

UNIVERSIDADE FEDERAL DE JUIZ DE FORA
PROGRAMA DE PÓS-GRADUAÇÃO EM MODELAGEM COMPUTACIONAL

Gustavo Miranda Teixeira

**Métodos numéricos para a solução de escoamentos bifásicos de fluidos
incompressíveis em meios porosos**

Juiz de Fora

2011

Gustavo Miranda Teixeira

**Métodos numéricos para a solução de escoamentos bifásicos de fluidos
incompressíveis em meios porosos**

Dissertação apresentada ao Programa de Pós-graduação em Modelagem Computacional, da Universidade Federal de Juiz de Fora como requisito parcial à obtenção do grau de Mestre em Modelagem Computacional.

Orientador: Prof. D.Sc. Rodrigo Weber dos Santos

Coorientador: Maicon Ribeiro Corrêa

Coorientador: Paulo Goldfeld

Juiz de Fora

2011

Teixeira, Gustavo Miranda.

Métodos numéricos para a solução de escoamentos bifásicos de fluidos incompressíveis em meios porosos / Gustavo Miranda Teixeira. – 2011.

111 f. : il.

Dissertação (Mestrado em Modelagem Computacional)–Universidade Federal de Juiz de Fora, Juiz de Fora, 2011.

1. Engenharia de petróleo. I. Título.

CDU 622.323

Gustavo Miranda Teixeira

**Métodos numéricos para a solução de escoamentos bifásicos de fluidos
incompressíveis em meios porosos**

Dissertação apresentada ao Programa de Pós-graduação em Modelagem Computacional, da Universidade Federal de Juiz de Fora como requisito parcial à obtenção do grau de Mestre em Modelagem Computacional.

Aprovada em 29 de Julho de 2011.

BANCA EXAMINADORA

Prof. D.Sc. Rodrigo Weber dos Santos - Orientador
Universidade Federal de Juiz de Fora

Prof. D.Sc. Maicon Ribeiro Corrêa - Coorientador
Universidade Federal de Juiz de Fora

Prof. D.Sc. Paulo Goldfeld - Coorientador
Universidade Federal do Rio de Janeiro

Prof. D.Sc. Eduardo Lucio Mendes Garcia
Laboratório Nacional de Computação Científica

Prof. D.Sc. Flávio Dickstein
Universidade Federal do Rio de Janeiro

Prof. D.Sc. Grigori Chapiro
Universidade Federal de Juiz de Fora

AGRADECIMENTOS

Gostaria de deixar registrado meu agradecimento a todos que contribuíram para minha formação e especialmente às pessoas que estimularam diretamente meu aprendizado durante todos os anos de minha vida. Agradeço a toda a minha família. À minha mãe, Angela, que foi a principal responsável por minha educação desde minha infância até os dias de hoje. Ao meu pai, Francisco e minha avó Mariinha. Também agradeço à Paola por todo carinho e estímulo a continuar os estudos. Agradeço a companhia de todos os colegas do mestrado, particularmente aos amigos do Fisiocomp que tornaram esses anos de mestrado mais leves. Às amigadas que ficaram em outras cidades, mas ainda estão presentes. A todos os professores do mestrado que sempre exigiram o melhor que eu poderia fazer, em especial aos Professores Rodrigo e Lobosco que me orientaram durante minha vida acadêmica.

*“A verdade nunca pode ser
contada de forma a ser
compreendida, e não acreditada.”*

William Blake

RESUMO

A Simulação de Reservatórios é uma importante área da engenharia de reservatórios. Simuladores são baseados em modelos matemáticos que modelam o escoamento dos fluidos através do meio porosos. Modelos água-óleo incompressíveis são representados por sistemas de equações diferenciais parciais em duas variáveis: pressão e saturação dos fluidos. O problema consiste de um sistema de equações de difícil resolução e que exige o uso de métodos iterativos para aproximar a solução. Neste trabalho foi feita uma comparação entre métodos numéricos que aproximam a solução deste problema através uma abordagem acoplada, utilizando um método implícito e um esquema desacoplado. O sistema desacoplado utiliza um método implícito para obter a solução da equação da pressão, enquanto a solução da saturação é aproximada através dos métodos de Euler Explícito e BDF (*Backward Differentiation Formulas*). Para resolver as equações no espaço, os métodos de Kurganov-Tadmor e o Esquema Upwind foram utilizados. O Esquema Upwind é um método de primeira ordem, enquanto o Kurganov-Tadmor (KT) é um método central de segunda ordem. Testes foram realizados utilizando diferentes tipos de reservatórios e propriedades da rocha e do óleo. Os resultados foram comparados com soluções precisas para medir o erro numérico introduzido por cada método. Através dos resultados obtidos nesse trabalho foi possível comparar os métodos e observar que a solução através de um esquema desacoplado é mais vantajosa, principalmente ao utilizar o método BDF para resolver a equação da saturação no tempo. Comparando o esquema Upwind com o KT, verificamos que, como esperado, o KT é um método menos difusivo. Nosso trabalho sugere que o uso do método KT em associação com o BDF resulta em um método mais preciso. Por outro lado, o KT é computacionalmente mais custoso do que o Esquema Upwind. Contudo, para produzir resultados com erros numéricos semelhantes aos do KT, o método Upwind chega a ser mais de seis vezes mais lento.

Palavras-chave: Meios Porosos. Kurganov-Tadmor. BDF. Escoamento Bifásico. IMPES.

ABSTRACT

Reservoir simulation is part of an important area of reservoir engineering. Reservoir simulators are based on mathematical models capable of predicting the fluid flow through porous medium. Water-oil incompressible models are represented by a system of differential partial equations in two variables: pressure and the fluid saturation. The system of equations of the problem is not simple to solve and it demands the use of iterative methods to get the approximate solution. In this work we compared a coupled implicit approach and a decoupled scheme. The decoupled system evolves in time using an implicit method to solve the pressure equation solution whereas the solution for the saturation equation is obtained using Explicit Euler and BDF (*Backward Differentiation Formulas*) methods. The solutions in space discretization use the Kurganov-Tadmor method and the Upwind Scheme. Upwind Scheme is a first-order finite volume based method whereas Kurganov-Tadmor (KT) is a second-order central scheme. Different kinds of reservoir types and different rock and oil properties were used to compare the results with more precise solutions in order to estimate the amount of numerical errors introduced by each method. These results allowed us to quantify the difference between the analyzed methods and to observe that the solution obtained from the decoupled method yields the best results, in particular when the BDF method is used to solve the saturation equation in time. The solution from the BDF method in association with the Upwind Scheme compared with the KT shows that, as expected, the KT method is less diffusive than the Upwind. Our work suggests that the use of the KT method in association with the BDF results in a more accurate method. On the other hand, the KT method is computationally more expensive compared to Upwind Scheme. Nevertheless, to produce numerical results with similar errors to KT, the Upwind Scheme can be more than five times slower.

Keywords: Porous Media. Kurganov-Tadmor. BDF. Biphasic Flow. IMPES.

SUMÁRIO

1	INTRODUÇÃO.....	15
2	MODELAGEM NUMÉRICA.....	18
2.1	Conceitos Fundamentais.....	18
2.1.1	<i>Porosidade</i>	19
2.1.2	<i>Permeabilidade</i>	20
2.1.3	<i>Saturação</i>	20
2.1.4	<i>Viscosidade</i>	20
2.1.5	<i>Massa específica</i>	21
2.2	Conservação de Massa.....	21
2.3	Lei de Darcy.....	24
2.4	Escoamento Bifásico.....	26
2.4.1	<i>Pressão Capilar</i>	26
2.4.2	<i>Permeabilidade Relativa</i>	27
2.4.3	<i>Simplificações</i>	29
2.4.4	<i>Condições iniciais e de contorno</i>	31
3	DISCRETIZAÇÃO NUMÉRICA NO TEMPO.....	33
3.1	O Esquema IMPES.....	33
3.1.1	<i>Métodos Numéricos para Solução de Equações Diferenciais Ordinárias (EDOs)</i>	36
3.1.1.1	<i>Euler Explícito</i>	36
3.1.1.2	<i>Backwards Differentiation Formulas (BDF)</i>	38
3.2	Totalmente Implícito.....	39
4	DISCRETIZAÇÃO NUMÉRICA NO ESPAÇO.....	41
4.1	Equação da Pressão.....	42
4.2	Esquema Upwind.....	45
4.2.1	<i>Pressão</i>	46
4.2.2	<i>Saturação</i>	47

