j^c} - (c_j, \nabla \cdot \check{v})_{\Omega_j^c} + \sum_{k \neq j} \langle \ell_{jk}^c, \check{v} \cdot \nu_j^c \rangle_{\Gamma_{jk}^c} = 0, \quad \forall \check{v} \in V_j^{c,h}. \quad (3.9)$$

Condições discretas de Robin, equivalentes às condições (3.1-3.2), envolvendo multiplicadores de Lagrange no lugar da restrição da solução da concentração na interface Γ_{jk} , podem ser substituídas em (3.9) para dar

$$(\psi \partial c_j / \partial \tau, \check{c})_{\Omega_j^c} + (\nabla \cdot v_j, \check{c})_{\Omega_j^c} = (g, \check{c})_{\Omega_j^c}, \quad \forall \check{c} \in W_j^{c,h}, \quad (3.10)$$

$$(D^{-1} v_j, \check{v})_{\Omega_j^c} - (c_j, \nabla \cdot \check{v})_{\Omega_j^c} + \sum_{k \neq j} \langle \beta_{jk}^c v_j \cdot \nu_j^c, \check{v} \cdot \nu_j^c \rangle_{\Gamma_{jk}^c} \\ = - \sum_{k \neq j} \langle \ell_{kj}^c + \beta_{jk}^c v_k \cdot \nu_k^c, \check{v} \cdot \nu_j^c \rangle_{\Gamma_{jk}^c}, \quad \forall \check{v} \in V_j^{c,h}. \quad (3.11)$$

Esta forma do sistema para a concentração é conveniente para se definir uma iteração baseada em decomposição de domínio. Isto será feito no Capítulo 6.

3.3.2 Sistema para a pressão

Seja $V^{p,h} \times W^{p,h}$ outro espaço de elemento finito misto (possivelmente diferente de $V^{c,h} \times W^{c,h}$), sobre a partição fina $\{K_\alpha\}$, e seja $\tilde{V}_j^{p,h} \times \tilde{W}_j^{p,h}$ a restrição deste espaço ao subdomínio $\tilde{\Omega}_j^p$, $j = 1, \dots, M_p$. Novamente, é necessário introduzir multiplicadores de Lagrange associados às variáveis escalares, que agora são pressões. Associe ao subdomínio $\tilde{\Omega}_k^p$ multiplicadores de Lagrange ℓ_{jk}^p definidos sobre a interface $\{\tilde{\Gamma}_{jk}^p\}$. Se σ_p é o grau do polinômio $u_k \cdot \nu_{kj}^p$, que é o fluxo normal sobre uma face de um elemento K_α , então defina

$$\tilde{\Lambda}_{jk}^p = \left\{ \ell : \ell|_{\tilde{K}_\alpha \cap \tilde{\Gamma}_{jk}^p} \in P_{\sigma_p}, \tilde{\Gamma}_{jk}^p \neq \emptyset \right\}, \quad \tilde{\Lambda}^p = \left\{ \ell : \ell|_{\tilde{\Gamma}_{jk}^p} \in \tilde{\Lambda}_{jk}^p \right\},$$

onde P_{σ_p} é o conjunto dos polinômios de grau σ_p .

O método híbrido de elementos finitos mistos com tempo contínuo para a equação da pressão (2.28) é dado procurando-se

$$\{p_j, u_j, \ell_{jk}^p\} \in \widetilde{W}_j^p \times \widetilde{V}_j^p \times \widetilde{\Lambda}_{jk}^p$$

tais que

$$(\nabla \cdot u_j, \check{p})_{\widetilde{\Omega}_j^p} = (q, \check{p})_{\widetilde{\Omega}_j^p}, \quad \forall \check{p} \in \widetilde{W}_j^p, \quad (3.12)$$

$$\begin{aligned} & (\mu \mathcal{K}^{-1} u_j, \check{u})_{\widetilde{\Omega}_j^p} - (p_j, \nabla \cdot \check{u})_{\widetilde{\Omega}_j^p} + \sum_{k \neq j} \langle \beta_{jk}^p u_j \cdot \check{\nu}_{jk}^p, \check{u} \cdot \check{\nu}_{jk}^p \rangle_{\widetilde{\Gamma}_{jk}^p} \\ & = - \sum_{k \neq j} \langle \ell_{jk}^p + \beta_{jk}^p u_k \cdot \nu_{kj}^p, \check{u} \cdot \check{\nu}_{jk}^p \rangle_{\widetilde{\Gamma}_{jk}^p}, \quad \forall \check{u} \in \widetilde{V}_j^p. \end{aligned} \quad (3.13)$$

O multiplicador de Lagrange ℓ_{jk}^p que aparece em (3.13) é calculado usando-se a solução da equação da pressão no subdomínio $\widetilde{\Omega}_k^p$. Este cálculo será exibido no Capítulo 6, onde será definido o procedimento iterativo baseado nesta decomposição de domínio.

Capítulo 4

Métodos

Euleriano-Lagrangianos para o Deslocamento Miscível

4.1 Introdução

Por simplicidade na apresentação, de agora em diante, nós assumimos que Ω é um retângulo particionado uniformemente em retângulos K_α (veja a seção 3.2), os quais possuem malha (fina) com células de dimensões h_x e h_y . O espaço de Raviart-Thomas de menor índice ([82]), sobre esta partição, será empregado na discretização dos seguintes pares de funções $\{p^h, u^h\}$ e $\{c^h, v^h\}$. Os métodos de discretização temporal apresentados aqui podem ser aplicados a muitos outros espaços de elementos finitos. Estes métodos também se aplicam a problemas que utilizam discretizações baseadas em diferenças finitas.

Para $\{p^h, u^h\}$ os graus de liberdade naturais em um elemento K_α são o valor constante p_j da pressão sobre K_α , interpretado como o valor no centro de K_α , e quatro valores constantes $u_{j\chi}$, $\chi = L, R, B, T$, da componente normal exterior do fluxo total ($u_j^h \cdot \nu_j^p$) através das faces (esquerda, direita, de baixo e de cima) deste elemento. Uma notação análoga será usada para c^h e v^h . Os multiplicadores de Lagrange ℓ_{jk}^p , $j, k = 1, \dots, M_p$ e $k \neq j$, e ℓ_{jk}^c , $j, k = 1, \dots, M_c$ são constantes em cada face dos elementos e serão denotados por $\ell_{j\chi}^m$, $m = p, c$, sobre $\tilde{\Gamma}_{jk}^p$ e Γ_{jk}^c , respectivamente (veja a seção 3.2).

4.2 Discretização temporal

No desenvolvimento de nossos métodos numéricos nós usaremos uma técnica de decomposição de operadores em dois níveis (ou estágios), para discretizarmos a variável tempo nas equações (2.28) e (2.29). Nós empregaremos estes dois níveis de decomposição de operadores para separar os cálculos referentes à pressão daqueles referentes à concentração (veja [26]) e para separar a parte de transporte da parte difusiva associadas à equação da concentração. Tal decomposição permitir-nos-á considerar passos de tempo satisfazendo

$$\Delta t_p \geq \Delta t_{cd} \geq \Delta t_{ct}, \quad (4.1)$$

onde os subscritos p , cd , e ct referem-se à pressão, difusão da concentração e transporte da concentração, respectivamente.

Assuma que

$$\Delta t_p = i_1 \Delta t_{cd} \quad \text{e} \quad \Delta t_{cd} = i_2 \Delta t_{ct}, \quad (4.2)$$

onde i_1 e i_2 são inteiros positivos. Nós nos referimos a Δt_{ct} como sendo o micropasso para o transporte de concentração. Seja $t^m = m\Delta t_p$ e denote uma função f avaliada no tempo t^m (nível de tempo para a pressão) por f^m . Similarmente, $t_n = n\Delta t_{cd}$ denota o nível de tempo para a concentração depois de um passo de tempo completo para a concentração e $t_{n,\kappa} = t_n + \kappa\Delta t_{ct}$ denota o tempo depois de κ micropassos de transporte de concentração. Então, defina $f_n = f(t_n)$ e $f_{n,\kappa} = f(t_{n,\kappa})$. Assim, a pressão será aproximada por p^m nos tempos t^m , $m = 0, 1, \dots$, e a concentração será aproximada por c_n nos tempos t_n , $n = 1, 2, \dots$; lembramos que ela é especificada no tempo $t = 0$. Contudo, existirão valores $\hat{c}_{n,\kappa}$, para uma variável relacionada à concentração, que serão calculados em tempos intermediários $t_{n,\kappa}$ para $t_n < t_{n,\kappa} \leq t_{n+1}$; estes cálculos levam em conta o transporte físico do solvente e não os efeitos difusivos.

4.3 O procedimento *MMOC*AA

O procedimento *MMOC* usual, que será lembrado logo abaixo, consiste numa seqüência de i_2 micropassos para o transporte da concentração seguido do cálculo da difusão da concentração. O novo *MMOC*AA, desenvolvido para escoamentos miscíveis e que será introduzido a seguir, consiste numa versão globalmente conservativa do *MMOC* usual. Um passo de tempo completo (de t_n a t_{n+1}) para a concentração é descrito a seguir.

- Faça uma seqüência de i_2 micropassos para o transporte da concentração que, aproximadamente, conservam a massa global. Estes micropassos utilizam um *esquema de ajuste de advecção*, descrito abaixo, que é baseado em uma identidade de conservação. Esta identidade será derivada na próxima seção;
- Faça um cálculo do passo de difusão para a concentração;
- Calcule novamente o último micropasso de transporte e o estágio difusivo por um esquema no qual a massa é conservada como uma identidade. Este passo é finalizado com um *esquema de ajuste de advecção-difusão*, também descrito abaixo.

4.3.1 Identidades de conservação

Nós derivamos primeiramente uma identidade de conservação associada à parte do transporte,

$$\phi \frac{\partial c}{\partial t} + u \cdot \nabla c = \psi \frac{\partial c}{\partial \tau}, \quad (4.3)$$

da equação da concentração. Assuma que a função $q(\mathbf{x}, t)$ é constante no tempo em cada intervalo (t_n, t_{n+1}) .

É conveniente definir um operador de extrapolação por

$$E(\Delta t)f(t) = \begin{cases} 2f(t - \Delta t) - f(t - 2\Delta t), & t \geq 2\Delta t, \\ f(t - \Delta t), & \Delta t \leq t < 2\Delta t. \end{cases} \quad (4.4)$$

Agora, integre (4.3) sobre $\Omega \times [t_{n,\kappa-1}, t_{n,\kappa}]$. Já que

$$\int_{\Omega} u \cdot \nabla c \, d\mathbf{x} = \int_{\Omega} \nabla \cdot (cu) \, d\mathbf{x} - \int_{\Omega} cq \, d\mathbf{x}, = - \int_{\Omega} cq \, d\mathbf{x}$$

(basta usar o teorema do divergente e a condição de fronteira (2.19)), segue que

$$\begin{aligned} & \int_{t_{n,\kappa-1}}^{t_{n,\kappa}} \int_{\Omega} \left(\phi \frac{\partial c}{\partial t} + u \cdot \nabla c \right) \, d\mathbf{x} \, dt = \\ & \int_{\Omega} \phi c(t_{n,\kappa}) \, d\mathbf{x} - \int_{\Omega} \phi c(t_{n,\kappa-1}) \, d\mathbf{x} - \int_{t_{n,\kappa-1}}^{t_{n,\kappa}} \int_{\Omega} cq \, d\mathbf{x} \, dt, \end{aligned} \quad (4.5)$$

a qual nós aproximamos por

$$\begin{aligned} & \int_{t_{n,\kappa-1}}^{t_{n,\kappa}} \int_{\Omega} \left(\phi \frac{\partial c}{\partial t} + u \cdot \nabla c \right) \, d\mathbf{x} \, dt \approx \\ & \int_{\Omega} \phi c(t_{n,\kappa}) \, d\mathbf{x} - \int_{\Omega} \phi c(t_{n,\kappa-1}) \, d\mathbf{x} - \Delta t_{ct} \int_{\Omega} E(\Delta t_{ct}) \hat{c}_{n,\kappa} q \, d\mathbf{x}. \end{aligned} \quad (4.6)$$

Nós agora vamos discutir a derivação de outra identidade de conservação, associada a um passo de tempo difusivo completo Δt_{cd} . A integração da equação diferencial (2.18) para a concentração sobre $\Omega \times [t_n, t_{n+1}]$, levando-se em conta as condições de fronteira (2.19)-(2.20), leva-nos à seguinte equação para a conservação de massa:

$$\int_{\Omega} \phi c_{n+1} dx = \int_{\Omega} \phi c_n dx + \int_{t_n}^{t_{n+1}} \int_{\Omega} \tilde{c} q dx dt. \quad (4.7)$$

4.3.2 O MMOC usual

Antes de explicarmos o estágio de transporte do procedimento MMOC nós introduzimos algumas informações preliminares sobre as funções que aproximam as concentrações transportadas em cada micropasso de tempo. Então, considere um elemento K_{α} e denote o seu centro por x_j . Dado c_n , considere $\hat{c}_{n,0}(x_j) = c_n(x_j)$. Agora, estenda $\hat{c}_{n,0}$ ao domínio Ω por interpolação bilinear, usando esses valores centrais. Note que as condições de fronteira para a equação da concentração permite-nos obter valores que estão fora de Ω por meio de reflexão através de sua fronteira ($\partial\Omega$). Indutivamente defina $\hat{c}_{n,\kappa}(x_j) = \hat{c}_{n,\kappa-1}(\bar{x}_{j,n,\kappa})$, a expressão para $\bar{x}_{j,n,\kappa}$ está exibida abaixo. Novamente usando interpolação bilinear nós podemos estender $\hat{c}_{n,\kappa}$ ao domínio todo. Esta função nos fornece uma aproximação da concentração transportada no tempo $t_{n,\kappa}$.

O estágio de transporte do procedimento MMOC consiste em i_2 micropassos de transporte e cada um deles é dado como segue. Para $\kappa = 1, \dots, i_2$, partindo de x_j , siga para trás a tangente à curva característica, associada à derivada direcional $\partial/\partial\tau$ no ponto $(x_j, t_{n,\kappa})$, com o intuito de obter a interseção desta reta com o plano $\{t = t_{n,\kappa-1}\}$. Denote este ponto por

$$\bar{x}_{j,n,\kappa} = x_j - \delta_{j,n,\kappa}, \quad \text{onde} \quad \delta_{j,n,\kappa} = \Delta t_{ct} E_1(m, t_{n,\kappa}) u^m(x_j) / \phi_j,$$

onde E_1 é um operador de extrapolação dado por

$$E_1(m, t)f = \begin{cases} \left(1 + \frac{t - t^m}{\Delta t_p}\right) f^m - \frac{t - t^m}{\Delta t_p} f^{m-1}, & t^m \leq t \leq t^{m+1}, \quad m \geq 1, \\ f^0, & t^m \leq t \leq t^{m+1}, \quad m = 0. \end{cases}$$

Então, defina

$$\bar{c}_{j,n,\kappa} = \hat{c}_{n,\kappa}(x_j) = \tilde{c}(\bar{x}_{j,n,\kappa}, t_{n,\kappa-1}). \quad (4.8)$$

É conveniente introduzir a função $\bar{c}_{n+1} \in W^{c,h}$, definida por

$$\bar{c}_{j,n+1} = \bar{c}_{j,n,i_2}.$$

O estágio difusivo do procedimento *MMOC* é baseado na aproximação

$$\left(\psi \frac{\partial c}{\partial \tau} \right)_{j,n+1} \approx \phi \frac{c_{j,n+1} - \bar{c}_{j,n+1}}{\Delta t_{cd}},$$

e o estágio difusivo da equação da concentração é dado procurando-se

$$\{c_j, v_j, \ell_{jk}^c, \ell_{kj}^c\} \in W_j^{c,h} \times V_j^{c,h} \times \Lambda_{jk}^c \times \Lambda_{kj}^c$$

tais que

$$\left(\phi \frac{c_{j,n+1} - \bar{c}_{j,n+1}}{\Delta t_{cd}}, \check{c} \right)_{\Omega_j^c} + (\nabla \cdot v_{j,n+1}, \check{c})_{\Omega_j^c} = (g_{n+1}, \check{c})_{\Omega_j^c}, \check{c} \in W_j^{c,h}, \quad (4.9)$$

$$\begin{aligned} & (D^{-1}v_{j,n+1}, \check{v})_{\Omega_j^c} - (c_{j,n+1}, \nabla \cdot \check{v})_{\Omega_j^c} + \sum_{k \neq j} \langle \beta_{jk}^c v_{j,n+1} \cdot \nu_j^c, \check{v} \cdot \nu_j^c \rangle_{\Gamma_{jk}^c} \\ & = - \sum_{k \neq j} \langle \ell_{k,j,n+1}^c + \beta_{jk}^c v_{k,n+1} \cdot \nu_k^c, \check{v} \cdot \nu_j^c \rangle_{\Gamma_{jk}^c}, \check{v} \in V_j^{c,h}. \end{aligned} \quad (4.10)$$

Vamos definir no Capítulo 6 uma iteração baseada nesta decomposição de domínio para resolvermos o sistema (4.9-4.10).

4.3.3 Esquema do ajuste de advecção

O propósito da discussão abaixo é a apresentação de um método que nos permita impor a relação de conservação (4.5), na sua forma discretizada (4.6), para cada micropasso de transporte. Um método conceitualmente similar foi introduzido em [28], para deslocamento imiscível. Ele foi chamado de Método Modificado das Características com Ajuste de Advecção (*MMOC*AA). Aplicações deste método a outros problemas, incluindo a análise numérica do procedimento, podem ser encontradas em [30, 31, 69, 88].

Definiremos agora o *MMOC*AA. Considere para cada micropasso, no estágio do transporte do procedimento *MMOC*, a massa (ou volume)

$$\bar{Q}_{n,\kappa} = \sum_j \phi_j \bar{c}(\bar{x}_{j,n,\kappa}, t_{n,\kappa-1}) h_x h_y, \quad (4.11)$$

da componente com concentração c quando comparada com seu valor teórico (a menos da aproximação da integral no espaço-tempo)

$$Q_{n,\kappa-1} = \sum_j \phi_j \hat{c}_{j,n,\kappa-1} h_x h_y + \Delta t_{ct} \sum_j E(\Delta t_{ct}) \hat{c}_{j,n,\kappa} q_{j,n,\kappa} h_x h_y. \quad (4.12)$$

Em geral, $\bar{Q}_{n,\kappa} \neq Q_{n,\kappa-1}$ e a massa não foi conservada.

O micropasso de transporte do *MMOC* é obtido como segue. Interpola-se c_n (interpolação bilinear) para se obter $\hat{c}_{n,0}$. Agora, assuma que $\hat{c}_{n,\kappa-1}$ é conhecida para algum κ tal que $1 \leq \kappa \leq i_2$. Primeiro, realize um micropasso do *MMOC* para obter $\bar{c}_{j,n,\kappa}$, calcule $\bar{Q}_{n,\kappa}$ e $Q_{n,\kappa-1}$ por (4.11) e (4.12), respectivamente. Se $\bar{Q}_{n,\kappa} = Q_{n,\kappa}$, então coloque $\hat{c}_{j,n,\kappa}$ igual a $\bar{c}_{j,n,\kappa}$ e estenda estes valores por interpolação bilinear para obter $\hat{c}_{n,\kappa}$. Caso contrário (como é esperado), seja \mathcal{C} uma constante positiva e faça

$$\mathcal{E}_{j,n,\kappa} = \mathcal{C}h \frac{E_1(m, t_{n,\kappa})u^m(x_j)/\phi_j}{\max_i |E_1(m, t_{n,\kappa})u^m(x_i)/\phi_i|}, \quad (4.13)$$

$$\tilde{x}_{j,n,\kappa}^+ = x_j + \mathcal{E}_{j,n,\kappa}, \quad \tilde{x}_{j,n,\kappa}^- = x_j - \mathcal{E}_{j,n,\kappa}, \quad (4.14)$$

$$\delta_{j,n,\kappa}^+ = \Delta t_{ct}(E_1(m, t_{n,\kappa})u^m)(\tilde{x}_{j,n,\kappa}^+)/\phi_j, \quad (4.15)$$

$$\delta_{j,n,\kappa}^- = \Delta t_{ct}(E_1(m, t_{n,\kappa})u^m)(\tilde{x}_{j,n,\kappa}^-)/\phi_j, \quad (4.16)$$

$$x_{j,n,\kappa}^+ = x_j - \delta_{j,n,\kappa}^+, \quad x_{j,n,\kappa}^- = x_j - \delta_{j,n,\kappa}^-, \quad (4.17)$$

onde $h = \min\{h_x, h_y\}$. Então, seja

$$\bar{c}_{j,n,\kappa}^\# = \begin{cases} \max(\hat{c}_{n,\kappa-1}(x_{j,n,\kappa}^+), \hat{c}_{n,\kappa-1}(x_{j,n,\kappa}^-)), & \text{se } \bar{Q}_{n,\kappa} \leq Q_{n,\kappa-1}, \\ \min(\hat{c}_{n,\kappa-1}(x_{j,n,\kappa}^+), \hat{c}_{n,\kappa-1}(x_{j,n,\kappa}^-)), & \text{se } \bar{Q}_{n,\kappa} > Q_{n,\kappa-1}, \end{cases} \quad (4.18)$$

e forme

$$\bar{Q}_{n,\kappa}^\# = \sum_j \phi_j \bar{c}_{j,n,\kappa}^\# h_x h_y. \quad (4.19)$$

Pode acontecer que $\bar{Q}_{n,\kappa}^\# = \bar{Q}_{n,\kappa}$ para os primeiros micropassos no início de um problema, a partir daí pode-se assumir que $\bar{Q}_{n,\kappa}^\# \neq \bar{Q}_{n,\kappa}$. Se $\bar{Q}_{n,\kappa}^\# = \bar{Q}_{n,\kappa}$, nos demais micropassos, então nós somos forçados a aceitar $\hat{c}_{n,\kappa-1}(\bar{x}_{j,n,\kappa})$ como $\hat{c}_{j,n,\kappa}$, acompanhado possivelmente de um pequeno erro no balanço de massa que atinge, na pior das hipóteses, $\mathcal{O}(\Delta t_p)$ sobre tais passos. Caso contrário, determine $\theta_{n,\kappa}$ tais que

$$Q_{n,\kappa-1} = \theta_{n,\kappa} \bar{Q}_{n,\kappa} + (1 - \theta_{n,\kappa}) \bar{Q}_{n,\kappa}^\#, \quad (4.20)$$

então coloque

$$\hat{c}_{j,n,\kappa} = \theta_{n,\kappa} \bar{c}_{j,n,\kappa} + (1 - \theta_{n,\kappa}) \bar{c}_{j,n,\kappa}^\#, \quad \kappa = 1, \dots, i_2. \quad (4.21)$$

e finalmente coloque

$$\widehat{c}_{j,n+1,0}^{(1)} = \widehat{c}_{j,n,i_2}. \quad (4.22)$$

Isto completa o primeiro passo no estágio de transporte do cálculo da concentração. Agora, nós já estamos prontos para considerar o estágio difusivo deste cálculo. Nós necessitaremos de uma segunda aplicação do procedimento de transporte ao último micropasso de tempo, $t = t_{n,i_2}$. Este será o assunto da próxima seção.

4.3.4 Esquema de ajuste de advecção-difusão

Com $\widehat{c}_{n+1}^{(1)}$ definido por (4.22), resolva a equação de difusão (4.9-4.10), com $\widehat{c}_{j,n+1}$ trocado por $\widehat{c}_{j,n+1}^{(1)}$. Esta equação é dada por

$$\left(\phi \frac{c_{j,n+1}^{(1)} - \widehat{c}_{j,n+1}^{(1)}}{\Delta t_{cd}}, \check{c} \right)_{\Omega_j^c} + (\nabla \cdot v_{j,n+1}^{(1)}, \check{c})_{\Omega_j^c} = (g_{n+1}, \check{c})_{\Omega_j^c}, \check{c} \in W_j^{c,h}, \quad (4.23)$$

$$\begin{aligned} & (D^{-1}v_{j,n+1}^{(1)}, \check{v})_{\Omega_j^c} - (c_{j,n+1}^{(1)}, \nabla \cdot \check{v})_{\Omega_j^c} + \sum_{k \neq j} \langle \beta_{jk}^c v_{j,n+1}^{(1)} \cdot \nu_j^c, \check{v} \cdot \nu_j^c \rangle_{\Gamma_{jk}^c} \\ & = - \sum_{k \neq j} \langle \ell_{k,j,n+1}^{(1)} + \beta_{jk}^c v_{k,n+1}^{(1)} \cdot \nu_k^c, \check{v} \cdot \nu_j^c \rangle_{\Gamma_{jk}^c}, \quad \check{v} \in V_j^{c,h} \end{aligned} \quad (4.24)$$

e tem solução $\{c_{n+1}^{(1)}, v_{n+1}^{(1)}, \ell_{n+1}^{(1)}\}$. Agora, denote por $\widetilde{c}_{n+1}^{(1)}$ os valores da concentração nos pontos de injeção e produção.

Nossa estratégia para obter conservação de massa, nos passos combinados de transporte e difusão no cálculo da concentração, consiste em repetir o último micropasso de transporte seguido por outra solução da equação de difusão (4.23-4.24). Nós veremos que uma combinação linear convexa apropriada das soluções de duas equações de difusão preservará a massa de acordo com a seguinte forma discreta da equação (4.7)

$$\sum_j \phi_j c_{j,n+1} h_x h_y = \sum_j \phi_j c_{j,n} h_x h_y + \sum_j q_{j,n+1} \widetilde{c}_{j,n+1} h_x h_y \Delta t_{cd}. \quad (4.25)$$

É conveniente decompor a função q em suas partes positiva e negativa, isto é, $q = q^+ - q^-$, onde q^+ e q^- são funções não negativas, tais que os seus suportes não apresentam superposição.

Dadas $c_{n+1}^{(1)}$ e $\widetilde{c}_{n+1}^{(1)}$ compare

$$Q_{n+1} = \sum_j \left(\phi_j c_{j,n} + \Delta t_{cd} q^+ \widetilde{c}_{j,n+1}^{(1)} \right) h_x h_y \quad \text{e}$$

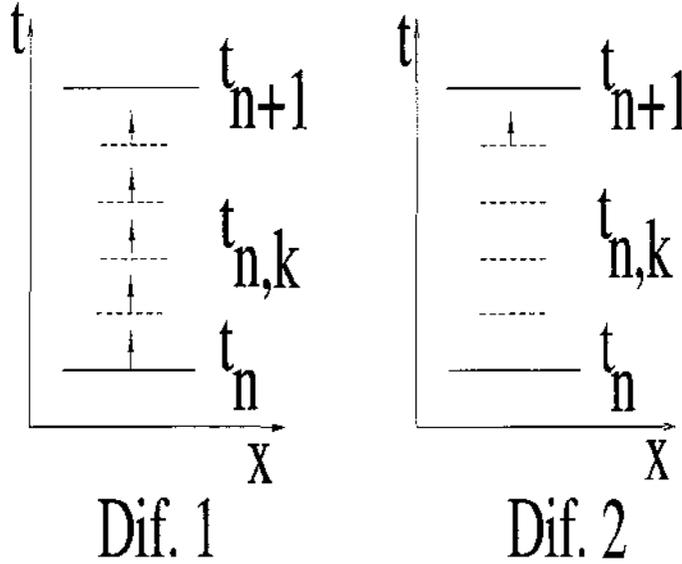


Figura 4.1: A figura do lado esquerdo (Dif. 1) corresponde ao esquema do ajuste de advecção, no passo de transporte, seguido de um primeiro cálculo do estágio difusivo da concentração. A figura do lado direito (Dif. 2) corresponde ao esquema do ajuste de advecção-difusão. Observe que, neste caso, o ajuste de advecção no passo de transporte é feito considerando-se somente o último micropasso de tempo. Após o ajuste no passo de transporte segue-se o cálculo do estágio difusivo, o qual permitirá o ajuste de massa ao final do estágio transporte-difusão completo. A concentração final é dada por uma combinação linear convexa das duas soluções obtidas em cada um dos estágios difusivos.

$$Q_{n+1}^{(1)} = h_x h_y \sum_j (\phi_j + \Delta t_{cd} q^-) c_{j,n+1}^{(1)} h_x h_y.$$

Se $Q_{n+1}^{(1)} = Q_{n+1}$, então massa foi conservada. Neste caso o cálculo conservativo do passo transporte-difusão está concluído e consideramos $c_{j,n+1} = c_{j,n+1}^{(1)}$ como sendo os novos valores da concentração no tempo t_{n+1} . Em geral, $Q_{n+1}^{(1)} \neq Q_{n+1}$ e massa não foi conservada como uma identidade. Para corrigir isto, recalcule o último micropasso de transporte de acordo com (4.18) (a Figura 4.1 exibe um esboço deste procedimento), com $\bar{Q}_{n,\kappa}$ e $Q_{n,\kappa-1}$ trocados por $Q_{n+1}^{(1)}$ e Q_{n+1} , respectivamente. Denote os novos valores do transporte da concentração por $\hat{c}_{n+1}^{(2)}$. Dado os $\hat{c}_{n+1}^{(2)}$, recalcule o estágio difusivo do procedimento *MMOC* (4.23-4.24) e denote os novos valores calculados da concentração por $c_{n+1}^{(2)}$. Os correspondentes valores da concentração nos pon-

tos de fonte são denotados por $\tilde{c}_{n+1}^{(2)}$. Agora, calcule

$$Q_{n+1}^{(2)} = h_x h_y \sum_j (\phi_j + \Delta t_{cd} q^-) c_{j,n+1}^{(2)}, \quad (4.26)$$

e então determine $\theta = \theta_{n+1}$, tal que

$$Q_{n+1} = \theta Q_{n+1}^{(1)} + (1 - \theta) Q_{n+1}^{(2)}. \quad (4.27)$$

A concentração depois do estágio difusivo do procedimento *MMOC* alterado é dada por

$$c_{j,n+1} = \theta c_{j,n+1}^{(1)} + (1 - \theta) c_{j,n+1}^{(2)}, \quad (4.28)$$

e massa foi conservada como uma identidade.

Note que c_{n+1} é uma solução de (4.9-4.10) com

$$\theta \tilde{c}_{n+1}^{(1)} + (1 - \theta) \tilde{c}_{n+1}^{(2)} \quad (4.29)$$

para os valores da concentração transportada e

$$\theta \tilde{c}_{n+1}^{(1)} + (1 - \theta) \tilde{c}_{n+1}^{(2)} \quad (4.30)$$

para os valores da concentração nos pontos de fonte.

4.4 O procedimento *LCELM*

Procedimentos Euleriano-Lagrangianos e procedimentos baseados em características (como o *MMOC*) proporcionam técnicas computacionalmente eficientes para aproximar as soluções de sistemas diferenciais parciais que envolvem equações de difusão dominada por convecção (transporte). Infelizmente, o procedimento *MMOC* usual não preserva certas identidades de conservação de massa satisfeitas pela solução de um tal sistema diferencial.

Na seção anterior vimos que uma variante do procedimento *MMOC*, o *MMOC*AA, conserva massa globalmente (no espaço) em todos os níveis de tempo, além de preservar todas as vantagens computacionais do esquema *MMOC*. Contudo, o procedimento *MMOC*AA, em geral, não preserva massa localmente no espaço. Os métodos conhecidos genericamente por *ELLAM* (*Eulerian Lagrangian Localized Adjoint Methods*, ou Métodos Adjuntos Localizados Euleriano Lagrangianos) - veja [4, 8, 10, 11, 67] - forneceram a desejada conservação local, porém o custo computacional destes esquemas é muito superior ao dos esquemas *MMOC* e *MMOC*AA.

O procedimento *LCELM* (Método Euleriano-Lagrangiano com Conservação Local de Massa), introduzido em [38] para escoamentos imiscíveis, além de discretizar, de uma maneira eficiente, o estágio de transporte da equação da concentração, que é localmente conservativo, ele herda todas as vantagens de baixo custo computacional do procedimento *MMOC* usual.

Existe uma diferença fundamental entre as técnicas empregadas nos procedimentos *MMOC*, *MMOCAA* e *LCELM*. Os procedimentos *MMOC* e *MMOCAA* consideram o sistema diferencial parcial (veja (2.24)) na forma não-divergente e utilizam as curvas características no estágio de transporte que corresponde à decomposição de operador que separa a parte de transporte da parte difusiva da equação de difusão-convecção. No procedimento *LCELM*, o sistema diferencial está na forma divergente e as curvas associadas ao estágio de transporte não são necessariamente as características, como mostramos a seguir.

Para se obter os valores transportados da concentração, no procedimento *LCELM*, nós construímos um tubo, no domínio espaço-tempo. A direção das retas tangentes às curvas que compõe a fronteira do tubo surge naturalmente ao escrevermos o sistema diferencial na forma divergente.

A seguir descrevemos uma maneira de se obter as direções que nos auxiliam na construção de um tubo no domínio espaço-tempo. Vamos considerar uma lei de conservação na forma divergente, dessa forma obtemos uma motivação para o estudo da versão do *LCELM* para escoamento miscível.

A lei de conservação de um ente físico (massa, calor, energia cinética, etc) pode ser estabelecida através do seguinte pressuposto: “Seja \mathcal{U} uma variável física conservativa. Então, a taxa de variação de \mathcal{U} em uma região \mathcal{V} , em um dado intervalo de tempo, é igual a quantidade de \mathcal{U} , $f(\mathcal{U})$, que atravessa a superfície S que envolve \mathcal{V} ”. Isto é válido se não existirem termos de fonte associados à variável \mathcal{U} . Podemos escrever a seguinte expressão matemática

$$\frac{d}{dt} \int_{\mathcal{V}} \mathcal{U} \, dx = - \int_S f(\mathcal{U}) \cdot \nu_{\partial\mathcal{V}} \, dS,$$

onde $\nu_{\partial\mathcal{V}}$ é a normal exterior à superfície S . Considere que \mathcal{U} e f sejam suficientemente suaves para podermos aplicarmos o teorema da divergência e eliminarmos o sinal de integração. Feito isto, obtemos a seguinte expressão para a lei de conservação

$$\frac{\partial \mathcal{U}}{\partial t} + \nabla \cdot f(\mathcal{U}) = 0.$$

Para problemas de escoamento em meios porosos, a massa é a variável que deve ser conservada. Neste caso, a lei de conservação pode ser escrita

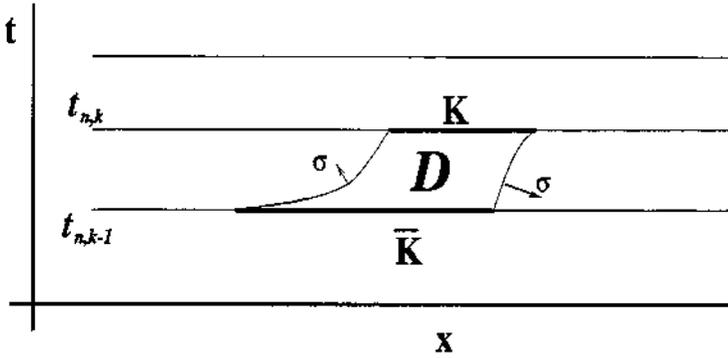


Figura 4.2: O Domínio espaço-tempo \mathcal{D} .

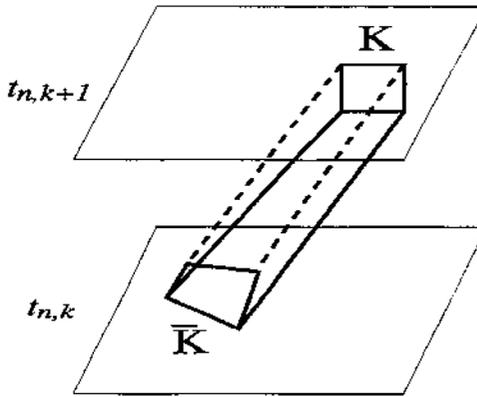


Figura 4.3: Tubo \mathcal{D} , com base superior K (elemento K_α da partição de Ω^c , no tempo $t_{n,k+1}$) e base inferior \bar{K} , que é o quadrilátero, no tempo $t_{n,k}$, obtido a partir dos vértices de K , seguindo-se a direção λ (em (4.33)).

como

$$\frac{\partial c}{\partial t} + \nabla \cdot (f(c)u) = g(c), \tag{4.31}$$

onde $g(c)$ é a função associada a termo de fonte da concentração c e u é a velocidade do escoamento.