4.3	Método de Kurganov-Tadmor	47
4.3.1	<i>Problema de Riemann</i>	49
4.3.2	<i>Lax-Friedrichs</i>	51
4.3.3	<i>Método de Rusanov</i>	53
4.3.4	<i>Método de Kurganov-Tadmor (KT) em uma dimensão</i>	58
4.3.5	<i>Extensão em duas dimensões do Método KT</i>	64
4.3.5.1	<i>Pressão</i>	64
4.3.5.2	<i>Saturação</i>	64
4.4	Totalmente Implícito	66
4.5	Difusão Numérica dos Métodos	67
5	METODOLOGIA.....	70
5.1	Implementação	70
5.2	Fluxo fracionário linear	71
5.3	Permeabilidade homogênea	72
5.4	Permeabilidade heterogênea	73
6	RESULTADOS	75
6.1	Métodos de discretização temporal	75
6.1.1	<i>Five-Spot</i>	75
6.1.1.1	<i>Óleo leve</i>	75
6.1.1.2	<i>Óleo pesado</i>	78
6.1.2	<i>Two-Spot</i>	80
6.1.2.1	<i>Óleo leve</i>	80
6.1.2.2	<i>Óleo pesado</i>	82
6.2	Discretização no espaço	86
6.2.1	<i>Função de Fluxo Linear</i>	86
6.2.2	<i>Five-Spot</i>	89
6.2.2.1	<i>Óleo leve</i>	89
6.2.2.2	<i>Óleo pesado</i>	92
6.2.3	<i>Two-Spot</i>	93
6.2.3.1	<i>Óleo leve</i>	93
6.2.3.2	<i>Óleo pesado</i>	94

7 CONCLUSÃO	99
REFERÊNCIAS	102
APÊNDICES	104

LISTA DE ILUSTRAÇÕES

2.1	Esquemática de um meio poroso.	19
2.2	Esquemática da porosidade absoluta.	19
2.3	Fluxos de entrada e saída de massa.	21
2.4	Fluxos de entrada e saída de massa.	22
2.5	Fluxos de entrada e saída de massa.	23
2.6	Ilustração do esquema utilizado por Darcy para concluir a Lei de Darcy.	25
2.7	Curvas de pressão capilar para embebição e drenagem.	27
2.8	Curvas de permeabilidade relativa.	28
4.1	Discretização espacial	41
4.2	Matriz pentadiagonal.	44
4.3	Duas constantes separadas pela descontinuidade $x = 0$	50
4.4	Solução do problema de Riemann no plano $x - t$ para a equação da advecção linear com velocidade a positiva.	50
4.5	Evolução do método Lax-Friedrichs com malha deslocada.	51
4.6	Problemas de Riemann do método Rusanov.	54
4.7	Problemas de Riemann do método KT.	60
5.1	Deslocamento da solução inicial	72
5.2	Reservatório do tipo Five-spot	72
5.3	Reservatório Two-spot	74
6.1	Mapa de cores para a saturação com óleo leve em (a) 6 dias, (b) 100 dias, (c) 200 dias e (d) 600 dias no reservatório Five-Spot.	75
6.2	Tempo total (em segundos) de simulação para resultados com malhas de tamanho 21×21 , 63×63 e 189×189	76
6.3	Relação entre o tempo utilizado no processamento da pressão e da saturação agrupados de acordo com o método e tamanho de malha.	77
6.4	Erro numérico dos métodos relativos à pressão.	77
6.5	Erro numérico dos métodos relativos à saturação.	78

6.6	Tamanho médio dos intervalos de tempo utilizados para resolver a equação da saturação (em milhares de segundos).	78
6.7	Mapa de cores para a saturação da água com óleo pesado em (a) 6 dias, (b) 100 dias, (c) 200 dias e (d) 600 dias no reservatório Five-Spot.	79
6.8	Tamanho dos intervalos de tempo utilizados para resolver a equação da saturação.	79
6.9	Tempo total (em segundos) de simulação para resultados com malhas de tamanho 21×21 , 63×63 e 189×189	80
6.10	Mapa de cores para a saturação da água com óleo leve em (a) 10 dias, (b) 250 dias, (c) 500 dias e (d) 1000 dias no reservatório Two-Spot.	81
6.11	Tempo total de simulação.	81
6.12	Relação entre o tempo utilizado no processamento da pressão e da saturação agrupados de acordo com o método e tamanho de malha.	82
6.13	Mapa de cores para a saturação da água com óleo pesado em (a) 10 dias, (b) 250 dias, (c) 500 dias e (d) 1000 dias no reservatório Two-Spot.	83
6.14	Tempo total (em segundos) de simulação para os diferentes métodos.	83
6.15	Relação entre o tempo utilizado no processamento da pressão e da saturação agrupados de acordo com o método e tamanho de malha.	84
6.16	Erro numérico dos métodos relativos à pressão.	84
6.17	Erro numérico dos métodos relativos à saturação.	85
6.18	Intervalo de tempo dos métodos.	85
6.19	Comparação da difusão numérica gerada pelos métodos (a) Upwind/BDF e (b) KT/BDF.	86
6.20	Tempo total (em segundos) de simulação para os diferentes métodos.	87
6.21	Erro numérico dos métodos com fluxo linear.	87
6.22	Tamanho dos intervalos de tempo utilizados para resolver o problema linear ($\times 0.00001$).	88
6.23	Tempo total (em segundos) de simulação.	89
6.24	Relação entre o tempo utilizado no processamento da pressão e da saturação agrupados de acordo com o método e tamanho de malha.	90
6.25	Erro numérico dos métodos relativos à pressão.	90
6.26	Erro numérico dos métodos relativos à saturação.	91

6.27 Tamanho dos intervalos de tempo utilizados para resolver a equação da saturação (em milhares).	91
6.28 Tempo total (em segundos) de simulação para os diferentes métodos.	92
6.29 Erro numérico dos métodos relativos à saturação.	93
6.30 Tempo total (em segundos) de simulação para os diferentes métodos.	93
6.31 Erro numérico dos métodos relativos à saturação.	94
6.32 Tempo total (em segundos) de simulação para os diferentes métodos.	95
6.33 Relação entre o tempo utilizado no processamento da pressão e da saturação agrupados de acordo com o método, tamanho de malha.	95
6.34 Erro numérico dos métodos relativos à pressão.	96
6.35 Erro numérico dos métodos relativos à saturação.	97
6.36 Intervalo de tempo dos métodos.	97

LISTA DE TABELAS

2.1	Resumo das simplificações.	32
5.1	Linguagem e Bibliotecas utilizadas nas implementações.	70
6.1	Resumo dos tempos de computação em segundos.	98
6.2	Resumo dos erros numéricos da saturação com malha 189×189 em relação ao erro do KT/BDF com malha 63×63 . Entre parênteses a relação $\frac{\text{Erro do método}}{KT/BDF}$	98

1 INTRODUÇÃO

A modelagem computacional ocupa um papel importante na engenharia de petróleo, com particular destaque no estudo e no gerenciamento de reservatórios. Como resultado dos diversos custos envolvidos na recuperação de óleo, é necessário conhecer as mais avançadas técnicas para recuperá-lo de maneira mais eficiente possível e causando o mínimo de impacto ambiental. Uma maneira usual de se analisar reservatórios é através da previsão do escoamento dos fluidos através dos meio porosos que o formam.

Os fluidos presentes em um reservatório interagem entre si e com o meio. Essa interação depende de características do meio, como porosidade e permeabilidade e características dos fluidos envolvidos no processo, como sua viscosidade e massa específica. Essas propriedades são fatores essenciais para se determinar o escoamento dos fluidos [1].

A extração do óleo de reservatórios se inicia ao se perfurar a rocha. Nesse primeiro momento, a diferença de pressão entre o fluido e a superfície já contribui para que parte do óleo presente seja extraído sem o uso de qualquer outro artifício. Este é o processo de recuperação primário, capaz de extrair apenas uma pequena parcela do óleo presente, de 5 a 15% [2]. O processo secundário consiste em se perfurar o reservatório em mais lugares e injetar um outro líquido ou gás de menor valor no poço injetor, gerando uma pressão sobre o óleo e empurrando-o para fora em outros poços (poços produtores). Mesmo esse processo não é capaz de recuperar todo o óleo presente no poço. Um terceiro processo (terciário) é realizado através da utilização de mecanismos mais complexos [3]. Nesse trabalho, manteremos o foco no processo secundário.

O estudo de escoamento em meios porosos é um enorme desafio devido às características físicas dos reservatórios, geralmente encontrados a grandes profundidades e possuindo extensões quilométricas, ao passo que características microscópicas também são fatores cruciais no processo. Como a extração de petróleo em reservatórios é de extrema complexidade e envolve altos custos, a simulação através de modelos computacionais é vista como uma alternativa no estudo das características inerentes a este processo. A natureza do problema determina o tipo de representação que pode ser feita dele.

Esse trabalho trata da utilização de um fluido imiscível para deslocar o óleo, o chamado escoamento bifásico. A modelagem computacional do escoamento bifásico água-óleo

representa as interações físicas que regem o escoamento desses fluidos por meio de sistemas de equações diferenciais parciais. A partir disso, é possível avaliar diferentes técnicas de recuperação a um custo muito pequeno [4]. No entanto, não é possível resolver essas equações de maneira analítica. Para a obtenção de respostas para esses sistemas, é usual a utilização de métodos numéricos.

Modelos água-óleo incompressíveis são baseados em sistemas de equações diferenciais parciais em duas variáveis: pressão e saturação dos fluidos. O problema consiste de um sistema de equações com características elípticas e hiperbólicas. Uma abordagem simples e eficiente de solução desse problema é obtida pelo método IMPES (*Implicit Pressure - Explicit Saturation*), que é utilizado para desacoplar e resolver as equações separadamente [5]. O método IMPES se aproveita do fato da pressão evoluir de maneira mais lenta que a saturação, para utilizar uma solução implícita para a pressão e uma solução explícita para a saturação. Concluindo, a equação implícita evolui em largos passos de tempo, e para cada solução da pressão, a solução da saturação (equação explícita) precisa ser reavaliada várias vezes, pois o avanço no tempo no método explícito é limitado por uma condição de estabilidade, a condição de CFL. O método IMPES pode ser facilmente adaptado para utilizar um esquema desacoplado de resolução implícita para a pressão e implícita para a saturação. Chamaremos essa outra forma de IMPIS (*Implicit Pressure - Implicit Saturation*).

O objetivo desse trabalho é comparar uma implementação feita por [6, 7] que utiliza o método IMPES em conjunto com o Esquema Upwind [8] na discretização espacial da equação hiperbólica com uma solução que utiliza o mesmo método IMPES, porém, com o método de Kurganov-Tadmor (KT) para a discretização espacial da equação hiperbólica [9]. O Esquema Upwind é um método de primeira ordem, enquanto o Kurganov-Tadmor (KT) é um método de segunda ordem. São utilizados, para essas duas discretizações espaciais, dois diferentes métodos para aproximar a solução da equação da saturação no tempo: método de Euler Explícito e *Backward Differentiation Formulas* (BDF). Nesse segundo caso teríamos o chamado IMPIS, já que o método BDF é um método implícito. Também implementamos uma alternativa aos métodos IMPES e IMPIS, onde a solução é obtida por uma discretização totalmente implícita do problema. Nesse último caso, o método numérico requer a solução de um sistema não linear a cada iteração.

Métodos numéricos nem sempre são capazes de lidar bem com frentes de onda onde

os fluidos estão em contato devido a descontinuidades apresentadas nessas regiões. Em geral, os métodos introduzem alguma difusão numérica. É importante conhecer bem essa característica e quantificar o quanto isso pode influenciar a solução do problema.

Testes foram realizados utilizando diferentes tipos de condições iniciais e funções de fluxo linear e não linear. Os resultados foram comparados com soluções precisas para medir o erro numérico introduzido [10]. Entre os métodos acoplado, IMPES e IMPIS, independentemente da discretização espacial utilizada, o IMPIS se mostrou capaz de produzir resultados mais precisos e em simulações mais rápidas. Comparando os métodos de discretização espacial, como esperado, observamos que os erros numéricos obtidos pelo método Upwind, por ser um método mais difusivo, podem ser maiores que os obtidos pelo KT. Ao se comparar o tempo entre resultados com erros numéricos semelhantes, o KT se mostra mais eficiente. Com relação aos métodos de discretização temporal testados, concluímos também que, em grande parte dos casos, o BDF se saiu melhor que os outros. Nosso trabalho sugere então que o uso do método KT em associação com o IMPIS com discretização temporal implícita realizada pelo método BDF resulta em um método mais preciso, entre os avaliados.

Esse trabalho é organizado da seguinte forma: no Cap. 2 são apresentados todos os conceitos necessários para se conhecer o problema do escoamento bifásico em meios porosos e o desenvolvimento da modelagem numérica; no Cap. 3 são apresentados os passos para desacoplar as equações apresentadas no Cap. 2 e discretizá-las no tempo através do método de resolução temporal de Euler Explícito, do esquema de resolução temporal implícito BDF e do esquema totalmente Implícito, que resolve o sistema de equações acoplado; no Cap. 4 são abordados os métodos de resolução espacial através do método Upwind clássico e de um novo esquema desenvolvido por Kurganov e Tadmor; no Cap. 5 apresentamos todos os experimentos realizados, bem como as condições em que foram realizados; já no Cap. 6 são apresentados os resultados para os experimentos; no Cap. 7 são apresentadas as discussões e conclusões.

2 MODELAGEM NUMÉRICA

Esse capítulo abordará os detalhes da modelagem numérica de um reservatório de petróleo. A modelagem numérica é uma representação matemática dos eventos físicos que regem o escoamento de fluidos através do meio poroso, bem como as interações que ocorrem entre o fluido, o meio e os outros fluidos presentes. Através de equações diferenciais parciais é possível reproduzir as principais características do processo. Porém é necessário fazer algumas simplificações devido ao alto grau de complexidade da solução computacional dessas equações e da dificuldade de se conhecer todas as características de um reservatório.

Após uma explicação de conceitos fundamentais, o capítulo seguirá para a modelagem dos princípios físicos que regem o escoamento de fluidos em meios porosos: a Lei da Conservação de Massa e a Lei de Darcy. A partir dessas equações será possível generalizar as equações para que tratem de dois fluidos (água e óleo) inseridos no mesmo meio. Serão apresentadas também, todas as simplificações realizadas para facilitar a resolução do sistema gerado.

2.1 Conceitos Fundamentais

O petróleo e água extraídos de reservatórios subterrâneos se encontram em ambientes com características especiais chamados meios porosos. Um meio poroso nada mais é do que um sólido com espaços vazios. Esses meios são compostos de formações rochosas com enorme quantidade de poros, onde se concentram os fluidos ou gases (também chamados fases). As características dessas formações e das fases ali presentes são de crucial importância na interação física entre esses meios, portanto quanto mais informações estiverem disponíveis, mais o modelo matemático irá se aproximar das situações reais. A Fig. 2.1 ilustra como é formado um meio poroso.

O reservatório de onde se extrai petróleo pode possuir vários quilômetros de extensão, ainda assim características microscópicas, como a porosidade e a permeabilidade estão entre suas principais propriedades. A essas se somam características como a pressão capilar do fluidos. Todas essas características serão descritas nas subseções seguintes em maiores detalhes.

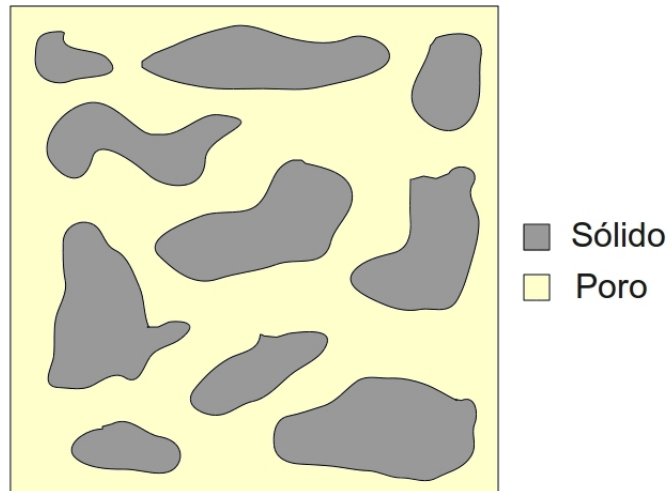


Figura 2.1: Esquematização de um meio poroso.

2.1.1 Porosidade

Porosidade absoluta é a razão entre o volume com espaços vazios, os poros e o volume total da rocha. Podemos visualizar essa razão na Eq. 2.1.

$$\phi = \frac{V_p}{V_t} = 1 - \frac{V_s}{V_t}, \quad (2.1)$$

onde V_p é o volume de poros, V_t é o volume total da rocha e V_s é o volume com matéria sólida na rocha.

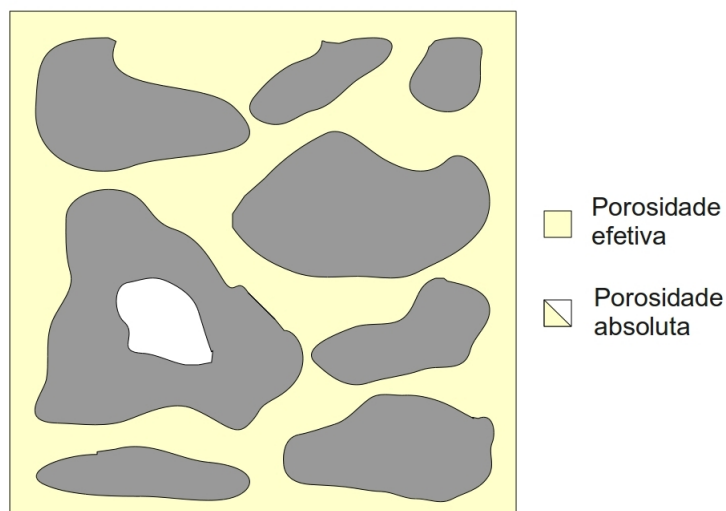


Figura 2.2: Esquematização da porosidade absoluta.

Uma rocha pode ter uma alta porosidade absoluta e, mesmo assim, não ser capaz de ser percorrida por fluidos.

O mais interessante é a chamada porosidade efetiva, que considera apenas os poros conectados entre si, por onde é possível escoar um fluido ou gás [11]. No entanto, não é trivial determinar o valor da porosidade efetiva, sendo necessária a realização de experimentações em laboratório. Na prática é impossível determinar essa característica em reservatórios, devido à sua extensão. Podem-se utilizar, no entanto, métodos estatísticos como forma de estimar a porosidade efetiva. A Fig. 2.2 ilustra a diferença entre porosidade absoluta e porosidade efetiva.

2.1.2 Permeabilidade

A permeabilidade absoluta (K) é uma propriedade do meio que mede a habilidade dos poros transmitirem fluido [12]. Não deve ser confundida com a porosidade, pois mesmo um meio com alta porosidade pode não ser capaz de permitir que fluidos escoem em todas as direções.