Observe que

$$\frac{\partial c}{\partial t} + f'(c)u \cdot \nabla c = \frac{\partial c}{\partial t} + \nabla \cdot (f(c)u) - f(c)\nabla \cdot u. \tag{4.32}$$

Ao considerarmos um domínio no espaço-tempo a identidade anterior

pode ainda ser escrita como

$$\frac{\partial c}{\partial t} + f'(c)u \cdot \nabla c = \nabla_{t,x} \cdot \lambda - f(c)\nabla \cdot u, \quad (4.33)$$

onde $\lambda = (c, f(c)u)$ e $\nabla_{t,x} \cdot \lambda = \frac{\partial c}{\partial t} + \nabla \cdot (f(c)u)$. Portanto uma escolha natural para a direção que vai originar a curva análoga à característica é:

$$\left(1, \frac{f(c)u}{c}\right).$$

No problema de deslocamento miscível a função “ f ” que aparece na fórmula (4.31) satisfaz: $f(c) = c$. Neste caso as regiões no espaço-tempo obtidas a partir das direções característica e a associada a λ (em 4.33) são idênticas.

Vamos descrever a seguir uma identidade satisfeita no estágio de transporte da equação da concentração, associada ao problema de deslocamento miscível. Primeiramente, devemos ressaltar que a equação considerada no estágio de transporte do procedimento *LCELM* é dada por

$$\phi \frac{\partial c}{\partial t} + u \cdot \nabla c = (\bar{c} - c)q. \quad (4.34)$$

Note que o termo de fonte desta equação de transporte não é nulo, como acontecia na equação associada ao procedimento *MMOC*.

Seja \mathcal{D} um tubo no espaço-tempo que tenha base superior \mathbf{K} , elemento K_α da partição de Ω^c no tempo $t_{n,\kappa}$, e base inferior $\bar{\mathbf{K}}$, que é o quadrilátero, no tempo $t_{n,\kappa-1}$, obtido a partir dos vértices de \mathbf{K} . As curvas que determinam a fronteira deste tubo são tais que suas tangentes possuem direção $\left(1, \frac{u}{\phi}\right)$ (veja a Figura 4.2 para um exemplo de \mathcal{D} em um problema unidimensional e a Figura 4.3 para um exemplo de \mathcal{D} em um problema bi-dimensional). Desta forma, não é difícil obter a seguinte igualdade:

$$\int_{\partial \mathcal{D}} \phi c \left(1, \frac{u}{\phi}\right) \cdot \sigma dS = \int_{\mathbf{K}} \phi c(t_{n,\kappa}) dx - \int_{\bar{\mathbf{K}}} \phi c(t_{n,\kappa-1}) dx, \quad (4.35)$$

onde σ é o unitário normal exterior ao tubo \mathcal{D} . Note que $\sigma = \sigma(\mathbf{x}, t)$ é ortogonal à direção $\left(1, \frac{u}{\phi}\right)$.

Usando a igualdade acima (4.35) e integrando, no tubo \mathcal{D} , a equação de transporte (4.34), considerada na forma análoga à fórmula divergente (4.33), nós obtemos a seguinte identidade:

$$\int_{\mathbf{K}} \phi c(t_{n,\kappa}) dx = \int_{\bar{\mathbf{K}}} \phi c(t_{n,\kappa-1}) dx + \int_{\mathcal{D}} \bar{c}q dx dt. \quad (4.36)$$

A identidade acima em sua forma discretizada é que fornece os valores transportados da concentração. Esta discretização é oriunda do espaço de Raviart-Thomas considerado neste trabalho; da regra dos trapézios que é aplicada a segunda integral do lado direito de (4.36) (integral no tubo \mathcal{D}) e de uma fórmula adequada para calcular a primeira integral do lado direito de (4.36) (integral na base inferior do tubo, \bar{K} , que está no plano $t = t_{n,\kappa-1}$). No caso de malha regular retangular, a região \bar{K} é delimitada por um quadrilátero. Neste tipo de malha, os passos para se calcular exatamente a integral de $\phi c_{n,\kappa-1}$, sobre \bar{K}_j ('j' é o índice que faz referência ao j-ésimo elemento da partição fina de Ω , veja a seção 3.2), são dados a seguir. Nós vamos suprimir os índices de tempo $\{n, \kappa\}$ para simplificar a notação.

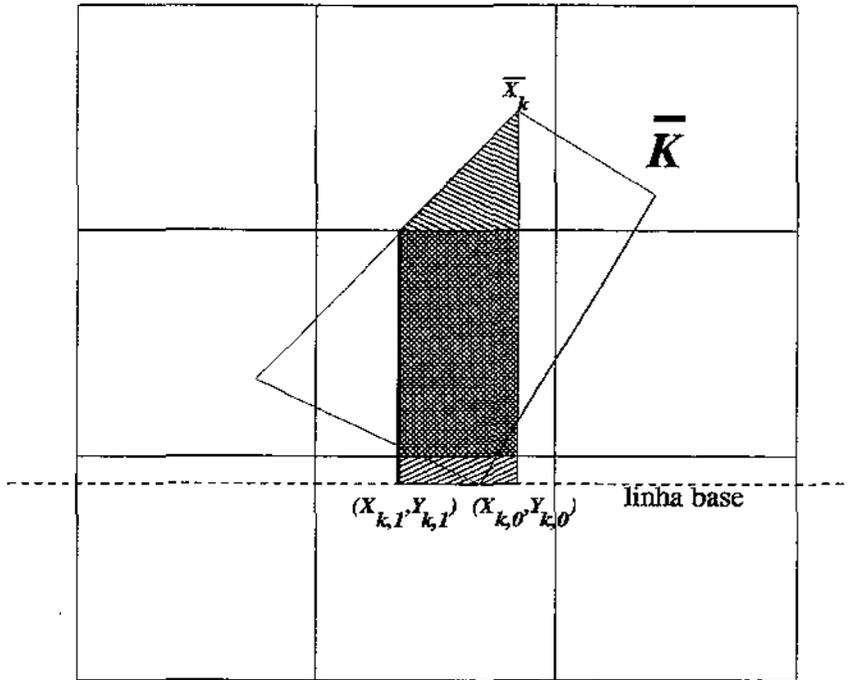


Figura 4.4: Cálculo exato do conteúdo de solvente em \bar{K}_j .

- 1° Dado \bar{K}_j como sendo o quadrilátero com vértices \bar{x}_{jk} , $k = 1, \dots, 4$, determine $\{\alpha_k\}$ tais que $\bar{x}_{jk} \in K_{\alpha_k}$. (Veja a Figura 4.4.)
- 2° Para os pares $\{k, \tilde{k}\} = \{1, 2\}, \{2, 3\}, \{3, 4\}, \{4, 1\}$, determine as interseções, ordenadamente, dos segmentos de linha $[\bar{x}_{jk}, \bar{x}_{j\tilde{k}}]$ com as interfaces dos elementos da partição. Denote estes pontos, sobre $[\bar{x}_{jk}, \bar{x}_{j\tilde{k}}]$, por $\bar{y}_{jkl} = (x_{jkl}, y_{jkl})$, $\ell = 0, \dots, L_{jk}$, onde $\bar{y}_{jk0} = \bar{x}_{jk}$ e $\bar{y}_{jkL_{jk}} = \bar{x}_{j\tilde{k}}$.
- 3° Determine uma linha base: $\{y = y^*\}$, onde $y^* = \min\{y : (x, y) \in \bar{K}_j\}$.

4° Para cada segmento $[\bar{x}_{jk}, \bar{x}_{j,k}]$, calcule a integral Q_{jkl} , $\ell = 1, \dots, L_{jk}$, de $\phi_{C_{n,\kappa-1}}$ sobre o quadrilátero que tem base inferior dada por

$$[(x_{jk(\ell-1)}, y^*), (x_{jk\ell}, y^*)]$$

e base superior dada por

$$[\bar{y}_{jk(\ell-1)}, \bar{y}_{jk\ell}].$$

Desde que $\phi_{C_{n,\kappa-1}}$ é constante por elemento, esta integral pode ser quebrada em integrais sobre alguns retângulos e no mínimo em um triângulo, nos quais o integrando é constante. Agora, some para $\ell = 1, \dots, L_{jk}$:

$$Q_{jk} = -\text{sign}(x_{jkL_{jk}} - x_{jk0}) \sum_{\ell=1}^{L_{jk}} Q_{jkl}.$$

5° Escreva

$$\int_{\bar{K}_j} \phi_{C_{n,\kappa-1}} d\mathbf{x} = \sum_{k=1}^4 Q_{jk}. \quad (4.37)$$

Existe uma maneira adequada de se calcular a velocidade de Darcy nos vértices de um elemento retangular. O procedimento descrito a seguir produz um campo de velocidades com divergência nula, na ausência de termos de fonte. Dado um vértice qualquer considere os quatro elementos da malha que o possuem (se o vértice estiver na fronteira, use reflexão para a construção dos elementos); calcule a velocidade (u^h) de Darcy nos centros desses quatro elementos consistentemente com a definição dessa variável no espaço de Raviart-Thomas (veja seção (4.1)); a partir desses centros forme um novo retângulo, a velocidade em seu centro, que é justamente o vértice em questão, é a interpolante bilinear dos quatro valores das velocidades calculadas anteriormente.

A velocidade de Darcy apresenta imprecisões quando calculada no centro dos elementos que possuem termo de fonte. Por esta razão, o cálculo da velocidade de Darcy nos vértices dos retângulos que se encontram na linha vertical $x = h_x$ devem ser evitados quando utilizamos reservatórios retangulares que possuem termos de fonte distribuídos ao longo da primeira coluna de elementos da malha (lado esquerdo do reservatório). Neste caso, nós somos obrigados a considerar retângulos estendidos que são obtidos pela união de dois retângulos adjacentes em relação a esta linha vertical. São os vértices

desses retângulos estendidos que darão origem aos quadriláteros que formam a base inferior do tubo no domínio espaço-tempo.

No cálculo da integral que envolve os quadriláteros que foram obtidos a partir dos retângulos estendidos é importante que se determine os dois pontos, pertencentes às arestas desses quadriláteros, que interceptam a linha vertical $x = h_x$. Isto nos permite dividir o quadrilátero em duas partes: uma que possui termo de fonte e outra que não possui.

Nós devemos tomar um cuidado especial com os elementos das duas primeiras colunas de nossa malha, pois temos que atribuir corretamente os valores das concentrações transportadas a cada uma das componentes que formam um dado retângulo estendido, que devem ser as médias aritméticas dos dois valores de concentrações associados a cada uma delas. Dessa forma, ao final do estágio de transporte, um elemento da primeira coluna e seu adjacente, na segunda coluna, terão o mesmo valor de concentração.

Observe que ao usarmos o esquema *LCELM*, que é um método que conserva massa localmente no passo de transporte, torna-se desnecessário o ajuste de massa no passo combinado convecção-difusão, como era feito no esquema *MMOCAA* (veja a seção 4.3.4). Portanto o estágio difusivo da equação da concentração no esquema *LCELM* é completamente análogo ao do *MMOC* (veja a seção 4.3.2) e é dado procurando-se

$$\{c_j, v_j, \ell_{jk}^c, \ell_{kj}^c\} \in W_j^{c,h} \times V_j^{c,h} \times \Lambda_{jk}^c \times \Lambda_{kj}^c$$

tais que

$$\left(\phi \frac{c_{j,n+1} - \bar{c}_{j,n+1}}{\Delta t_{cd}}, \check{c} \right)_{\Omega_j^c} + (\nabla \cdot v_{j,n+1}, \check{c})_{\Omega_j^c} = 0, \quad \check{c} \in W_j^{c,h}, \quad (4.38)$$

$$\begin{aligned} (D^{-1}v_{j,n+1}, \check{v})_{\Omega_j^c} - (c_{j,n+1}, \nabla \cdot \check{v})_{\Omega_j^c} + \sum_{k \neq j} \langle \beta_{jk}^c v_{j,n+1} \cdot \nu_j^c, \check{v} \cdot \nu_j^c \rangle_{\Gamma_{jk}^c} \\ = - \sum_{k \neq j} \langle \ell_{k,j,n+1}^c + \beta_{jk}^c v_{k,n+1} \cdot \nu_k^c, \check{v} \cdot \nu_j^c \rangle_{\Gamma_{jk}^c}, \quad \check{v} \in V_j^{c,h}, \quad (4.39) \end{aligned}$$

onde $\bar{c}_{j,n+1} = \bar{c}_{j,n,i_2}$ é calculado pela forma discretizada da equação (4.36). O lado direito da equação (4.38) é igual a zero porque a função associada ao termo de fonte é nula, pois este termo foi incorporado à equação de transporte (4.34).

Capítulo 5

Simulações Numéricas

5.1 Introdução

Neste Capítulo discutimos diversas simulações numéricas de escoamentos miscíveis incompressíveis em meios porosos heterogêneos.

Uma descrição detalhada dos algoritmos computacionais utilizados para os procedimentos *MMOC*, *MMOCAA* e *LCELM* é o objeto da seção 5.2. Na seção 5.3 exibimos um estudo de convergência numérica dos procedimentos *MMOCAA* e *LCELM*, que é realizado através de sucessivos refinamentos da malha computacional e dos passos de tempo. Alguns estudos de sensibilidade dos métodos numéricos aos diversos parâmetros que definem o escoamento também são apresentados. Na seção 5.4 nós analisamos várias simulações com o objetivo de se comparar os procedimentos *MMOC*, *MMOCAA* e *LCELM*. Faremos referência ao Capítulo 6 para a solução dos problemas de álgebra linear que aparecem a cada passo de tempo de uma simulação.

As simulações discutidas neste Capítulo foram realizadas levando-se em consideração dois modelos de geometria para o reservatório: *slab* horizontal e *five-spot*. O *slab* horizontal corresponde a uma região computacional retangular e o *five-spot* corresponde a um quadrado. As condições de contorno e as condições iniciais consideradas são dadas a seguir. Para o *slab* horizontal a injeção de solvente é feita uniformemente ao longo da fronteira esquerda do reservatório e uma mistura de solvente e óleo é produzida uniformemente ao longo da fronteira direita; o escoamento não ocorre nas fronteiras superior e inferior. No caso da geometria *five-spot* a injeção de solvente é feita em um dos cantos do quadrado e a produção de fluido se dá no canto diametralmente oposto ao de injeção; as fronteiras do reservatório são impermeáveis ao escoamento. Em ambas as geometrias o termo de fonte é calculado de forma

que, nos problemas de escoamento considerados nesta tese, um volume poroso seja injetado na região computacional a cada 5 anos. Nos experimentos discutidos neste Capítulo e no próximo assumimos que a porosidade tem o valor $\phi = 0.1$.

Os seguintes dados, a menos que mencionemos valores diferentes, foram mantidos constantes nas simulações descritas neste Capítulo:

Dispersão hid.	$d_\ell = 0.014 \text{ m}$	$d_t = 0.0014 \text{ m}$
Coef. de dif. molecular	$dm = 1.0 \cdot 10^{-7} \text{ cm}^2/\text{s}$	
Função de viscosidade	$\mu(c) = \{(1 - c) + (M)^{1/4}c\}^{-4}\mu_o$	$M = \mu_o/\mu_s$
	$c = c_{\text{solvente}}$	
	$c_o = 1 - c_s$	

Para a maior parte dos experimentos consideraremos um campo heterogêneo de permeabilidades (variável como função da posição). Estes campos serão especificados abaixo para cada conjunto de simulações.

Sempre assumimos que, no início do processo de injeção, o reservatório não contém solvente. Isto é, a concentração do solvente a ser injetado tem o valor inicial $c(x) = 0$.

5.2 Algoritmos computacionais

Uma primeira comparação entre os procedimentos estudados aqui pode ser feita por uma análise direta de seus algoritmos.

O algoritmo computacional completo do método *MMOC* é dado por:

- Dadas a concentração inicial $c^0 = c_0$ e a função q avaliada em $t = 0$, calcule o campo inicial de pressões: p^0 , resolvendo-se o sistema (3.12)-(3.13) (consulte a seção 6.3 para obter o método iterativo que resolve este sistema). Então avalie u^0 de acordo com (6.18) e (6.25).
- Para $m \geq 0$ e $n \geq 0$, calcule $\bar{c}_{n,\kappa}$ por (4.8), $\kappa = 1, \dots, i_2$ (veja (4.2)).
- Se $\kappa = i_2$, coloque $\bar{c}_{n+1} = \bar{c}_{n,i_2}$. Então, calcule c_{n+1} resolvendo-se (4.9)-(4.10); faça uso do método iterativo descrito na subseção 6.2.2.
- Se $n+1 = 0 \pmod{i_1}$, calcule p^m , resolvendo-se o sistema (3.12)-(3.13) para o tempo $t^m = t_{n+1}$ (veja (4.2)).
- Se $t^m < T$, onde T é o tempo final da simulação desejada, então retorne ao segundo item; caso contrário, pare.

O algoritmo computacional completo do método *MMOC* é dado por:

- Dadas a concentração inicial $c^0 = c_0$ e a função q avaliada em $t = 0$, calcule o campo inicial de pressões: p^0 , resolvendo-se o sistema (3.12)-(3.13) (consulte a seção 6.3 para obter o método iterativo que resolve este sistema). Então avalie u^0 de acordo com (6.18) e (6.25).
- Para $m \geq 0$ e $n \geq 0$, calcule $\hat{c}_{n,\kappa}$ por (4.21), $\kappa = 1, \dots, i_2$ (veja (4.2)).
- Se $\kappa = i_2$, coloque $\hat{c}_{n+1}^{(1)} = \hat{c}_{n,i_2}$. Então, calcule $c_{n+1}^{(1)}$ resolvendo-se (4.23)-(4.24); faça uso do método iterativo descrito na subseção 6.2.2.
- Calcule novamente o último passo de transporte de acordo com (4.18) (com $\bar{Q}_{n,\kappa}$ e $Q_{n,\kappa-1}$ substituídos por $Q_{n+1}^{(1)}$ e Q_{n+1} , respectivamente) e obtenha $\hat{c}_{n+1}^{(2)}$.
- Dado $\hat{c}_{n+1}^{(2)}$ calcule $c_{n+1}^{(2)}$ resolvendo novamente o sistema (4.23)-(4.24).
- Calcule c_{n+1} pela combinação linear convexa de $c_{n+1}^{(1)}$ e $c_{n+1}^{(2)}$, como em (4.28).
- Se $n+1 = 0 \pmod{i_1}$, calcule p^m , resolvendo-se o sistema (3.12)-(3.13) para o tempo $t^m = t_{n+1}$ (veja (4.2)).
- Se $t^m < T$, onde T é o tempo final da simulação desejada, então retorne ao segundo item; caso contrário, pare.

O algoritmo computacional completo do método *LCEL* é dado por:

- Dadas a concentração inicial $c^0 = c_0$ e a função q avaliada em $t = 0$, calcule o campo inicial de pressões: p^0 , resolvendo-se o sistema (3.12)-(3.13) (consulte a seção 6.3 para obter o método iterativo que resolve este sistema). Então avalie u^0 de acordo com (6.18) e (6.25).
- Para $m \geq 0$ e $n \geq 0$, calcule $\bar{c}_{n,\kappa}$ usando a forma discretizada da equação (4.36), $\kappa = 1, \dots, i_2$ (veja (4.2)).
- Se $\kappa = i_2$, coloque $\bar{c}_{n+1} = \bar{c}_{n,i_2}$. Então, calcule c_{n+1} resolvendo-se (4.38)-(4.39); faça uso do método iterativo descrito na subseção 6.2.2.
- Se $n+1 = 0 \pmod{i_1}$, calcule p^m , resolvendo-se o sistema (3.12)-(3.13) para o tempo $t^m = t_{n+1}$ (veja (4.2)).
- Se $t^m < T$, onde T é o tempo final da simulação desejada, então retorne ao segundo item; caso contrário, pare.

Note que o algoritmo para o procedimento *LCELM* é similar ao algoritmo para o *MMOC* e relativamente mais simples do que o algoritmo para o *MMOCAA*. Uma simplificação que ocorre no *LCELM* quando comparado com o *MMOCAA* é que não existe a necessidade da combinação linear convexa (4.28), porque o estágio de transporte é calculado exatamente, através da identidade (4.36). Os detalhes deste cálculo foram expostos no Capítulo 4. Outra simplificação está presente no estágio difusivo que não apresenta termo de fonte, pois este foi incorporado ao estágio de transporte. Cabe ressaltar, no entanto, que o cálculo exato da concentração sobre quadriláteros, presente no *LCELM* mas não nos outros métodos, exige um esforço computacional relativamente grande.

5.3 Justificativa dos métodos

Nesta seção vamos discutir vários estudos de refinamento de malha e várias simulações numéricas com o objetivo de verificar a sensibilidade dos métodos numéricos à variação de diversos parâmetros que definem o escoamento.

Para efeito da investigação do comportamento dos métodos sob refinamento das malhas espacial e temporal consideramos, inicialmente, um problema modelo que consiste em um reservatório com a geometria *slab* tendo 256 metros por 128 metros. A permeabilidade absoluta foi especificada em uma malha com 64×32 elementos quadrados. Esta malha foi mantida fixa, à medida que a malha espacial foi refinada.

O primeiro estudo de refinamento de malha aparece nas Figuras 5.1 e 5.2 onde utilizou-se o *MMOCAA* e o *LCELM*, respectivamente. Nestas Figuras mostramos curvas de nível para a concentração do solvente depois de 700 dias de injeção; os níveis mostrados são: 0.1, 0.2, ..., 0.9. Três malhas foram utilizadas neste estudo: 64×32 (quadros de cima), 128×64 (quadros do meio) e 256×128 (quadros de baixo). Para a simulação com malha 64×32 o passo de tempo para o cálculo da pressão e do estágio difusivo da concentração foi de 10 dias. Para cada estágio difusivo 10 micropassos foram utilizados para o transporte. À medida que a malha espacial foi refinada os passos de tempo para a pressão e para o estágio difusivo da concentração foram divididos por um fator de 2. Nestes estudos assumimos um $C_V = 0.99$ para o campo de permeabilidades (veja o Capítulo 7 para a definição do C_V , uma medida sem dimensão física da variabilidade presente no campo de permeabilidades) e uma razão de viscosidades $M = 5$. Note nestas Figuras a boa convergência dos métodos sob o refinamento de malha.

Em seguida, repetimos o mesmo estudo de refinamento de malha para

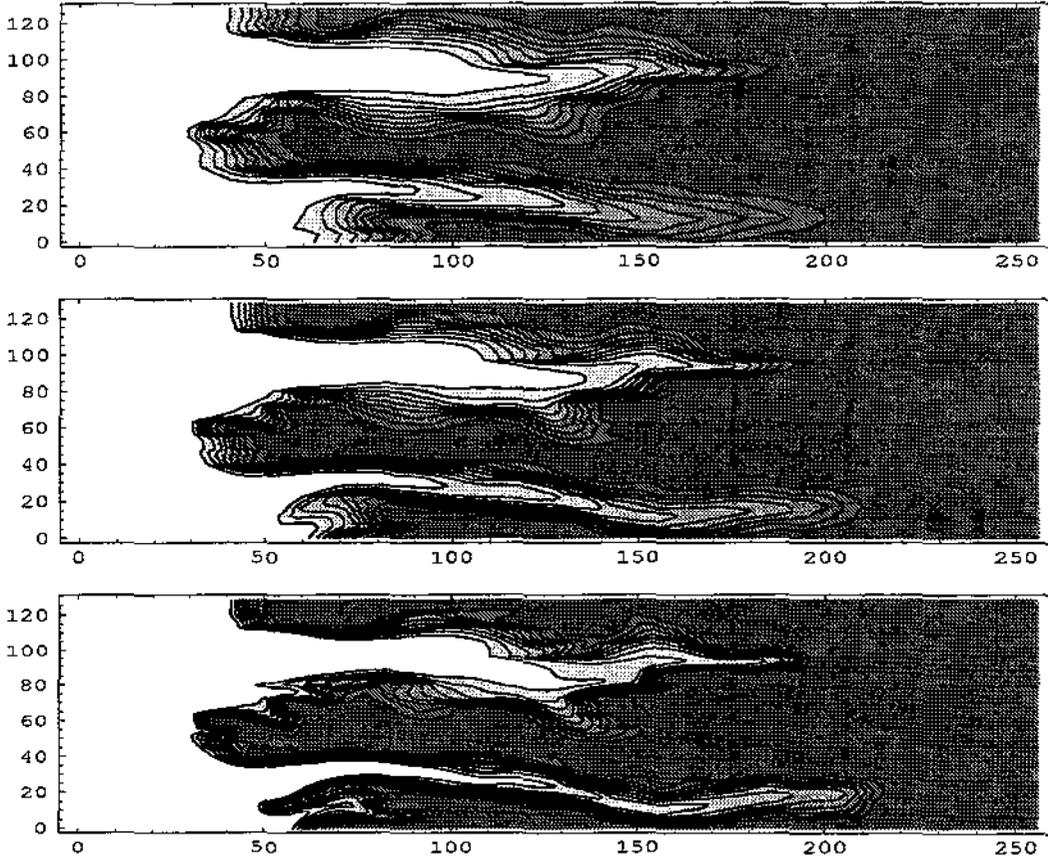


Figura 5.1: Estudo de refinamento de malha para o procedimento *MMOCAA*. Consideramos um campo de permeabilidades com $C_V = 0.99$. Note a boa convergência numérica do método à medida que a malha computacional é refinada.

uma formação rochosa bem mais heterogênea, com $C_V = 3.53$. Todos os outros parâmetros foram mantidos como no estudo que levou aos resultados descritos nas Figuras 5.1 e 5.2. Novamente, tanto para o *MMOCAA* como para o *LCELM*, observamos um convergência numérica satisfatória. Estes

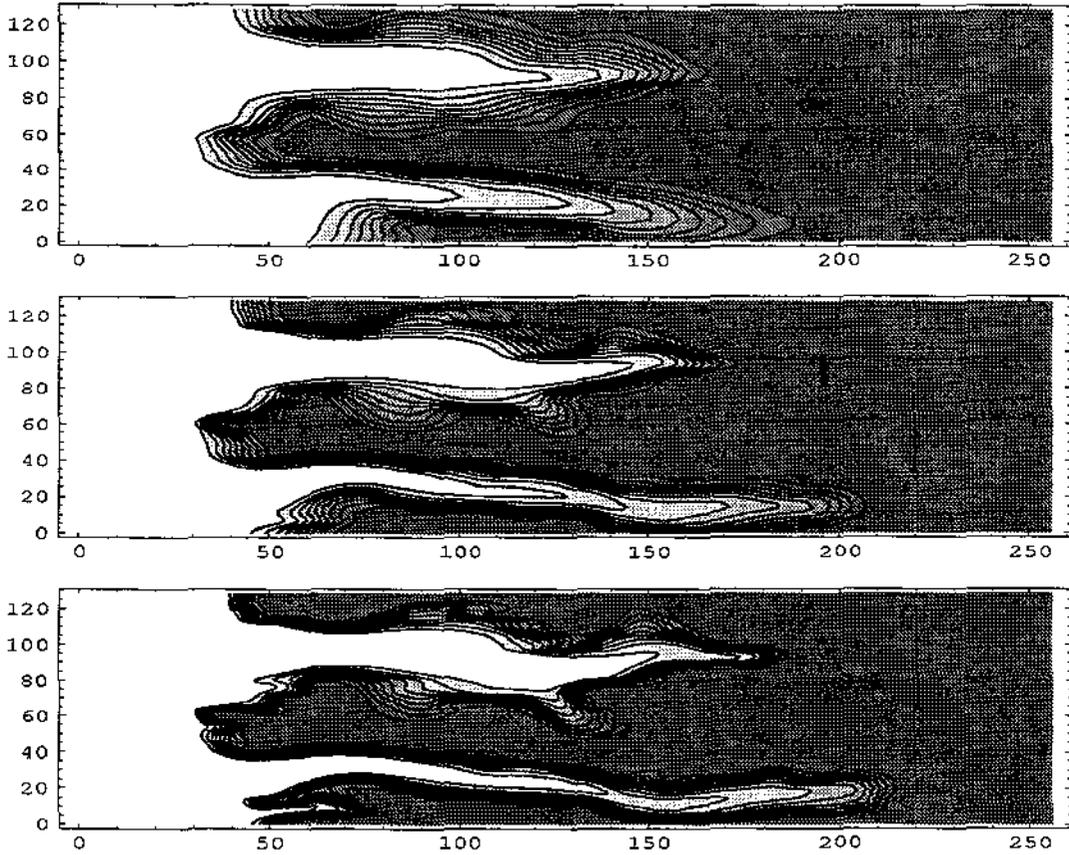


Figura 5.2: Estudo de refinamento de malha para o procedimento *LCELM*. Consideramos um campo de permeabilidades com $C_V = 0.99$. Note a boa convergência numérica do método à medida que a malha computacional é refinada.

resultados aparecem nas Figuras 5.3 e 5.4.

Consideramos em seguida o nível de conservação global da massa para o *LCELM*. Note que para o *MMOCAA* esta questão não é relevante, pois a conservação ocorre no método como uma identidade. No caso do *LCELM*

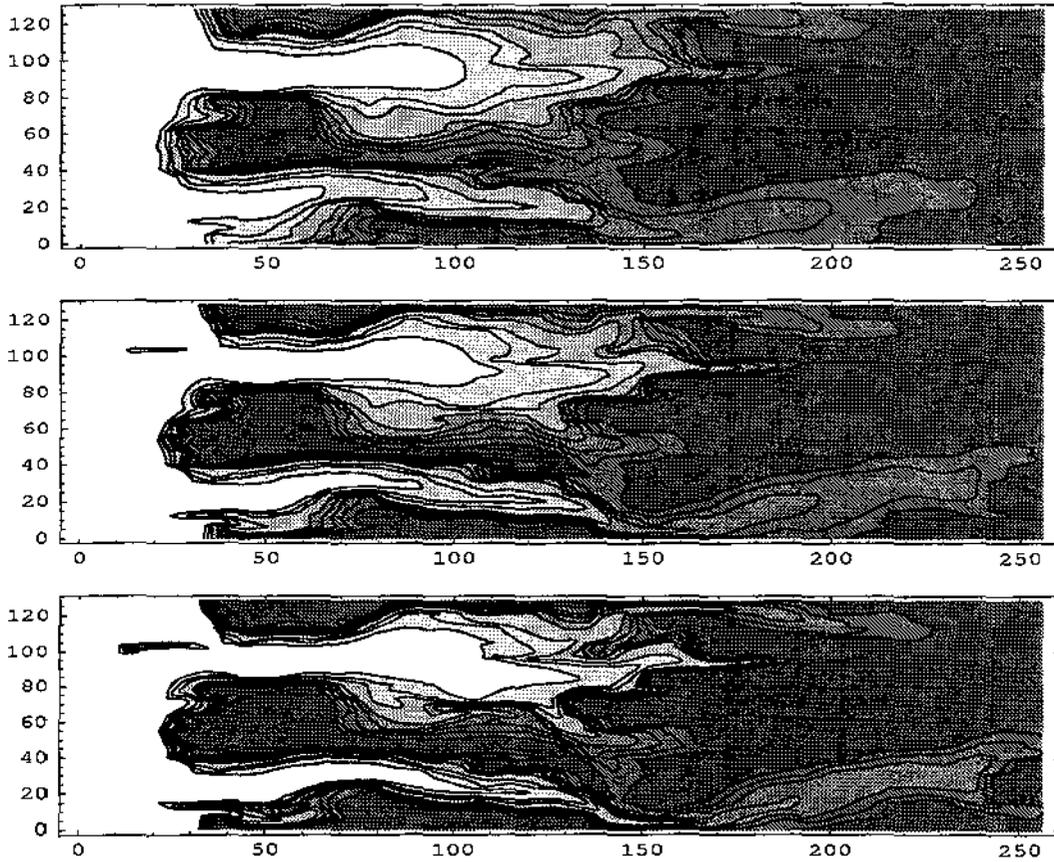


Figura 5.3: Estudo de refinamento de malha para o procedimento *MMOCAA*. Consideramos um campo de permeabilidades com $C_V = 3.53$. Note a boa convergência numérica do método à medida que a malha computacional é refinada.

pequenas imprecisões no campo de velocidades podem levar à valores de concentração levemente maiores que 1.0 (este fato é observado principalmente perto dos poços de injeção). Se o valor da concentração transportada é maior que 1.0, em algum elemento, nós modificamos este valor para 1.0. Esta cor-

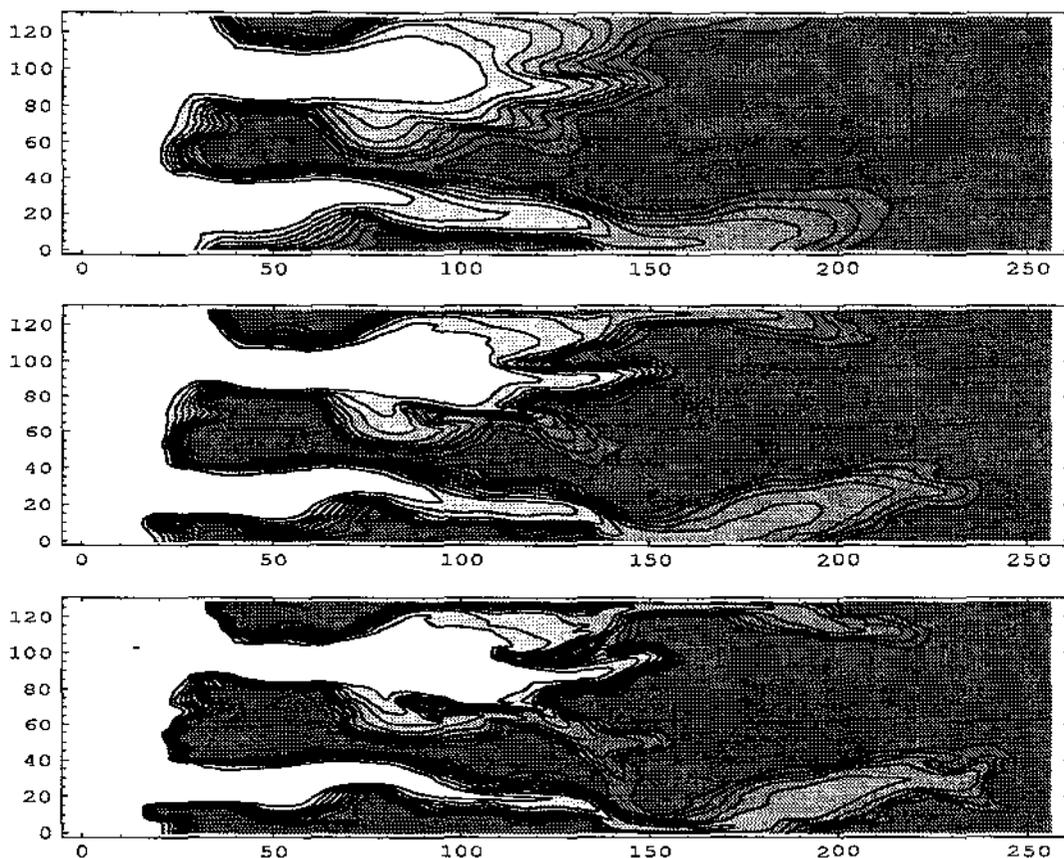


Figura 5.4: Estudo de refinamento de malha para o procedimento *LCELM*. Consideramos um campo de permeabilidades com $C_V = 3.53$. Note a boa convergência numérica do método à medida que a malha computacional é refinada.

reção no valor da concentração transportada leva a um erro na conservação global da massa que investigaremos a seguir. Para o terceiro quadro da Figura 5.4 o erro relativo na conservação da massa depois de 700 dias de injeção de solvente foi 0.28 %. Consideramos a simulação que levou ao terceiro quadro

Tabela 5.1: Erro relativo na conservação da massa (*LCELM*).

Micropassos	erro (%)
10	0.28
20	0.19
30	0.15
150	0.10

da Figura 5.4 como nosso problema teste. Todos os parâmetros desta simulação foram preservados, exceto o número de micropassos para o transporte que foi variado. Na Tabela 5.1 mostramos a dependência do erro relativo na conservação da massa como função do número de micropassos para o transporte. Neste estudo mantivemos os passos de tempo para o estágio difusivo da concentração e para a pressão fixos em 2.5 dias. A Tabela 5.1 mostra que um aumento grande no número de micropassos não leva a uma melhora considerável na conservação da massa. Ao final desta seção discutiremos novas estratégias para a implementação do *LCELM* que podem levar a uma melhor conservação local (e portanto, global) da massa.