A permeabilidade é de fundamental importância para a modelagem de escoamentos em meios porosos, e será tratada novamente na Seção 2.3 onde será apresentada a lei de Darcy [13].

2.1.3 Saturação

A saturação de uma das fases do meio é dada por:

$$s_\alpha = \frac{\text{Volume da fase } \alpha \text{ no meio poroso}}{\text{Volume poroso efetivo do meio}}. \quad (2.2)$$

A saturação das fases é uma fração da saturação total do meio, então a soma da saturação das fases é $\sum s_\alpha = 1$. Considerando que o meio é preenchido por água e óleo, tem-se que:

$$s_a + s_o = 1. \quad (2.3)$$

2.1.4 Viscosidade

A viscosidade (μ) é uma propriedade do fluido referente à resistência ao seu escoamento. A viscosidade depende principalmente do atrito interno das moléculas que o compõem. Sua unidade de medida é $[Pa.s]$.

Diferentes tipos de fases se diferenciam principalmente pela sua viscosidade. Exemplificando, uma fase gasosa, com suas moléculas distantes entre si, tem baixa viscosidade, enquanto a água, com moléculas mais próximas, possui viscosidade maior e o óleo, sendo mais espesso, possui viscosidade maior que as das duas anteriores.

2.1.5 *Massa específica*

A massa específica (ρ) é a razão entre a massa e o volume ocupado por um fluido. A unidade utilizada para medir a massa específica de uma fase é o $[kg/m^3]$. Nesse trabalho a massa específica será constante, já que só são considerados fluidos incompressíveis.

2.2 Conservação de Massa

A Lei da Conservação de Massa se baseia no princípio de que, em um volume de controle fixo no espaço, a variação da massa em um intervalo de tempo é igual à massa que entrou menos a que saiu através de fronteiras ou de fontes ou sumidouros. Temos então:

$$\text{ENTRADA} - \text{SAIDA} = \text{ACUMULAÇÃO}$$

Definimos então um volume de controle retangular $V = [x, x + dx] \times [y, y + dy] \times [z, z + dz]$ e uma velocidade $\vec{v}(x, y, z) = (v_x(x, y, z), v_y(x, y, z), v_z(x, y, z))$. A Fig. 2.3 ilustra como o fluxo percorre o volume V nas direções x , y e z .

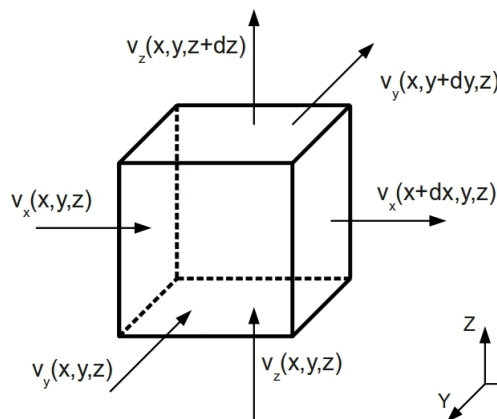


Figura 2.3: Fluxos de entrada e saída de massa.

Denotando a densidade do fluido por ρ , temos que a massa (dada por M) presente no volume V no instante de tempo t é a integral volumétrica dessa densidade, como mostra

a Eq. 2.4:

$$M(t) = \iiint_V (\phi\rho)(x, y, z, t) dV. \quad (2.4)$$

Se considerarmos essa massa M variando no intervalo de tempo $[t, t + dt]$, teremos a Eq. 2.5, que representa a acumulação de massa no volume V :

$$\begin{aligned} M(t + dt) - M(t) &= \iiint_V [(\phi\rho)(x, y, z, t + dt) - (\phi\rho)(x, y, z, t)] dV \\ &= \iiint_V \int_t^{t+dt} \frac{\partial(\phi\rho)}{\partial t} dt dV. \end{aligned} \quad (2.5)$$

Para cada uma das interfaces do volume existe um fluxo entrando ou saindo. Considere a interface perpendicular ao eixo x no ponto (x, y, z) e no instante t , na face esquerda de V , como mostra a Fig. 2.4. Esse fluxo pode ser escrito na forma de uma integral volumétrica, como na Eq. 2.6.

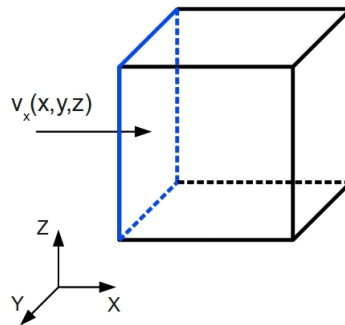


Figura 2.4: Fluxos de entrada e saída de massa.

$$f_x(x, t) = \int_y^{y+dy} \int_z^{z+dz} (\rho v_x)(x, y, z, t) dy dz. \quad (2.6)$$

Para a interface direita do volume V , temos a Eq. 2.7 com fluxo semelhante à Eq. 2.6, porém com sinal negativo, mostrando que o fluxo deixa a região, como ilustra a Fig. 2.5).

$$f_x(x + dx, t) = - \int_y^{y+dy} \int_z^{z+dz} (\rho v_x)(x + dx, y, z, t) dy dz. \quad (2.7)$$

Essa massa atravessa então a região V no eixo x no intervalo $[t, t + dt]$, como mostra

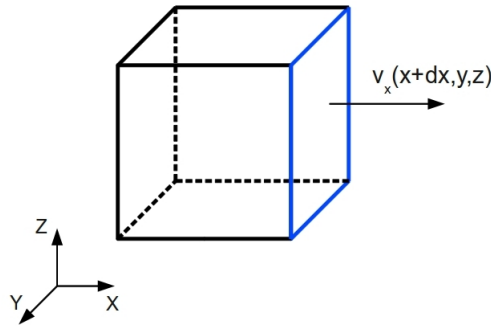


Figura 2.5: Fluxos de entrada e saída de massa.

a Eq. 2.8.

$$\begin{aligned}
 & \int_t^{t+dt} (f_x(x, t) + f_x(x + dx, t)) dt = \\
 & \int_t^{t+dt} \int_y^{y+dy} \int_z^{z+dz} [(\rho v_x)(x, y, z, t) - (\rho v_x)(x + dx, y, z, t)] dz dy dt = \\
 & - \int_t^{t+dt} \left[\int_x^{x+dx} \int_y^{y+dy} \int_z^{z+dz} \frac{\partial(\rho v_x)}{\partial x} dx dy dz \right] dt = \\
 & - \int_t^{t+dt} \iiint_V \frac{\partial(\rho v_x)}{\partial x} dV dt.
 \end{aligned} \tag{2.8}$$

Aproveitando o mesmo raciocínio para as coordenadas y e z produzem-se as equações Eq. 2.9 e Eq. 2.10.

$$\int_t^{t+dt} (f_y(y, t) + f_y(y + dy, t)) dt = - \int_t^{t+dt} \iiint_V \frac{\partial(\rho v_y)}{\partial y} dV dt. \tag{2.9}$$

$$\int_t^{t+dt} (f_z(z, t) + f_z(z + dz, t)) dt = - \int_t^{t+dt} \iiint_V \frac{\partial(\rho v_z)}{\partial z} dV dt. \tag{2.10}$$

Somando as Eqs. 2.8, 2.9 e 2.10, mostramos que a massa total que entra no volume V no intervalo de tempo $[t, t + dt]$ é dada pela Eq. 2.11.

$$\begin{aligned}
 & - \int_t^{t+dt} \iiint_V \left[\frac{\partial(\rho v_x)}{\partial x} + \frac{\partial(\rho v_y)}{\partial y} + \frac{\partial(\rho v_z)}{\partial z} \right] dV dt = \\
 & - \int_t^{t+dt} \iiint_V \nabla \cdot (\rho \vec{v}) dV dt.
 \end{aligned} \tag{2.11}$$

Além da saída e entrada de massa através dos fluxos em cada interface do volume, ocorre também a perda e acréscimo de massa através dos chamados poços de produção e poços de injeção, respectivamente. Como os poços podem ser da ordem de centímetros e se encontram em reservatórios de centenas de metros ou quilômetros, é conveniente tratá-los

como fontes ou sumidouros pontuais. Seja q a vazão volumétrica (unidades do volume por tempo) de uma fonte ($q > 0$ para injeção) ou sumidouro ($q < 0$ para produção) situada no volume de controle V , a massa agregada a V no intervalo de tempo $[t, t + dt]$ é dada pela Eq. 2.12.

$$\int_t^{t+dt} \iiint_V (\rho q) dV dt. \quad (2.12)$$

Lembrando que a acumulação (Eq. 2.5) é igual ao fluxo (Eq. 2.11) adicionado às fontes e sumidouros (Eq. 2.12).], pode-se então reunir as três equações em uma única:

$$\begin{aligned} & \iiint_V \int_t^{t+dt} \frac{\partial(\phi\rho)}{\partial t} dt dV = \\ & - \int_t^{t+dt} \iiint_V \nabla \cdot (\rho\vec{v}) dV dt + \int_t^{t+dt} \iiint_V (\rho q) dV dt. \end{aligned} \quad (2.13)$$

Pode-se reunir todos os elementos da Eq. 2.13 dentro da mesma integral, produzindo:

$$\iiint_V \int_t^{t+dt} \left[\frac{\partial(\phi\rho)}{\partial t} - \nabla \cdot (\rho\vec{v}) + (\rho q) \right] dV dt = 0. \quad (2.14)$$

Como o volume V e o intervalo de tempo $[t, t + dt]$ são arbitrários, tem-se a formulação final da conservação de massa, dada pela Eq. 2.15.

$$\frac{\partial(\phi\rho)}{\partial t} + \nabla \cdot (\rho\vec{v}) - (\rho q) = 0. \quad (2.15)$$

2.3 Lei de Darcy

Henry Darcy, engenheiro francês, descreveu pela primeira vez em 1856 um experimento realizado em laboratório para estudar o escoamento de água através de uma camada de areia [13]. Esse experimento clássico veio a ser considerado mais tarde como uma das leis fundamentais para a modelagem de fluxos em meios porosos.