A seguir consideramos um estudo no qual a instabilidade dinâmica presente no escoamento é maior: $M = 20$. Realizamos um estudo semelhante ao que foi descrito acima na Figura 5.2, porém utilizamos mais um nível de refinamento de malha. Mais especificamente, as malhas utilizadas para o *LCELM* foram (de cima para baixo na Figura 5.5): 64×32 , 128×64 , 256×128 e 512×256 . Note que para os dois primeiros níveis de discretização parte do *finger* superior nos dois primeiros quadros da Figura 5.5 fica suprimida, por falta de resolução numérica. No entanto, para malhas suficientemente finas, dois canais preferenciais se estabelecem no escoamento e são preservados sob refinamento de malha.

O segundo estudo de refinamento de malha aparece nas Figuras 5.6 e 5.7 onde utilizou-se o *MMOCAA* e o *LCELM*, respectivamente. Nestas Figuras mostramos curvas de nível para a concentração do solvente depois de 600 dias de injeção; os mesmos níveis de concentração mostrados no primeiro estudo de refinamento de malha são mostrados aqui. Consideramos um campo (heterogêneo) maior de permeabilidades, definido em uma malha com 256×64 blocos quadrados. Este campo foi tomado como sendo um quarto dos campos utilizados nos estudos de macrodispersão na segunda parte desta tese. O objetivo deste segundo estudo foi a determinação do nível de refinamento adequado para uma boa resolução numérica das heterogeneidades geológicas. Para este fim, além de analisarmos as curvas de nível, vamos mos-

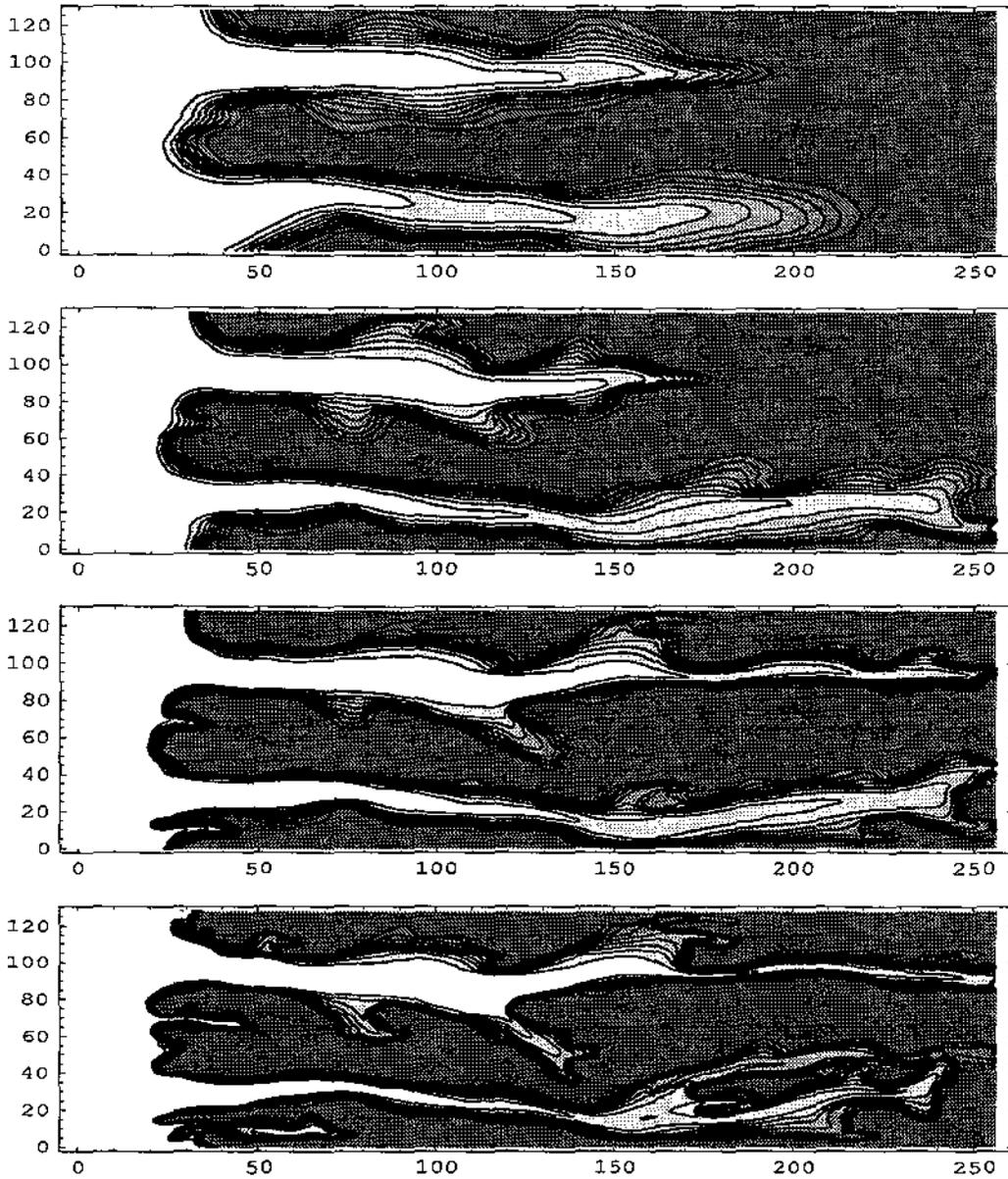


Figura 5.5: Estudo de refinamento de malha para o procedimento *LCELM* com $M = 20$. Consideramos um campo de permeabilidades com $C_V = 0.99$. Note que malhas grosseiras suprimem parte do *finger superior*.

trar também a média transversal da concentração como função da posição. O estudo da macrodispersão está baseado nestes perfis.

Duas malhas computacionais foram utilizadas neste estudo: 256×64 (quadros de cima) e 512×128 (quadros de baixo). Para a simulação com malha 256×64 o passo de tempo para o cálculo da pressão e do estágio difusivo da concentração foi de 1 dia. Para cada estágio difusivo 10 micropassos foram utilizados para o transporte. Para a malha mais refinada (512×128) o passo de tempo para a pressão e para o estágio difusivo da concentração foi de 0.5 dias, mantidos os 10 micropassos para o transporte. Nestes estudos assumimos um $C_V = 0.99$ para o campo de permeabilidades e uma razão de viscosidades $M = 5$. Note nas Figuras 5.6 e 5.7 que há um pequeno alongamento dos *fingers* à medida que se refina a malha computacional, embora a região onde o solvente e o óleo se misturam macroscopicamente não se altere significativamente. Este ponto pode ser melhor entendido pela análise da Figura 5.8. Nesta Figura apresentamos perfis de concentração (médias transversais) como função da posição (medida em centímetros). No quadro de cima da Figura 5.8 mostramos perfis relativos às simulações com o *MMOCAA*; a linha sólida se refere à simulação com a malha mais grosseira e a linha tracejada à simulação com a malha mais fina. O quadro do meio apresenta os perfis relativos às simulações com o *LCELM*. Já o quadro de baixo mostra, para efeito de comparação, os perfis relativos às simulações com o *MMOCAA* (linha tracejada) e *LCELM* (linha sólida) na malha com 256×64 elementos. Observe que tanto para o *MMOCAA* como para o *LCELM* os perfis obtidos com a malha computacional com 256×64 são muito próximos dos perfis obtidos com a malha mais refinada. Além disto, como era de se esperar, os perfis produzidos pelos dois métodos para o transporte são muito similares. Os dois primeiros quadros da Figura 5.8 indicam que o nível de discretização menos refinada pode ser utilizada nos estudos da segunda parte deste trabalho. No Capítulo 8 a nossa escolha de malhas será ainda verificada por comparação da taxa de crescimento da região onde o óleo e o solvente se misturam macroscopicamente com: (i) resultados analíticos, derivados por teoria de perturbação, disponíveis para o traçador passivo na presença de heterogeneidades com C_V pequeno; (ii) resultados computacionais, obtidos por outros simuladores para o traçador passivo, não restritos a valores pequenos para o C_V .

Concluimos esta seção com um estudo da sensibilidade da solução numérica no valor da dispersão hidrodinâmica. Consideramos o problema do traçador ($M = 1$) numa geometria *slab* com um campo de permeabilidades definido em uma malha com 256×128 blocos ($C_V = 0.99$). O reservatório tem tamanho $256\text{ m} \times 128\text{ m}$ e a malha computacional utilizada tem 256×128 elementos. A Figura 5.9 mostra o resultado de duas simulações em termos de superfícies para a concentração. O quadro de baixo mostra os efeitos de suavização (como esperado) do perfil da concentração devido ao tensor es-

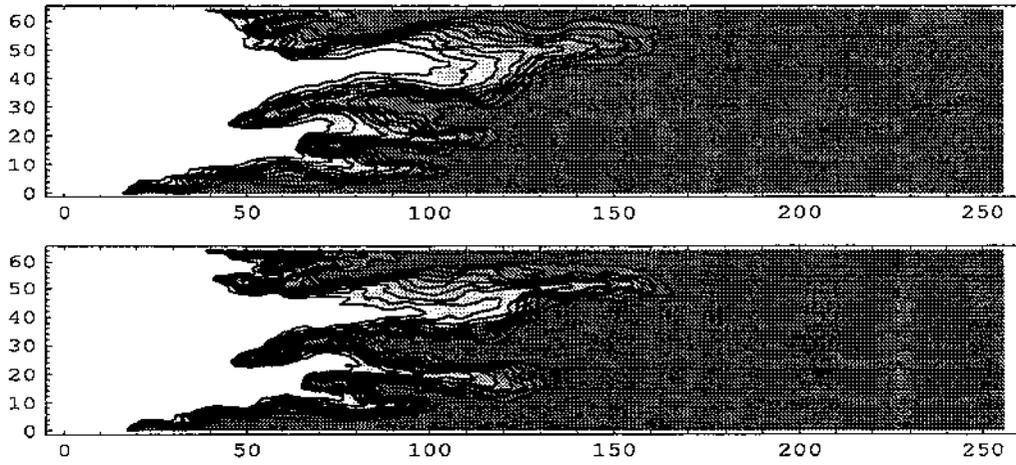


Figura 5.6: Estudo de refinamento de malha para o procedimento *MMOCAA* com $M = 5$. Consideramos um campo de permeabilidades com $C_V = 0.99$.

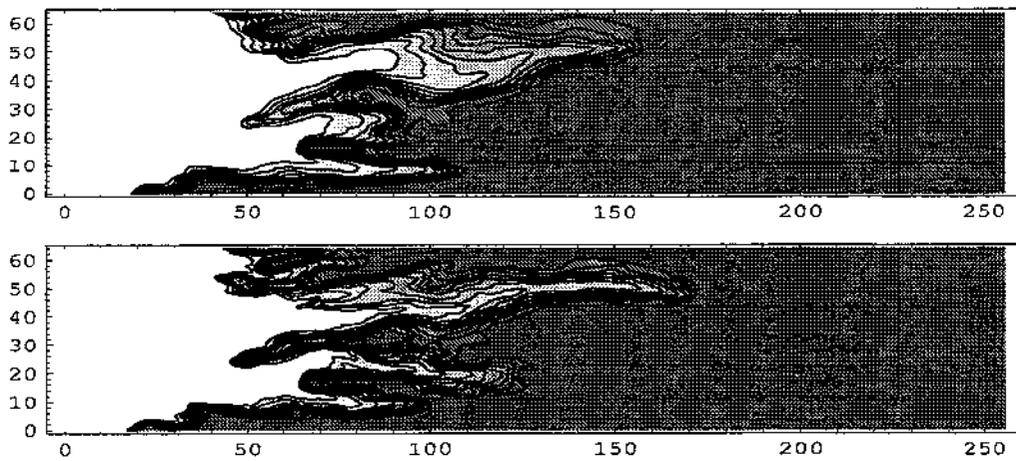


Figura 5.7: Estudo de refinamento de malha para o procedimento *LCELM* com $M = 5$. Consideramos um campo de permeabilidades com $C_V = 0.99$.

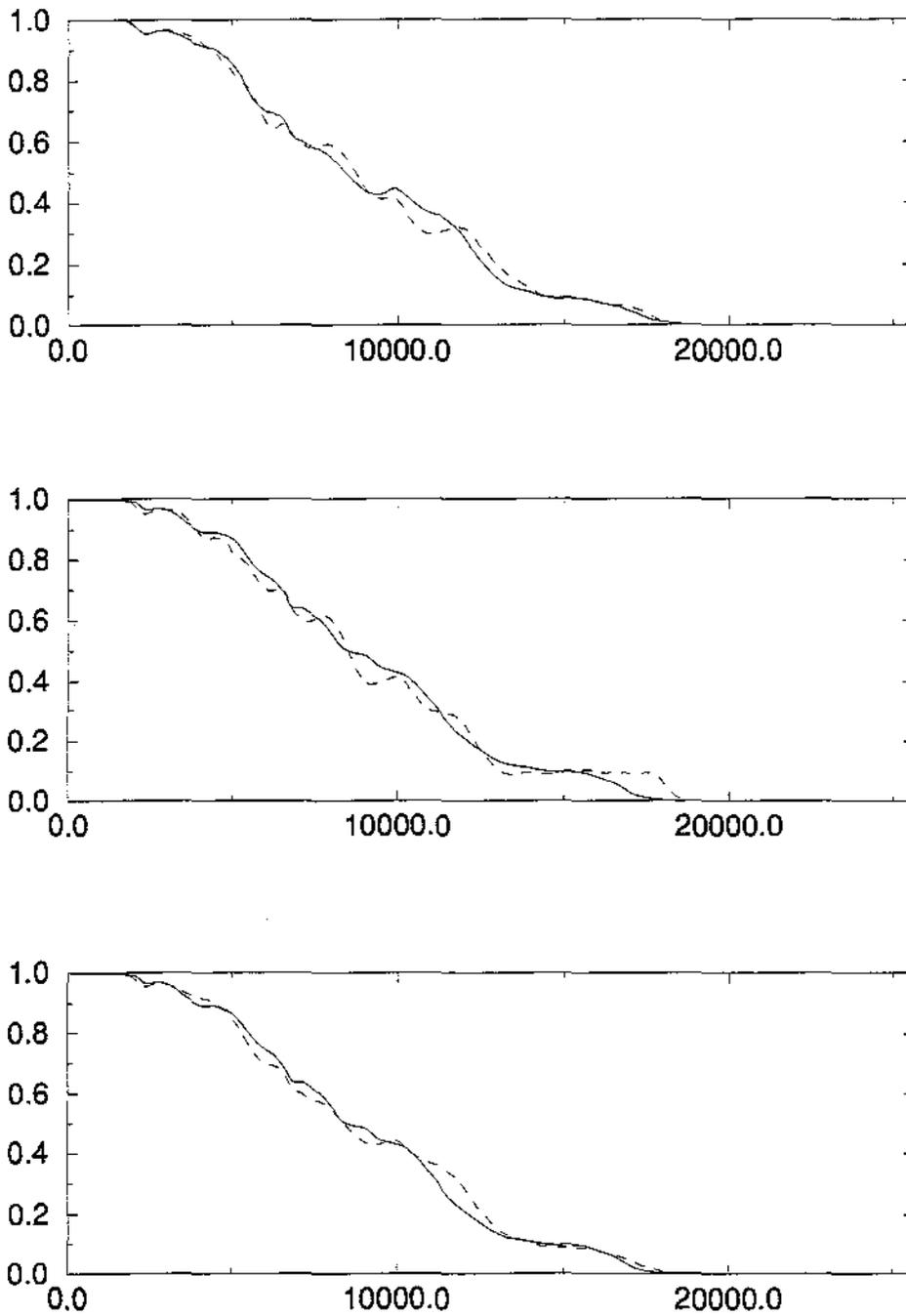


Figura 5.8: Perfis de concentração para um problema modelo depois de 600 dias de injeção de solvente. De cima para baixo: *MMOCAA* (primeiro quadro), *LCELM* (segundo quadro) e comparação dos dois métodos (terceiro quadro). Nos dois quadros de cima a linha sólida se refere a uma simulação com malha computacional com 256×64 elementos; a linha tracejada foi obtida com uma malha contendo 512×128 elementos.

toçástico de dispersão hidrodinâmica (2.15), com $d_\ell = 1.4$ e $d_t = 0.14$. O quadro de cima, por sua vez, mostra uma simulação onde a difusão molecular é o único mecanismo de difusão presente no problema.

5.4 Resultados numéricos comparativos

O objetivo desta seção é a comparação de simulações numéricas realizadas com os procedimentos *MMOC* usual e os novos esquemas introduzidos neste trabalho, *MMOCAA* e o *LCELM*.

Inicialmente consideramos um dos problemas modelo da seção anterior, que gerou os resultados numéricos das Figuras 5.3 e 5.4. Na Figura 5.10 mostramos, para a malha espacial com 256×128 elementos, as superfícies de concentração depois de 700 dias de injeção de solvente. Os procedimentos numéricos utilizados na Figura 5.10, de cima para baixo, foram: *MMOC*, *MMOCAA* e *LCELM*. No caso do *MMOC* o erro relativo na conservação da massa foi de 17 %. Evidentemente que este erro é inaceitável para a solução de problemas práticos e o *MMOC* usual deve ser descartado como uma alternativa para a realização de simulações em meios fortemente heterogêneos. Comparando os resultados obtidos pelos procedimentos *MMOCAA* e *LCELM* observamos que o *LCELM* produz saltos abruptos na solução mais bem delineados. Isto decorre do fato de que o *LCELM* não utiliza interpolações de valores de concentração, ao contrário do *MMOCAA*. Estas interpolações efetivamente introduzem uma pequena suavização artificial na solução numérica.

A seguir consideramos simulações na geometria *five-spot* para o problema do traçador passivo ($M = 1$). Consideramos uma região com $256 m \times 256 m$ e uma malha computacional com 128×128 elementos.

Curvas de nível associadas às simulações na geometria *5-spot* para o problema do traçador em um meio poroso homogêneo estão exibidas nas Figuras 5.11 e 5.12. Ambas as Figuras apresentam uma comparação entre os métodos *MMOC* (quadros de cima), *MMOCAA* (quadros do meio) e *LCELM* (quadros de baixo). A primeira (segunda) coluna mostra o perfil de concentrações depois de 347 (847) dias de injeção de solvente. Os valores dos coeficientes de dispersão hidrodinâmica são $d_\ell = 1.4$ e $d_t = 0.14$ na Figura 5.11 e $d_\ell = d_t = 0.14$ na Figura 5.12. Note que na Figura 5.11 considera-se um valor relativamente alto para a dispersão hidrodinâmica. Como consequência, os perfis de concentração são bastante suaves. Neste caso, os três métodos considerados aqui são essencialmente equivalentes. No entanto, no exemplo seguinte (Figura 5.12) onde a dispersão hidrodinâmica é um pouco menor, já podemos observar que a simulação que utiliza o *LCELM* produz um salto

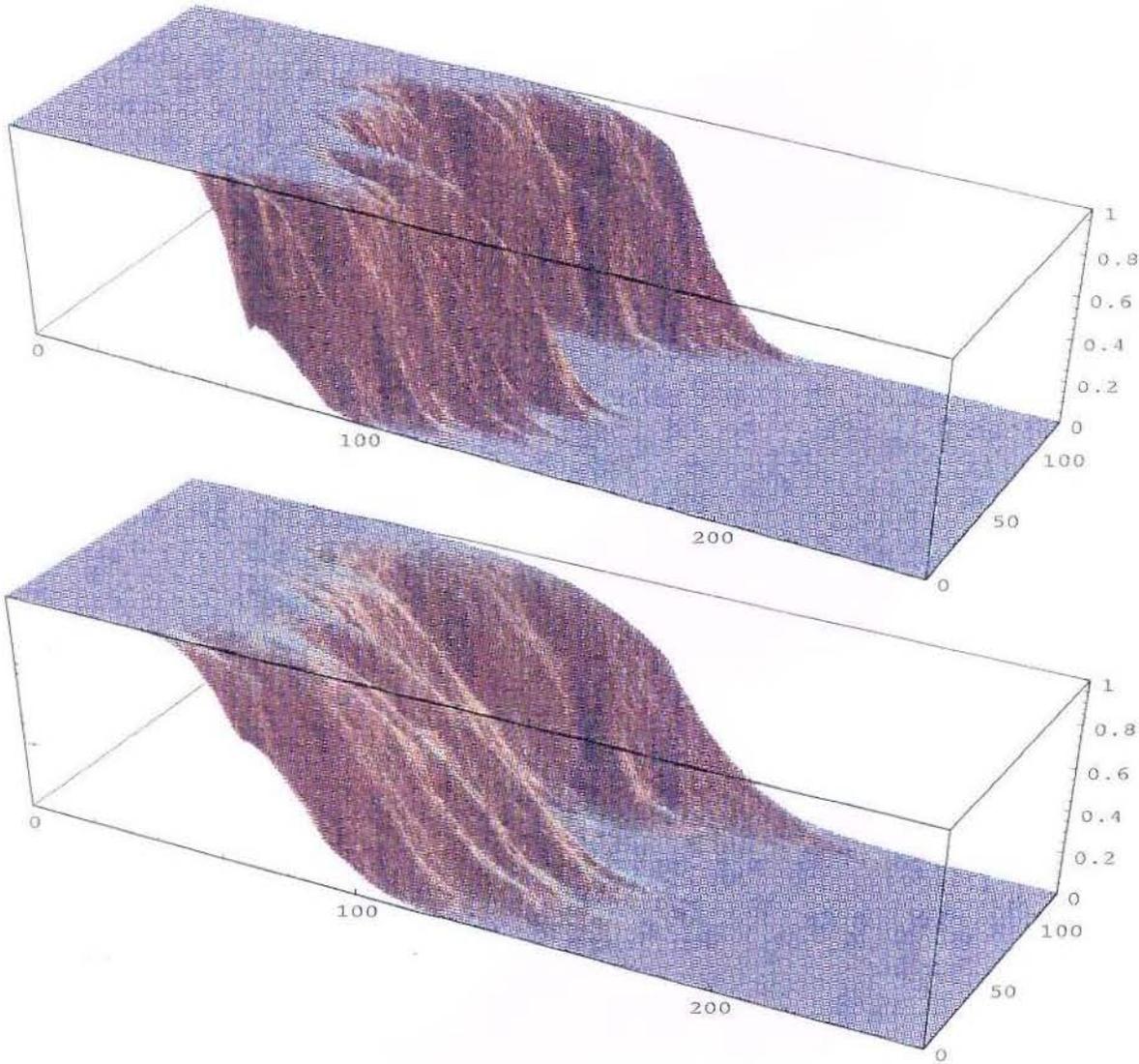


Figura 5.9: Simulações numéricas do problema do traçador. O quadro de cima mostra uma simulação onde a difusão molecular é o único mecanismo difusivo, presente no problema. Já o quadro de baixo mostra o efeito de suavização devido ao tensor estocástico de dispersão hidrodinâmica. Em ambas as simulações o erro relativo do balanço de massa é menor que 10^{-10} . Foi considerado um campo de permeabilidades com $C_V = 0.99$.

na solução numérica mais bem delineado. Esta observação está de acordo

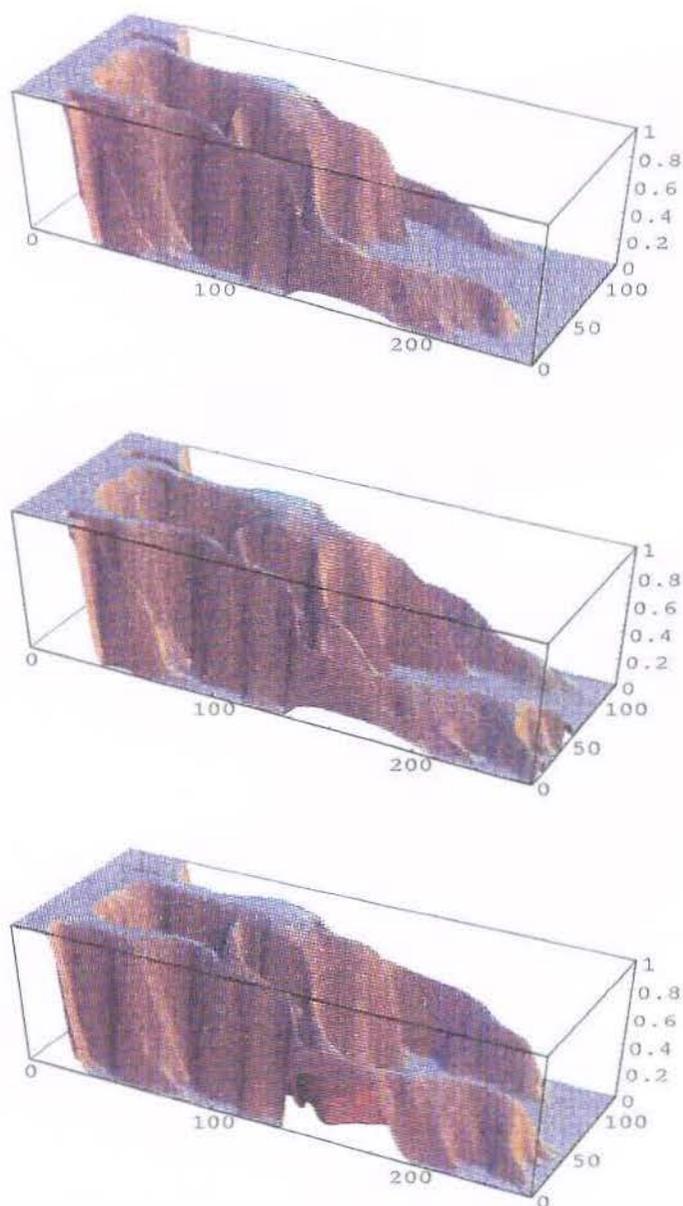


Figura 5.10: Simulações numéricas utilizando os procedimentos *MMOC*, *MMOCAA* e *LCELM* (de cima para baixo) em um campo de permeabilidades com $C_V = 3.53$. Note o atraso dos *fingers* na simulação que utiliza o *MMOC*, devido ao erro na conservação da massa do fluido.

com nosso comentário acima, relativo à suavização artificial da solução nos métodos *MMOC* e *MMOCAA*.

Superfícies de concentração associadas às simulações em geometria *5-spot* para o problema do traçador em um meio heterogêneo estão exibidas na Figura 5.13. Consideramos um meio bastante heterogêneo ($C_V = 3.53$). O campo de permeabilidades foi definido em uma malha de 128×128 blocos quadrados. O erro relativo do balanço de massa depois de 547 dias de injeção de solvente ficou em torno de 13 % para o *MMOC*, em torno de 10^{-11} para o *MMOCAA* e em torno de 1 % para o *LCELM*.

Em resumo, podemos concluir do nosso estudo comparativo que:

- O *LCELM* produz soluções numéricas muito precisas. A conservação da massa dos fluidos dá-se localmente e, além disto, o método apresenta menos suavização artificial da solução numérica que o *MMOCAA*.
- O *MMOCAA* apresenta como principal vantagem a robustez. Passos de tempo suficientemente pequenos, para o transporte, são necessários para um bom nível de conservação de massa para o *LCELM*. Este não é o caso com o *MMOCAA*.
- O *MMOC* mostrou-se inapropriado para a simulação em meios heterogêneos. Grandes erros na conservação da massa dos fluidos podem ocorrer. O problema da suavização artificial da solução está presente aqui também.

Concluimos esta seção mencionando algumas estratégias de implementação de métodos do tipo *LCELM* distintas da que foi apresentada aqui. Como já mencionamos, o desenvolvimento de métodos localmente conservativos computacionalmente eficientes é um assunto de pesquisa atual e as observações a seguir referem-se a tópicos de pesquisa que pretendemos investigar em breve.

Em primeiro lugar, a Tabela 5.1 mostra que não é suficiente reduzirmos o micropasso de tempo para o transporte para melhorarmos a conservação global da massa. Acreditamos que seja importante construirmos as curvas integrais que determinam os tubos no espaço-tempo partindo de mais pontos, ao invés de utilizarmos apenas os quatro vértices de um dado elemento da partição do domínio Ω . Com isto, teremos um tubo mais preciso e a conservação da massa deve melhorar.

A eficiência computacional do procedimento também deve ser consideravelmente melhorada se, ao invés de calcularmos a integral exata de quadriláteros em cada micropasso, fizéssemos uso de um esquema do tipo *backwards tracking* em que a fronteira do tubo é construída a partir de velocidades extrapoladas e a integral exata é calculada apenas uma vez.

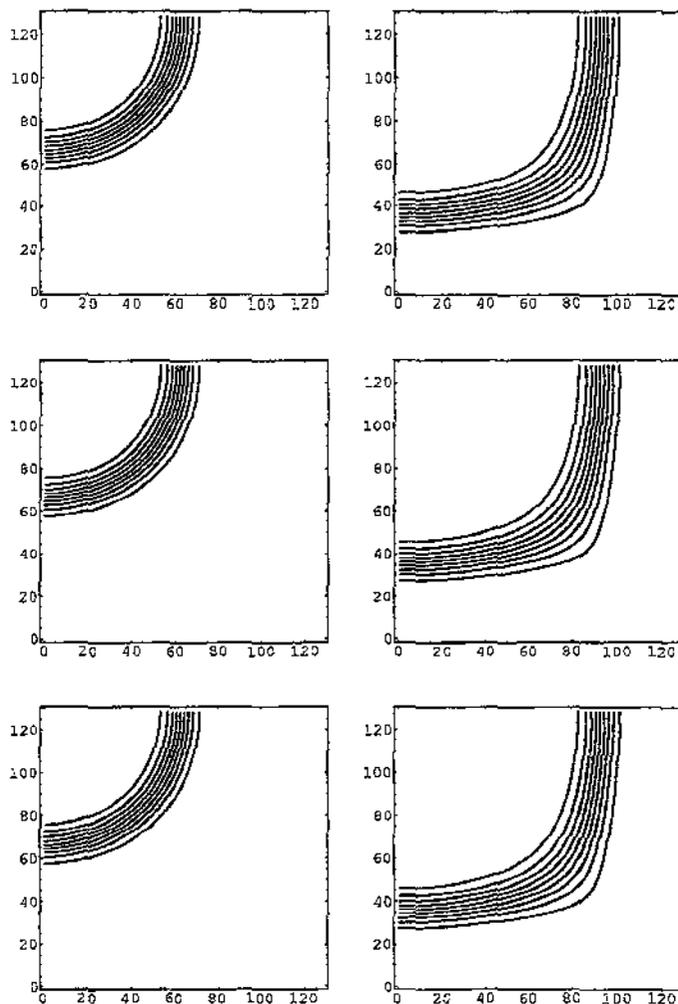


Figura 5.11: Os métodos utilizados para gerar esta Figura foram: o *MMOC* (quadros de cima), o *MMOC AA* (quadros do meio) e o *LCELM* (quadros de baixo). Consideramos o problema do traçador passivo em um meio homogêneo, numa geometria *5-spot*. A primeira (segunda) coluna mostra o perfil de concentrações depois de 347 (847) dias de injeção de solvente. Os coeficientes de dispersão hidrodinâmica são $d_t = 1.4$ e $d_t = 0.14$.

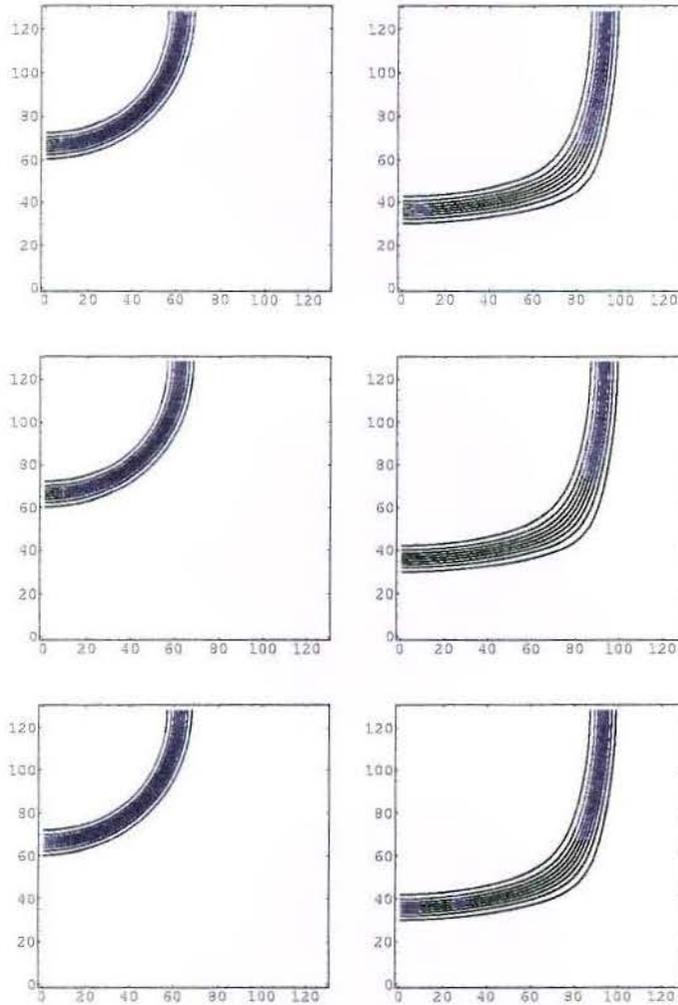


Figura 5.12: Os métodos utilizados para gerar esta Figura foram: o *MMOC* (quadros de cima), o *MMOCAA* (quadros do meio) e o *LCELM* (quadros de baixo). Consideramos o problema do traçador passivo em um meio homogêneo, numa geometria *5-spot*. A primeira (segunda) coluna mostra o perfil de concentrações depois de 347 (847) dias de injeção de solvente. Os coeficientes de dispersão hidrodinâmica são $d_\ell = 0.14$ e $d_t = 0.14$.

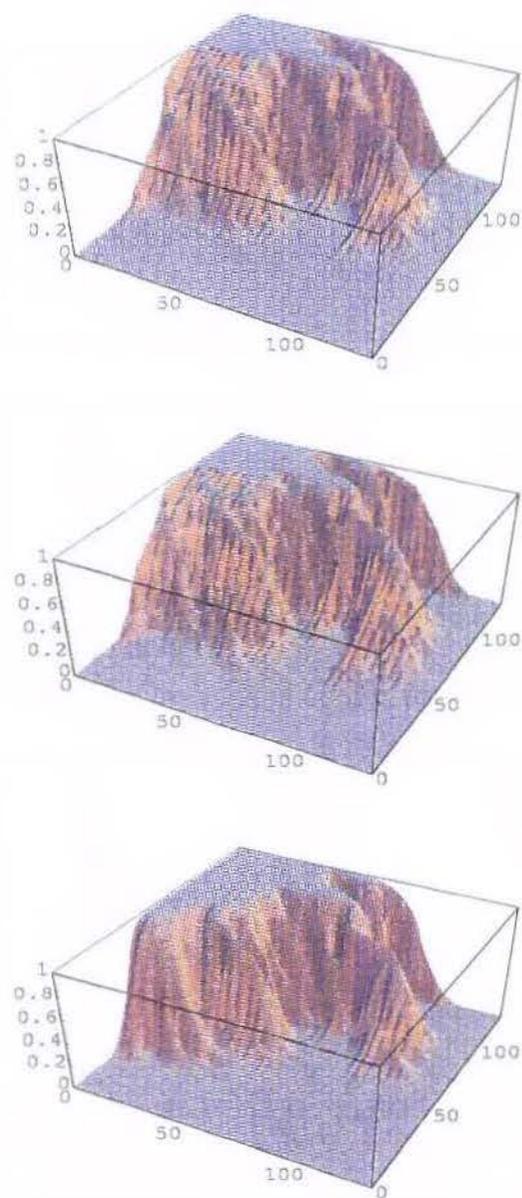


Figura 5.13: As superfícies de concentração, na geometria *5-spot*, exibem a concentração após 547 dias de injeção de solvente, usando o *MMOC* (quadro de cima), o novo *MMOC AA* (quadro do meio) e o *LCELM* (quadro de baixo), com um campo de permeabilidades tendo $C_V = 3.53$.

Capítulo 6

Métodos Iterativos

6.1 Introdução

Neste Capítulo nós apresentamos os métodos iterativos baseados nas decomposições de domínio discutidas no Capítulo 3. Para resolvermos o estágio difusivo da equação da concentração, dado pelo sistema (4.9-4.10), nós introduzimos um método iterativo naturalmente paralelizável que não apresenta superposição entre os subdomínios e é baseado em iterações por face. Isto é, para cada uma das faces de um dado elemento da decomposição o método executa um tipo de iteração. Após percorrermos seqüencialmente todas as faces obtemos uma aproximação da concentração no elemento dado. O Método dos Gradientes Conjugados com Pré Condicionamento combinado com condições de interface (entre os subdomínios) do tipo Robin (*GCP-Robin*) é introduzido para resolver numericamente a equação da pressão, dada pelo sistema (3.12-3.13). Lembramos que este método iterativo é baseado em decomposição com superposição entre os subdomínios.

6.2 Uma iteração por faces para a concentração

Nesta seção nós apresentamos o procedimento de decomposição de domínio que executa as iterações face por face dentro de cada elemento da partição fina do domínio Ω . Note que, estamos considerando o caso no qual a partição grossa coincide com a partição fina de Ω , ou seja, os subdomínios Ω_j são constituídos por um único elemento da partição fina de Ω . Este procedimento foi planejado para obtermos a solução numérica do estágio difusivo do cálculo da concentração. A cada iteração, nós usamos as condições de transmissão

de Robin nas interfaces dos subdomínios. Estas condições serão introduzidas na seção 6.2.2.

Suprima nesta seção o subscrito j que caracteriza cada elemento da partição. Então, o vetor de fluxo v (veja a equação (2.29)) pode ser escrito como

$$v = \sum_{\chi} v_{\chi} w_{\chi}, \quad \chi = L, R, B, T, \quad (6.1)$$

onde w_{χ} são as funções base do espaço de Raviart-Thomas de menor índice considerado aqui. Dado um elemento retangular padrão com vértices $(0, 0)$, $(h_x, 0)$, $(0, h_y)$ e (h_x, h_y) as funções base são as seguintes

$$w_L = \left(\frac{x}{h_x} - 1, 0 \right), \quad (6.2)$$

$$w_B = \left(0, \frac{y}{h_y} - 1 \right), \quad (6.3)$$

$$w_R = \left(\frac{x}{h_x}, 0 \right), \quad (6.4)$$

$$w_T = \left(0, \frac{y}{h_y} \right). \quad (6.5)$$

6.2.1 Expressando fluxo em termos de multiplicadores de Lagrange

Nosso objetivo agora é expressar cada componente do fluxo na face χ , v_{χ} , em termos de multiplicadores de Lagrange. Para tanto, considere a equação (3.9). Aplique uma regra trapezoidal para calcular o termo $(D^{-1}v, \tilde{v})_{\Omega_j}$ e considere as quatro funções base w_{χ} , $\chi = L, R, B, T$ para \tilde{v} . Fazendo-se isto, nós obtemos o seguinte sistema linear relacionando fluxo, concentração e multiplicadores de Lagrange, em cada elemento:

$$\begin{pmatrix} 2d_{11} & 0 & -d_{12} & d_{12} \\ 0 & 2d_{11} & d_{12} & -d_{12} \\ -d_{12} & d_{12} & 2d_{22} & 0 \\ d_{12} & -d_{12} & 0 & 2d_{22} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} v_R \\ v_L \\ v_B \\ v_T \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} -\frac{4}{h_x} (\ell_{cR} - c) \\ -\frac{4}{h_x} (\ell_{cL} - c) \\ -\frac{4}{h_y} (\ell_{cB} - c) \\ -\frac{4}{h_y} (\ell_{cT} - c) \end{pmatrix}, \quad (6.6)$$

onde d_{11} , d_{12} , d_{22} são as componentes do tensor D^{-1} avaliadas no centro do elemento em consideração. Os multiplicadores de Lagrange, neste caso, são denotados por $\ell_{c\chi}$, nas faces $\chi = L, R, B, T$.

O sistema anterior pode ser facilmente resolvido para as variáveis do fluxo v_χ , $\chi = L, R, B, T$,

$$v_T = \frac{-2(\ell_{cT} - c)}{h_y d_{22}} - \frac{d_{12}^2}{N h_y d_{22}} (\ell_{cT} - \ell_{cB}) + \frac{d_{12}}{h_x N} (\ell_{cR} - \ell_{cL}), \quad (6.7)$$

$$v_B = \frac{-2(\ell_{cB} - c)}{h_y d_{22}} + \frac{d_{12}^2}{N h_y d_{22}} (\ell_{cT} - \ell_{cB}) - \frac{d_{12}}{h_x N} (\ell_{cR} - \ell_{cL}), \quad (6.8)$$

$$v_L = \frac{-2(\ell_{cL} - c)}{h_x d_{11}} + \frac{d_{12}^2}{N h_x d_{11}} (\ell_{cR} - \ell_{cL}) - \frac{d_{12}}{h_y N} (\ell_{cT} - \ell_{cB}), \quad (6.9)$$

$$v_R = \frac{-2(\ell_{cR} - c)}{h_x d_{11}} - \frac{d_{12}^2}{N h_x d_{11}} (\ell_{cR} - \ell_{cL}) + \frac{d_{12}}{h_y N} (\ell_{cT} - \ell_{cB}), \quad (6.10)$$

onde $N = \det D^{-1}$.

6.2.2 O procedimento iterativo face-por-face

Nós agora discutiremos o procedimento iterativo para o cálculo do estágio difusivo da equação da concentração (4.9-4.10), que aparece nos procedimentos *MMOCAA* e *LCELM*, desenvolvidos neste trabalho. Como estamos considerando o espaço de Raviar-Thomas de menor índice, a concentração é constante por elemento. Dessa forma, podemos reescrever a equação (4.9), para um dado elemento, da seguinte forma

$$h_x h_y \phi \frac{c_{n+1} - \bar{c}_{n+1}}{\Delta t_{cd}} + h_x (v_B + v_T) + h_y (v_L + v_R) + h_x h_y c_{n+1} q = h_x h_y \bar{c}_{n+1} q. \quad (6.11)$$

O procedimento iterativo que será definido logo abaixo, é baseado na utilização de condições de Robin nas interfaces. A condição de Robin é dada por

$$\ell_{c\chi} = \beta_{c\chi} v_\chi + \beta_{c\chi} \tilde{v}_{\chi'} + \tilde{\ell}_{c\chi'}, \quad \chi = L, R, B, T, \quad (6.12)$$

onde o símbolo \sim denota variáveis de elementos adjacentes, e χ' denota a face do elemento adjacente correspondente à face χ do elemento em consideração. A função $\beta_{c\chi}$ é positiva e definida nas faces do elemento (veja na subseção 6.2.3 uma escolha adequada para esta função).

O símbolo “*”, que aparece nas equações a seguir, denota valores atrasados (iteração anterior) para as variáveis.

Apresentaremos agora a iteração para elementos interiores. Primeiramente, note que todas as faces do elemento devem ser consideradas seqüencialmente duas vezes (uma vez para cada elemento que ela pertença). Associada a cada face existe uma equação linear que é resolvida e produz novos valores para a concentração, fluxo e multiplicador de Lagrange. Considere, como exemplo, a face- T de um elemento interior. A iteração consiste em resolver o seguinte sistema para a concentração c , o fluxo $v_{j,T}$ e o multiplicador ℓ_{cT} :

$$\begin{aligned} h_x h_y \phi \frac{c_{j,n+1} - \bar{c}_{j,n+1}}{\Delta t_{cd}} + h_x (v_{j,B}^* + v_{j,T}) + h_y (v_{j,L}^* + v_{j,R}^*) + h_x h_y c_{j,n+1} q \\ = h_x h_y \tilde{c}_{j,n+1} q, \\ v_T = \frac{-2(\ell_{cT} - c)}{h_y d_{22}} - \frac{d_{12}^2}{\mathcal{N} h_y d_{22}} (\ell_{cT} - \ell_{cB}^*) + \frac{d_{12}}{h_x \mathcal{N}} (\ell_{cR}^* - \ell_{cL}^*), \\ \ell_{cT} = \beta_{cT} v_T + \beta_{cT} \tilde{v}_B^* + \tilde{\ell}_{cB}^*. \end{aligned} \quad (6.13)$$

Note que a última equação do sistema é a condição de Robin usada para a face- T .

Elementos que possuem faces sobre a fronteira necessitam de um esquema específico. O sistema acima não é resolvido para faces na fronteira; entretanto, os correspondentes multiplicadores de Lagrange devem ser incluídos como variáveis adicionais para os sistemas lineares associados com as faces restantes dos elementos que tocam a fronteira. Os sistemas com estes graus de liberdade a mais têm equações adicionais dadas pela imposição da condição de fronteira $v_x = 0$ nas equações (6.7-6.10).

6.2.3 Escolha de $\beta_{c\chi}$

O parâmetro $\beta_{c\chi}$ acelera a convergência das iterações se ele for devidamente escolhido. Em particular, é vantajoso defini-lo sobre as interfaces, em termos de propriedades locais do meio.

Seja b_c uma constante sem dimensão e escolha

$$\beta_{c\chi} = \frac{b_c h}{\Delta_{eff,\chi}}, \quad \chi = L, R, B, T, \quad (6.14)$$

onde $h = h_x$ para $\chi = L, R$ e $h = h_y$ para $\chi = B, T$,

$$\Delta_{eff,\chi} = 2 \frac{D_\chi \cdot \tilde{D}_\chi}{(D_\chi + \tilde{D}_\chi)}, \quad (6.15)$$

e

$$D_\chi = D_{11} + D_{22}. \quad (6.16)$$

onde D_{11} e D_{22} são as componentes do tensor D avaliadas no centro do elemento em consideração.

6.3 A iteração GCP-Robin para o campo de velocidades

Nós usamos um procedimento com decomposição de domínio e iteração a dois níveis para resolver o sistema da pressão (3.12-3.13). Chamamos este procedimento de GCP-Robin. Ele é naturalmente paralelizável e combina uma iteração do GCP (gradiente conjugado pré-condicionado) dentro dos subdomínios estendidos, $\tilde{\Omega}_j^p$ (veja Capítulo 3) com cálculos que atualizam as interfaces das regiões de superposição de subdomínios. Novamente, a condição de Robin

$$\ell_{p\chi} = \beta_{p\chi} u_\chi + \beta_{p\chi} \tilde{u}_{\chi'} + \tilde{\ell}_{p\chi'}, \quad \chi = L, R, B, T, \quad (6.17)$$

é usada para este propósito. O multiplicador de Lagrange na face χ , para a equação da pressão, é indicado por $\ell_{p\chi}$.

Na equação acima, e no restante deste Capítulo, o símbolo \sim denota variável de elementos adjacentes, e χ' denota a face do elemento adjacente correspondente à face χ do elemento em consideração.

A seguir nós derivaremos as equações associadas aos elementos interiores ao subdomínio estendido $\tilde{\Omega}_j^p$ e as equações associadas aos elementos que tocam a fronteira de $\tilde{\Omega}_j^p$. Para os elementos interiores nós mostraremos que a equação obtida é a clássica fórmula de cinco pontos (que aparece no contexto de diferenças finitas).

É importante ressaltar que o campo de velocidades, (veja a equação (2.28)), pode ser escrito como

$$u = \sum_{\chi} u_\chi w_\chi, \quad \chi = L, R, B, T, \quad (6.18)$$

onde w_χ são as funções base do espaço de Raviart-Thomas de menor índice considerado aqui (veja (6.2)-(6.5)).

6.3.1 Diferenças finitas para a pressão

6.3.1.1 Diferença finita centrada para elementos interiores

Seja K_α um elemento da partição fina de Ω , conforme a seção 3.2. Com a finalidade de facilitar a apresentação das equações de diferenças finitas nós utilizaremos uma notação com dois índices para representar este elemento. Então, considere $K_\alpha = K_{\ell m}$ um elemento interior a $\tilde{\Omega}_j^p$ que não toca a sua fronteira ($\partial\tilde{\Omega}_j^p$).

Seguindo o mesmo procedimento descrito em [28] nós podemos reescrever a expressão (3.13), substituindo $\tilde{\Omega}_j^p$ por um elemento individual $K_{\ell m}$ da partição fina do domínio Ω . Agora, aplique uma regra trapezoidal ao termo $(\mu\mathcal{K}^{-1}u, \tilde{u})_{K_{\ell m}}$ que aparece nesta expressão. A função teste \tilde{u} é uma função base do espaço de Raviart-Thomas considerado aqui. Deste modo, nós obtemos a seguinte expressão para o fluxo

$$u_\chi = \frac{2\mathcal{K}}{\mu_\chi h} (p_{\ell m} - \ell_{p\chi}), \quad \chi = L, R, B, T, \quad (6.19)$$

onde $h = h_x$ para $\chi = R, L$, $h = h_y$ para $\chi = T, B$, $p_{\ell m}$ é a pressão no centro do elemento $K_{\ell m}$ e $\ell_{p\chi}$ é o multiplicador de Lagrange na face χ deste elemento.

Note que a viscosidade μ_χ depende do valor da concentração na face χ , o qual é calculado por interpolação linear. Por exemplo, se nós considerarmos $\chi = R$, então

$$c_\chi = \frac{c_{\ell m} + c_{\ell+1, m}}{2}, \quad (6.20)$$

onde $c_{\ell m}$ e $c_{\ell+1, m}$ são os valores das concentrações disponíveis no centro dos elementos $K_{\ell m}$ e $K_{\ell+1, m}$, respectivamente.

As condições de consistência nas interfaces (faces) de $K_{\ell m}$ são dadas por

$$u_\chi + \tilde{u}_{\chi'} = 0, \quad \ell_{p\chi} = \tilde{\ell}_{p\chi'}, \quad \mu_\chi = \tilde{\mu}_{\chi'}. \quad (6.21)$$

Usando as relações acima (6.21) e as duas equações para os fluxos (eliminando-se os subscritos ℓ, m):

$$\begin{aligned} u_\chi &= \frac{2\mathcal{K}}{\mu_\chi h} (p - \ell_{p\chi}), \\ \tilde{u}_{\chi'} &= \frac{2\tilde{\mathcal{K}}_{\chi'}}{\tilde{\mu}_{\chi'} h} (\tilde{p}_{\chi'} - \tilde{\ell}_{p\chi'}) \end{aligned} \quad (6.22)$$

segue que

$$\ell_{pX} = \tilde{\ell}_{pX'} = \frac{\mathcal{K}p + \tilde{\mathcal{K}}_{X'}\tilde{p}_{X'}}{\mathcal{K} + \tilde{\mathcal{K}}_{X'}}. \quad (6.23)$$

Então, se

$$\mathcal{K}_{\text{eff},X} = \frac{2\mathcal{K}\tilde{\mathcal{K}}_{X'}}{\mathcal{K} + \tilde{\mathcal{K}}_{X'}} \quad (6.24)$$

é a permeabilidade efetiva entre os elementos, nós temos que

$$u_X = \frac{\mathcal{K}_{\text{eff},X}}{\mu_X h} (p - \tilde{p}_{X'}). \quad (6.25)$$

Considerando esta última equação, (6.25), e a fórmula do divergente (2.28) escrita na forma discretizada

$$(u_L + u_R)h_y + (u_B + u_T)h_x = qh_x h_y, \quad (6.26)$$

nós podemos escrever a seguinte fórmula de cinco pontos

$$\begin{aligned} & -\left(\frac{\mathcal{K}_{\text{eff},B}}{\mu_B h_y^2}\right)p_{\ell,m-1} - \left(\frac{\mathcal{K}_{\text{eff},L}}{\mu_L h_x^2}\right)p_{\ell-1,m} + \\ & \left(\sum_{\chi} \left(\frac{\mathcal{K}_{\text{eff},\chi}}{\mu_{\chi} h^2}\right)\right)p_{\ell m} - \left(\frac{\mathcal{K}_{\text{eff},R}}{\mu_R h_x^2}\right)p_{\ell+1,m} - \left(\frac{\mathcal{K}_{\text{eff},T}}{\mu_T h_y^2}\right)p_{\ell,m+1} = q_{\ell m}, \end{aligned} \quad (6.27)$$

onde $\chi = L, R, B, T$.

6.3.1.2 Condição de interface para faces na fronteira

Quando algum elemento $K_{\ell m}$ toca a fronteira $\partial\tilde{\Omega}_j^p$, então nós devemos modificar a fórmula de cinco pontos obtida anteriormente (6.27), levando-se em conta a equação para fluxo (6.19), com o multiplicador de Lagrange substituído pela condição de transmissão de Robin (6.17). Isto nos conduz a

$$(1 + \beta_{pX}\xi_{pX})u_X - \xi_{pX}p_{\ell m} = -\beta_{pX}\xi_{pX}\tilde{u}_{X'} - \xi_{pX}\tilde{\ell}_{pX'}, \quad (6.28)$$

onde

$$\xi_{pX} = \frac{2\mathcal{K}}{\mu_X h}, \quad (6.29)$$

e χ é a face de $K_{\ell m}$ que encosta na fronteira $\partial\tilde{\Omega}_j^p$.

6.3.2 Uma iteração a dois níveis

Escolha o parâmetro β_{pX} , que aparece na condição de Robin (6.17), como

$$\beta_{pX} = \frac{b_p h \mu_X}{\mathcal{K}_{\text{eff},X}}, \quad (6.30)$$

onde b_p é uma constante sem dimensão. Uma maneira adequada de se expressar o fluxo modificado (6.28) é a seguinte

$$u_X = \frac{\mathcal{K}_{\text{eff},X}}{\mu_X h} \left[\frac{1}{\left(b_p + \frac{\tilde{\kappa}_X}{\kappa + \tilde{\kappa}_X}\right)} \left(p - \tilde{\ell}_{pX'} - \frac{b_p \mu_X h}{\mathcal{K}_{\text{eff},X}} \tilde{u}_{X'} \right) \right], \quad (6.31)$$

onde os valores de $\tilde{u}_{X'}$ e $\tilde{\ell}_{pX'}$ serão calculados por (6.25) e (6.23), respectivamente.

Estas informações possibilitar-nos-ão escrever um sistema linear para a pressão, através de diferenças finitas centradas, dentro de cada subdomínio $\tilde{\Omega}_j^p$. Este sistema será resolvido pelo método do Gradiente Conjugado Pré-Condicionado, onde a matriz do pré-condicionamento é obtida do método *SSOR* (*symmetric successive overrelaxation*, ou relaxação simétrica do método de Gauss-Seidel).

O procedimento iterativo usado para resolver o sistema linear global é um processo a dois níveis de iteração. O primeiro nível é local, porque resolve um sistema linear local dentro de cada subdomínio $\tilde{\Omega}_j^p$ (iterações interiores do *GCP-Robin*). A condição de contorno imposta sobre as interfaces das regiões onde ocorrem as superposições entre os subdomínios é a condição de Robin (6.17). Depois que o método iterativo converge, nestes subdomínios, nós obtemos uma solução global que, juntamente com a solução local, permite-nos realizar o segundo nível de iteração. Neste nível as interfaces das regiões onde ocorrem as superposições de subdomínios são atualizadas calculando-se os multiplicadores de Lagrange e as componentes normais ao fluxo. Um teste de convergência é aplicado sobre a solução global (iterações exteriores).

Considere uma decomposição de domínio como aquela dada no Capítulo 3, subseção 3.2.2. Dados os valores iniciais p^0 em Ω , $p^{0,j}$ em $\tilde{\Omega}_j^p$ e $\ell_p^{0,j}$, $u^{0,j}$ em $\tilde{\Gamma}_j^p$, a iteração para pressão é a seguinte:

- Para $n \geq 0$ e $j = 1, \dots, M_p$, calcule $p^{n+1,j}$ aplicando-se o esquema *GCP-Robin* dentro de $\tilde{\Omega}_j^p$ (primeiro nível de iteração).
- Teste a convergência para $p^{n+1,j}$ dentro de $\tilde{\Omega}_j^p$.
- Tome p^{n+1} em Ω tal que $p_{|\Omega_j}^{n+1} = p^{n+1,j}$.

- Calcule $\ell_p^{n+1,j}$ e $u^{n+1,j}$ por (6.23) e (6.25), respectivamente (segundo nível de iteração).
- Teste a convergência para p^{n+1} em Ω .

6.3.3 Experimentos numéricos

Os experimentos numéricos discutidos aqui, referem-se às partições de Ω em 4, 8 ou 16 subdomínios. Estes experimentos são comparados com os experimentos realizados com o método *GCP* seqüencial, que não considera decomposição de domínio. Todas as simulações foram realizadas em uma estação de trabalho do tipo *SPARCstation-Sun*. Não utilizamos processamento em paralelo, o *GCP-Robin* também foi implementado seqüencialmente. Em trabalho futuro pretendemos implementá-lo em paralelo utilizando máquinas com memória distribuída.

Resolvemos numericamente o sistema para a pressão, (3.12-3.13), que corresponde à formulação fraca da seguinte equação elíptica

$$\nabla \cdot u = q, \quad u = \frac{-\mathcal{K}(\mathbf{x})}{\mu(c)} \nabla p. \quad (6.32)$$

O sistema foi resolvido no instante de tempo $t = 0$ com a condição inicial para a concentração dada por $c(\mathbf{x}, 0) = 0.0$, para $\mathbf{x} \in \Omega$. A função $\mu(c)$ é dada por (2.2). A condição de Robin (6.17), que é imposta nas interfaces dos subdomínios estendidos, utiliza para o parâmetro adimensional (veja (6.30)) o valor ótimo $b_p = 39.5$ (determinado experimentalmente). Este valor é consideravelmente diferente daquele que foi usado para o procedimento sem superposição, $b_p = 1.0$, que foi determinado nos trabalhos [36] e [37], onde técnicas de decomposição de domínio sem superposição de subdomínios foram usadas.

A condição de fronteira para a equação (6.32) é dada por

$$u \cdot n = 0, \quad \forall \mathbf{x} \in \partial\Omega, \quad t \in J, \quad (6.33)$$

onde n é o unitário normal exterior à fronteira de Ω e $J = [0, T]$ é o intervalo de tempo do escoamento no reservatório Ω .

O reservatório Ω é um quadrado, $\Omega = (0, X) \times (0, Y)$, com dimensões $X = 256$ metros e $Y = 256$ metros. As malhas computacionais e geológicas (malhas onde são especificadas as permeabilidades absolutas), juntamente com os valores dos coeficientes de variação, C_V , estão exibidos na Tabela 6.1. Consideramos um campo de permeabilidades caracterizado pelo expoente de Hurst $\rho = 0.5$ (veja a seção 7.2).

Tabela 6.1: Malhas utilizadas nas simulações com o *GCP*-Robin.

Malha computacional	128×128	128×128	256×256	256×256
Malha geológica	64×64	64×64	64×64	64×64
C_V	0.0	3.53	0.0	3.53

Os experimentos numéricos utilizam uma geometria para o reservatório que é conhecida como *five-spot*. O reservatório apresenta um poço de injeção, localizado no canto inferior esquerdo, e um poço de produção, localizado no canto superior direito. Mantemos os seguintes parâmetros fixos:

- Taxa de injeção (q): um volume poroso a cada 5 anos.
- Porosidade: $\phi(\mathbf{x}) = 0.1$.
- Razão de viscosidades ($M = \mu_o/\mu_s$): $M = 20$.
- Viscosidade do óleo: $\mu_o = 20$ cP.

Discutimos a seguir alguns detalhes, sobre o esquema *GCP*-Robin, usados nos experimentos numéricos discutidos nesta subseção.

É importante observarmos que o critério de convergência global (convergência no domínio todo) para os potenciais (ou pressões), que são oriundos do método *GCP*-Robin, é o do erro relativo na norma ℓ_2 . A tolerância do erro relativo, usada no teste de convergência dos potenciais em todo o domínio, que nós chamamos de convergência externa, foi considerada menor do que $1.0 \cdot 10^{-5}$ em nossos experimentos. Dentro de cada subdomínio, nós usamos um critério de baixo custo computacional para avaliar a convergência do método *GCP*: simplesmente somamos os fluxos através da fronteira de uma curva fechada que não contém termos de fonte. Determinamos experimentalmente que esta soma de fluxos deve ser menor do que $0.1 \cdot \text{exttol}$, onde exttol é a tolerância do erro relativo, na norma ℓ_2 , considerada no teste de convergência externa dos potenciais.

Observe que, se a implementação for em paralelo em uma máquina com memória distribuída, as trocas de informações somente ocorrerão sobre as interfaces das regiões superpostas. Dados não são enviados nem recebidos no interior destas regiões.

Na próxima subseção apresentamos várias tabelas que exibem os resultados das simulações numéricas do método *GCP*-Robin.

6.3.4 Tabelas de resultados de algumas simulações com o esquema *GCP-Robin*

Todas as tabelas desta subseção estão dispostas da seguinte forma: no topo da página são apresentados os resultados do método (global) seqüencial, Gradientes Conjugados com Pré Condicionamento, seguido de três quadros de resultados, os quais se referem às decomposições de domínio utilizadas nas iterações do *GCP-Robin*. Nos quadros de resultados, a variável C_V denota o coeficiente de variação que caracteriza a heterogeneidade do meio, caso o meio seja homogêneo, colocamos $C_V = 0$.

Os quadros de resultados referentes ao *GCP-Robin* apresentam cinco colunas, sendo que a primeira corresponde ao tamanho da região de superposição, que nós indicaremos por δ_{rs} (quando $\delta_{rs} = 0$ significa que estamos usando um método sem superposição); a segunda corresponde ao valor médio de iterações internas realizadas dentro de cada subdomínio; a terceira corresponde ao número de iterações externas; a quarta coluna refere-se ao tempo da realização de cada simulação para valores diferentes de δ_{rs} e a última coluna apresenta o erro relativo usado no teste de convergência do processo iterativo (iteraões externas).

Os resultados mais relevantes ao analisarmos as tabelas referentes às simulações com o esquema *GCP-Robin* são:

- O número de iterações exteriores (terceira coluna dos quadros de resultados) deve ser interpretado como o número de trocas de mensagens no caso de processamento paralelo. O método *GCP-Robin*, com $\delta_{rs} > 0$, apresenta em todas as Tabelas (1, 2, 3 e 4) o número de iterações exteriores consideravelmente menor do que o número de iterações do *GCP* seqüencial. Quanto mais heterogêneo o meio, mais evidente fica esta diferença. Observe que, se o algoritmo *GCP* seqüencial fosse executado em paralelo, então, levando-se em conta a Tabela 4, 1388 trocas de mensagens teriam que ser realizadas, que é um valor bem superior àqueles obtidos pelo esquema *GCP-Robin*.
- O tempo total de CPU (tempo gasto pelo computador para concluir uma simulação) para o *GCP* seqüencial não é muito discrepante do tempo para o *GCP-Robin*. Em um meio muito heterogêneo ($C_V = 3.53$), ocorreu um caso onde o esquema *GCP-Robin* apresenta vantagem em relação ao *GCP* seqüencial. Este resultado pode ser visto na Tabela 2 (oito subdomínios e δ_{rs} maior do que zero). Em um meio homogêneo, ocorreu um caso semelhante que está exibido na Tabela 3 (quatro subdomínios e δ_{rs} igual a um, cinco e seis).

- Os resultados das simulações com o método sem superposição de subdomínios ($\delta_{rs} = 0$) aparecem na primeira linha de alguns quadros de resultados. Observe que o tempo gasto nas simulações sem superposição é muito superior àqueles com superposição. Estes resultados podem ser vistos nas Tabelas 1 e 2 e nas Tabelas 3 e 4 (segundo quadro).

Em resumo, o método *GCP*-Robin, com pequenos valores para δ_{rs} , é bastante competitivo computacionalmente para implementação em máquinas com memória distribuída. A principal vantagem deste método é a simplicidade de sua implementação. O código paralelo é construído de forma simples a partir de um código do *GCP* serial. A implementação do *GCP* usual em paralelo, sem decomposição de domínio, é bem mais complexa, principalmente se malhas não estruturadas forem utilizadas. Cabe ressaltar que embora nossa implementação tenha sido feita em malhas estruturadas o método *GCP*-Robin aplica-se ao caso de malhas não estruturadas. Um outro aspecto que deve ser enfatizado é que o parâmetro b_p foi mantido fixo. Trabalhos recentes [32, 33] (onde assume-se que os coeficientes da equação elíptica são constantes) indicam que os métodos iterativos que utilizam a condição de Robin nas interfaces dos subdomínios podem ser acelerados se o valor de b_p for alterado de uma iteração para outra. Portanto o método descrito aqui pode se tornar ainda mais competitivo se a análise feita em [32, 33] for estendida para equações com coeficientes variáveis. Deixamos esta investigação como proposta para um trabalho a ser realizado no futuro.

Tabela 1

GCP Seqüencial

problema	grid	iter. ext.	tempo(s)	erro rel.
Hom. ($C_V = 0.0$)	128×128	100	21.0	$6.401e-6$

$C_V = 0.0$; Homogêneo; 4 subdomínios; 128×128

δ_{rs}	iter. int. média	iter. ext.	tempo(s)	erro rel.
0	4.9	175	163.0	$9.859e-6$
1	5.7	32	35.0	$8.869e-6$
2	11.2	28	57.0	$9.803e-6$
3	10.1	21	40.0	$8.509e-6$
4	10.7	22	44.0	$9.896e-6$
5	14.0	21	56.0	$8.041e-6$
6	11.8	22	50.0	$8.731e-6$

$C_V = 0.0$; Homogêneo; 8 subdomínios; 128×128

δ_{rs}	iter. int. média	iter. ext.	tempo(s)	erro rel.
0	3.6	356	232.0	$9.992e-6$
1	4.3	54	43.0	$9.798e-6$
2	6.8	34	42.0	$9.855e-6$
3	7.0	23	30.0	$8.565e-6$
4	6.7	28	37.0	$8.764e-6$
5	7.5	29	43.0	$7.596e-6$
6	7.4	28	43.0	$8.980e-6$

$C_V = 0.0$; Homogêneo; 16 subdomínios; 128×128

δ_{rs}	iter. int. média	iter. ext.	tempo(s)	erro rel.
0	3.1	501	290.0	$9.357e-6$
1	4.3	48	39.0	$8.801e-6$
2	5.2	34	35.0	$9.470e-6$
3	6.0	34	41.0	$9.726e-6$
4	5.6	35	41.0	$9.759e-6$
5	6.1	34	44.0	$9.080e-6$
6	5.7	36	46.0	$9.203e-6$

Tabela 2

GCP Sequencial

problema	grid	iter. ext.	tempo(s)	erro rel.
Het. ($C_V = 3.53$)	128×128	803	166.0	$8.877e-6$

$C_V = 3.53$; 4 subdomínios; 128×128

δ_{rs}	iter. int. média	iter. ext.	tempo(s)	erro rel.
0	32.2	401	2185.0	$9.134e-6$
1	50.2	29	249.0	$8.626e-6$
2	26.7	38	178.0	$7.896e-6$
3	81.7	22	316.0	$5.183e-6$
4	48.6	22	192.0	$8.620e-6$
5	46.7	24	204.0	$9.477e-6$
6	77.8	17	243.0	$6.878e-6$

$C_V = 3.53$; 8 subdomínios; 128×128

δ_{rs}	iter. int. média	iter. ext.	tempo(s)	erro rel.
0	17.1	609	1582.0	$8.179e-6$
1	15.0	55	133.0	$9.012e-6$
2	27.5	24	108.0	$9.391e-6$
3	20.3	33	116.0	$9.795e-6$
4	27.0	28	132.0	$9.837e-6$
5	29.9	29	158.0	$8.710e-6$
6	23.6	33	144.0	$8.037e-6$

$C_V = 3.53$; 16 subdomínios; 128×128

δ_{rs}	iter. int. média	iter. ext.	tempo(s)	erro rel.
0	8.5	1264	1738.0	$7.781e-6$
1	11.7	92	179.0	$9.355e-6$
2	7.6	140	192.0	$6.594e-6$
3	12.2	87	193.0	$8.622e-6$
4	18.2	53	179.0	$9.201e-6$
5	23.2	43	192.0	$9.921e-6$
6	32.1	115	731.0	$8.824e-6$

Tabela 3

GCP Sequencial

problema	grid	iter. ext.	tempo(s)	erro rel.
Hom. ($C_V = 0.0$)	256×256	195	179.0	6.459e-6

$C_V = 0.0$; Homogêneo; 4 subdomínios; 256×256

δ_{rs}	iter. int. média	iter. ext.	tempo(s)	erro rel.
0	8.9	290	2090.0	9.747e-6
1	11.7	17	168.0	6.508e-6
2	17.5	18	257.0	8.200e-6
3	28.5	25	565.0	3.461e-6
4	16.1	14	191.0	4.491e-6
5	14.5	13	163.0	5.456e-6
6	16.9	11	161.0	7.966e-6
7	21.8	14	258.0	8.743e-6

$C_V = 0.0$; Homogêneo; 8 subdomínios; 256×256

δ_{rs}	iter. int. média	iter. ext.	tempo(s)	erro rel.
1	9.2	35	261.0	9.018e-6
2	14.1	20	227.0	9.497e-6
3	14.3	19	223.0	8.021e-6
4	9.6	27	221.0	7.770e-6
5	14.5	21	255.0	7.877e-6
6	12.7	21	229.0	7.444e-6

$C_V = 0.0$; Homogêneo; 16 subdomínios; 256×256

δ_{rs}	iter. int. média	iter. ext.	tempo(s)	erro rel.
1	7.6	46	285.0	9.878e-6
2	10.0	30	245.0	7.612e-6
3	8.2	39	270.0	4.736e-6
4	9.1	34	265.0	9.394e-6
5	9.0	35	276.0	7.992e-6
6	8.8	37	292.0	7.249e-6

Tabela 4

GCP Seqüencial

problema	grid	iter. ext.	tempo(s)	erro rel.
$(C_V = 3.53)$	256×256	1388	1261.0	$8.925e-6$

$C_V = 3.53$; 4 subdomínios; 256×256

δ_{rs}	iter. int. média	iter. ext.	tempo(s)	erro rel.
0	63.4	708	34038.0	$9.500e-6$
1	129.3	39	3824.0	$7.500e-6$
2	105.3	37	2987.0	$3.906e-6$
3	122.3	31	2927.0	$8.803e-6$
4	113.8	33	2919.0	$6.304e-6$
5	174.7	71	9676.0	$5.710e-6$
6	115.1	31	2822.0	$3.153e-6$
7	83.4	43	2865.0	$4.620e-6$

$C_V = 3.53$; 8 subdomínios; 256×256

δ_{rs}	iter. int. média	iter. ext.	tempo(s)	erro rel.
1	53.1	50	1938.0	$6.156e-6$
2	52.9	54	2112.0	$5.045e-6$
3	47.7	62	2224.0	$9.427e-6$
4	45.7	59	2071.0	$6.998e-6$
5	60.5	48	2266.0	$7.278e-6$
6	59.0	50	2337.0	$6.354e-6$

$C_V = 3.53$; 16 subdomínios; 256×256

δ_{rs}	iter. int. média	iter. ext.	tempo(s)	erro rel.
1	26.1	124	2369.0	$8.642e-6$
2	27.9	120	2508.0	$8.098e-6$
3	26.3	127	2568.0	$7.056e-6$
4	28.9	98	2221.0	$8.620e-6$
5	30.6	105	2573.0	$7.175e-6$
6	28.0	115	2646.0	$9.501e-6$

Capítulo 7

Macrodispersão

7.1 Introdução

Neste Capítulo iniciamos o estudo do processo de mistura devido à formação de canais preferenciais de fluxo (*fingers*), para o escoamento incompressível, miscível (solvente-óleo), em meios porosos heterogêneos. Este processo de mistura aparece em vários problemas relevantes em contextos científicos e tecnológicos, tais como processos secundários e terciários de produção de petróleo e o transporte de contaminantes em águas do subsolo.

O estudo do processo de mistura de fluidos em meios porosos tem uma longa história e tem sido considerado através de diferentes métodos. A metodologia aqui utilizada é bastante semelhante àquela desenvolvida na série de trabalhos [52, 53, 54, 60, 61, 63], onde se estudou o processo de mistura para o caso do transporte linear. Para este tipo de transporte, diferentes metodologias podem ser encontradas em [6], onde técnicas do grupo de renormalização foram utilizadas, em [91], onde se fez uso de teoria de perturbação, e em [2] onde foi usada a teoria de homogeneização. Veja também [16, 18, 57, 76] e as referências lá citadas.

Faremos uso de uma abordagem estatística para a descrição da região onde ocorre a mistura dos fluidos solvente e óleo. Nós investigamos diretamente a ocorrência de leis de escala que podem governar o crescimento da região de mistura para tempos grandes. Como veremos, estas leis de escala caracterizam de maneira inequívoca o mecanismo físico que predomina no comportamento assintótico do processo de mistura.

Nós resolvemos numericamente as equações que governam o escoamento solvente-óleo para um conjunto de campos de permeabilidades tendo uma correlação espacial em comum. Analisamos então o comportamento da região de mistura (calculada através de médias de conjunto) como função do tempo.

Nossa metodologia pode ser considerada como pertencente à categoria de técnicas do grupo de renormalização. Estes procedimentos fornecem uma maneira sistemática de se reduzir o número de graus de liberdade de um sistema físico, através da incorporação dos efeitos de escalas pequenas em escalas maiores. Na nossa abordagem para o problema de escoamento, a renormalização é feita quando tomamos médias de conjunto de simulações.