Segundo a Lei de Darcy, o escoamento de um fluido é proporcional ao gradiente da pressão e inversamente proporcional à viscosidade do fluido em questão. Esta proporcionalidade depende do meio onde o fluido escoar, através da chamada permeabilidade absoluta que representa a capacidade que o meio tem de deixar que o fluido percorra seus poros.

Para entender melhor o experimento realizado por Darcy, pode-se observar a ilustração

da Fig. 2.6.

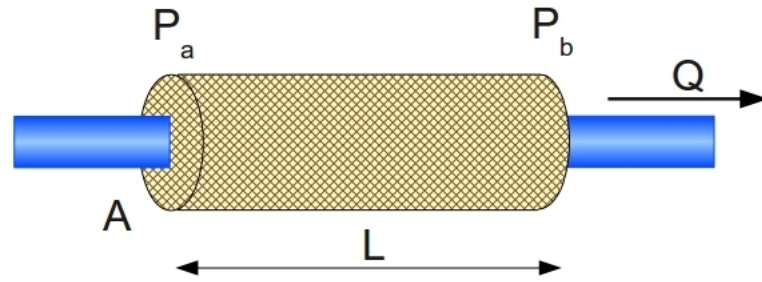


Figura 2.6: Ilustração do esquema utilizado por Darcy para concluir a Lei de Darcy.

Na Fig. 2.6 pode ser observado um filtro homogêneo de comprimento L limitado por seções planas de mesma área superficial A e preenchido por um líquido incompressível que percorre esse filtro devido às diferenças de pressão (P_a e P_b). Darcy observou que a relação entre diferentes características desse filtro alteram a quantidade de vazão (Q) na seção onde o líquido é expelido.

A taxa de escoamento, então, é dada pela diferença de pressão entre a entrada e saída do filtro, variando de maneira inversamente proporcional à viscosidade do fluido injetado nesse meio e ao tamanho do meio, e proporcionalmente à constante de permeabilidade desse meio e ao tamanho da seção de área. A Lei de Darcy pode ser escrita da seguinte maneira:

$$Q = -\frac{KA(P_b - P_a)}{\mu L}, \quad (2.16)$$

onde Q é a vazão do fluido (m^3/s), K é a permeabilidade absoluta do meio, μ é a viscosidade do fluido (Pa.s), A a seção de área (m^2) e $P_b - P_a$ (Pa) é a diferença de pressão em uma distância dada por L (m). O sinal de Q é negativo devido à direção de escoamento da maior para a menor pressão. Temos então:

$$K = -\frac{Q\mu}{A} \frac{L}{(P_b - P_a)} = \frac{[m^3s^{-1}][Pa.s] [m]}{[m^2] [Pa]} = [m^2]. \quad (2.17)$$

A Eq. 2.17 mostra que a unidade da permeabilidade é m^2 , no entanto, na prática se utiliza o *Darcy*, onde 1 *Darcy* equivale a $9.869233 \times 10^{-13} m^2$. Na maioria dos reservatórios de petróleo, no entanto a permeabilidade é bem menor do que 1 *Darcy*. Portanto uma unidade mais comum é o *milidarcy* (mD) que é amplamente utilizada na indústria de óleo e gás. No Sistema Internacional (SI), pode-se usar o micrômetro quadrado (μm)²

ao invés de m^2 , onde $1\text{mD} = 0.986923(\mu\text{m})^2$. Os valores mais comuns para as rochas em reservatórios de petróleo estão na faixa de 0.1 a 1000 milidarcies.

Pode-se fazer uma pequena modificação na Eq. 2.16, dividindo ambos os lados pela área A para que a variável calculada seja a velocidade, ao invés da vazão:

$$\frac{Q}{A} = v = -\frac{K}{\mu} \frac{(P_b - P_a)}{L}, \quad (2.18)$$

onde $\frac{Q}{A}$ é a chamada velocidade de Darcy.

Outra maneira de se utilizar a lei de Darcy é em sua forma diferencial em três dimensões, como apresentado na Eq. 2.19:

$$v = -\frac{K}{\mu} (\nabla p - \rho g \nabla z), \quad (2.19)$$

onde v é a velocidade de fluxo do fluido no meio, K é a permeabilidade absoluta do meio, μ a viscosidade do fluido, ∇p é o vetor gradiente da pressão e o restante trata da ação gravitacional sobre o fluido: ρ é sua densidade, g representa constante gravitacional e ∇z vale $(0, 0, 1)$.

2.4 Escoamento Bifásico

Antes de generalizar a Lei de Darcy e a Conservação de Massa para múltiplas fases, é importante detalhar melhor algumas propriedades que são específicas de cada fase e podem estar presente em um meio poroso.

2.4.1 Pressão Capilar

Com a diferenciação entre fases, se duas delas entram em contato e não se misturam, cada uma exerce uma pressão sobre a outra. Para escoamentos bifásicos é necessário considerar a pressão das fases separadamente na Eq. 2.19. A pressão capilar é justamente a diferença entre essas pressões, devido à curvatura e tensão que ocorre no contato das interfaces das fases. Considerando as fases água e óleo, a Eq. 2.20 mostra como é representada a pressão capilar:

$$p_c = p_o - p_a, \quad (2.20)$$

onde p_c é a pressão capilar; p_o é a pressão do óleo e p_a a pressão da água.

Quando o meio está inicialmente saturado com o fluido molhante (água) e é injetado outro fluido não molhante (óleo), esse processo é conhecido como drenagem. Ao ocorrer o contrário, com um fluido molhante deslocando um fluido não molhante ocorre a embebição. A Fig. 2.7 exemplifica as curvas da pressão capilar para cada um desses casos [3].

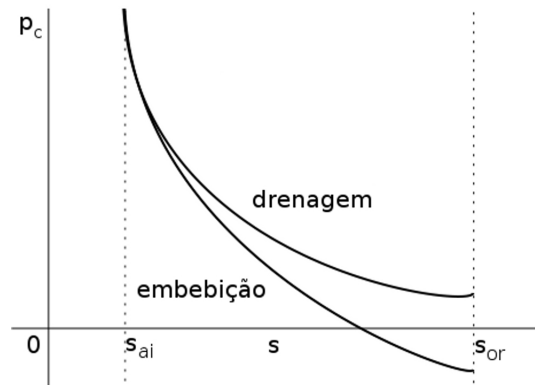


Figura 2.7: Curvas de pressão capilar para embebição e drenagem.

2.4.2 Permeabilidade Relativa

Para que se entenda o que é a permeabilidade relativa, é preciso detalhar a permeabilidade absoluta de um meio. A permeabilidade absoluta representa a capacidade do fluido escoar no meio poroso quando apenas esse fluido satura 100% o meio. A permeabilidade absoluta dita a conectividade e o fluxo do fluido no reservatório, variando com a posição, características do próprio fluido e características do solo (tamanho, arranjo e forma dos grãos).

A presença de dois fluidos no mesmo ambiente causa uma mútua interferência no escoamento de ambos, portanto é necessário introduzir outro conceito do escoamento bifásico chamado permeabilidade relativa. A permeabilidade relativa considera essa interação entre os fluidos, conseqüentemente varia de acordo com a saturação atual do meio. A permeabilidade relativa é portanto, a razão entre a permeabilidade absoluta de um fluido que não preenche o meio inteiramente e a permeabilidade com saturação total.

A Eq. 2.21 mostra de maneira geral a relação entre a permeabilidade relativa e a

permeabilidade absoluta de um meio:

$$k_{r\alpha} = \frac{K_\alpha}{K}, \quad \alpha = a, o, \quad (2.21)$$

onde $k_{r\alpha}$ é a função permeabilidade relativa para a fase α ; K_α é a permeabilidade absoluta do meio para fase α ; α representa a fase água (a) ou óleo (o).