Na seção 7.2 discutimos alguns resultados recentes para o transporte linear estocástico (o problema do traçador passivo). Estes resultados motivaram o nosso estudo para o problema de escoamento miscível. Na seção 7.3 discutimos algumas das dificuldades associadas ao problema de transferência de escalas (*scale-up*) em escoamentos em meios porosos. Na seção 7.4 definimos o tamanho da região de mistura, a *mixing length* ($\ell(t)$), que será usado para o escoamento miscível. Na seção 7.5 discutimos alguns resultados da literatura para o processo de mistura em duas situações distintas: o problema puramente não linear e o problema linear em formações heterogêneas.

7.2 Modelagem estocástica

Nesta seção discutiremos alguns resultados recentes que motivaram o nosso estudo sobre modelagem estocástica para o escoamento miscível em meios porosos. Estes resultados são referentes ao problema do transporte linear estocástico. Apresentaremos uma equação efetiva para o traçador passivo (7.7) que nos permitirá obter o crescimento da região de mistura, a *mixing length*, para tempos grandes.

A dispersão de poluentes em aquíferos é governada por uma equação linear de transporte (7.1), na qual o campo de velocidades é uma função aleatória (ou estocástica) do espaço

$$\phi \frac{\partial c}{\partial t} + u \cdot \nabla c = \vartheta^* \Delta c, \quad (7.1)$$

onde ϑ^* é a difusão molecular e u é o campo aleatório de velocidades dado pela Lei de Darcy e condição de incompressibilidade

$$u = -\frac{\mathcal{K}(\mathbf{x})}{\mu} \nabla p, \quad \nabla \cdot u = 0. \quad (7.2)$$

A estocasticidade presente no campo de velocidades é resultante do uso de modelos estocásticos usuais para a permeabilidade absoluta.

Os campos escalares de permeabilidade são do tipo log-normal,

$$\mathcal{K}(\mathbf{x}) = \mathcal{K}_0 e^{S\xi(\mathbf{x})}, \quad (7.3)$$

onde ξ é um campo aleatório Gaussiano estacionário caracterizado pela sua média $\langle \xi \rangle = 0$ (o operador $\langle \cdot \rangle$ denota média estatística) e sua covariância

$$C(\mathbf{x}, \mathbf{y}) = \langle \xi(\mathbf{x})\xi(\mathbf{y}) \rangle.$$

A média $\langle \mathcal{K} \rangle$ e a variância do campo log-normal \mathcal{K} são determinadas pelos coeficientes \mathcal{K}_0 e S . Variando-se o valor de S varia-se o coeficiente de variação do campo de permeabilidades

$$C_V \equiv \frac{\sigma_{\mathcal{K}}}{\langle \mathcal{K} \rangle}, \quad (7.4)$$

onde $\sigma_{\mathcal{K}}$ é o desvio padrão associado ao campo log-normal \mathcal{K} . Nós utilizamos o coeficiente de variação como uma medida (sem dimensão física) da heterogeneidade do campo de permeabilidades. Tomamos o campo ξ como sendo isotrópico e, para introduzirmos variabilidade em todas as escalas de comprimento, fractal ou auto-similar. Portanto, sua covariância é dada por

$$C(\mathbf{x}, \mathbf{y}) = b |\mathbf{x} - \mathbf{y}|^{-\varrho}, \quad b, \varrho > 0, \quad (7.5)$$

onde o expoente ϱ é conhecido como o expoente de Hurst. Este expoente controla a importância relativa das heterogeneidades nas grandes e pequenas escalas de comprimento. Para valores pequenos de ϱ , as heterogeneidades nas grandes escalas são enfatizadas. As heterogeneidades nas pequenas escalas de comprimento são enfatizadas para valores grandes de ϱ . A Figura 7.1 mostra duas realizações de campos aleatórios de permeabilidades, correspondendo a $\varrho = \infty$ (Gaussiano não correlacionado), quadro superior, e $\varrho = 0.5$, quadro inferior.

Note que a estatística fractal (7.5) é singular para pequenas distâncias. Quando ela é definida em uma malha computacional, naturalmente ocorre uma regularização devido ao espaçamento da malha. Recomendamos os trabalhos [3, 61] para uma discussão a respeito do uso de campos aleatórios fractais como modelos para a variabilidade de propriedades geológicas em estudos de escoamentos em meios porosos. Os trabalhos [44, 52] são recomendados para a descrição de métodos numéricos que geram campos Gaussianos aleatórios.

A estocasticidade do campo de velocidades, u , leva ao surgimento de uma região de mistura na média estatística da concentração dos poluentes $\langle c \rangle$, que pode ser caracterizada por um comprimento $\ell = \ell(t)$.

Apresentamos a seguir um sumário dos resultados obtidos em estudos recentes: [52, 53, 54, 60, 61, 79, 92]. Estes trabalhos descrevem a dinâmica da região de mistura em termos do crescimento de $\ell(t)$.

Desconsiderando-se efeitos gravitacionais, para um escoamento predominantemente em uma direção o crescimento assintótico (para tempos grandes) da região de mistura é determinado pela lei de escala das heterogeneidades geológicas. Para campos de permeabilidades com um valor pequeno de C_V temos

$$\ell(t) = O(t^\gamma), \quad \text{com} \quad \gamma = \max \left\{ \frac{1}{2}, \frac{1}{2} + \frac{1 - \varrho}{2} \right\}. \quad (7.6)$$

Esta relação mostra a existência de dois regimes qualitativamente distintos para o processo de mistura. O processo é Fickiano ou normal ($\gamma = 1/2$) quando a difusão é dominada por heterogeneidades em escalas pequenas ($\varrho \geq 1$), ou anômalo ($\gamma > 1/2$), quando dominado por heterogeneidades em grandes escalas ($\varrho < 1$). Estes resultados foram derivados através de uma expansão diagramática de segunda ordem da equação de transporte em termos das flutuações δu do campo de velocidades: $u = \langle u \rangle + \delta u$ (ou, equivalentemente, em termos das flutuações do campo de permeabilidades, consideradas pequenas).

Ainda de acordo com esta análise, a média $\langle c \rangle$, que fornece uma descrição macroscópica (*upscaled*) da dispersão, satisfaz a seguinte equação de convecção-difusão

$$\phi \frac{\partial \langle c \rangle}{\partial t} + \langle u \rangle \cdot \nabla \langle c \rangle = \vartheta \Delta \langle c \rangle, \quad (7.7)$$

onde o coeficiente renormalizado de dispersão (ou *coeficiente de macrodispersão*), ϑ , é dado por

$$\vartheta = \int_0^t \langle \delta u(\langle u \rangle t) \delta u(\langle u \rangle \sigma) \rangle d\sigma.$$

No limite de pequenas flutuações do campo de permeabilidades, simulações numéricas com alta resolução ([56, 79]) confirmaram estes resultados. Além disto, as simulações que utilizaram heterogeneidades geológicas de grande porte - um regime no qual não se espera que teorias de perturbação apresentem resultados corretos - também obtiveram as mesmas leis de escala (7.6) conseguidas via teoria de perturbação com pequenos valores de C_V .

Dados de campo ([58]) mostram que, tipicamente, o coeficiente de macrodispersão depende da escala e exhibe um comportamento anômalo (isto é, que cresce com a escala). Este comportamento anômalo foi associado à ocorrência de heterogeneidades em múltiplas escalas, pela primeira vez, nos trabalhos [52, 53, 54, 60, 61, 79, 92].

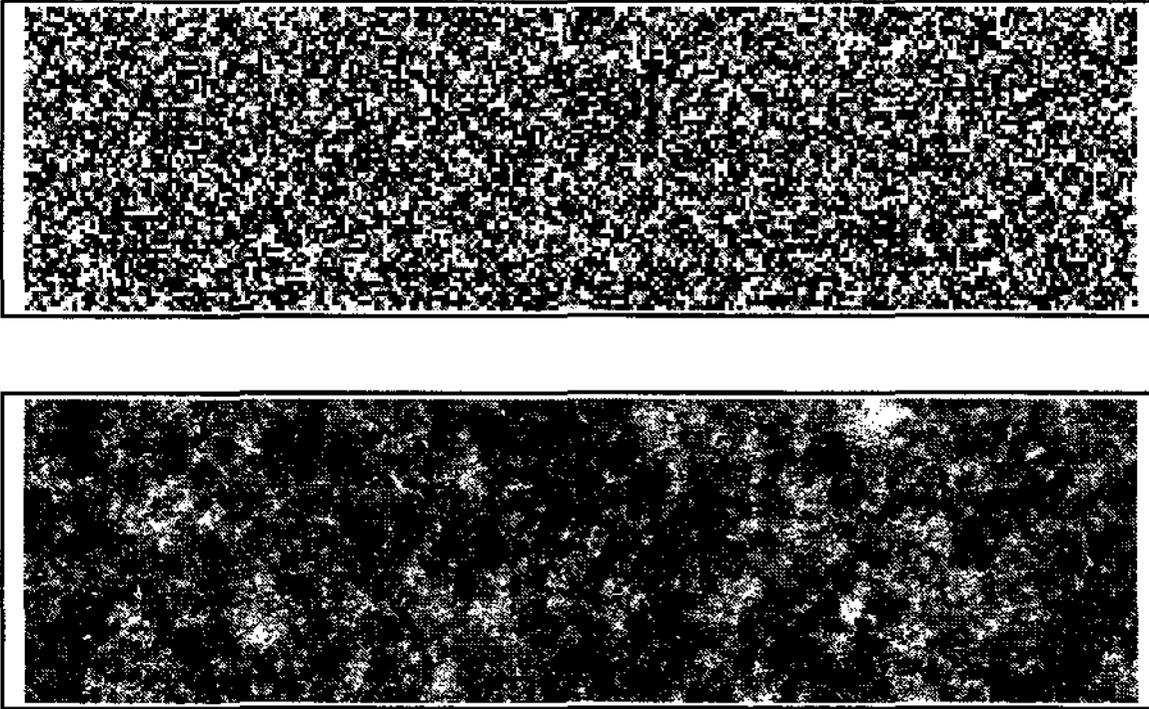


Figura 7.1: Dois exemplos de realizações, de campos de permeabilidades, utilizadas em estudos de escoamentos de fluidos. O quadro de cima se refere a um campo Gaussiano não correlacionado ($\rho = \infty$) e o quadro de baixo mostra um campo fractal com $\rho = 0.5$. Os valores de corte nos dados apresentados são: 0.3 md para preto e 4.0 md para branco.

7.3 O problema de transferência de escalas

Mesmo a variabilidade associada a pequenas escalas do campo de permeabilidades pode ter um efeito significativo no escoamento de fluidos em meios porosos. Do ponto de vista prático, ao invés de realizarmos um estudo computacional de grande porte com alta resolução numérica, seria desejável que fizéssemos uso de algum procedimento de *scale-up*. O objetivo de tal procedimento seria prescrevermos valores médios adequados para propriedades geológicas e outras funções de fluxo em uma escala maior, onde fosse possível realizarmos simulações numéricas que demandassem um esforço computacional bastante reduzido.

Tais procedimentos são, em geral, muito difíceis de se derivar. As difi-

culdades aparecem devido às interações altamente não lineares dos fluidos e da interação das não linearidades com as heterogeneidades. De fato, nossos resultados mostram que diferentes regimes para o escoamento podem ocorrer, dependendo da importância relativa das não linearidades presentes no escoamento e das heterogeneidades, assim como da correlação espacial destas heterogeneidades (veja também [3, 56, 59, 87]). É plausível, portanto, esperarmos que diferentes tipos de sistemas renormalizados de equações diferenciais parciais (diferentes tipos de equações efetivas) sejam usados para diferentes tipos, ou regimes, de escoamento.

Apesar disto, a maior parte das abordagens para se realizar o *scale up* para escoamentos multifásicos opera dentro de um paradigma rígido, baseado na renormalização das curvas de permeabilidade relativa com o intuito de se capturar os efeitos das heterogeneidades em escalas pequenas [7, 13, 43]. Todas estas abordagens resumem-se na introdução de uma renormalização hiperbólica das equações de transporte, onde apenas os termos de primeira ordem (hiperbólicos) de transporte são modificados. Portanto, podemos argumentar que tais abordagens são muito limitadas para capturar a complexidade do comportamento presente em escoamentos multifásicos em formações heterogêneas.

Como outros autores já observaram [56, 59, 72], a forma da equação de transporte renormalizada deve depender do regime presente no escoamento, convectivo, dispersivo ou mais complexo. Nossos resultados reforçam este ponto de vista e nós acreditamos que um melhor entendimento científico da influência mútua entre não linearidades e heterogeneidades é necessário para que modelos matemáticos, apropriados para uma descrição de escoamentos multifásicos em escalas de campo, possam ser formulados.

7.4 A região de mistura

Passamos agora a discutir uma definição apropriada para o comprimento (longitudinal) da região onde solvente e óleo se misturam macroscopicamente (o *mixing length*). O nosso objetivo no estudo deste processo é caracterizar o comprimento da região de mistura através de leis de escala que descrevam sua dinâmica de crescimento.

Para explicar a definição do *mixing length* ([55]), considere o seguinte problema de transporte unidimensional

$$\frac{\partial c}{\partial t} + u \frac{\partial c}{\partial x} - \vartheta(t) \frac{\partial^2 c}{\partial x^2} = 0, \quad (7.8)$$

$$c(x, 0) = H(-x). \quad (7.9)$$

A equação (7.8) é uma forma simplificada da equação efetiva (7.7) para o problema do traçador passivo submetido a um campo estocástico de velocidades. Aqui c é a concentração de um dos fluidos, que inicialmente está localizado na região $x < 0$, H é a função de Heaviside:

$$H(x) = \begin{cases} 0, & \text{se } x \leq 0, \\ 1, & \text{se } x > 0. \end{cases}$$

A solução das equações (7.8), (7.9) é dada pela função (*complementary error function*):

$$c(x, t) = \frac{1}{2} \operatorname{erfc} \left(\frac{x - ut}{l(t)} \right), \quad (7.10)$$

onde

$$\operatorname{erfc}(\eta) = 1 - \frac{2}{\sqrt{\pi}} \int_0^\eta e^{-\sigma^2} d\sigma \quad \text{e} \quad l(t) = 2 \left[\int_0^t \vartheta(\sigma) d\sigma \right]^{1/2}.$$

A solução (7.10) define duas escalas espaciais características do processo de mistura. Uma é $L(t) = ut$, que representa a distância (média) percorrida pela região de mistura no período de tempo t . A outra é $l(t)$, o *mixing length*, que constitui uma medida do comprimento da região de mistura no tempo t .

Se desconsiderarmos o fluxo difusivo $d(x, t) = -\vartheta(t) \partial c / \partial x$ no problema de transporte (7.8-7.9), sua solução fica

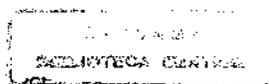
$$c(x, t) = H(L(t) - x); \quad (7.11)$$

ou seja, a interface inicialmente localizada em $x = 0$ separando os dois fluidos é simplesmente transportada para sua nova posição $x = L(t)$ no tempo t . A diferença de “massa” $\mathcal{M}(t)$ na região $x < L(t)$ nas soluções de (7.10) e (7.11),

$$\begin{aligned} \mathcal{M}(t) &= \int_{-\infty}^{L(t)} \left| \frac{1}{2} \operatorname{erfc} \left(\frac{x - L(t)}{l(t)} \right) - H(L(t) - x) \right| dx \\ &= \frac{1}{2} \int_{-\infty}^{\infty} \left| \frac{1}{2} \operatorname{erfc} \left(\frac{x - L(t)}{l(t)} \right) - H(L(t) - x) \right| dx, \end{aligned}$$

aparece devido ao efeito difusivo (presente em (7.10) mas não em (7.11)), que transporta “massa” da região $x < L(t)$ para a região $x > L(t)$. Então,

$$\mathcal{M}(t) = \int_0^t d(L(\sigma), \sigma) d\sigma = \frac{1}{\sqrt{\pi}} \int_0^t \frac{\vartheta(\sigma)}{l(\sigma)} d\sigma. \quad (7.12)$$



(A última igualdade acima segue da definição do fluxo difusivo d e da forma da solução (7.10).) Se nós substituirmos a identidade

$$\frac{1}{2} \frac{dl(t)}{dt} = \frac{1}{4l(t)} \frac{dl^2(t)}{dt} = \frac{\vartheta(t)}{l(t)}$$

na equação (7.12) e fizermos uso do fato de $l(0) = 0$, obteremos a seguinte expressão que relaciona o *mixing length* $l(t)$ e a diferença de “massa” $\mathcal{M}(t)$:

$$l(t) = 2\sqrt{\pi}\mathcal{M}(t). \quad (7.13)$$

A relação (7.13) motiva a definição para o *mixing length* em nosso estudo numérico da macrodispersão, no caso de escoamentos miscíveis em meios porosos heterogêneos. Para estudar este processo de mistura, através de simulações numéricas, nós resolvemos as equações, que descrevem o escoamento (2.28-2.29), para um conjunto de campos estocásticos de permeabilidade, $\mathcal{K}(\mathbf{x})$, que foram gerados com uma correlação espacial fractal (veja (7.5)). Para cada realização de $\mathcal{K}(\mathbf{x})$ e para cada tempo, calculamos a média transversal da concentração (transversal ao eixo horizontal - x - que é a direção predominante da velocidade média do fluido). Em seguida, para cada tempo, tomamos a média de conjunto das médias transversais e a denotamos por \bar{c} (uma função de x e t , $\bar{c} = \bar{c}(x, t)$). Em seguida, C_H , a solução das equações que descrevem o escoamento (2.28-2.29), com um campo de permeabilidades constantes, $\bar{\mathcal{K}} \equiv \langle \mathcal{K}(\mathbf{x}) \rangle$, é calculada e usada na definição do *mixing length* $\ell(t)$:

$$\ell(t) = \frac{1}{2} \int_0^X \phi |\bar{c}(x, t) - C_H(x, t)| dx, \quad (7.14)$$

onde X é o comprimento horizontal do reservatório ($\Omega = (0, X) \times (0, Y)$).

Uma forma alternativa de analisarmos o *mixing length*, que provavelmente é fisicamente mais significativa, é em termos da distância percorrida pela região de mistura. Para este fim, introduzimos o parâmetro $L(t)$, como uma medida da distância média percorrida pela região de mistura, no período de tempo t :

$$\ell(t) = \int_0^{L(t)} \phi |\bar{c}(x, t) - C_H(x, t)| dx. \quad (7.15)$$

7.5 Regimes de mistura: efeitos isolados

Tanto a não linearidade das equações, que descrevem o escoamento, quanto a heterogeneidade, no campo de permeabilidades, constituem mecanismos

que promovem a mistura macroscópica de fluidos, quando estes são transportados em meios porosos.

O acoplamento não linear entre a equação de convecção-difusão (2.29), dominada pelo transporte (2.25), e a equação para a pressão (2.28) pode causar o crescimento instável de pequenas flutuações, sendo este fenômeno conhecido como *viscous fingering* (veja, por exemplo, [68]). Por outro lado, heterogeneidades no campo de permeabilidades levam às variações no campo de velocidades que, por sua vez, estabelecem caminhos preferenciais para o escoamento. Como as heterogeneidades geram perturbações no escoamento, as quais podem iniciar a formação de *fingers*, nós devemos esperar a interação dos dois mecanismos: heterogeneidades e não linearidades. Além disto, as heterogeneidades influenciam na dinâmica de crescimento destes *fingers*. Para entendermos o efeito combinado das heterogeneidades e não linearidades, no processo de mistura macroscópica de fluidos, é conveniente que consideremos inicialmente cada efeito isoladamente. No Capítulo 9 nós apresentaremos e discutiremos os resultados de um estudo computacional de grande porte referente a estes efeitos combinados.

7.5.1 O efeito das não linearidades

Uma análise linear de estabilidade (perturbações infinitesimais das condições iniciais e pequenos intervalos de tempo), para problemas não lineares de escoamento, é instrutiva e leva à determinação de parâmetros e regimes de escoamento importantes.

Uma análise importante é feita para o caso do escoamento miscível (veja [68] e as referências lá citadas), onde a difusão molecular é o único efeito difusivo presente. Esta análise revela a existência de dois regimes distintos para o escoamento, caracterizados em termos de um parâmetro adimensional M , a razão de viscosidades

$$M = \frac{\mu_o}{\mu_s}. \quad (7.16)$$

Na região $0 \leq M < 1$ o escoamento é estável, no sentido de que pequenas perturbações, introduzidas na condição inicial, diminuem com o passar do tempo. Já na região $M > 1$ o escoamento é instável e tais perturbações crescem com o tempo.

A análise linear de estabilidade nos fornece informação acerca do comportamento de pequenas perturbações para tempos pequenos. No entanto, esta análise não fornece informação alguma sobre o comportamento não linear que governa as perturbações não estáveis para tempos grandes.

Nós investigamos a dinâmica do processo de mistura na qual somente os efeitos da não linearidade foram considerados. Fizemos isto através de simulações numéricas das equações que descrevem o escoamento miscível solvente-óleo (os resultados destas simulações encontram-se no Capítulo 9, seção 9.2). Nossos resultados indicam que o tamanho da região de mistura (como definida na seção (7.4)), num regime instável para o escoamento e para tempos grandes, cresce linearmente com o tempo como

$$\ell(t) = O(t), \quad \text{com } t \rightarrow \infty. \quad (7.17)$$

Nós vamos nos referir a um regime para o escoamento onde o *mixing length* obedece a lei de escala (7.17) como instável não linear (NU). Se, no entanto, o regime para o escoamento for estável no sentido que

$$\ell(t) = O(1), \quad \text{com } t \rightarrow \infty, \quad (7.18)$$

então vamos nos referir a ele como estável não linear (NS).

7.5.2 O efeito das heterogeneidades

O transporte linear (o problema do traçador passivo) em formações rochosas heterogêneas é descrito pela equação diferencial parcial linear (7.1).

Note que, para o transporte linear, a razão de viscosidades, M , é igual a 1 (os fluidos têm a mesma viscosidade). Isto significa que o processo de mistura é neutro, com respeito à instabilidade dinâmica (*viscous fingering*). Portanto, o processo de mistura determinado pela lei de escala (7.6) deve-se unicamente às variações no campo de velocidades, decorrentes das heterogeneidades presentes no campo de permeabilidades. Neste trabalho, um processo de mistura que obedece as leis de escala (7.6) será associado a um regime linear (L) para o escoamento.

Capítulo 8

O Problema do Traçador Passivo e os Efeitos do Tensor de Dispersão Hidrodinâmica

8.1 Introdução

Desenvolvemos neste Capítulo um estudo numérico com alta resolução para o problema do traçador passivo. O escoamento que nós vamos considerar para o problema do traçador é governado por uma equação elíptica (2.28) e por uma equação de difusão-convecção (2.29) que apresenta os efeitos difusivos do tensor de dispersão hidrodinâmica, ou tensor de difusão-dispersão “ D ”, (2.15). Para o traçador passivo, a equação de difusão-convecção é desacoplada da equação elíptica, pois estamos considerando fluidos que possuem a mesma viscosidade.

O procedimento *LCELM* foi usado em todas as simulações do nosso estudo numérico. Preferimos este procedimento ao *MMOCAA* por ele ser mais preciso, em virtude da conservação local de massa.

Na seção 8.2 fazemos a validação de nosso método numérico. Neste estudo nós desprezamos os efeitos difusivos devido aos coeficientes de dispersão hidrodinâmica ($d_{\ell} = d_t = 0$ metro) e consideramos apenas os efeitos difusivos devido à difusão molecular. Obtemos o regime linear (L) - lei de escala (7.6) - para o crescimento assintótico da região de mistura, de acordo com o estudo teórico exibido na seção 7.2.

O principal resultado deste Capítulo aparece na seção 8.3, onde fazemos um estudo numérico sobre a influência do tensor de difusão-dispersão, “ D ”, no comportamento assintótico da região de mistura. Fizemos várias simulações de escoamentos levando-se em consideração os efeitos difusivos dos

coeficientes de dispersão hidrodinâmica e de difusão molecular. Comparamos estas simulações com aquelas em que o escoamento não sofre efeitos dispersivos. As leis de escala, (7.6), são observadas também neste caso.

Para os estudos de reservatórios heterogêneos, nós consideramos campos escalares e heterogêneos de permeabilidades absolutas, considerados como o exponencial dos valores de realizações de campos fractais, aleatórios, Gaussianos (como descritos na seção 7.2), com correlações espaciais em comum. A intensidade da heterogeneidade é medida pelo coeficiente de variação, C_V (7.4).

Os dados abaixo foram fixados em todos os estudos deste Capítulo.

$$\begin{array}{ll} \text{Visc. do solvente e do óleo} & \mu_s = 1.0 \text{ cP} \quad \mu_o = 1.0 \text{ cP} \\ \text{Porosidade} & \phi = 0.2 \end{array}$$

Todos os gráficos presentes nas figuras deste Capítulo apresentam as seguintes características:

- As linhas pontilhadas correspondem às curvas provenientes de médias de conjunto de simulações com permeabilidade estocástica; as linhas tracejadas correspondem às retas com coeficientes angulares iguais a 0.5, se $\rho = \infty$, e 0.75, se $\rho = 0.5$; as linhas sólidas correspondem às retas com coeficiente angular igual a 1.0.
- No eixo vertical estão os valores de $\ln(\ell(t))$ e no eixo horizontal estão os valores de $\ln(t)$, onde $\ell(t)$ é o *mixing length* (7.14).

8.2 Validação do procedimento numérico

Para validar nosso procedimento numérico, usado no estudo das leis de escala para o crescimento da região de mistura de escoamentos em meios porosos heterogêneos, nós vamos aplicá-lo ao problema linear do traçador passivo. As equações que governam este escoamento são dadas por (7.1) e (7.2). As condições de fronteira para este sistema de equações são dadas por

$$u \cdot n = 0, \quad \forall \mathbf{x} \in \partial\Omega, \quad t \in J, \quad (8.1)$$

$$(\vartheta \nabla c) \cdot n - c(u \cdot n) = 0, \quad \forall \mathbf{x} \in \partial\Omega, \quad t \in J, \quad (8.2)$$

onde ϑ é a difusão molecular, n é o unitário normal exterior à fronteira de Ω e $J = [0, T]$ é o intervalo de tempo do escoamento no reservatório $\Omega = (0, X) \times (0, Y)$, que é considerado retangular, sendo que a injeção de fluido é feita em seu lado esquerdo e a mistura é produzida em seu lado direito. A condição inicial é dada por $c(\mathbf{x}, 0) = c_0(\mathbf{x}), \forall \mathbf{x} \in \Omega$.

Nós vimos na seção 7.2 que estudos recentes, [52, 53, 54, 60, 61, 63, 79, 92, 93, 94], descrevem a dinâmica da região de mistura em termos do crescimento de $\ell(t)$. Mostrou-se naquela seção que, para valores pequenos de C_V , $\ell(t)$ tem o comportamento dado pela lei de escala (7.6).

O nosso estudo numérico apresentou a mesma lei de escala acima para o crescimento assintótico da região de mistura, mesmo considerando valores grandes de C_V para os campos de permeabilidades (veja a Tabela 8.2). Desta forma obtivemos a validação do nosso procedimento numérico. Os detalhes deste estudo estão na próxima subseção.

8.2.1 Estudo numérico do traçador passivo

A metodologia que estamos utilizando, baseada em médias sobre conjuntos de simulações, requer que duas formas de convergência sejam utilizadas.

Em primeiro lugar, as malhas computacionais devem ser refinadas de modo a nos conduzir à convergência numérica da solução para cada realização do campo de permeabilidades. A escolha das malhas utilizadas aqui é justificada pelos estudos numéricos do Capítulo 5 (Figuras 5.2, 5.4, 5.5, 5.7 e 5.8), pela comparação com resultados derivados por teoria de perturbação (que serão descritos a seguir) e outros estudos de médias sobre conjuntos já disponíveis na literatura ([56, 81]).

A segunda forma de convergência que deve ser verificada é a estatística: o número de realizações consideradas no conjunto deve ser aumentado até que a curva para o *mixing length* se mantenha estável. Em todo o nosso estudo obtivemos uma boa convergência estatística com 8 realizações do campo de permeabilidades.

Em nosso estudo numérico nós resolvemos as equações (7.1) e (7.2), através de uma abordagem estocástica, para um conjunto de oito campos de permeabilidades distintos, porém com uma correlação espacial em comum (veja (7.5)). Analisamos, então, o comportamento da região de mistura (calculada através de médias de conjunto) como função do tempo. O comprimento $\ell(t)$ é calculado de acordo com a definição (7.14) do *mixing length*.

O coeficiente de difusão molecular está fixo em todas as simulações e vale $d_m = 0.0000001 \text{ cm}^2/\text{s}$.

O domínio retangular Ω possui dimensões $X = 512 \text{ m}$ e $Y = 128 \text{ m}$. Os campos de permeabilidades foram gerados levando-se em conta dois valores de ρ (o expoente de Hurst). A Tabela 8.1 exhibe os valores de ρ e as malhas computacionais e geológicas (permeabilidades) que foram usadas.

A Tabela 8.2 exhibe os valores dos coeficientes de variação usados nas simulações numéricas.

Tabela 8.1: Malhas utilizadas no problema do traçador.

ρ	∞	0.5
Malha computacional	512×128	512×128
Malha para permeab.	256×64	512×128

Tabela 8.2: Parâmetros utilizados nas simulações numéricas.

ρ	∞	∞	0.5	0.5
C_V	0.54	2.93	0.50	3.53

Passemos a discutir os resultados numéricos referentes à investigação da lei de escala para o problema do traçador passivo.

A Figura 8.1 exhibe os resultados das médias sobre conjuntos de realizações que utilizam campos de permeabilidades caracterizados pelo expoente de Hurst $\rho = 0.5$ e coeficientes de variação $C_V = 0.5$ (quadro de cima) e $C_V = 3.53$ (quadro de baixo). As curvas do *mixing length* indicam o regime linear (L) para a mistura macroscópica, ou seja, o crescimento assintótico da região de mistura é determinado pela lei de escala (7.6). Note que $\rho = 0.5$ implica $\gamma = 0.75$, portanto o processo macroscópico de mistura é anômalo. Um fato importante é que mesmo para um valor elevado do coeficiente de variação, $C_V = 3.53$, um valor não tratado pelas teorias mencionadas no Capítulo 7, nós observamos também o regime linear. Este resultado está de acordo com o estudo apresentado em [56] obtido por técnicas numéricas distintas das que utilizamos aqui.

A Figura 8.2 exhibe os resultados as médias sobre conjuntos de realizações que utilizam campos de permeabilidades caracterizados pelo expoente de Hurst $\rho = \infty$ e coeficientes de variação $C_V = 0.54$ (quadro de cima) e $C_V = 2.93$ (quadro de baixo). As curvas do *mixing length*, neste caso, também indicam o regime linear (L) para a mistura macroscópica. Note que $\rho = \infty$ implica $\gamma = 0.5$, portanto o processo macroscópico de mistura é Fickiano, ou normal. Observe que para um valor elevado do coeficiente de variação, $C_V = 2.93$, o regime linear é obtido, novamente de acordo com [56].

Podemos concluir, considerando-se os resultados numéricos obtidos nesta seção, que as malhas utilizadas para o campo de permeabilidades e as malhas computacionais foram apropriadas para o estudo proposto, visto que as simulações numéricas descreveram o mesmo comportamento que foi comprovado teoricamente.

8.3 Estudo dos efeitos do tensor hidrodinâmico no comportamento do *mixing length*

No estudo numérico desta seção nós resolvemos as equações (2.28) e (2.29), considerando valores não nulos para os coeficientes de dispersão hidrodinâmica, presentes no tensor “ D ”. A abordagem estocástica, as condições de fronteira e a condição inicial, para o sistema de equações acima, são as mesmas usadas na seção anterior. O nosso resultado mais importante é que as leis de escala não se alteram com os efeitos do tensor de difusão-dispersão.

O tensor de difusão-dispersão “ D ” apresenta as seguintes características:

- O coeficiente de difusão molecular está fixo em todas as simulações e vale $d_m = 0.0000001 \text{ cm}^2/s$.
- Os coeficientes de dispersão hidrodinâmica assumem os seguintes valores (relativamente grandes, quando comparados com valores típicos destes coeficientes):

$$d_\ell = 1.4 \text{ m}, \quad d_t = 0.14 \text{ m}.$$

O reservatório ainda é retangular e tem as mesmas características apresentadas na seção anterior. A Tabela 8.1 exhibe as malhas computacionais, as geológicas e os respectivos expoentes de Hurst, ρ , utilizados nas médias sobre conjuntos de simulações numéricas realizadas neste estudo. A Tabela 8.2 exhibe os valores dos coeficientes de variação, C_V , utilizados nos campos de permeabilidades heterogêneos.

8.3.1 Tensor com efeitos difusivos elevados

Pretendemos agora, investigar quais os efeitos causados nas curvas de *mixing length* quando usamos um tensor com os valores dos coeficientes de dispersão hidrodinâmica não nulos.

A Figura 8.3 exhibe os resultados do estudo numérico que compara os escoamentos do problema do traçador sem efeito e com efeito de dispersão. Consideramos campos de permeabilidades caracterizados por $\rho = 0.5$ e coeficientes de variação $C_V = 0.5$ (quadro de cima) e $C_V = 3.53$ (quadro de baixo). Para tempos grandes, a curva do *mixing length* correspondente ao escoamento sem efeitos dispersivos (pontilhado mais fino) apresenta um tamanho maior da região de mistura do que a curva do *mixing length* correspondente ao escoamento com efeitos dispersivos (pontilhado mais grosso). Para evitarmos conclusões errôneas é importante que façamos neste momento um comentário acerca deste resultado. Se, através da comparação de duas

simulações: uma com efeito dispersivo e a outra sem efeito dispersivo, nós analisássemos simplesmente os efeitos causados ao incluirmos mais dispersão ao nosso problema de escoamento, então certamente concluiríamos que a região de mistura aumentaria. Porém, o resultado apresentado aqui é mais complexo. Na verdade nós estamos considerando médias sobre diferentes conjuntos de simulações. Para cada problema considerado utilizamos valores diferentes para C_H (definido antes da expressão (7.14)) que aparece no cálculo do *mixing length*, desta forma não podemos esperar que o resultado intuitivo prevaleça. No entanto, a lei de escala para o crescimento da região de mistura não se altera.

Mostramos na Figura 8.4 que o mesmo comportamento ocorre quando consideramos campos de permeabilidades caracterizados por $\varrho = \infty$ e coeficientes de variação $C_V = 0.54$ (quadro de cima) e $C_V = 2.93$ (quadro de baixo).

Resumindo, em todos os estudos as curvas do *mixing length* apresentam o comportamento assintótico dado por (7.6), indicando claramente o regime linear (L) para o processo de mistura.

Na Figura 8.5 mostramos curvas de nível para a concentração do solvente depois de 600 dias de injeção; os níveis mostrados são: 0.1, 0.2, ..., 0.9. Esta simulação é uma das realizações que fazem parte do nosso estudo estocástico referente ao escoamento do traçador em meio caracterizado por $\varrho = 0.5$ e coeficiente de variação $C_V = 3.53$. As curvas de nível correspondentes ao escoamento com efeitos dispersivos está exibida no quadro de cima. O quadro de baixo exhibe as curvas de nível correspondente ao escoamento sem efeitos dispersivos. Como era de se esperar, os efeitos difusivos presentes na simulação exibida no quadro superior levam a um perfil de concentração mais suave.

8.4 Conclusões

Todos os resultados referentes aos estudos sobre o tensor “ D ” de difusão-dispersão apresentam sempre o comportamento assintótico dado por (7.6) para a curva que mede o crescimento da região de mistura (regime linear (L)). Isto indica claramente que os efeitos difusivos provocados por este tensor não influenciam o tipo de regime do escoamento.

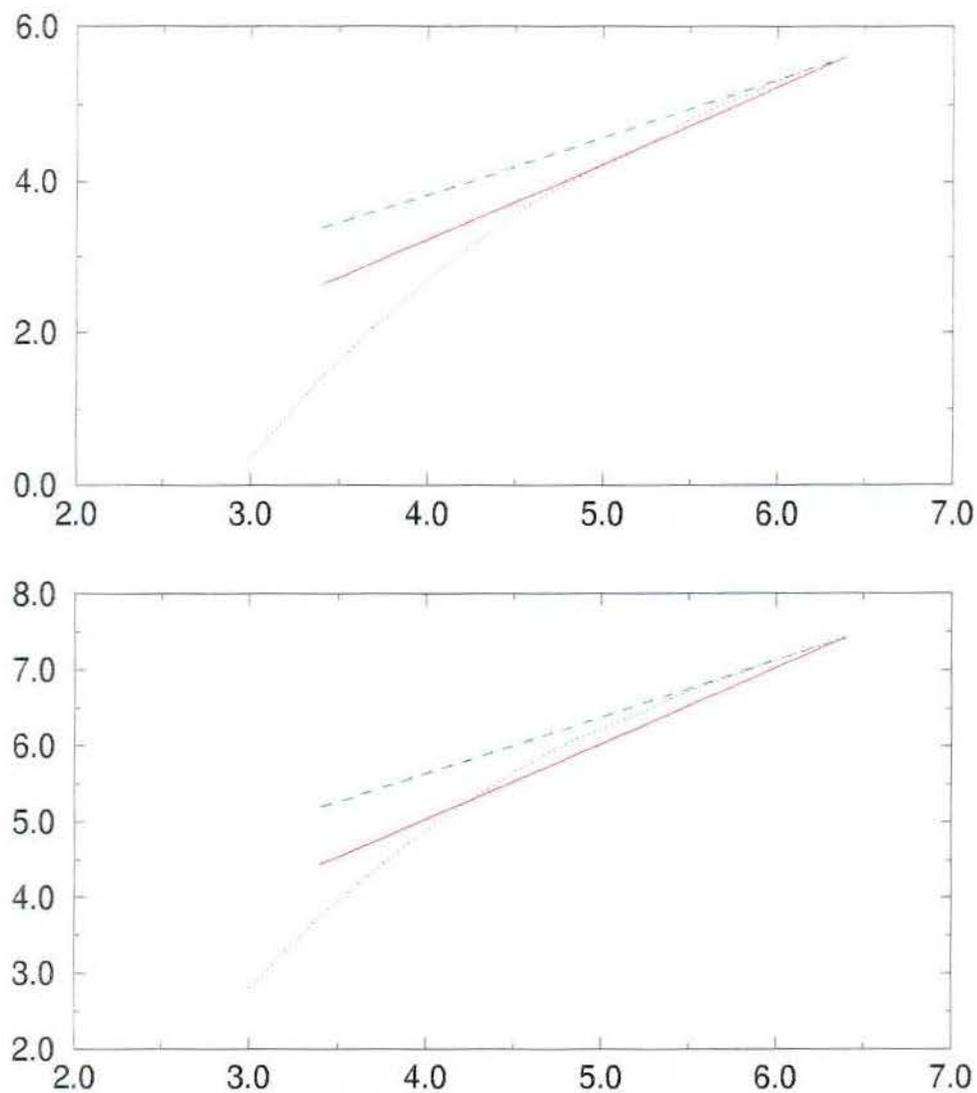


Figura 8.1: Comportamento, para tempos grandes, das curvas do *mixing length* do escoamento do traçador passivo em um meio heterogêneo. O campo de permeabilidades considerado é caracterizado por $\varrho = 0.5$ e coeficientes de variação $C_V = 0.5$ (quadro de cima) e $C_V = 3.53$ (quadro de baixo). Observamos o regime linear (L).

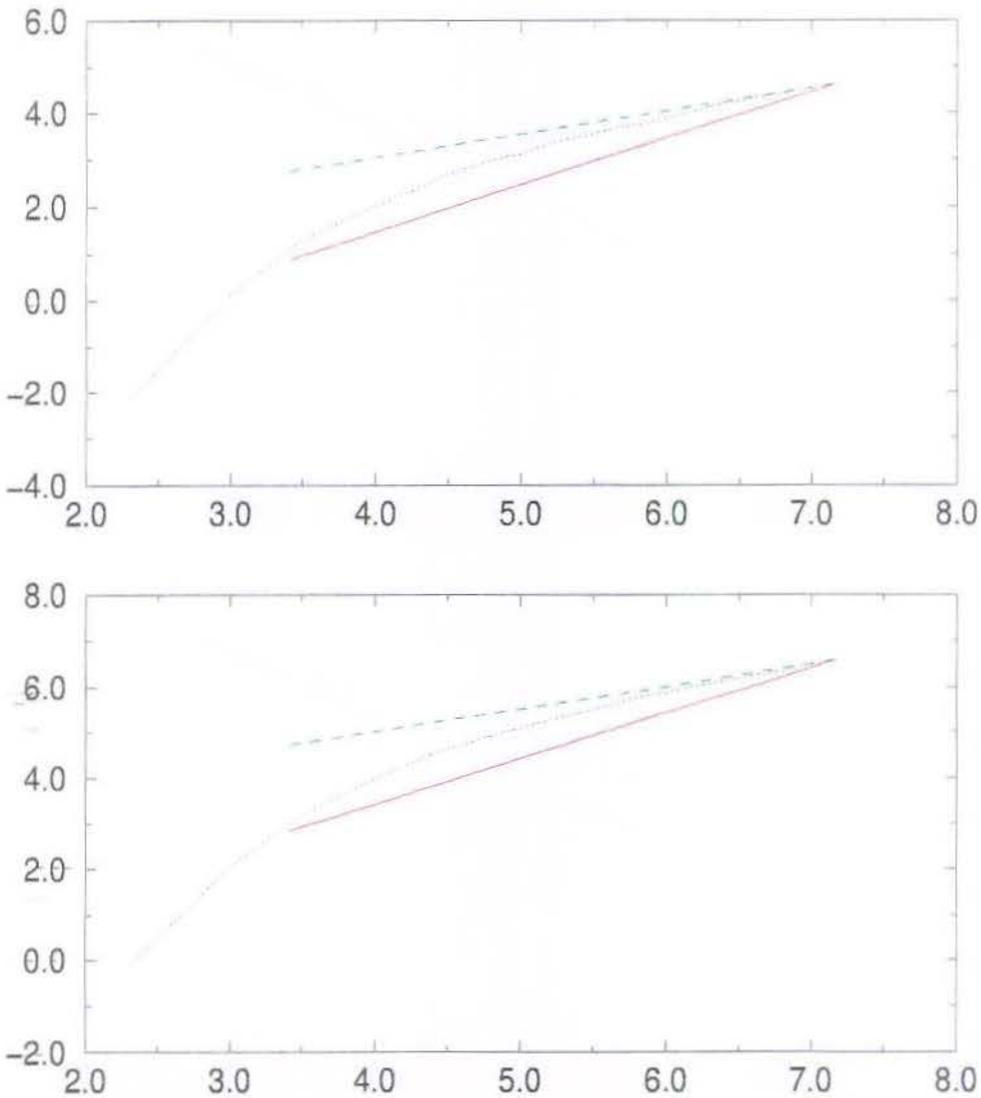


Figura 8.2: Comportamento, para tempos grandes, das curvas do *mixing length* do escoamento do traçador passivo em um meio heterogêneo. O campo de permeabilidades considerado é caracterizado por $\rho = \infty$ e coeficientes de variação $C_V = 0.54$ (quadro de cima) e $C_V = 2.93$ (quadro de baixo). Observamos o regime linear (L).

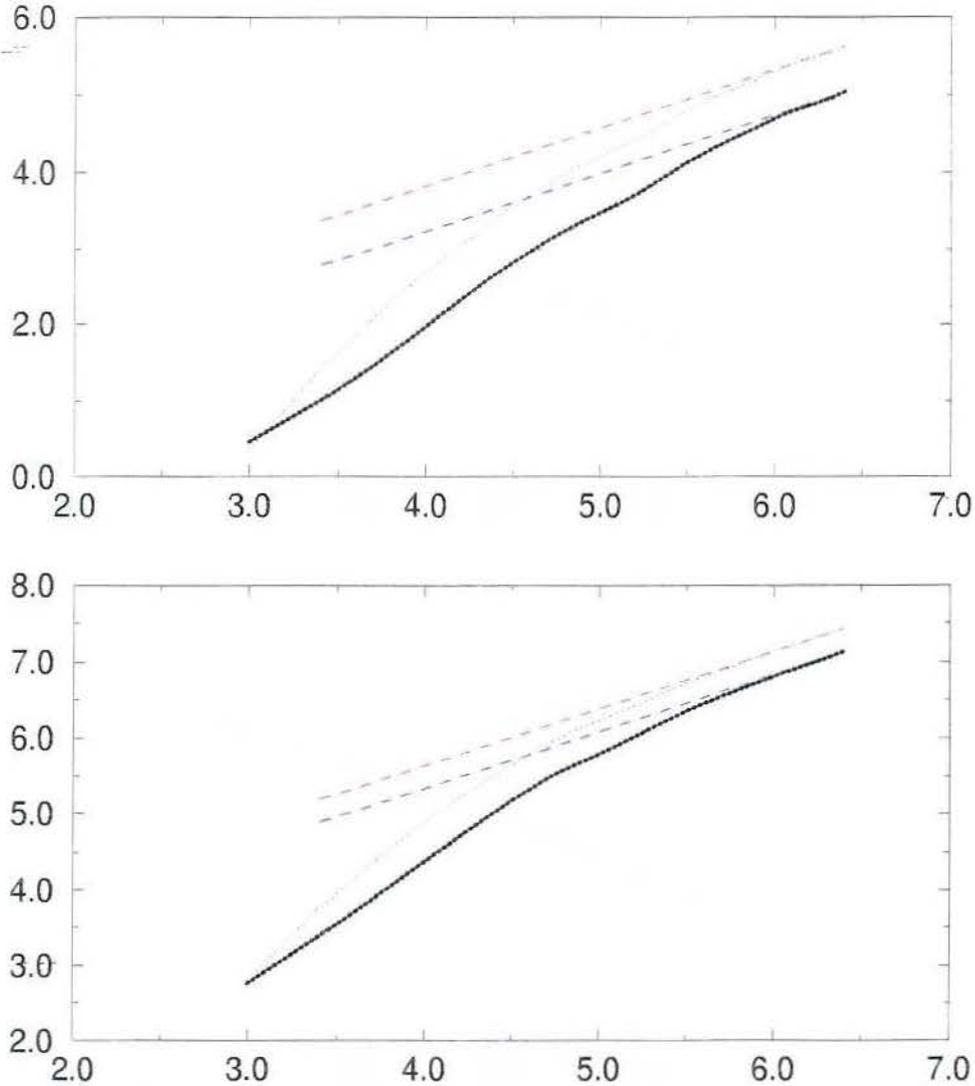


Figura 8.3: Comportamento, para tempos grandes, das curvas do *mixing length* do escoamento do traçador passivo em um meio heterogêneo. Fazemos uma comparação entre dois tipos de escoamentos: com efeitos dispersivos e sem efeitos dispersivos. As curvas com pontilhados mais grossos indicam a curva do *mixing length* correspondente ao escoamento com efeitos dispersivos. O campo de permeabilidades considerado é caracterizado por $\rho = 0.5$ e coeficientes de variação $C_V = 0.5$ (quadro de cima) e $C_V = 3.53$ (quadro de baixo). Observamos o regime linear (L).

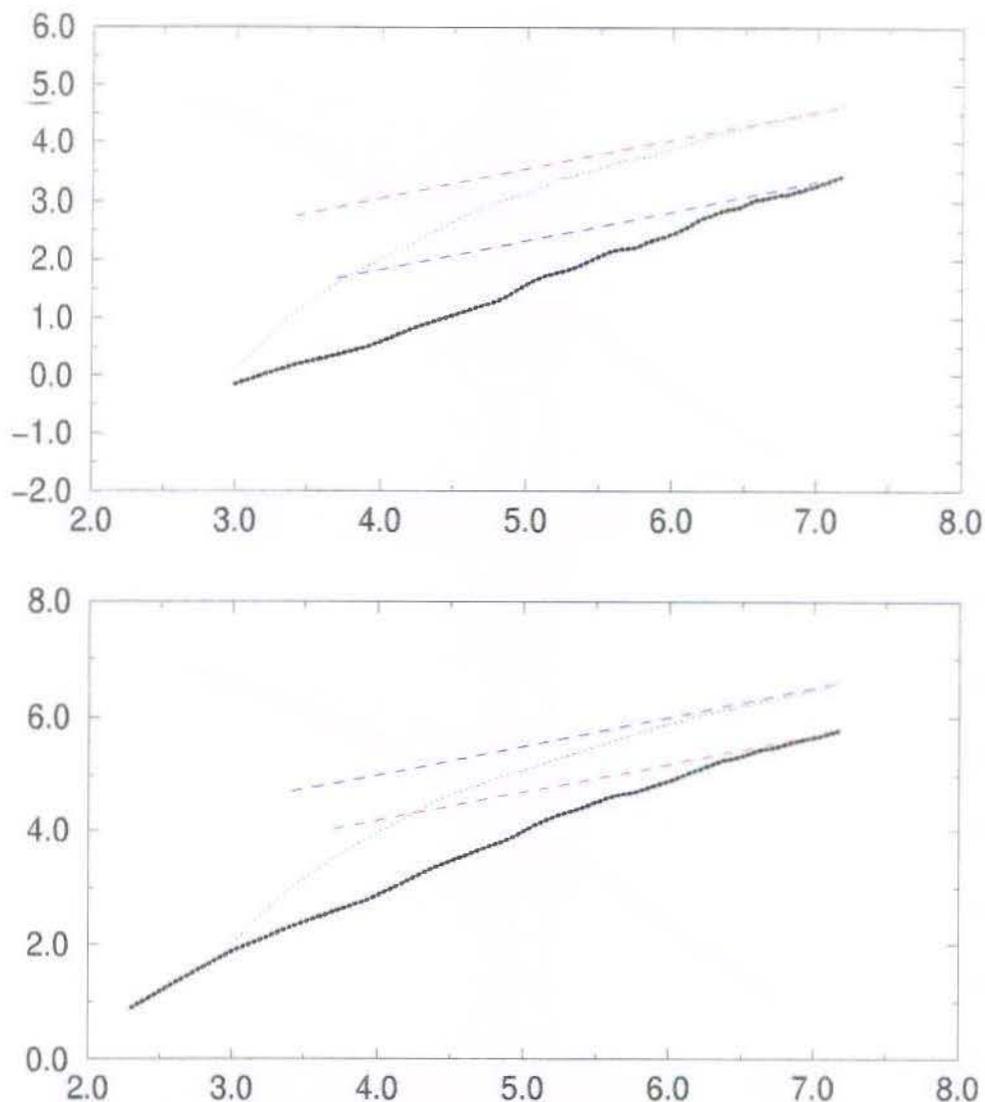


Figura 8.4: Comportamento, para tempos grandes, das curvas do *mixing length* do escoamento do traçador passivo em um meio heterogêneo. Fazemos uma comparação entre dois tipos de escoamentos: com efeitos dispersivos e sem efeitos dispersivos. As curvas com pontilhados mais grossos indicam a curva do *mixing length* correspondente ao escoamento com efeitos dispersivos. O campo de permeabilidades considerado é caracterizado por $\rho = \infty$ e coeficientes de variação $C_V = 0.54$ (quadro de cima) e $C_V = 2.93$ (quadro de baixo). Observamos o regime linear (L).

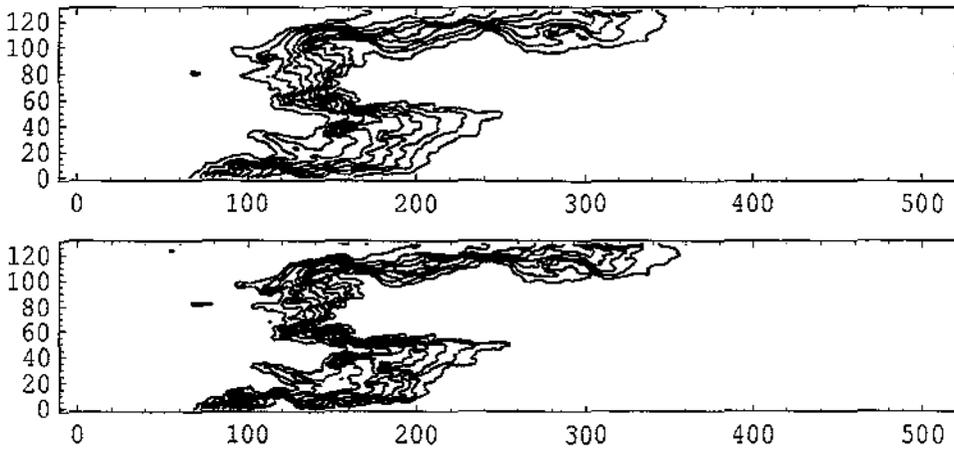


Figura 8.5: Simulações numéricas do problema do traçador com campo de permeabilidades caracterizado por $\rho = 0.5$ e $C_V = 3.53$. As curvas de nível do quadro de cima correspondem a um escoamento com efeitos dispersivos, onde o tensor de difusão-dispersão apresenta os coeficientes $d_\ell = 1.4 \text{ m}$ e $d_t = 0.14 \text{ m}$. O quadro de baixo apresenta um escoamento com menos difusão ($d_\ell = d_t = 0 \text{ m}$) e um perfil de concentrações menos suave do que o obtido no quadro de cima. Foram simulados 600 dias de escoamento.

Capítulo 9

Regimes de mistura para o escoamento miscível não linear

9.1 Introdução

Neste Capítulo apresentamos um estudo numérico, de grande porte e com alta resolução, para o processo de mistura devido à formação de canais preferenciais de fluxo (*fingers*), para o escoamento incompressível, miscível não linear (solvente-óleo), em meios porosos heterogêneos.

Os principais resultados deste Capítulo são:

- O estudo do efeito isolado das não linearidades no processo de mistura para escoamentos em meios homogêneos. Este material encontra-se na seção 9.2.
- A determinação de uma família de regimes de mistura para o escoamento miscível não linear. Este material encontra-se na seção 9.3.

Lembramos que o escoamento em estudo é governado por uma equação de convecção-difusão para a concentração do solvente (2.29). Esta equação é dominada por sua parte hiperbólica e é acoplada a uma equação elíptica para a pressão (2.28). Vamos considerar campos de permeabilidades correlacionados e não-correlacionados.

A abordagem estatística para a descrição da região onde ocorre a mistura dos fluidos solvente e óleo está descrita no Capítulo 7. Nós investigamos, por meio de simulações numéricas, a ocorrência de leis de escala que podem governar o crescimento da região de mistura para tempos grandes. Como veremos, estas leis de escala caracterizam de maneira inequívoca o mecanismo físico que predomina no comportamento assintótico do processo de mistura.

Tabela 9.1: Malhas utilizadas.

ϱ	∞	0.5
Malha computacional	512×128	512×128
Malha para permeab.	256×64	512×128

Nos estudos deste Capítulo o tensor de difusão-dispersão “ D ” (2.15) apresenta as seguintes características:

- O coeficiente de difusão molecular vale

$$d_m = 0.0000001 \text{ cm}^2/\text{s}.$$

- O coeficiente de dispersão hidrodinâmica longitudinal vale

$$d_\ell = 0.014 \text{ m}.$$

- O coeficiente de dispersão hidrodinâmica transversal vale

$$d_t = 0.0014 \text{ m}.$$

Em todas as simulações do escoamento de fluidos deste Capítulo as dimensões da região computacional são $X = 512 \text{ m}$, $Y = 128 \text{ m}$. As simulações numéricas consistem em duas partes, a geração numérica de um conjunto de realizações (ou amostras) de campos de permeabilidades com o comportamento dado por (7.5) para um dado valor de ϱ (o expoente de Hurst - veja a Tabela 9.1) e a determinação do *mixing length* resultante para o escoamento através de um conjunto de campos aleatórios de permeabilidades. A curva do *mixing length* é definida como na seção 7.4 e calculada de acordo com (7.14), em função da distância percorrida pela região de mistura.

A Tabela 9.1 mostra as malhas utilizadas nas simulações do escoamento dos fluidos (malha computacional) e a especificação da permeabilidade absoluta (malha para permeab.).

Todos os gráficos correspondentes às curvas do *mixing length* apresentam no eixo vertical os valores de $\ln(\ell(t))$ e no eixo horizontal os valores de $\ln(t)$, onde $\ell(t)$ é a função que mede o tamanho da região de mistura no tempo “ t ” (veja (7.14)) e $\ln(t)$ é a função logaritmo neperiano. Os gráficos que exibem os perfis de médias de concentrações apresentam no eixo vertical os valores de concentrações (variando de 0.0 a 1.0) e no eixo horizontal os valores, em centímetros, da distância percorrida pela frente da onda.

Todos os resultados numéricos deste Capítulo, referentes aos regimes de mistura, apresentam as seguintes características:

- Nos gráficos que exibem os comportamentos assintóticos, as linhas pontilhadas correspondem às curvas provenientes de médias sobre conjuntos de simulações com permeabilidade estocástica; as linhas tracejadas correspondem às retas com coeficientes angulares 0.5, se $\rho = \infty$, e 0.75, se $\rho = 0.5$; as linhas sólidas correspondem às retas com coeficiente angular 1.0.
- Nos gráficos que exibem os perfis de concentrações médias, as curvas pontilhadas correspondem aos perfis associados às médias sobre conjuntos de simulações. As curvas sólidas são os perfis destas mesmas simulações em um meio homogêneo (C_H que aparece em (7.15)).

Os reservatórios considerados neste Capítulo serão retangulares. A injeção de fluido será feita no lado esquerdo do reservatório e a mistura será produzida em seu lado direito (geometria *slab* horizontal para o reservatório).

9.2 Escoamento em um meio homogêneo: o efeito das não linearidades

O efeito isolado das heterogeneidades no processo de mistura foi discutido no Capítulo 8. Nesta seção nós apresentamos o estudo numérico do efeito isolado das não linearidades no processo de mistura para escoamentos em meios homogêneos. Nosso objetivo é o estudo da dinâmica que governa o crescimento de pequenas perturbações que são feitas nas condições iniciais das equações não lineares que governam este tipo de escoamento. Resolvemos numericamente as equações não lineares (com $M = 1.5$) para oito campos homogêneos de permeabilidades com perturbações distintas nas condições iniciais do escoamento. Para cada realização as perturbações iniciais foram introduzidas da seguinte forma. Nós consideramos campos heterogêneos de permeabilidades com $C_V > 2$ que foram usados no início de cada realização, simulando-se um período de seis dias de escoamento. Depois deste período inicial nós utilizamos um campo constante de permeabilidades.

Observamos claramente que o regime de mistura é instável não linear (NU), como discutido na subseção 7.5.1.

A Figura 9.1 mostra o comportamento assintótico, para tempos grandes, da curva do *mixing length*. Este é um dos resultados novos deste trabalho. Como mencionamos no Capítulo 7, técnicas analíticas permitem o estudo do processo de mistura restrita a tempos pequenos e perturbações infinitesimais nas condições iniciais. O nosso estudo elimina estas restrições: temos grandes perturbações devido aos grandes valores dos coeficientes de variação (C_V)

utilizados e, além disto, temos o comportamento assintótico no tempo para $\ell(t)$.

9.3 Efeitos combinados da heterogeneidade e da não linearidade

9.3.1 Descrição das simulações

Dezenove conjuntos de simulações foram realizados na investigação das leis de escala que governam o processo de mistura para o problema miscível. Nosso principal objetivo é entender a competição entre a heterogeneidade e a não linearidade na determinação de regimes para o processo de mistura. Portanto, mantemos os seguintes parâmetros fixos:

- Taxa de injeção (q): um volume poros a cada 5 anos.
- Porosidade: $\phi(\mathbf{x}) = 0.2$.

9.3.2 Sumário dos resultados

As Tabelas 9.2 e 9.3 mostram os valores do C_V do campo de permeabilidades e da razão de viscosidades M nas simulações com $\varrho = \infty$ e $\varrho = 0.5$, respectivamente. Estes valores para ϱ , no caso do traçador passivo, correspondem às difusões Fickiana ($\varrho = \infty$) e anômala ($\varrho = 0.5$). Estas Tabelas também exibem os regimes do processo de mistura correspondentes a vários pontos (C_V, M) , os quais serão abordados a seguir. Os símbolos que aparecem nas Tabelas 9.2 e 9.3 possuem o seguinte significado:

- NU : Instável Não Linear; $\ell(t) = O(t)$ para tempos grandes, como descrito na subseção 7.5.1.
- L : Linear; o comportamento para tempos grandes de $\ell(t)$ é dado por (7.6).
- NS : Estável Não Linear; $\ell(t)$ não cresce com o tempo.
- L^+ : Superlinear; dado um valor de ϱ e o correspondente valor de γ por (7.6) então $\ell(t) = O(t^\delta)$ para tempos grandes, com $\gamma < \delta < 1$.
- L^- : Sublinear; dado um valor de ϱ e o correspondente valor de γ por (7.6) então $\ell(t) = O(t^\delta)$ para tempos grandes, com $0 < \delta < \gamma$.

Tabela 9.2: $\rho = \infty$ (Não correlacionado)

M / C_V	0.54	1.33	2.93
1.5	<i>NU</i>	L^+	L^+
1.0	L	L	L
0.5	<i>NS</i>	L	L

Tabela 9.3: $\rho = 0.5$ (Fractal)

M / C_V	0.5	0.99	1.83	3.53
1.5		<i>NU</i>	L	
1.0	L	L	L	L
0.5		L^-	L	
0.25	<i>NS</i>		L^-	

Passemos então a discutir em detalhe os resultados apresentados nas Tabelas 9.2 e 9.3.

Considere em primeiro lugar a Tabela 9.2. Estes resultados referem-se ao expoente de Hurst $\rho = \infty$. As transições entre os regimes de escoamento, exibidos na segunda coluna e na primeira linha desta Tabela, são resultados da análise da Figura 9.2. A primeira transição é observada quando fixamos $C_V = 1.33$ e aumentamos a importância relativa da não linearidade (aumentamos o valor de M : de 0.5 para 1.5). Passamos de um regime linear (L) (quadro de baixo, ($C_V = 1.33, M = 0.5$)) para um regime superlinear (L^+) (quadro do meio, ($C_V = 1.33, M = 1.5$)). Já a segunda transição é observada quando fixamos $M = 1.5$ e aumentamos a importância relativa das heterogeneidades (aumentamos o valor de C_V : de 0.54 para 1.33). Passamos de um regime instável não linear (*NU*) (quadro de cima, ($C_V = 0.54, M = 1.5$)) para um regime superlinear (L^+) (quadro do meio, ($C_V = 1.33, M = 1.5$)). Os perfis de concentrações médias correspondentes a estas simulações aparecem na Figura 9.3.

Nossos resultados exibidos na Tabela 9.3 ($\rho = 0.5$) mostram, em termos gerais, o mesmo comportamento que foi apresentado na Tabela 9.2. As transições entre os regimes de escoamento, exibidos na segunda coluna e na primeira linha desta Tabela, são resultados da análise da Figura 9.5. Nesta Figura, se diminuirmos a importância relativa da não linearidade (fixa-se um valor de C_V e diminui-se o valor de M) podemos passar de um regime *NU* (quadro do meio, ($C_V = 0.99, M = 1.5$)) para um regime L^- (quadro de baixo, ($C_V = 0.99, M = 0.5$)). Agora, se fixamos $M (= 1.5)$ e aumentamos

os valores de C_V , passamos de um regime NU (quadro do meio, ($C_V = 0.99$, $M = 1.5$)) para um regime L (quadro de cima, ($C_V = 1.83$, $M = 1.5$)). Os perfis de concentrações médias correspondentes a estas simulações aparecem na Figura 9.6.

Os resultados das Tabelas 9.2 e 9.3 podem ser resumidos em:

- Diferentes regimes para o processo de mistura, determinados pela lei de escala para o *mixing length* para tempos grandes, podem ocorrer. Tais regimes aparecem se algum mecanismo (não linearidade ou heterogeneidade) domina sozinho (ou não) o processo de mistura solvente-óleo.
- Se a não linearidade domina sozinha, então duas possibilidades podem ocorrer dependendo das forças viscosas: NU ou NS caso o *mixing length* cresça ou não com o tempo, respectivamente. Obtivemos o comportamento NS para $\varrho = 0.5$ e $\varrho = \infty$, ilustrado nas Figuras 9.7 e 9.4, respectivamente. Veja nestas Figuras que os perfis de concentrações médias indicam que a região de mistura não cresce com o tempo.
- Se a heterogeneidade domina o processo de mistura, então observamos o regime linear (L).
- Se os dois mecanismos atuam simultaneamente sem que um deles predomine, então duas possibilidades podem ocorrer: L^- ou L^+ .
- Os processos de mistura macroscópica associados a escoamentos lineares e não lineares são essencialmente idênticos, se a magnitude das heterogeneidades for suficientemente grande.

Uma representação gráfica dos nossos resultados foi feita, em termos de um “diagrama de fase”, no plano $M \times C_V$, veja a figura 9.8. Nossos resultados sugerem que para um dado valor de ϱ existe um valor “crítico” para a razão de viscosidades M . Próximo a este “ponto crítico” o escoamento miscível comporta-se de acordo com os diversos regimes discutidos acima.

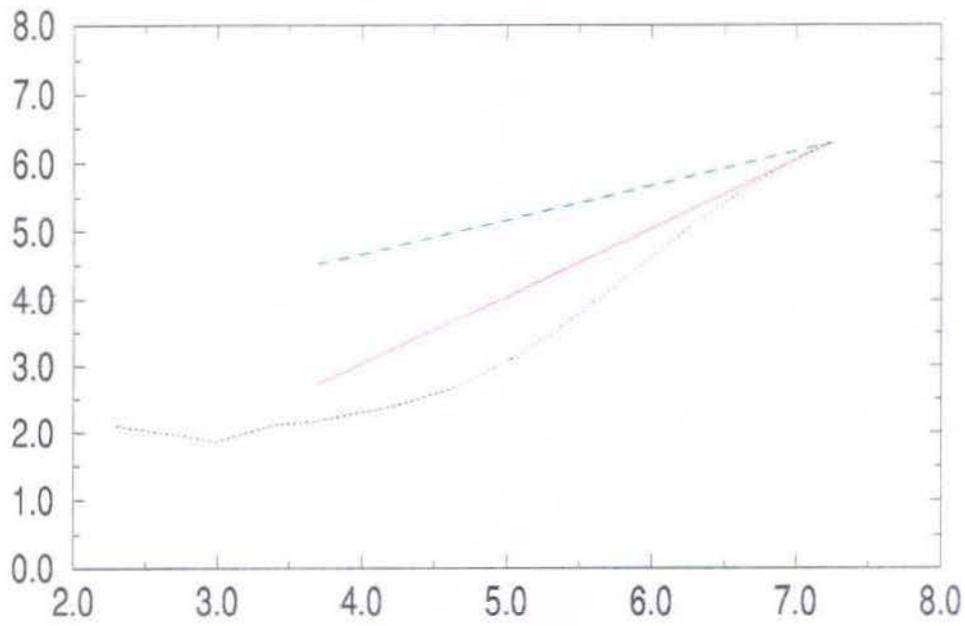


Figura 9.1: Comportamento, para tempos grandes, da curva para o *mixing length* do escoamento miscível, em meio homogêneo, com $M = 1.5$. Claramente observamos o comportamento (NU).

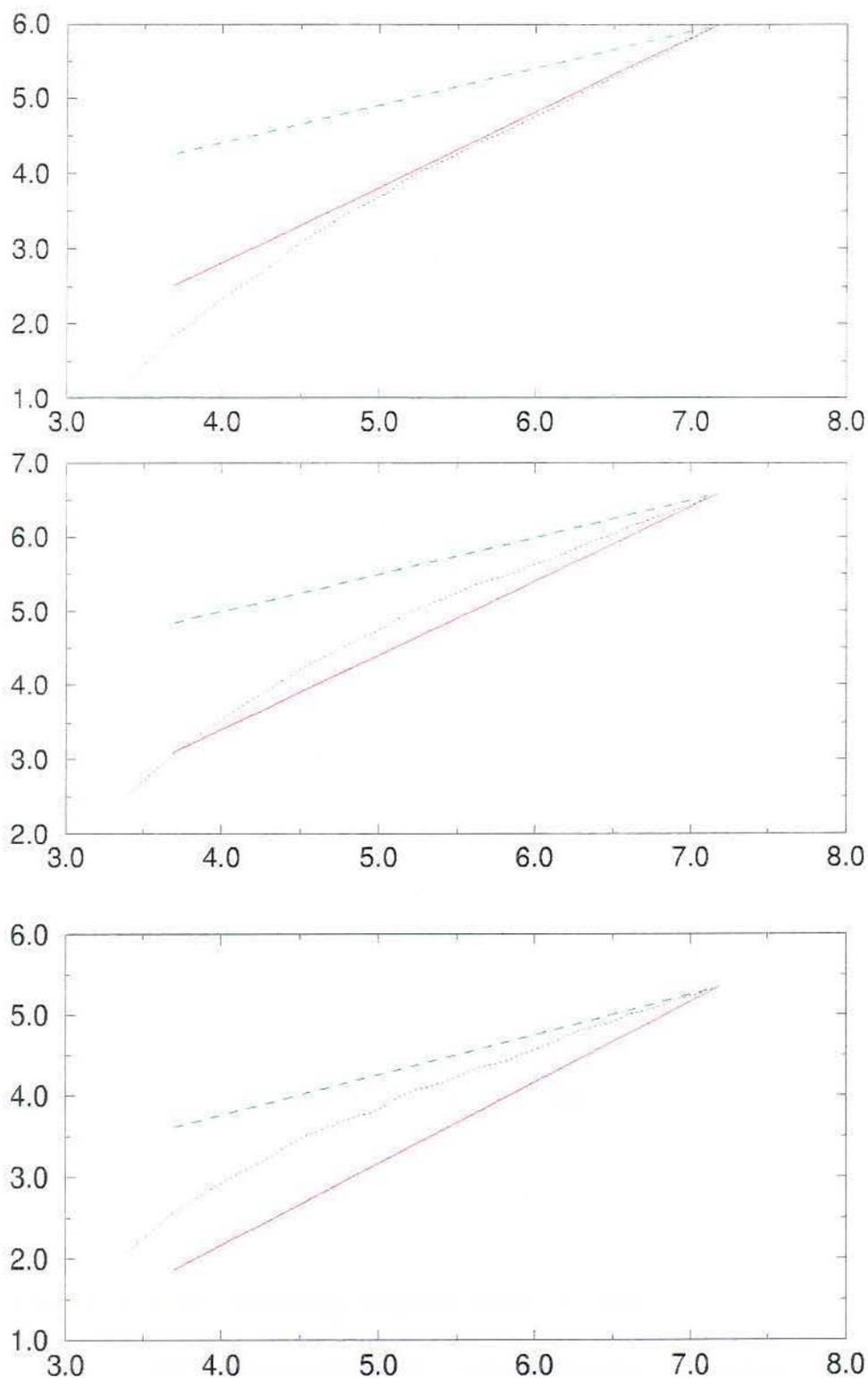


Figura 9.2: Comportamento, para tempos grandes, das curvas do *mixing length* para o escoamento miscível, indicando a ocorrência de diferentes regimes para o processo de mistura: NU (quadro de cima, $M = 1.5$ e $C_V = 0.54$), L^+ (quadro do meio, $M = 1.5$, $C_V = 1.33$) e L (quadro de baixo, $M = 0.5$ e $C_V = 1.33$). O campo de permeabilidades é caracterizado por $\varrho = \infty$.