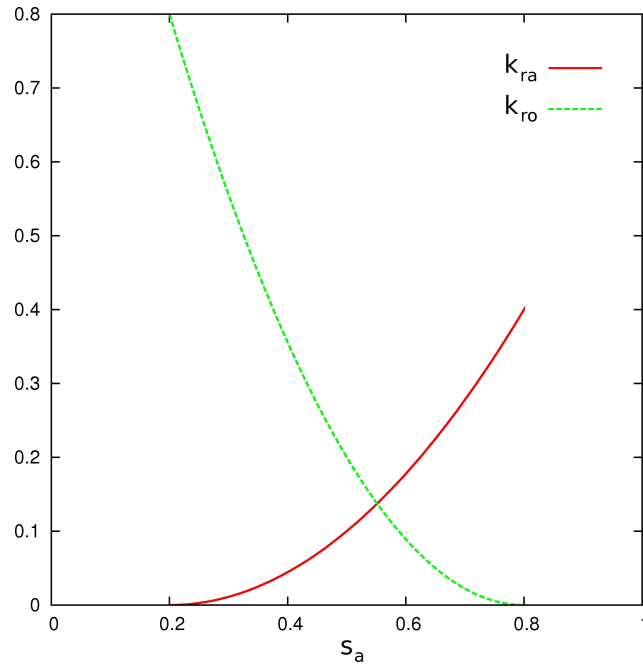


Figura 2.8: Curvas de permeabilidade relativa.

As funções de permeabilidade relativa $k_{r\alpha}$ controlam o comportamento das fases na presença de outro fluido ou gases, quando ambos ocupam uma fração do meio poroso. Essas funções são determinantes na maneira como os fluidos escoam. São fornecidas ao modelo e podem ser lineares ou não-lineares.

As curvas de Corey são funções de permeabilidade relativa muito utilizadas para água e óleo. Essas curvas podem ser dadas, por exemplo, pela Eq. 2.22:

$$\begin{aligned} k_{ra} &= 0.4 \left(\frac{s - s_{ai}}{1 - s_{or} - s_{ai}} \right)^2, \\ k_{ro} &= 0.8 \left(\frac{1 - s_{or} - s}{1 - s_{or} - s_{ai}} \right)^2, \end{aligned} \quad (2.22)$$

onde s é a saturação da água; s_{ai} e s_{or} são constantes: a saturação irreduzível da água e a saturação residual do óleo, respectivamente.

Para valores definidos em $s_{ai} = 0.2$ e $s_{or} = 0.2$ na Eq. 2.22, pode-se visualizar as

curvas de permeabilidade relativa através da Fig. 2.8. Na posição $x = 0.2$ tem-se a chamada saturação irreduzível da água (s_{ai}). Como foi atribuído a ela o valor de 0.2, essa é a menor quantidade que a saturação da água alcançará no reservatório e o maior valor é de 0.8, já que a saturação residual do óleo (s_{ro}) vale 0.2.

2.4.3 Simplificações

Nessa subseção serão apresentadas as simplificações aplicadas nas propriedades apresentadas anteriormente. Como serão estudados meios rígidos, o termo fase designará sempre uma das fases fluidas: água ou óleo.

A primeira simplificação apresentada trata da incompressibilidade dos fluidos, significando que a massa específica é constante no tempo, independentemente da pressão aplicada, o que equivale a:

$$\frac{\partial V}{\partial p} = 0, \quad \frac{\partial \rho}{\partial p} = 0. \quad (2.23)$$

Também considera-se uma pressão capilar nula, ou seja, não há diferença de pressão entre os fluidos, logo:

$$p = p_a = p_o. \quad (2.24)$$

Esse trabalho também desconsidera efeitos gravitacionais e reduz o modelo para duas dimensões espaciais. A Eq. 2.25 apresenta a Lei de Darcy (2.19), um fluxo bifásico e pressão capilar nula:

$$v_\alpha = -\frac{K_\alpha}{\mu_\alpha} \nabla p. \quad (2.25)$$

onde v_α é a velocidade da fase α ; o produto entre a permeabilidade absoluta e relativa do meio para a fase α é dada por K_α e a viscosidade de α é μ_α .

A extensão da lei da Conservação de Massa (Eq. 2.15) para duas fase também é feita de maneira trivial, basta que se aplique a lei da conservação separadamente para cada

fluido. Apresenta-se na Eq. 2.26 esse sistema com fluidos incompressíveis (Eq. 2.23):

$$\begin{cases} \rho_a \frac{\partial \phi s_a}{\partial t} + \nabla \cdot (v_a \rho_a) = \rho_a q_a, \\ \rho_o \frac{\partial \phi s_o}{\partial t} + \nabla \cdot (v_o \rho_o) = \rho_o q_o. \end{cases} \quad (2.26)$$

lembrando que ρ é a densidade, ϕ a porosidade, s a saturação, v a velocidade e q a vazão nos poços.

A porosidade ϕ na Eq. 2.26 pode variar com a pressão. Nesse trabalho, vamos considerar que ela é constante:

$$\begin{cases} \phi \rho_a \partial_t s_a + \nabla \cdot (v_a \rho_a) = \rho_a q_a, \\ \phi \rho_o \partial_t s_o + \nabla \cdot (v_o \rho_o) = \rho_o q_o. \end{cases} \quad (2.27)$$

Como considerou-se uma densidade constante dos fluidos e a pressão capilar nula, pode-se dividir a primeira linha da Eq. 2.27 por ρ_a e a segunda por ρ_o .

$$\begin{cases} \phi \partial_t s_a + \nabla \cdot v_a = q_a, \\ \phi \partial_t s_o + \nabla \cdot v_o = q_o. \end{cases} \quad (2.28)$$

Lembrando que $s_a + s_o = 1$, pode-se somar as equações do sistema, de forma a obter a velocidade total do sistema:

$$\nabla \cdot v_t = q_t, \quad (2.29)$$

onde v_t é a velocidade total ($v_t = v_a + v_o$) e q_t é a vazão total ($q_t = q_a + q_o$).

Pode-se agora formar um sistema com a Eq. 2.29 e a primeira equação de Eq. 2.28:

$$\begin{cases} \nabla \cdot v_t = q_t, \\ \phi \partial_t s_a + \nabla \cdot v_a = q_a, \end{cases} \quad (2.30)$$

Tratando por s a saturação da água e omitindo subscritos, apresenta-se o fluxo fracionário:

$$f(s) = \frac{\frac{K_a}{\mu_a}}{\frac{K_a}{\mu_a} + \frac{K_o}{\mu_o}}. \quad (2.31)$$

Lembrando da Eq. 2.25 tem-se a relação:

$$v_t = - \left(\frac{K_a}{\mu_a} + \frac{K_o}{\mu_o} \right) \nabla p \Rightarrow v_a = -f(s)v_t. \quad (2.32)$$

Da qual é possível chegar no sistema final da Eq. 2.33:

$$\begin{cases} \nabla \cdot v_t = q_t, \\ \phi \partial_t s + \nabla \cdot (f(s)v_t) = q_a. \end{cases} \quad (2.33)$$

Na Eq. 2.33 tem-se um sistema com duas equações diferenciais, sendo a primeira uma equação elíptica e a segunda uma equação hiperbólica. O sistema tem duas variáveis: a pressão p e a saturação s . A função fluxo fracionário $f(s)$ é dada pela Eq. 2.31, que depende da variável saturação e é calculada através das funções de permeabilidade relativa.

A vazão total q_t é prescrita para todos os instantes de tempo, ou seja, determina-se quanto de água será injetado e quanto de água e óleo será extraído dos poços por segundo. Nos poços injetores ocorre apenas a inserção de água no sistema ($q_t = q_a$) enquanto nos poços produtores se conhece a vazão total, mas não se sabe a porcentagem de água ou óleo extraídos ($q_t = q_a + q_o$). Portanto, mais uma equação é necessária para relacionar a vazão de cada um dos fluidos:

$$q_a = f(s)q_t. \quad (2.34)$$

Com a Eq. 2.34 é possível determinar a vazão de água (q_a) extraída no poço produtor e por consequência também a vazão de óleo (q_o).

Ainda serão definidas as condições de contorno e iniciais do problema. Por enquanto, apresenta-se um resumo de todas as simplificações aplicadas à modelagem do escoamento bifásico na Tab. 2.1:

2.4.4 *Condições iniciais e de contorno*

Assume-se um reservatório isolado em um domínio bidimensional retangular Ω . Nas regiões de fronteira o vetor normal da velocidade é nulo. Utiliza-se, portanto, condições do tipo Neumann:

$$v_{\alpha} \cdot \nu = 0, x \in \partial\Omega, \quad (2.35)$$

Tabela 2.1: Resumo das simplificações.

Simplificação	Fórmula	Equação
Fluidos incompressíveis	$\frac{\partial V}{\partial p} = 0, \frac{\partial \rho}{\partial p} = 0$	2.23
Pressão capilar nula	$p = p_a = p_o$	2.24
Efeitos gravitacionais nulos	$\rho g \nabla z = 0$	—
Problema bidimensional	$\frac{\partial v}{\partial z} = 0$	—
Porosidade invariável no tempo	$\frac{\partial \phi}{\partial t} = 0$	—

onde ν é o vetor normal à fronteira $\partial\Omega$ do domínio Ω .

A condição inicial do problema é especificada pela Eq. 2.36:

$$s(x, 0) = s_0(x), x \in \Omega. \quad (2.36)$$

Conclui-se então, com um sistema fechado como mostra a Eq. 2.37 com variáveis (s, p) :

$$\left\{ \begin{array}{l} \nabla \cdot v_t = q_t, \\ \phi \partial_t s + \nabla \cdot (f(s)v_t) = q_a, \\ v_\alpha \cdot \nu = 0, x \in \partial\Omega, \\ s(x, 0) = s_0(x), x \in \Omega. \end{array} \right. \quad (2.37)$$

3 DISCRETIZAÇÃO NUMÉRICA NO TEMPO

Neste capítulo serão apresentados algoritmos para a discretização temporal do sistema (Eq. 2.37). Nos métodos totalmente implícitos, as equações do sistema são resolvidas simultaneamente, enquanto o esquema conhecido como IMPES desacopla as equações, de forma a resolvê-las isoladamente.

3.1 O Esquema IMPES

O sistema de equações (Eq. 2.37) é acoplado e não-linear. Nesse trabalho emprega-se a técnica conhecida como *Improved IMPES Method* (ou IMPES melhorado) para quebrar o sistema em duas equações separadas que podem ser resolvidas em sequência. O Método IMPES (*Implicit Pressure - Explicit Saturation*) obtém a solução para a equação elíptica (pressão) e, então, a solução para a equação hiperbólica (saturação).

O Esquema IMPES clássico foi desenvolvido em [14, 15] com o objetivo de separar as equações do sistema em duas equações distintas, onde a entrada de uma é o resultado da outra. Além disso, essas equações seriam resolvidas utilizando aproximações implícitas para a equação da pressão e explícitas para a solução da saturação. A equação explícita, no entanto, limita o tamanho dos intervalos de tempo no qual esse método pode evoluir, devido às condições de estabilidade. Inicialmente, a Eq. 2.33 é desacoplada em duas equações, uma referente à pressão e outra referente à saturação. Com as equações desacopladas é possível dividir o tempo em intervalos de tamanho t , sendo limitado por $[0, T)$, com $T > 0$. Tem-se então partições do tempo como $0 = t^0 < t^1 < t^2 < \dots < t^N = T$. O método IMPES clássico evolui a equação da pressão obedecendo a esses intervalos, partindo de uma saturação inicial fornecida e em seguida usa-se a pressão obtida por essa equação como entrada para a solução da equação da saturação que evolui até o mesmo instante de tempo da equação elíptica. Para intervalos de tempo $t = n\Delta t$ tem-se uma

solução para a equação elíptica:

$$\nabla \cdot \left(- \left(\frac{K_a(s^n)}{\mu_a} + \frac{K_o(s^n)}{\mu_o} \right) \nabla p^{n+1} \right) = q_t^n, \quad (3.1)$$

lembrando que K_a e K_o são funções da saturação e portanto dependem da saturação no tempo n . Para facilitar a visualização, pode-se chamar a parcela da Eq. 3.1 que depende da saturação de transmissibilidade total, ou $T(s^n)$, ou seja:

$$T(s^n) = \left(\frac{K_a(s^n)}{\mu_a} + \frac{K_o(s^n)}{\mu_o} \right). \quad (3.2)$$

Reescreve-se a equação da pressão (Eq. 3.1) como:

$$\nabla \cdot (-T(s^n) \nabla p^{n+1}) = q_t^n, \quad (3.3)$$

A equação que representa a saturação precisa ser discretizada no tempo. Uma maneira de se fazer isso é através de um esquema explícito de diferenças finitas. Os métodos de solução utilizados nesse trabalho serão apresentadas na Subseção 3.1.1. Discretizando a equação hiperbólica (Eq. 2.37) no tempo:

$$\phi \frac{s^{n+1} - s^n}{t^{n+1} - t^n} \approx \phi \frac{\partial s}{\partial t} \approx -\nabla \cdot (f(s^n) T(s^n) \nabla p^{n+1}) + q_a^n. \quad (3.4)$$

Então:

$$s^{n+1} = s^n + \frac{\Delta t^{n+1}}{\phi} (-\nabla \cdot (f(s^n) T(s^n) \nabla p^{n+1}) + q_a^n). \quad (3.5)$$

O Algoritmo 1 esquematiza a resolução do método.

```

1:  $s^0 \leftarrow s(x, 0)$ 
2: for  $n = 1, 2, \dots, N$  do
3:   Use  $s^{n-1}$  para resolver a Eq. 3.3 e obter  $p^n$ .
4:   Com  $p^n$ , calcule a velocidade na Eq. 2.32.
5:   Obter  $s^n$  na Eq. 3.5 a partir de  $s^{n-1}$ ,  $p^n$  e  $v^n$ .
6: end for

```

Algoritmo 1: IMPES Clássico

O método IMPES clássico, no entanto, é extremamente restritivo devido à limitação no passo de tempo que a resolução explícita exige, para que seja mantida sua estabilidade. Como a resolução da equação da pressão (Eq. 3.3) não demanda essas limitações, foi

observado em [5] que é possível considerar intervalos de tempos maiores, enquanto a solução da saturação evolui obedecendo às limitações da condição de estabilidade. Essa é a base do método IMPES melhorado, que será descrito com maiores detalhes na sequência.

No método IMPES melhorado, a pressão é calculada em cada passo de tempo $t^n = \Delta t_p, 2\Delta t_p, \dots, N\Delta t_p$. A saturação é calculada a partir do tempo t^n da pressão até o próximo instante t^{n+1} quando a pressão será reavaliada. O passo de tempo da saturação Δt_s é, então, uma fração do tempo da pressão e reavaliado a cada interação $t^{n,0} = n\Delta t_p, t^{n,1} = n\Delta t_p + \Delta t_s, t^{n,2} = n\Delta t_p + 2\Delta t_s, \dots, t^{n,L} = (n+1)\Delta t_p$. Novamente, utilizamos um método de discretização explícito baseado em diferenças finitas para exemplificar. Temos então a Eq. 3.6:

$$s^{n,l+1} = s^{n,l} - (\nabla \cdot (f(s^{n,l})v^n) + q_a^{n,l}) \frac{\Delta t^{n,l+1}}{\phi}. \quad (3.6)$$

A grande diferença entre o método IMPES melhorado e o método IMPES clássico é a utilização de diferentes intervalos de tempo para a pressão e a saturação. A pressão evolui e, em passos de tempos fracionados, a saturação chega ao mesmo tempo da pressão. Novamente um algoritmo é apresentado para a melhor compreensão do método.

```

1:  $s^0 \leftarrow s(x, 0)$ 
2: for  $n = 1, 2 \dots N$  do
3:   Use  $s^{n-1}$  para resolver a Eq. 3.3 e obter  $p^n$ .
4:   Com  $p^n$ , calcule a velocidade em Eq. 2.32.
5:   for  $l = 1, 2, 3 \dots L$  do
6:     Obter  $s^{n-1,l}$  na Eq. 3.6 a partir de  $s^{n-1,l-1}$ ,  $p^n$  e  $v^n$ .
7:   end for
8:    $s^n = s^{n,L}$ .
9: end for

```

Algoritmo 2: IMPES melhorado

Ainda é preciso especificar as condições de CFL (Courant-Friedrichs-Lewy) às quais o método IMPES fica restrito. Na Seção 3.1.1 são relacionados os métodos numéricos utilizados para avançar a solução no tempo.

O método IMPES foi apresentado utilizando-se o método de Euler Explícito para obter a solução da equação hiperbólica. Outros métodos, no entanto, podem ser utilizados, inclusive métodos implícitos. Com as equações desacopladas, ao utilizar o método BDF (*Backwards Differentiation Formulas*) para resolver a equação hiperbólica, por exemplo, temos uma discretização implícita para a pressão e uma discretização implícita para a

saturação. Chamaremos esse esquema de IMPIS (*Implicit Pressure - Implicit Saturation*).

Os passos de tempo da pressão não são delimitados por uma restrição, como no caso da saturação. Portanto, pode-se apenas dividir o tempo total de simulação em intervalos de tempos de tamanho igual, ou utilizar alguma técnica para encontrar o melhor tamanho possível. Em nosso trabalho, para calcular o tamanho do intervalo de tempo da pressão utilizamos a variação percentual da mesma no tempo:

$$VP^n = \frac{\|p^{n+1} - p^n\|_\infty}{\|p^n\|_\infty}, \quad (3.7)$$

se VP^n for maior que VP_{\max} , uma variação máxima estabelecida, diminuimos o passo de tempo da pressão na próxima iteração, fazendo $(\Delta t)_{n+1} = \alpha(\Delta t)_n$, onde $\alpha < 1$ é dado. Caso VP^n seja menor que uma variação mínima, podemos aumentar o intervalo de tempo fazendo $(\Delta t)_{n+1} = \beta(\Delta t)_n$, onde $\beta > 1$.

3.1.1 Métodos Numéricos para Solução de Equações Diferenciais Ordinárias (EDOs)

Esse trabalho compara dois diferentes *solvers* (Euler Explícito e *Backwards Differentiation Formulas*) para integrar a forma discreta das equações diferenciais no tempo (Eq. 3.4) dos métodos IMPES melhorado e IMPIS. Essa seção irá descrever de maneira sucinta esses métodos de resolução de EDOs. A solução no espaço será apresentada utilizando os métodos do KT e Upwind (Eq. 4.14 e Eq. 4.74) no Cap. 4.

Estamos buscando soluções para EDOs associadas ao problema hiperbólico da Eq. 3.6. Temos então problemas de valor inicial (PVI) como na Eq. 3.8.

$$\dot{y} = f(t, y), y(t_0) = y_0, \quad (3.8)$$

onde \dot{y} representa dy/dt .