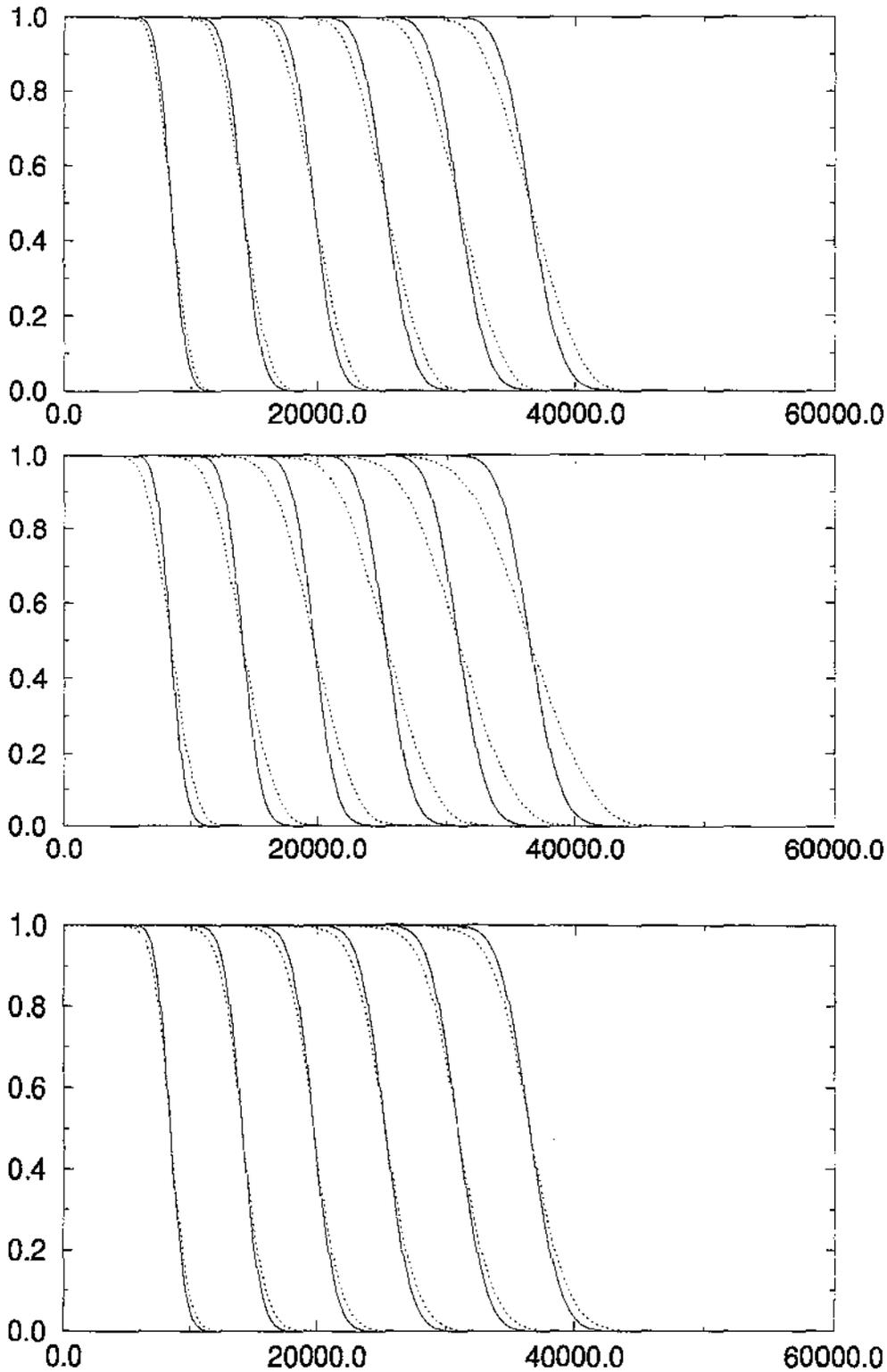


Figura 9.3: Perfis de concentrações médias são exibidos em função da razão de viscosidades M , correspondendo a diferentes regimes de mistura, para o escoamento em um campo de permeabilidades com $\rho = \infty$. Os regimes de mistura (de cima para baixo) são: instável não linear ($M = 1.5, C_V = 0.54$), superlinear ($M = 1.5, C_V = 1.33$) e linear ($M = 0.5, C_V = 1.33$).

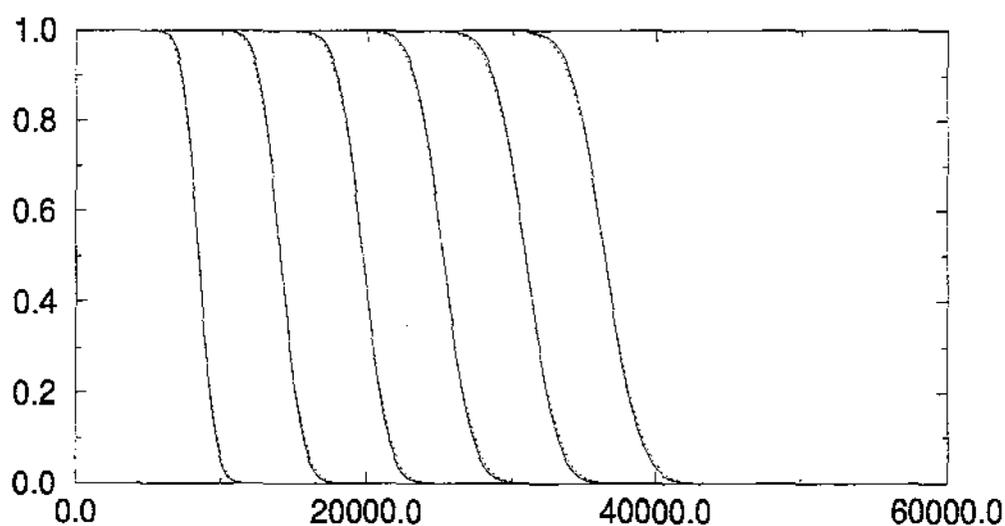


Figura 9.4: Ao analisarmos os perfis correspondentes à simulação do escoamento em um campo de permeabilidades com $\rho = \infty$, $C_V = 0.54$ e $M = 0.5$ fica claro que o regime de mistura corresponde ao comportamento (*NS*), pois estes perfis, todos bem similares, indicam um não crescimento da região de mistura.

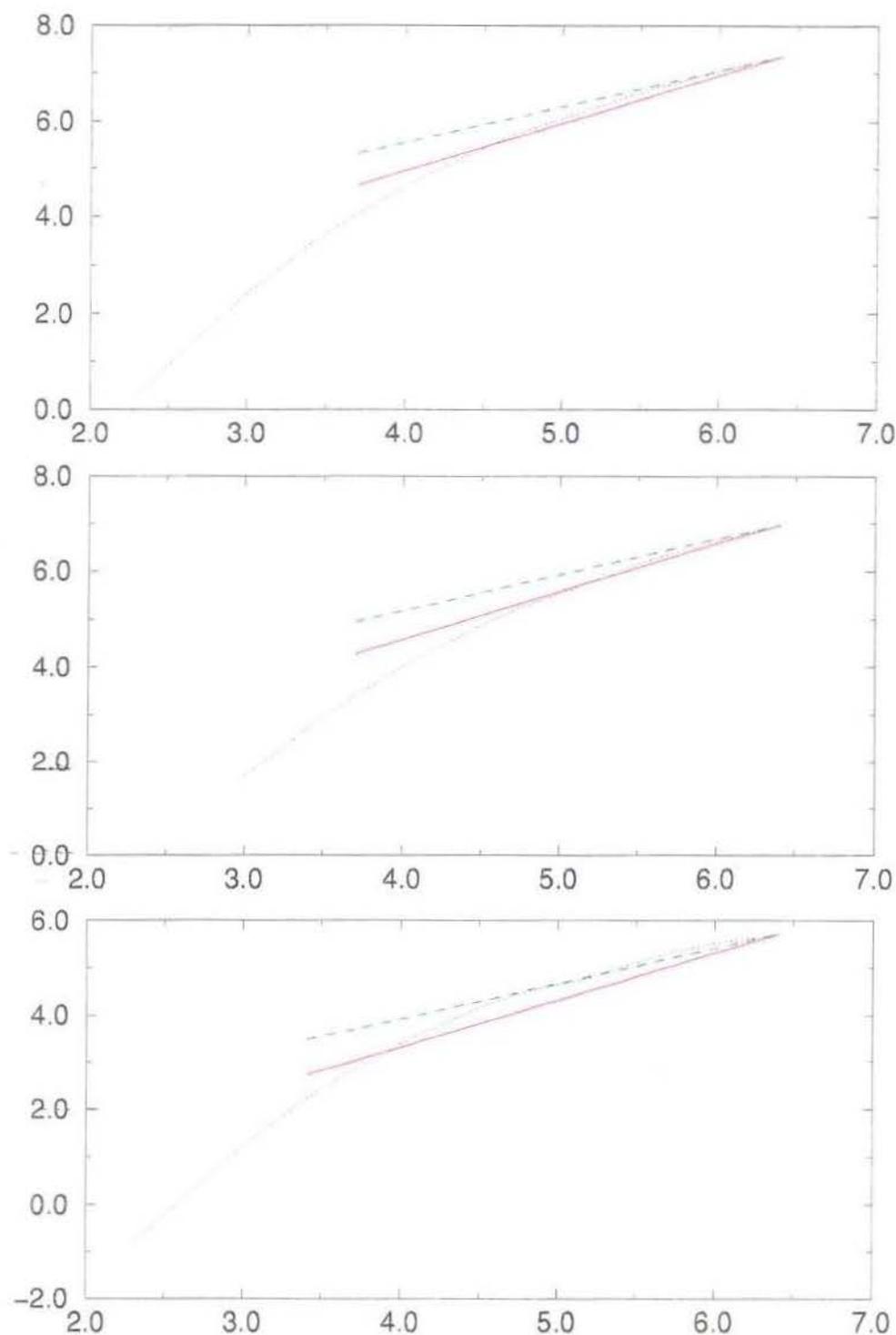


Figura 9.5: Comportamento das curvas do *mixing length* para o escoamento miscível, indicando a ocorrência de diferentes regimes de misturas para tempos grandes. O campo de permeabilidades considerado é caracterizado por $\varrho = 0.5$. Os regimes são: L (quadro de cima, $M = 1.5$ e $C_V = 1.83$), NU (quadro do meio, $M = 1.5$, $C_V = 0.99$) e L^- (quadro de baixo, $M = 0.5$ e $C_V = 0.99$).

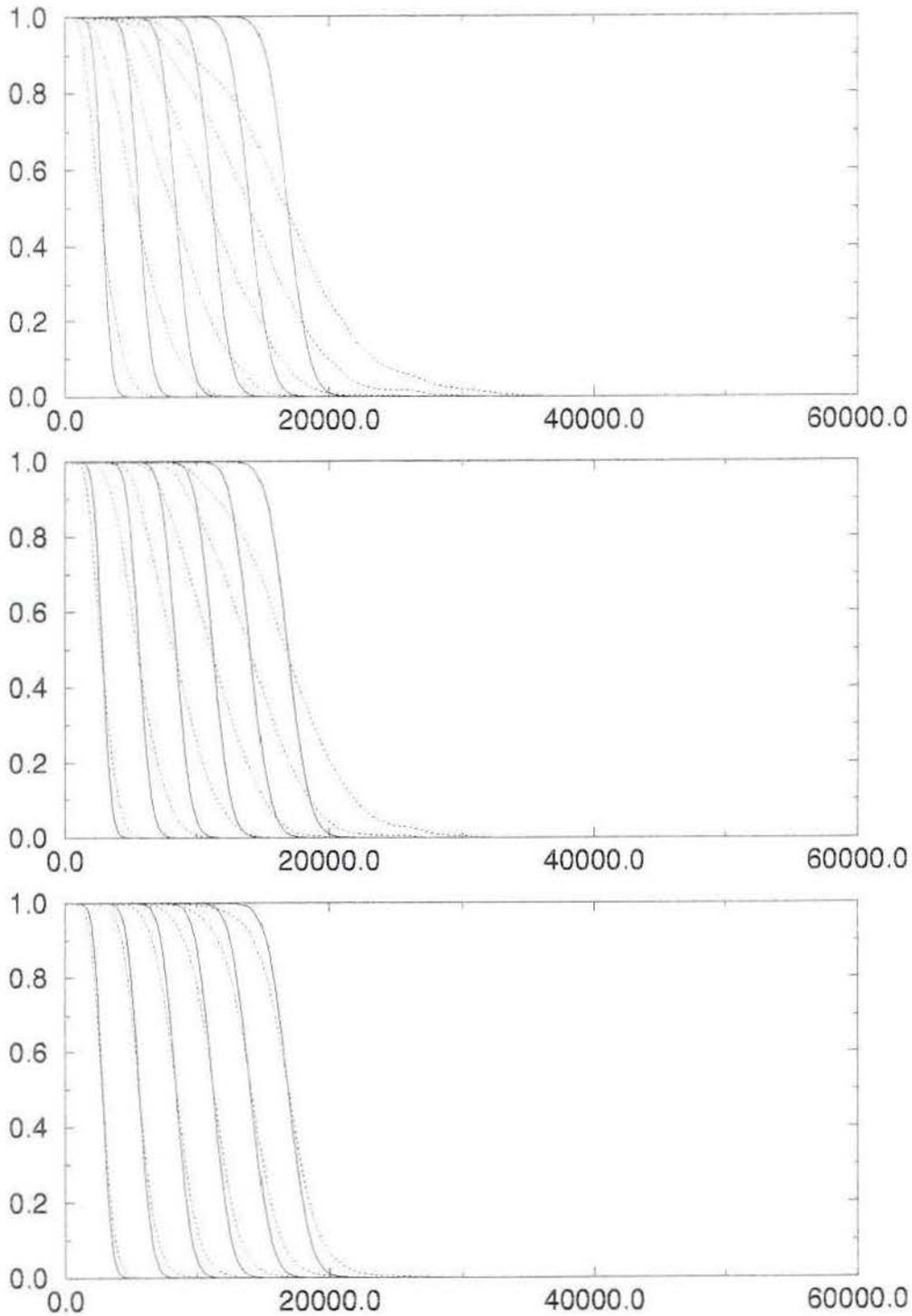


Figura 9.6: Perfis de concentrações médias referentes à Figura 9.5. Os diferentes regimes de mistura associados são (de cima para baixo): linear ($M = 1.5$, $C_V = 1.83$), não linear instável ($M = 1.5$, $C_V = 0.99$) e sublinear ($M = 0.5$, $C_V = 0.99$). O campo de permeabilidades é caracterizado por $\varrho = 0.5$.

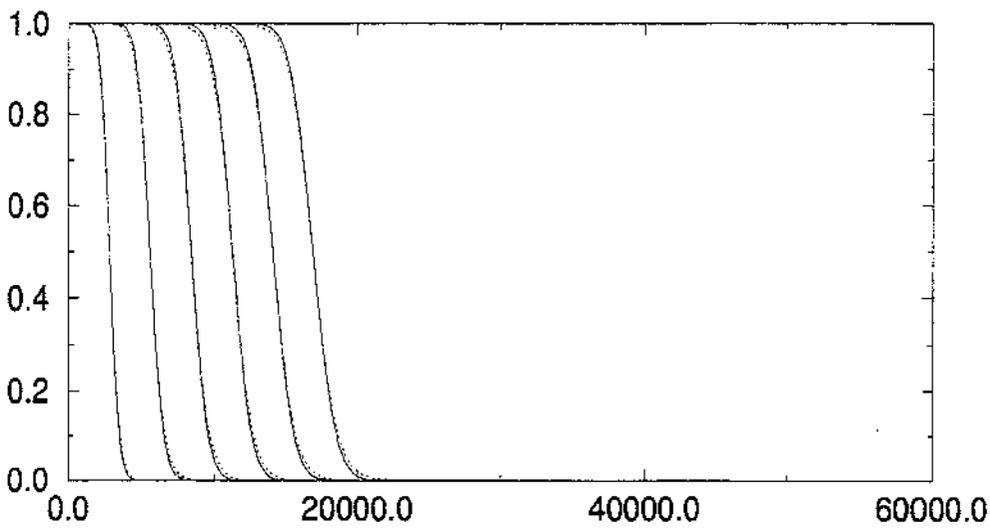


Figura 9.7: Ao analisarmos os perfis correspondentes à simulação do escoamento em um campo de permeabilidades com $\rho = 0.5$, $C_V = 0.5$ e $M = 0.25$, fica claro que o regime de mistura corresponde ao comportamento (*NS*), pois estes perfis, todos bem similares, indicam um não crescimento da região de mistura.

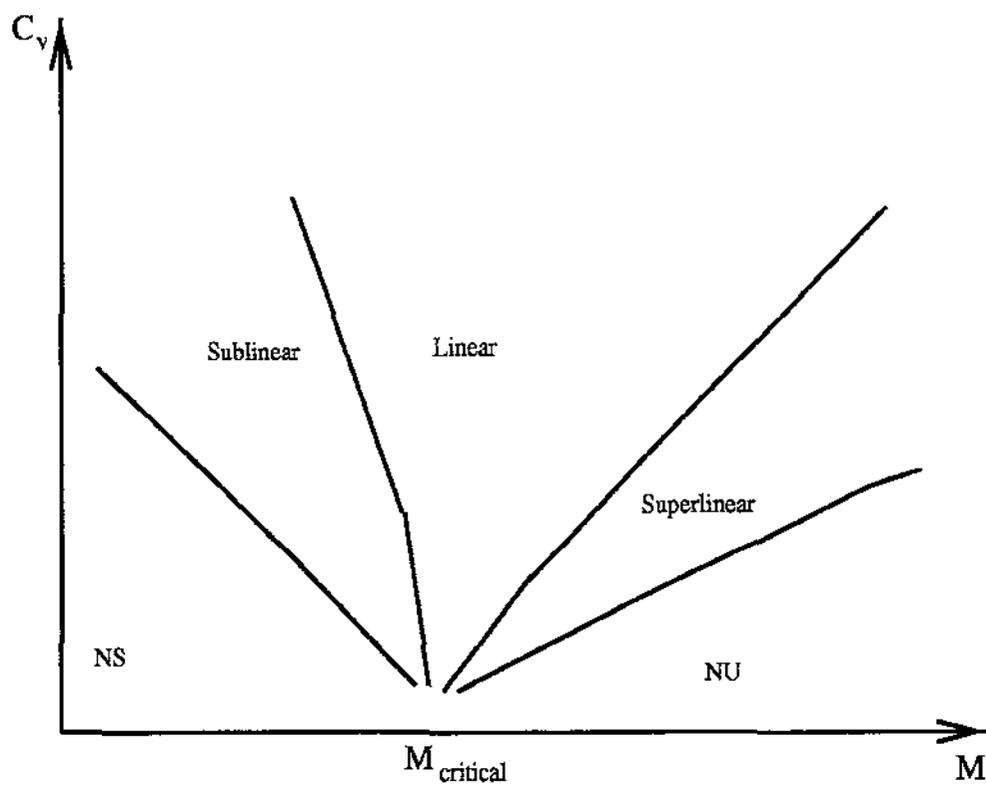


Figura 9.8: “Diagrama de fase”: representação gráfica dos diversos regimes de mistura que podem ocorrer para um dado valor do expoente de Hurst ρ .

Capítulo 10

Conclusões e Trabalhos Futuros

Nesta tese consideramos tanto a modelagem como a simulação numérica precisa de escoamentos miscíveis, incompressíveis, em meios porosos rígidos e heterogêneos.

Na primeira parte deste trabalho consideramos as simulações numéricas de escoamentos miscíveis e novos métodos numéricos foram propostos, implementados e comparados com outros procedimentos numéricos já conhecidos.

Inicialmente formulamos novos métodos do tipo Euleriano-Lagrangiano para a discretização temporal de equações do tipo transporte-difusão (equações associadas à concentração de um dos fluidos). Introduzimos o Método Modificado das Características com Ajuste de Massa no Passo de Transporte (*MMOCAA*) para escoamentos miscíveis. Este método permite uma conservação global de massa ao final de um estágio de transporte seguido por um passo de difusão. Este procedimento computacional é tão competitivo quanto o Método Modificado das Características (*MMOC*), que não conserva a massa dos fluidos como uma identidade. Em seguida introduzimos o Método Euleriano-Lagrangiano com Conservação Local de Massa (*LCELM*). Este método possui um estágio de transporte localmente conservativo, baseado na construção numérica de tubos no espaço tempo onde se dá o transporte dos fluidos. Diversos experimentos numéricos realizados neste trabalho mostraram que os dois métodos introduzidos são bastante competitivos quando comparados com o Método Modificado das Características (*MMOC*), previamente descrito na literatura. Além disto, conservam a massa dos fluidos sendo transportados, ao contrário do *MMOC*.

Existem vários problemas de escoamento em meios porosos que podem ser simulados com as técnicas introduzidas nesta tese. Citamos como exemplo problemas de escoamento com fluidos miscíveis compressíveis e o escoamento em formações rochosas fraturadas, compressível ou não. A formulação e im-

plementação de nossas técnicas para estas classes de problemas constituiriam uma continuação natural das questões investigadas nesta tese.

Em seguida, trabalhamos na formulação de novas técnicas de decomposição de domínios para equações elípticas de segunda ordem. Elementos finitos mistos e híbridos foram usados para a discretização espacial destas equações. Os novos procedimentos de decomposição são propostos para resolver os problemas de álgebra linear postos a cada passo de tempo de uma simulação numérica. Estes procedimentos são naturalmente paralelizáveis. Introduzimos o Método dos Gradientes Conjugados com Pré Condicionamento, combinado com condições de interface tipo Robin (GCP-Robin). Este método usa a técnica de superposição entre os subdomínios e é empregado no cálculo do campo de velocidades que aparece nas equações que governam o escoamento. Verificamos a eficiência do esquema GCP-Robin comparando as simulações numéricas deste método com as do GCP usual. Para resolvermos o estágio difusivo da equação da concentração nós introduzimos um outro método numérico. Este método, de implementação simples, não apresenta superposição entre os subdomínios e é baseado em iterações por faces dos elementos.

Um novo simulador computacional, que faz uso dos novos métodos numéricos descritos acima foi desenvolvido. Outro problema interessante, em aberto, que desejamos mencionar é a implementação do nosso simulador em máquinas com memória distribuída. Temos intenção de, fazendo uso do *software* MPI (*Message Passing Interface*), implementarmos e testarmos a eficiência de versões do nosso simulador apropriadas tanto para um *cluster* de computadores pessoais (como o COSMOS I, em construção no IPRJ/UERJ) como para computadores paralelos de última geração (como o IBM-SP2, disponível no LNCC/MCT).

Na segunda parte deste trabalho estudamos a dinâmica que governa o processo de mistura macroscópica (a macrodispersão) na escala de campo. Nesta investigação, fizemos uso do nosso simulador em um estudo computacional de grande porte. Novos resultados foram estabelecidos para problemas lineares e não lineares, por meio de uma metodologia que combina simulações numéricas com alta resolução e uma abordagem estocástica para a modelagem das propriedades geológicas dos meios porosos.

Investigamos inicialmente a importância do tensor de dispersão hidrodinâmica estocástico na determinação das leis de escala que governam, para tempos longos, o crescimento da região de mistura. Este estudo foi feito para um problema linear: o traçador passivo. Para este modelo estas leis de escala são conhecidas na ausência do tensor de dispersão. Mostramos que a presença da dispersão hidrodinâmica no problema do traçador não altera as leis de escala que governam o comportamento assintótico (no tempo) do crescimento

da região de mistura. Ainda no contexto de problemas lineares existem diversos problemas que podem ser investigados dentro da metodologia descrita nesta tese. Citamos, como exemplo, a introdução de efeitos geométricos no escoamento, devido à presença de poços de injeção e produção, e o uso de modelos mais realísticos para a geologia que incluam camadas (*layers*).

Finalmente, investigamos a macrodispersão para o escoamento miscível não linear. Mostramos que, dependendo da importância relativa entre as heterogeneidades geológicas e a não linearidade presente nas equações que modelam o escoamento, diferentes regimes de mistura podem ocorrer. Para formações rochosas muito heterogêneas determinamos que o escoamento miscível não linear apresenta as mesmas leis de escala, para o crescimento da região de mistura, que as leis já conhecidas para o problema linear. A importância destes resultados no contexto do problema de transferência de escalas para fluxos em meios porosos foi discutida; acreditamos que para o regime de escoamento dominado pelas heterogeneidades uma forma da teoria de perturbação que foi utilizada com sucesso para problemas lineares possa ser utilizada na derivação de uma equação efetiva (*upscaled*). Do ponto de vista prático a derivação de uma equação efetiva é muito relevante. Pretendemos dar continuidade ao desdobramento deste trabalho no futuro próximo.

Referências Bibliográficas

- [1] M. Allen, G. Behie and J. Trangenstein, *Multiphase Flow in Porous Media*, Lecture Notes in Engineering Vol. 34, Springer-Verlag, 1988.
- [2] Y. Amirat, K. Hamdache, and A. Ziani, *Homogénéisation d'équations hyperboliques du premier ordre et application aux écoulements miscibles en milieu poreux*, Ann. Inst. H. Poincaré 6 (1989) 397.
- [3] L. An, J. Glimm, D. H. Sharp, and Q. Zhang *Scale up of flow in porous media*, in "Mathematical Modelling of Flow Through Porous Media", A. P. Bourgeat, C. Carasso, S. Luckhaus, and A. Mikelić, eds., pages 26–44. World Scientific, Singapore, New Jersey, London, Hong Kong, 1995.
- [4] T. Arbogast and M. F. Wheeler, *A characteristics-mixed finite element for advection-dominated transport problems*. SIAM J. Numer. Anal., 32 (1995) 404-424.
- [5] D. N. Arnold and F. Brezzi, *Mixed and nonconforming finite element methods: implementation, postprocessing and error estimates*, R.A.I.R.O. Modélisation Mathématique et Analyse Numérique, 19 (1985) 7-32.
- [6] J. A. Aronovitz and D. R. Nelson, *Anomalous diffusion in steady fluid flow through a porous medium*, Phys. Rev. A 30 (1984) 1948–1954.
- [7] J. W. Barker and S. Thibeau, A critical review of the use of pseudo-relative permeabilities for upscaling, *SPE Reservoir Engineering*, pp. 138–143, May 1997.
- [8] P. Binning and M. A. Celia, *Two-dimensional Eulerian Lagrangian localised adjoint method for the solution of the contaminant transport equation in the saturated and unsaturated zones*, "Proceedings, Tenth International Conference on Computational Methods in Water Resources," A. Peters *et al.*, eds., Kluwer, Dordrecht, 1994, vol. 1, 165-172.

- [9] F. Brezzi, J. Douglas, Jr., M. Fortin, and L. D. Marini, *Efficient rectangular mixed finite elements in two and three space variables*. R.A.I.R.O. Modélisation Mathématique et Analyse Numérique, 21 (1987) 581-604.
- [10] M. A. Celia, *Eulerian-Lagrangian localized adjoint methods for contaminant transport simulations*, "Proceedings, Tenth International Conference on Computational Methods in Water Resources," A. Peters *et al.*, eds., Kluwer, Dordrecht, 1994, vol. 1, 207-216.
- [11] M. A. Celia, T. F. Russell, I. Herrera, and R. E. Ewing, *An Eulerian-Lagrangian local adjoint method for the advection-diffusion equation*. Adv. Water Resour., 13 (1990) 187-206.
- [12] G. Chavent and J. Jaffré, "Mathematical Models and Finite Elements for Reservoir Simulation", North-Holland, Amsterdam, 1986.
- [13] A. J. Chorin, *The instability of fronts in a porous medium*, Comm. Math. Phys., 91 (1983) 103-116.
- [14] R. L. Chouke, P. van Meurs and C. van der Poel, *The instability of slow, immiscible, viscous liquid-liquid displacements in permeable media*, Trans. AIME 216 (1959) 188-194.
- [15] L. C. Cowsar and M. F. Wheeler, *Parallel domain decomposition method for mixed finite elements for elliptic partial differential equations*, in "Proceedings of the Fourth International Symposium on Domain Decomposition Methods for Partial Differential Equations", SIAM, Philadelphia, 1991. R. Glowinski, Y. Kuznetsov, G. Meurant, J. Périaux, and O. B. Widlund, eds.
- [16] J. Cushman. "Physics of Fluids in Hierarchical Porous Media: Angstroms to Miles", Cambridge, in press, 1997.
- [17] V. Cvetkovic and G. Dagan, *Reactive transport and immiscible flow in geological media. II. Applications*, Proc. R. Soc. Lond., A 452 (1996) 303-328.
- [18] G. Dagan, *Theory of solute transport by groundwater*, Annu. Rev. Fluid Mech. 19 (1987) 183-215.
- [19] G. Dagan and V. Cvetkovic, *Reactive transport and immiscible flow in geological media. I. General Theory*, Proc. R. Soc. Lond., A 452 (1996) 285-301.

- [20] B. Després, *Domain decomposition method and the Helmholtz problem*, in “Mathematical and Numerical Aspects of Wave Propagation Phenomena”, 44–52, G. Cohen, L. Halpern, and P. Joly, eds., SIAM, Philadelphia (1991).
- [21] B. Després, *Méthodes de décomposition de domaines pour les problèmes de propagation d’ondes en régime harmonique*, Ph.D. thesis, Université Paris IX Dauphine, UER Mathématiques de la Décision (1991).
- [22] J. Douglas, Jr., *Simulation of miscible displacement in porous media by a modified method of characteristics procedure*. In “Numerical Analysis”, Lecture Notes in Mathematics, volume 912, Springer-Verlag, Berlin, 1982.
- [23] J. Douglas, Jr., *Finite difference methods for two-phase incompressible flow in porous media*. SIAM J. Numer. Anal., 20 (1983) 681-696.
- [24] J. Douglas, Jr., *Numerical methods for the flow of miscible fluids in porous media*. In “Numerical Methods in Coupled Systems”, pages 405-439, John Wiley and Sons, Ltd., London, 1984. R. W. Lewis, P. Bettess, and E. Hinton, eds.
- [25] J. Douglas, Jr., R. E. Ewing, and M. F. Wheeler, *The approximation of the pressure by a mixed method in the simulation of miscible displacement*. R.A.I.R.O., Anal. Numér., 17 (1983) 17-33.
- [26] J. Douglas, Jr., R. E. Ewing, and M. F. Wheeler, *A time-discretization procedure for a mixed finite element approximation of miscible displacement in porous media*. R.A.I.R.O., Anal. Numér., 17 (1983) 249-265.
- [27] J. Douglas, Jr., F. Furtado, and F. Pereira. *The statistical behavior of instabilities in immiscible displacement subject to fractal geology*. In “Mathematical Modelling of Flow Through Porous Media”, A. P. Bourgeat, C. Carasso, S. Luckhaus, and A. Mikelić, eds., pages 115–137. World Scientific, Singapore, New Jersey, London, Hong Kong, 1995.
- [28] J. Douglas, Jr., F. Furtado, and F. Pereira, *On the numerical simulation of waterflooding of heterogeneous petroleum reservoirs*. Computational Geosciences, 1 (1997) 155-190.
- [29] J. Douglas, Jr., J. L. Hensley, Y. Wei, L. Yeh, J. Jaffré, P. J. Paes Leme, T. S. Ramakrishnam, and D. J. Wilkinson, *A derivation for Darcy’s law for miscible fluids and a revised model for miscible displacement in porous media*. In “Mathematical Modeling in Water Resources”, T. F.

- Russell, R. E. Ewing, C. A. Brebbia, W. G. Gray, and G. F. Pinder, eds., volume 2, pages 165-178. Computational Mechanics Publications, Elsevier Applied Science, Southhampton, Boston, 1992.
- [30] J. Douglas, Jr., C. S. Huang, and F. Pereira, *The modified method of characteristics with adjusted advection*. To appear; currently available as Technical Report #298, Center for Applied Mathematics, Purdue University.
- [31] J. Douglas, Jr., C. S. Huang, and F. Pereira, *The modified method of characteristics with adjusted advection for an immiscible displacement problem*. To appear; currently available as Technical Report #999, Center for Applied Mathematics, Purdue University.
- [32] J. Douglas, Jr., and C. S. Huang, *An accelerated domain decomposition procedure based on Robin transmission conditions*. To appear; currently available as Technical Report, Center for Applied Mathematics, Purdue University.
- [33] J. Douglas, Jr., and C. S. Huang, *Accelerated domain decomposition iterative procedures for mixed methods based on Robin transmission conditions*. To appear in *Calcolo*; currently available as Technical Report #300, Center for Applied Mathematics, Purdue University.
- [34] J. Douglas, Jr., P. J. Paes Leme, F. Pereira, and L. M. Yeh, *A massively parallel iterative numerical algorithm for immiscible flow in naturally fractured reservoirs*, in "Flow in Porous Media", International Series of Numerical Mathematics, 114 (1993) 75-94, Birkhäuser Verlag, Basel. J. Douglas, Jr., and U. Hornung, eds. Proceedings of the Oberwolfach Conference, June 21-27, 1992.
- [35] J. Douglas, Jr., P. J. Paes Leme, J. E. Roberts, and J. Wang, *A parallel iterative procedure applicable to the approximate solution of second order partial differential equations by mixed finite element methods*, *Numer. Math.*, 65 (1993) 95-108.
- [36] J. Douglas, Jr., F. Pereira, and L. M. Yeh, *A parallelizable method for two-phase flows in naturally-fractured reservoirs*. *Computational Geosciences*, vol. 1, #4, 1997, pp. 333-368.
- [37] J. Douglas, Jr., F. Pereira, and L. M. Yeh. *A parallelizable characteristic scheme for two phase flow I: Single porosity models*. *Computational and Applied Mathematics*, 14 (1995) 73-96.

- [38] J. Douglas, Jr., F. Pereira, and L. M. Yeh. *A locally conservative Eulerian-Lagrangian numerical method and its application to nonlinear transport in porous media*. To appear.
- [39] J. Douglas, Jr., F. Pereira, L. M. Yeh, and P. J. Paes Leme, *Domain decomposition for immiscible displacement in single porosity systems*, in "Finite Element Methods: Fifty Years of the Courant Element", Lecture Notes in Pure and Applied Mathematics, 164 (1994) 191-199, Marcel Dekker, New York, NY. M. Krížek, P. Neittaanmäki, and R. Stenberg, eds.
- [40] J. Douglas, Jr., and T. F. Russell, *Numerical methods for convection-dominated diffusion problems based on combining the method of characteristics with finite element or finite difference procedures*. SIAM J. Numer. Anal., 19 (1982) 871-885.
- [41] J. Douglas, Jr., M. F. Wheeler, B. L. Darlow, and R. P. Kendall, *Self-adaptive finite element simulation of miscible displacement in porous media*. Comp. Meth. Appl. Mech. Eng., 47 (1984) 131-159.
- [42] J. Douglas, Jr., and Y. Yuan, *Numerical simulation of immiscible flow in porous media based on combining the method of characteristics with mixed finite element procedures*. In "Numerical Simulation in Oil Recovery," The IMA Volumes in Mathematics and its Applications, volume 11, pages 119-131, Springer-Verlag, Berlin and New York, 1988. M. F. Wheeler, ed..
- [43] L. J. Durlofsky, Use of higher moments for the description of upscaled, process independent relative permeabilities, *SPE 37987*, 1997.
- [44] F. W. Elliot, Jr., and A. Majda, *A wavelet Monte Carlo method for turbulent diffusion with many spatial scales*, J. Comp. Phys., 113 (1994) 82-111.
- [45] R. E. Ewing and T. F. Russell, *Efficient time-stepping methods for miscible displacement problems in porous media*. SIAM J. Numer. Anal., 19 (1982) 1-67.
- [46] R. E. Ewing, T. F. Russell, and M. F. Wheeler, *Simulation of miscible displacement using mixed methods and a modified method of characteristics*. In "Proceedings, Seventh SPE Symposium on Reservoir Simulation," Paper SPE 12241, pages 71-81. Society of Petroleum Engineers, Dallas, Texas, 1983.

- [47] R. E. Ewing, T. F. Russell, and M. F. Wheeler, *Convergence analysis of an approximation of miscible displacement in porous media by mixed finite elements and a modified method of characteristics*. *Comp. Meth. Appl. Mech. Eng.*, 47 (1984) 73-92.
- [48] R. E. Ewing and J. Wang, *Analysis of the Schwarz algorithm for mixed finite element methods*, R.A.I.R.O. Modélisation Mathématique et Analyse Numérique, 26 (1992) 739-756.
- [49] R. E. Ewing and J. Wang, *Analysis of multilevel decomposition iterative methods for mixed finite element methods*, R.A.I.R.O. Modélisation Mathématique et Analyse Numérique, 28 (1994) 377-398.
- [50] R. E. Ewing and M. F. Wheeler, *Galerkin methods for miscible displacement problems in porous media*. *SIAM J. Numer. Anal.*, 17 (1980) 351-365.
- [51] X. Feng, *On Miscible Fluids in Porous Media and Absorbing Boundary Conditions for Eletromagnetic Wave Propagation and on Nearly Elastic Waves in the Frequency Domain*. PH.D. Thesis, Purdue University, 1992.
- [52] F. Furtado, J. Glimm, B. Lindquist, and F. Pereira. *Multi-length scale computations of the mixing length growth in tracer flow*, Emerging Technologies Conference (F. Kovarik, ed.). Institute for Improved Oil Recovery, University of Houston, 1990, pp. 251-259.
- [53] F. Furtado, J. Glimm, B. Lindquist, and F. Pereira. *Characterization of mixing length growth for flow in heterogeneous porous media*. In "Proceedings of the 11th SPE Symposium on Reservoir Simulation", pages 317-322. Soc. of Petroleum Engineers of AIME, Richardson, TX, 1991.
- [54] F. Furtado, J. Glimm, B. Lindquist, F. Pereira, and Q. Zhang. *Time dependent anomalous diffusion for flow in multi-fractal porous media*. In "Numerical Methods for the Simulation of Multiphase and Complex Flow", Lecture Notes in Physics, volume 398. T. M. M. Verheggen, editor. Springer Verlag, New York, 1992.
- [55] F. Furtado, and F. Pereira. *Scaling analysis for two-phase immiscible flow in heterogeneous porous media*. *Computational and Applied Mathematics*, vol. 17, #3, 1998, pp. 233-262.

- [56] F. Furtado, and F. Pereira. *Fluid mixing regimes for two-phase flow in heterogeneous porous media*. Submitted to Computational Geosciences (1998).
- [57] L. W. Gelhar, *Stochastic subsurface hydrology from theory to applications*, Water Resour. Res. 22 (1986) 135S–145S.
- [58] L. W. Gelhar, A. Mantoglou, C. Welty, and K. R. Rehfeld, *A review of field-scale physical solute transport processes in saturated and unsaturated porous media*, EPRI Report EA-4190, 1985.
- [59] J. Glimm, H. Kim, D. Sharp, and T. Wallstrom, A stochastic analysis of the scale up problem for flow in porous media, *Computational and Applied Mathematics*, 17 (1998) 67–79.
- [60] J. Glimm, B. Lindquist, F. Pereira, R. Peierls, *The fractal hypothesis and anomalous diffusion*, Computational and Applied Mathematics, 11 (1992) 189–207.
- [61] J. Glimm, B. Lindquist, F. Pereira, Q. Zhang, *A theory of macrodispersion for the scale up problem*, Transport in Porous Media, 13 (1993), 97–122.
- [62] J. Glimm, D. Marchesin, and O. McBryan, *A numerical method for two phase flow with an unstable interface*, J. Comp. Phys., 39 (1981) 179–200.
- [63] J. Glimm and D. H. Sharp, *A random field model for anomalous diffusion in heterogeneous porous media*, J. Stat. Phys., 62 (1991) 415–424.
- [64] R. Glowinski, W. Kinton, M. F. Wheeler, *Acceleration of domain decomposition algorithms for mixed finite elements by multi-level methods*, in “Third International Symposium on Domain Decomposition Methods for Partial Differential Equations”, 263–290, R. Glowinski, ed., SIAM, Philadelphia (1990).
- [65] R. Glowinski and M. F. Wheeler, *Domain decomposition and mixed finite element methods for elliptic problems*, in “Domain Decomposition Methods for Partial Differential Equations”, 144–172 (R. Glowinski, G. Golub, G. Meurant, J. Periaux, eds.), SIAM, Philadelphia (1988).
- [66] W. G. Gray, *A derivation of the equations for multiphase transport*. Chem. Eng. Sci., 30 (1975), pp. 229–233.

- [67] R. W. Healy and T. F. Russell, *A finite-volume Eulerian-Lagrangian localized adjoint method for solving the advection-diffusion equation*. Water Resour. Res., 29 (1993) 2399-2413.
- [68] G. M. Homsy, *Viscous Fingering in Porous Media*, Ann. Rev. Fluid Mech., 19 (1987) 271-311.
- [69] C.S. Huang, *The modified method of characteristics with adjusted advection and an accelerated domain decomposition procedure*. Thesis, Department of Mathematics, Purdue University, 1998; currently available as Technical Report #318, Center for Applied Mathematics, Purdue University.
- [70] M. J. King, W. B. Lindquist, and L. Reyna, *Stability of two-dimensional immiscible flow to viscous fingering*, Courant Math. and Comp., Lab Report DOE/ER/03077-244, March 1985.
- [71] P. Langlo and M. Espedal, *Macrodispersion for two-phase, immiscible flow in porous media*, Adv. Water Resour., 17 (1994) 297-316.
- [72] R. Lenormand, *Determining flow equations from stochastic properties of a permeability field: the MHD model*, SPE Journal, pp. 179-190, June 1996.
- [73] P. L. Lions. *On the Schwarz alternating method III: a variant for nonoverlapping subdomains*, in "Domain Decomposition Methods for Partial Differential Equations", 202-223, (T. F. Chan, R. Glowinski, J. Periaux, and O. B. Widlund, eds.), SIAM, Philadelphia, PA, 1990.
- [74] M.I. Morris and R.C. Ball, *Renormalization of miscible flow functions*, J. Phys. A, 23 (1990) 4199-4209.
- [75] J. C. Nedelec, *Mixed finite elements in \mathbf{R}^3* . Numer. Math., 35 (1980) 315-341.
- [76] S. P. Neuman and Y. K. Zhang, *A quasi-linear theory of non-Fickian subsurface dispersion*, Water Resour. Res. 26 (1990) 887-902.
- [77] D. W. Peaceman, *Improved treatment of dispersion in numerical calculation of multidimensional miscible displacement*. Soc. Petroleum Engr. J., 6 (1966) 213-216.
- [78] D. W. Peaceman, "Fundamentals of Numerical Reservoir Simulation", Elsevier, New York, 1977.

- [79] F. Pereira, *Stochastic geology and porous media flow: theory and simulations*, State University of New York at Stony Brook, Ph.D. Thesis, 1992.
- [80] F. Pereira, F. Furtado, J. Douglas, L. M. Yeh, *Numerical methods for transport-dominated flows in heterogeneous porous media*. Computational Methods in Water Resources XII, vol. 1, 1998, pp. 469-476.
- [81] F. Pereira e F. Furtado, *Mixing regimes and the scale up problem for multiphase flow*. Computational Methods in Water Resources XII, vol. 2, 1998, pp. 83-90.
- [82] P. A. Raviart and J. M. Thomas, *A mixed finite element method for second order elliptic problems*. In "Mathematical Aspects of the Finite Element Method", Lecture Notes in Mathematics, volume 606, pages 292-315. Springer-Verlag, Berlin, New York, 1977. I. Galligani and E. Magenes, eds.
- [83] T. F. Russell, *An incompletely iterated characteristic finite element method for a miscible displacement problem*. Ph.D. thesis, University of Chicago, Chicago, 1980.
- [84] T. F. Russell, *Time stepping along characteristics with incomplete iteration for a Galerkin approximation of miscible displacement in porous media*. SIAM J. Numer. Anal., 22 (1985) 970-1013.
- [85] T. F. Russel and M. F. Wheeler, *Finite Element and Finite Difference Methods for Continuous Flows in Porous Media*. Frontiers in Applied Mathematics-SIAM, "The Mathematics of Reservoir Simulation" (1983) 35-106.
- [86] P. Saffman and G. Taylor, *The penetration of a fluid into a porous medium or Hele-Shaw cell containing a more viscous liquid*, Proc. R. Soc. Lond., A 245 (1958) 312-322.
- [87] K. S. Sorbie, Farag Feghi, G. E. Pickup, P. S. Ringrose and J. L. Jensen, Heriot-Watt University, *Flow Regimes in Miscible Displacements in Heterogeneous Correlated Random Fields*, SPE Advanced Technology Series, Vol. 2, No. 2, 78-87.
- [88] A. M. Spagnuolo, *Approximation of nuclear contaminant transport through porous media*. Thesis, Department of Mathematics, Purdue University, 1998; currently available as Technical Report #319, Center for Applied Mathematics, Purdue University.

- [89] M. F. Wheeler, *A priori L^2 -error estimates for Galerkin approximations to parabolic partial differential equations*. SIAM J. Numer. Anal., 10 (1973) 723-759.
- [90] S. Whitaker, *Diffusion and dispersion in porous media*. AIChE J., 13 (1967), pp. 420-427.
- [91] C. L. Winter, C. M. Neuman, and S. P. Newman, *A perturbation expansion for diffusion in a random velocity field*, SIAM J. Appl. Math. 44 (1984) 411-424.
- [92] Q. Zhang. *A multi-length scale theory of the anomalous mixing length growth for tracer flow in heterogeneous porous media*. Journal of Statistical Physics 66 (1991) 485-501.
- [93] Q. Zhang. *The asymptotic scaling behavior of mixing induced by a random velocity field*. Adv. in Appl. Math., 16 (1995), 23-58.
- [94] Q. Zhang. *The transient scaling behavior of mixing induced by a random velocity field*. Water Research Resources, 31 (1995), 577-591.

Apêndice A

Um Problema Modelo

A.1 Introdução

O objetivo deste apêndice é estudar um problema modelo análogo ao proposto em [33]. Aqui, nós estamos interessados no estudo que se refere à aceleração de convergência de um procedimento iterativo, baseado em aproximação por elementos finitos mistos, aplicado a um problema modelo do tipo Neumann, com decomposição de domínio que usa superposição de subdomínios.

Em [33] foi usado um ciclo de parâmetros $\{\beta_1, \dots, \beta_n\}$ para analisar a taxa de redução do erro numa determinada interface de um subdomínio (o domínio em questão é uma faixa infinita unitária: $\Omega = (-\infty, \infty) \times (0, 1)$). No estudo apresentado aqui, nós não vamos considerar tal ciclo, o parâmetro usado será constante. O domínio que usaremos será um quadrado unitário: $\Omega = (0, 1) \times (0, 1)$.

O resultado que propomos provar é que o erro cometido na interface de um subdomínio nem sempre é uma função decrescente, em relação ao tamanho da região de superposição entre os subdomínios, quando consideramos um domínio limitado (em nosso caso um quadrado unitário). Mostrou-se, em [33], que se considerarmos um domínio do tipo faixa infinita unitária: $\Omega = (-\infty, \infty) \times (0, 1)$, o erro cometido na interface de um subdomínio é uma função decrescente em relação ao tamanho da região de superposição.

A.2 Apresentação do problema

Considere o problema

$$-\Delta u + u = q, \quad \forall X \in \Omega; \quad (\text{A.1})$$

$$\nabla u \cdot \nu = 0, \quad \forall X \in \partial\Omega, \quad (\text{A.2})$$

onde $\Omega = (0, 1) \times (0, 1)$, $q \in L^2(\Omega)$, ν é o unitário normal exterior à fronteira de Ω e $X = (x, y)$.

Defina as seguintes interfaces:

$$\begin{aligned} \Gamma_{12} &= (0, 1) \times \{1/2 + \delta\}; \\ \Gamma_{21} &= (0, 1) \times \{1/2 - \delta\}, \end{aligned} \quad (\text{A.3})$$

onde nós aplicamos as condições de transmissão de Robin, definidas a seguir.

Seja U uma função arbitrária sobre Γ_{12} . Nós resolvemos o problema (A.1-A.2) por um processo iterativo, dado por

$$-\Delta u_1^0 + u_1^0 = q, \quad \forall X \in \Omega_1; \quad (\text{A.4})$$

$$\nabla u_1^0 \cdot \nu_1 = 0, \quad \forall X \in \partial\Omega \cap \partial\Omega_1,$$

$$u_1^0 = U, \quad \forall X \in \Gamma_{12}, \quad (\text{A.5})$$

$$-\Delta u_2^n + u_2^n = q, \quad \forall X \in \Omega_2; \quad (\text{A.6})$$

$$\nabla u_2^n \cdot \nu_2 = 0, \quad \forall X \in \partial\Omega \cap \partial\Omega_2,$$

$$\beta \nabla u_2^n \cdot \nu_2 + u_2^n|_{\Gamma_{21}} = -\beta \nabla u_1^{n-1} \cdot \nu_1 + u_1^{n-1}|_{\Gamma_{21}}, \quad \forall X \in \Gamma_{21}, \quad (\text{A.7})$$

$$-\Delta u_1^n + u_1^n = q, \quad \forall X \in \Omega_1; \quad (\text{A.8})$$

$$\nabla u_1^n \cdot \nu_1 = 0, \quad \forall X \in \partial\Omega \cap \partial\Omega_1,$$

$$\beta \nabla u_1^n \cdot \nu_1 + u_1^n|_{\Gamma_{12}} = -\beta \nabla u_2^n \cdot \nu_2 + u_2^n|_{\Gamma_{12}}, \quad \forall X \in \Gamma_{12} \quad (\text{A.9})$$

onde $\Omega_1 = (0, 1) \times (0, 1/2 + \delta]$, $\Omega_2 = (0, 1) \times [1/2 - \delta, 1)$; ν_1 e ν_2 são os respectivos unitários normais exteriores; δ é um número positivo que corresponde ao tamanho da região de superposição entre os subdomínios Ω_1 e Ω_2 e $\beta \in \mathbf{R}$ é uma constante positiva. Note que as condições de Robin, (A.7 e A.9), foram aplicadas nas interfaces Γ_{21} e Γ_{12} , respectivamente, para $n \geq 1$.

Em cada iteração, denote as funções erro por:

$$\begin{aligned} v_1^n &= u - u_1^n; \\ v_2^n &= u - u_2^n; \end{aligned} \quad (\text{A.10})$$

assim, as funções erro satisfazem o seguinte processo iterativo

$$\begin{aligned} -\Delta v_1^0 + v_1^0 &= 0, \quad \forall X \in \Omega_1; \\ \nabla v_1^0 \cdot \nu_1 &= 0, \quad \forall X \in \partial\Omega \cap \partial\Omega_1, \\ v_1^0 &= u - U = \sum_k \alpha_k \cos k\pi x, \quad \forall X = (x, y) \in \Gamma_{12}, \end{aligned} \quad (\text{A.11})$$

$$\begin{aligned} -\Delta v_2^n + v_2^n &= 0, \quad \forall X \in \Omega_2; \\ \nabla v_2^n \cdot \nu_2 &= 0, \quad \forall X \in \partial\Omega \cap \partial\Omega_2, \\ \beta \nabla v_2^n \cdot \nu_2 + v_2^n|_{\Gamma_{21}} &= -\beta \nabla v_1^{n-1} \cdot \nu_1 + v_1^{n-1}|_{\Gamma_{21}}, \quad \forall X \in \Gamma_{21}, \end{aligned} \quad (\text{A.12})$$

$$\begin{aligned} -\Delta v_1^n + v_1^n &= 0, \quad \forall X \in \Omega_1; \\ \nabla v_1^n \cdot \nu_1 &= 0, \quad \forall X \in \partial\Omega \cap \partial\Omega_1, \\ \beta \nabla v_1^n \cdot \nu_1 + v_1^n|_{\Gamma_{12}} &= -\beta \nabla v_2^n \cdot \nu_2 + v_2^n|_{\Gamma_{12}}, \quad \forall X \in \Gamma_{12}. \end{aligned} \quad (\text{A.13})$$

A.3 Expressões para as funções erro

Usando um argumento de separação de variáveis, condições de fronteira, condições de transmissão de Robin nas interfaces, nós podemos obter as expressões das funções erro, v_1^n e v_2^n . Antes, porém, defina

$$R(\delta) = \frac{(1 - \beta \xi_k) e^{\xi_k(1-\delta)} + (1 + \beta \xi_k) e^{\xi_k \delta}}{(1 - \beta \xi_k) e^{-\xi_k \delta} + (1 + \beta \xi_k) e^{\xi_k(1+\delta)}}, \quad (\text{A.14})$$

onde $\xi_k = \sqrt{(k\pi)^2 + 1}$.

As expressões para v_1^n e v_2^n são dadas por

$$v_1^n = \sum_k A_{1,k}^{(n)} (e^{-\xi_k y} + e^{\xi_k y}) \cos k\pi x; \quad (\text{A.15})$$

$$v_2^n = \sum_k A_{2,k}^{(n)} (e^{(2-y)\xi_k} + e^{\xi_k y}) \cos k\pi x, \quad (\text{A.16})$$

onde

$$\begin{aligned} A_{2,k}^{(n)} &= A_{1,k}^{(n-1)} \frac{1}{e^{\xi_k}} R(\delta); \\ A_{1,k}^{(n)} &= A_{2,k}^{(n)} e^{\xi_k} R(\delta); \end{aligned} \quad (\text{A.17})$$

assim,

$$\begin{aligned} A_{2,k}^{(n)} &= A_{1,k}^{(0)} \frac{1}{e^{\xi_k}} [R(\delta)]^{2n-1}; \\ A_{1,k}^{(n)} &= A_{1,k}^{(0)} [R(\delta)]^{2n}. \end{aligned} \quad (\text{A.18})$$

Note que

$$A_{1,k}^{(0)} = \frac{\alpha_k}{e^{-\xi_k(1/2+\delta)} + e^{\xi_k(1/2+\delta)}}. \quad (\text{A.19})$$

A.4 Análise das funções erro

Nós estudaremos o comportamento do erro na interface $\Gamma = (0, 1) \times \{y = 1/2\}$. Para este fim, nós precisamos definir a seguinte função (para $n \geq 1$)

$$\begin{aligned} g(\delta) &= \frac{1 + e^{\xi_k}}{e^{\xi_k(1+\delta)} + e^{-\xi_k\delta}}; \\ G_1(\delta) &\equiv G_{1,k}^{(n)}(\delta) = g(\delta)[R(\delta)]^{2n}; \\ G_2(\delta) &\equiv G_{2,k}^{(n)}(\delta) = g(\delta)[R(\delta)]^{2n-1}. \end{aligned} \quad (\text{A.20})$$

As funções erro na interface Γ são dadas por

$$v_1^n = \sum_k G_{1,k}^{(n)} \alpha_k \cos k\pi x; \quad (\text{A.21})$$

$$v_2^n = \sum_k G_{2,k}^{(n)} \alpha_k \cos k\pi x. \quad (\text{A.22})$$

É importante o entendimento de algumas propriedades da função $R(\delta)$, as quais nos serão uteis para a análise do comportamento das funções $G_1(\delta)$ e $G_2(\delta)$. Dessa forma, passamos a apresentar algumas proposições.

Proposição 1. Se $\beta > 1$, então $|R(\delta)| < 1$.

Prova:

$$R(\delta) = \frac{(1 - \beta\xi_k)e^{\xi_k(1-\delta)} + (1 + \beta\xi_k)e^{\xi_k\delta}}{(1 - \beta\xi_k)e^{-\xi_k\delta} + (1 + \beta\xi_k)e^{\xi_k(1+\delta)}} = \frac{N}{D};$$

note que

$$D = (1 - \beta\xi_k)e^{-\xi_k\delta} + (1 + \beta\xi_k)e^{\xi_k(1+\delta)} = \beta\xi_k[e^{\xi_k(1+\delta)} - e^{-\xi_k\delta}] + e^{\xi_k(1+\delta)} + e^{-\xi_k\delta}.$$

Sabendo-se que $\xi_k \geq 1$, $\beta > 1$ e $\delta \geq 0$, nós obtemos $D > 0$.

Observe que $\xi_k \geq 1$, $\beta > 1$ e $\delta \geq 0$ conduzem a

$$\text{i)} e^{2\xi_k \delta} - 1 \geq 0,$$

$$\text{ii)} 1 - e^{\xi_k} < 0,$$

$$\text{iii)} 1 - \beta\xi_k < 0.$$

Agora, é fácil mostrar que $N - D < 0$ e $N + D > 0$ ou, equivalentemente, $|R(\delta)| < 1$. ■

Proposição 2. $R'(\delta) > 0$, se $\beta > 1$.

Prova:

Basta avaliarmos o numerador da função $R'(\delta)$. Mas este numerador é

$$2\xi_k(1 + \beta\xi_k)(1 - \beta\xi_k)(1 - e^{2\xi_k})$$

que é positivo se $\beta > 1$. ■

Note que, $R'(\delta) > 0$ implica que $R(\delta)$ é uma função crescente.

Proposição 3. Se $\beta > \frac{e+1}{e-1}$, então $R(0) < 0$.

Prova:

Como o denominador de $R(\delta)$ é positivo, então nós só precisamos mostrar que

$$1 + e^{\xi_k} < \beta\xi_k(e^{\xi_k} - 1)$$

ou, equivalentemente,

$$\beta > \frac{e^{\xi_k} + 1}{\xi_k(e^{\xi_k} - 1)} \equiv y_k.$$

Porém, a seqüência (y_k) é decrescente, pois

$$\xi_k < \xi_{k+1}$$

e

$$y_{k+1} = \frac{e^{\xi_{k+1}} + 1}{\xi_{k+1}(e^{\xi_{k+1}} - 1)} = \frac{e^{-\xi_{k+1}} + 1}{\xi_{k+1}(1 - e^{-\xi_{k+1}})} < \frac{e^{-\xi_k} + 1}{\xi_{k+1}(1 - e^{-\xi_{k+1}})} < \frac{e^{-\xi_k} + 1}{\xi_k(1 - e^{-\xi_{k+1}})} < \frac{e^{-\xi_k} + 1}{\xi_k(1 - e^{-\xi_k})} = y_k.$$

Deste modo, se

$$\beta > \frac{e+1}{e-1} = y_0,$$

então $\beta > y_k$ para todo k . ■

Antes de enunciar a próxima proposição nós investigamos se existe algum δ_r tal que $R(\delta_r) = 0$. Mas,

$$R(\delta) = 0 \quad \text{se e somente se} \quad (1 - \beta\xi_k)e^{\xi_k(1-\delta)} + (1 + \beta\xi_k)e^{\xi_k\delta} = 0.$$

Então,

$$\delta_r = 1/2 + \frac{1}{2\xi_k} \ln \left(\frac{\beta\xi_k - 1}{\beta\xi_k + 1} \right)$$

é um zero da função R , se $\beta > 1$.

Proposição 4. Se $\beta > \frac{e+1}{e-1}$, então $0 < \delta_r < 1/2$.

Prova:

Nós temos que

$$0 < \frac{\beta\xi_k - 1}{\beta\xi_k + 1} < 1,$$

assim

$$\ln \left(\frac{\beta\xi_k - 1}{\beta\xi_k + 1} \right) < 0,$$

o que nos conduz a $\delta_r < 1/2$. Para mostrarmos que $\delta_r > 0$ nós precisaremos estudar a seqüência com termo geral dado por

$$z_k = \frac{1}{2\xi_k} \ln \left(\frac{\beta\xi_k - 1}{\beta\xi_k + 1} \right).$$

A seqüência (z_k) é crescente. De fato, lembre-se de que

$$\ln \left(\frac{\beta\xi_k - 1}{\beta\xi_k + 1} \right) < 0,$$

assim

$$z_{k+1} = \frac{1}{2\xi_{k+1}} \ln \left(\frac{\beta - \frac{1}{\xi_{k+1}}}{\beta + \frac{1}{\xi_{k+1}}} \right) > \frac{1}{2\xi_k} \ln \left(\frac{\beta - \frac{1}{\xi_{k+1}}}{\beta + \frac{1}{\xi_{k+1}}} \right) > \frac{1}{2\xi_k} \ln \left(\frac{\beta - \frac{1}{\xi_k}}{\beta + \frac{1}{\xi_k}} \right) = z_k,$$

a última inequação é satisfeita devido ao logaritmo ser uma função crescente. Portanto,

$$z_0 < z_1 < \dots < z_k < z_{k+1} < \dots, \quad \text{de onde segue que}$$

$$\delta_r = 1/2 + z_k > 1/2 + z_0 > 0, \quad \text{pois}$$

$$\beta > \frac{e+1}{e-1} \quad \text{ou, equivalentemente,}$$

$$\frac{\beta-1}{\beta+1} > 1/e.$$

■

A proposição abaixo nos dá o comportamento assintótico dos gráficos de $R_k(\delta) = R(\delta)$.

Proposição 5. Seja $R_k(\delta) = R(\delta)$ e $R_k(\delta_{r,k}) = R(\delta_r) = 0$, então

- i) $\lim_{\delta \rightarrow \infty} R_k(\delta) = \frac{1}{e^{\xi_k}}$;
- ii) se $\delta > 0$, então $\lim_{k \rightarrow \infty} R_k(\delta) = 0$;
- iii) se $\delta = 0$, então $\lim_{k \rightarrow \infty} R_k(0) = -1$;
- iv) se $\delta > 0$, então $\lim_{\delta \rightarrow \infty} R_0(\delta) = 1/e$;
- v) $\lim_{k \rightarrow \infty} \delta_{r,k} = 1/2$.

Prova:

$$\text{i) } R_k(\delta) = \frac{(1 - \beta\xi_k)e^{\xi_k} \frac{1}{e^{2\xi_k\delta}} + (1 + \beta\xi_k)}{(1 - \beta\xi_k)\frac{1}{e^{2\xi_k\delta}} + (1 + \beta\xi_k)e^{\xi_k}}$$

$$\text{ii) } R_k(\delta) = \frac{\frac{1}{\xi_k e^{2\xi_k\delta}} - \frac{\beta}{e^{2\xi_k\delta}} + \frac{1}{\xi_k e^{\xi_k}} + \frac{\beta}{e^{\xi_k}}}{\frac{1}{\xi_k e^{(2\delta+1)\xi_k}} - \frac{\beta}{e^{\xi_k(2\delta+1)}} + \frac{1}{\xi_k} + \beta}$$

$$\text{iii) } R_k(0) = \frac{\frac{1}{\xi_k} - \beta + \frac{1}{\xi_k e^{\xi_k}} + \frac{\beta}{e^{\xi_k}}}{\frac{1}{\xi_k e^{\xi_k}} - \frac{\beta}{e^{\xi_k}} + \frac{1}{\xi_k} + \beta}$$

$$\text{iv) } R_0(\delta) = \frac{\frac{1-\beta}{e^{2\delta}} + \frac{1+\beta}{e}}{\frac{1-\beta}{e^{2\delta+1}} + 1 + \beta};$$

$$\text{v) } \delta_{r,k} = 1/2 + \frac{1}{2\xi_k} \ln \left(\frac{\beta - \frac{1}{\xi_k}}{\beta + \frac{1}{\xi_k}} \right).$$

■

Proposição 6. Se $\delta \geq 0$ e $\beta > 1$, então $0 \leq G_1(\delta) < 1$.

Prova:

$G_1(\delta) = g(\delta)[R(\delta)]^{2n}$, então $G_1(\delta_r) = 0$. Nós já mostramos que $|R(\delta)| < 1$ (veja proposição 1), então nós devemos mostrar que $0 < g(\delta) \leq 1$. Com efeito,

$$g(\delta) = \frac{1 + e^{\xi_k}}{e^{\xi_k(1+\delta)} + e^{-\xi_k\delta}} > 0$$

e

$$g'(\delta) = -\frac{\xi_k(1 + e^{\xi_k})(e^{\xi_k(1+\delta)} - e^{-\xi_k\delta})}{[e^{\xi_k(1+\delta)} + e^{-\xi_k\delta}]^2} < 0,$$

porque

$$e^{\xi_k(1+2\delta)} - 1 > 0.$$

Portanto, $g(\delta)$ é uma função decrescente para $\delta \geq 0$, logo

$$0 < g(\delta) \leq g(0) = 1.$$

■

Proposição 7. Se $\beta > \frac{e+1}{e-1}$, então existem dois intervalos, I_1 e I_2 , tais que

$$\delta \in I_1 \Rightarrow G'_1(\delta) < 0 \quad \text{e} \quad \delta \in I_2 \Rightarrow G'_1(\delta) > 0.$$

Além disso, $G'_1(\delta_r) = 0$.

Prova:

$$G'_1(\delta) = [R(\delta)]^{2n-1} g_{aux}(\delta), \quad \text{onde} \quad g_{aux}(\delta) = 2ng(\delta)R'(\delta) + R(\delta)g'(\delta).$$

Como $R(\delta_r) = 0$, então $G'_1(\delta_r) = 0$, também.

Nós sabemos, pelas proposições 2 e 6, que:

$$g(\delta) > 0, g'(\delta) < 0 \quad \text{e} \quad R'(\delta) > 0, \quad \text{se} \quad \delta \geq 0;$$

$$R(\delta) > 0, \text{ se } \delta > \delta_r;$$

$$R(\delta) < 0 \text{ se } 0 \leq \delta < \delta_r.$$

Deste modo, podemos concluir:

$$\delta \in I_1 = (0, \delta_r) \Rightarrow G'_1(\delta) < 0,$$

porque $g_{aux}(\delta) > 0$ e $R(\delta) < 0$.

Como a função $g_{aux}(\delta)$ é contínua e

$$g_{aux}(\delta_r) = 2ng(\delta_r)R'(\delta_r) > 0,$$

nós podemos garantir que existe um intervalo $I_2 = (\delta_r, \delta^*)$ tal que

$$\delta \in I_2 \Rightarrow G'_1(\delta) > 0,$$

porque $g_{aux}(\delta) > 0$ e $R(\delta) > 0$. ■

Daqui por diante considere $\beta > \frac{e+1}{e-1}$.

Proposição 8. $G_2(0) < 0$.

Prova:

$$G_2(0) = g(0)[R(0)]^{2n-1} = [R(0)]^{2n-1} < 0$$

e pela proposição 3 nós temos que $R(0) < 0$ se $\beta > \frac{e+1}{e-1}$. ■

Proposição 9. Se $\delta \geq 0$, então $|G_2(\delta)| < 1$. Além disto, $G_2(\delta_r) = 0$.

Prova:

A prova é análoga a da proposição 6. ■

Proposição 10. Existe um conjunto $I = I_1 \cup I_2$ tal que

$$\delta \in I \Rightarrow G'_2(\delta) > 0.$$

Prova:

$$G'_2(\delta) = [R(\delta)]^{2(n-1)}g_{2,aux}(\delta),$$

onde

$$g_{2,aux}(\delta) = (2n - 1)g(\delta)R'(\delta) + R(\delta)g'(\delta).$$

Note que

$$\delta \in I_1 = (0, \delta_r) \Rightarrow G_2'(\delta) > 0,$$

pois

$$g_{2,aux}(\delta) > 0. \text{(veja a demonstração da proposição 7)}$$

Além disso, $g_{2,aux}(\delta)$ é uma função contínua e

$$g_{2,aux}(\delta_r) > 0;$$

portanto existe um intervalo $I_2 = (\delta_r, \delta^*)$, onde $g_{2,aux}(\delta) > 0$. Assim,

$$\delta \in I = I_1 \cup I_2 \Rightarrow G_2'(\delta) > 0.$$

■

A.5 Estudo com quatro subdomínios

Antes de tratarmos do caso com quatro subdomínios, observe que também podemos considerar as superposições, entre os subdomínios, ocorrendo na direção do eixo horizontal. Dessa forma, ao invés de analisarmos as funções erro na interface $\Gamma_y = (0, 1) \times \{y = 1/2\}$ (veja (A.21-A.22)), devemos analisá-las na interface $\Gamma_x = \{x = 1/2\} \times (0, 1)$. Os resultados são completamente análogos aos obtidos com superposição na direção do eixo vertical, devido à simetria do problema.

Considerando o mesmo problema dado em (A.1-A.2), tome as seguintes interfaces:

$$\Gamma_{x12} = \{1/2 + \delta\} \times (0, 1), \tag{A.23}$$

$$\Gamma_{x21} = \{1/2 - \delta\} \times (0, 1), \tag{A.24}$$

onde nós aplicamos as condições de fronteira do tipo Robin, como definidas em (A.7) e (A.9).

Com um procedimento iterativo completamente análogo ao (A.4)–(A.9), nós obtemos as expressões para as funções erro nas interfaces (A.23-A.24):

$$\begin{aligned} v_1^n &= \sum_k A_{1,k}^{(n)} (e^{-\xi_k x} + e^{\xi_k x}) \cos k\pi y; \\ v_2^n &= \sum_k A_{2,k}^{(n)} (e^{(2-x)\xi_k} + e^{\xi_k x}) \cos k\pi y, \end{aligned} \tag{A.25}$$

onde

$$\begin{aligned} A_{2,k}^{(n)} &= A_{1,k}^{(n-1)} \frac{1}{e^{\xi_k}} R(\delta); \\ A_{1,k}^{(n)} &= A_{2,k}^{(n)} e^{\xi_k} R(\delta); \end{aligned} \quad (\text{A.26})$$

assim,

$$\begin{aligned} A_{2,k}^{(n)} &= A_{1,k}^{(0)} \frac{1}{e^{\xi_k}} [R(\delta)]^{2n-1}; \\ A_{1,k}^{(n)} &= A_{1,k}^{(0)} [R(\delta)]^{2n}. \end{aligned} \quad (\text{A.27})$$

Note que

$$A_{1,k}^{(0)} = \frac{\alpha_k}{e^{-\xi_k(1/2+\delta)} + e^{\xi_k(1/2+\delta)}}. \quad (\text{A.28})$$

Então, as funções erro na interface $\Gamma_x = \{x = 1/2\} \times (0, 1)$ são dadas por

$$v_{1x}^n = \sum_k G_{1,k}^{(n)} \alpha_k \cos k\pi y; \quad (\text{A.29})$$

$$v_{2x}^n = \sum_k G_{2,k}^{(n)} \alpha_k \cos k\pi y. \quad (\text{A.30})$$

O objetivo agora é utilizarmos as estimativas para o erro nas interfaces $\Gamma_y = (0, 1) \times \{y = 1/2\}$ e $\Gamma_x = \{x = 1/2\} \times (0, 1)$, obtidas respectivamente em (A.21-A.22) e (A.29-A.30), para avaliarmos o erro nas interfaces referentes a uma decomposição com quatro subdomínios.

Dadas as interfaces Γ_y e Γ_x nós particionamos Ω em quatro subdomínios. Apresentaremos uma iteração baseada em superposição desses subdomínios. Para isto, definamos os seguintes subdomínios:

$$\Omega_{11} = (0, 1/2) \times (0, 1/2 + \delta), \quad \Omega_{21} = (1/2 - \delta, 1) \times (0, 1/2),$$

$$\Omega_{12} = (0, 1/2 + \delta) \times (1/2, 1) \quad \text{e} \quad \Omega_{22} = (1/2, 1) \times (1/2 - \delta, 1).$$

Vamos fixar a discussão em termos do subdomínio Ω_{21} , em relação aos demais a discussão é análoga. Então, consideremos a seguinte iteração:

$$-\Delta u_{21}^n + u_{21}^n = q, \quad \forall X \in \Omega_{21}; \quad (\text{A.31})$$

$$\begin{aligned} \nabla u_{21}^n \cdot \nu_{21} &= 0, \quad \forall X \in \partial\Omega \cap \partial\Omega_{21}, \\ u_{21}^n &= u_{1y}^n, \quad \forall X \in \Omega - \Omega_{21}, \end{aligned} \quad (\text{A.32})$$

onde u_{1y}^0 é a solução do sistema (A.4-A.5) e, para $n \geq 1$, u_{1y}^n é a solução do método iterativo dado por (A.6-A.7) e (A.8-A.9); ν_{21} é o unitário normal exterior a Ω_{21} .

Dessa forma ao considerarmos a função erro, dada por $v_{21} = u - u_{21}$, obtemos o seguinte processo iterativo:

$$-\Delta v_{21}^n + v_{21}^n = 0, \quad \forall X \in \Omega_{21}; \quad (\text{A.33})$$

$$\nabla v_{21}^n \cdot \nu_{21} = 0, \quad \forall X \in \partial\Omega \cap \partial\Omega_{21},$$

$$v_{21}^n = u - u_{1y}^n, \quad \forall X \in \Omega - \Omega_{21}, \quad (\text{A.34})$$

cuja solução é $v_{1y}^n = u - u_{1y}^n$, que nós sabemos calcular por (A.15).

Fazendo-se considerações análogas para os outros subdomínios, nós verificaremos que as interfaces sempre serão estimadas pelas funções erros v_{1y}^n , ou v_{2y}^n , ou v_{1x}^n , ou v_{2x}^n , dependendo do subdomínio em questão.

A.6 Conclusão

Neste problema modelo ficou claro que não podemos afirmar que um acréscimo no tamanho da região de superposição (acréscimo em δ) acarretará sempre num decréscimo do erro cometido nas interfaces, pois as funções $G_1(\delta)$ e $G_2(\delta)$, que aparecem nas expressões dos erros (v^n), não são monótonas.

De fato, o objetivo principal desse procedimento iterativo, baseado em decomposição de subdomínios, é variar o valor de δ com a finalidade de obter o melhor valor para o tamanho das superposições, de maneira a minimizar o erro nas interfaces.

No problema prático proposto neste trabalho, nós aplicamos o procedimento iterativo, apresentado aqui neste apêndice, à equação elíptica da pressão, a qual está associada ao escoamento miscível de dois fluidos em meios porosos. Neste caso nós decompomos o domínio em 4, 8 e 16 subdomínios. Em todas as simulações nós observamos o comportamento oscilatório do erro nas interfaces. Por exemplo, analisando a Tabela 2 (quadro 2), presente no Capítulo 6, vemos que passando de $\delta = 1$ para $\delta = 2$ nós obtemos um decréscimo no número médio de iterações internas (de 50.2 para 26.7) o que leva a uma convergência global em 178.0 segundos, porém se comparamos os valores obtidos para $\delta = 2$ e $\delta = 3$ o mesmo não acontece; o número médio de iterações internas aumenta (vai de 26.7 para 81.7), ocasionando uma demora maior para atingirmos a convergência (316.0 segundos).

Ainda em relação ao problema prático relatado acima, nós devemos ressaltar que os valores usados nas interfaces dos subdomínios são atualizados levando-se em conta as propriedades do espaço de Raviart-Thomas considera-

do nesta tese, a formulação fraca do problema e as condições de consistência dadas pelas condições de Robin nas interfaces.