3.1.1.1 Euler Explícito

O método de Euler Explícito consiste em aproximar \dot{y} usando os dois primeiros termos da Expansão de Taylor nas equação acima (3.8), resultando na fórmula geral do Método

de Euler Explícito:

$$y^{n+1} = y^n + h_n f(t, y), \quad (3.9)$$

onde $h_n = t_{n+1} - t_n$.

Considerando o tempo de simulação T , temos o intervalo de tempo (n, l) onde $0 < t^0 < t^1 < \dots < t^N = T$ com subintervalos $J^n = (t^{n-1}, t^n]$ de tamanho $\Delta t_p^n = t^n - t^{n-1}$ que é utilizada para a pressão e um intervalo $J^{n,l} = (t^{n-1,l-1}, t^{n-1,l}]$ onde $\Delta t_s^{n,l} = t^{n-1,l} - t^{n-1,l-1}$, $l = 1, \dots, L^n$ e $t^{n-1,l} = t^{n,0}$. Temos portanto um passo de tempo para a pressão (Δt_n) e outro para a saturação $(\Delta t_{n,l})$.

Neste trabalho, o método de Euler Explícito emprega passos de tempos adaptativos para manter a estabilidade, recalculando o tamanho do passo em toda iteração. O passo de tempo deve obedecer às restrições impostas pelas condições de CFL e a soma dos passos de tempo da saturação devem resultar em um passo de tempo da pressão: $(\Delta t)_{n,1} + (\Delta t)_{n,2} + (\Delta t)_{n,3} + \dots + (\Delta t)_{n,L} = (\Delta t)_n$. Para que o problema respeite as condições de CFL, é necessário termos então:

$$\begin{aligned} \max f'(s_m) \sum_m \frac{(\Delta t)_{n,l}}{\phi \Delta m} |v_m^n| &\leq \rho_1, \\ s_{i,j}^{n,l} + \rho_2 \frac{(\Delta t)_{n,l}}{\phi} (q_a^{n,l} (1 - f(s_{i,j}^{n,l}))) &< 1 - s_{or}, \end{aligned} \quad (3.10)$$

onde m indica as interfaces com fluxo entrante, Δ_m podendo ser Δ_x ou Δ_y ; s_m se encontra entre o menor e o maior valor de s no bloco e seus vizinhos no instante (n, l) , $0 < \rho_1 < 1$ é um parâmetro a ser escolhido, assim como $\rho_2 > 1$; $s_{o,res}$ é a saturação residual do óleo.

Para garantir que a resolução pelo método de Euler Explícito respeite as condições de CFL, temos que garantir que essas desigualdades sejam respeitadas. Temos então a primeira linha de Eq. 3.10 para blocos sem poços ou poços produtores e a segunda linha para blocos com poços injetores. Para maiores detalhes da dedução dessa fórmulas, ver o Apêndice A e [7, 6].

Através da Eq. 3.10 e do Apêndice A, é possível notar que simulações em reservatórios com menor porosidade ϕ e maior diferença entre a viscosidade da água e do óleo (μ_a e μ_o , respectivamente) limitam ainda mais o tamanho do Δt que pode ser utilizado pela saturação. Nesses casos é necessário ajustar o valor das constantes ρ_1 e ρ_2 para que o problema possa ser resolvido. Os experimentos que serão descritos no Capítulo 5 exploram justamente essas diferenças.

3.1.1.2 Backwards Differentiation Formulas (BDF)

O método *Backwards Differentiation Formulas* foi empregado nesse trabalho através da biblioteca Sundials CVODE. Os métodos do CVODE são de ordem variável, multi-passos variáveis e baseados em equações da forma (veja [16]):

$$\sum_{i=0}^{K_1} \alpha_{n,i} y^{n-i} + h_n \sum_{i=0}^{K_2} \beta_{n,i} \dot{y}^{n-i} = 0. \quad (3.11)$$

onde y^n são aproximações de $y(t_n)$ e $h_n = t_n - t_{n-1}$. O método BDF tem $K_1 = q$ e $K_2 = 0$ onde q está entre 1 e 5. O sistema não-linear da Eq. 3.12 deve ser resolvido:

$$G(y^n) \equiv y^n - h_n \beta_{n,0} f(t_n, y^n) - a_n = 0, \quad (3.12)$$

onde $a_n \equiv \sum_{i>0} (\alpha_{n,i} y^{n-1} + h_n \beta_{n,i} \dot{y}^{n-i})$, deve ser calculado a cada passo de tempo. Para encontrar a solução desse sistema não-linear, o CVODE utiliza o método de Newton, dado pela Eq. 3.13:

$$\begin{aligned} M[y^{n(m+1)} - y^{n(m)}] &= -G(y^{n(m)}), \\ M &\approx I - \gamma J, \quad J = \partial f / \partial y, \quad \text{and } \gamma = h_n \beta_{n,0}. \end{aligned} \quad (3.13)$$

O CVODE oferece duas maneiras de resolver o sistema não-linear: métodos diretos ou métodos iterativos como o GMRES, o Bi-Gradiente Conjugado ou o método *Transpose-Free Quasi-Minimal Residual* (TFQMR). Nesse trabalho, o método que apresentou melhores resultados foi o GMRES (*Generalized Minimal Residual method*), portanto vamos considerar apenas os resultados gerados por ele.

O controle do tamanho do passo de tempo de cada iteração nos métodos resolvidos pelo CVODE são calculados internamente pela biblioteca, portanto não é necessário manter nenhum controle a respeito das condições de CFL.

Os passos de tempo do CVODE são baseados em estimativas *a priori* do erro. Esse erro deve ser menor que condições de tolerância fornecidas à biblioteca através de parâmetros. Sempre que os erros ultrapassam o limite pré-estabelecido, o passo de tempo é recalculado e o passo é refeito. São feitas até três tentativas de reduzir o passo de tempo. Caso não seja suficiente, a ordem do método é diminuída. Após sete tentativas, o CVODE retorna um erro com uma mensagem de desistência para o usuário.

Em conjunto com a prática de ajustar o tamanho do passo de tempo para alcançar

o limite de erro, o CVODE ajusta a ordem do método periodicamente com o objetivo de maximizar o tamanho do passo de tempo. O método começa na ordem um e varia dinamicamente na sequência. O objetivo é escolher uma ordem para qual um polinômio de mesma ordem se adapte à solução discreta envolvida no método. Maiores detalhes sobre o cálculo do passo de tempo e ordem dos métodos utilizados pelo CVODE podem ser obtidos em [16].

3.2 Totalmente Implícito

Nas seções anteriores do Capítulo 3, foi apresentada uma forma de resolver o sistema da Eq. 2.37, que desacopla as duas equações, uma para a pressão e outra para a saturação. Nessa seção, o problema será tratado de maneira acoplada utilizando um sistema não-linear para resolver as Eqs. 2.37 através de um método implícito.

Para resolver o sistema da Eq. 2.37 de maneira implícita, é necessário resolver a equação:

$$\phi \delta_t s_\alpha^{n+1} + \nabla \cdot (f(s) v_\alpha^{n+1}) - q_\alpha^{n+1} = 0, \quad (3.14)$$

Assim como foi feito no caso anterior, vamos utilizar um operador de diferenças finitas discreto para a evolução no tempo do método. Tem-se então:

$$(\delta_s h)^{n+1} = \frac{s_\alpha^{n+1} - s_\alpha^n}{\Delta t}. \quad (3.15)$$

Ao contrário do método explícito utilizado pelo esquema IMPES, onde se utiliza os valores do tempo t^n para se encontrar valores do tempo t^{n+1} , no método totalmente implícito resolve-se o sistema não-linear F a cada instante de tempo $n\Delta t$:

$$F(p^{n+1}, s^{n+1}) = \phi \frac{(s_\alpha)^{n+1} - (s_\alpha)^n}{\Delta t} + \nabla \cdot (f(s) v_\alpha^{n+1}) - (q_\alpha)^{n+1}. \quad (3.16)$$

Como esse esquema resolve a pressão e saturação simultaneamente, em nosso trabalho utilizamos intervalos de tempo constantes para todas as iterações, onde o intervalo de tempo é o tempo total de simulação sobre 1001 iterações. Em todos os outros métodos, utilizamos intervalos de tempo variáveis para a pressão, como mostrado na Fig. 3.7.

Como se sabe, o método de Newton exige a resolução de sistemas lineares envolvendo o Jacobiano $F'(p, s)$. Para mostrar como calcular a matriz Jacobiana, vamos discutir no

próximo capítulo a discretização espacial do método. Veremos também que é possível resolver o método IMPES com diferentes técnicas de discretizações espaciais.

4 DISCRETIZAÇÃO NUMÉRICA NO ESPAÇO

O método de discretização das equações diferenciais utilizado nesse trabalho é chamado de diferenças finitas bloco-centradas. O esquema de diferenças finitas se baseia em substituir as equações do modelo por aproximações numéricas que podem ser resolvidas por um computador.

A fim de discretizar um sistema bidimensional, deve-se dividir o domínio de trabalho em duas coordenadas (x, y) . O volume de trabalho tem unidades chamadas blocos que são divididos por suas interfaces de contato. A posição desses blocos é identificada na malha pela suas variáveis i e j nas coordenadas x e y , e suas interfaces à direita e acima são identificadas por $i + \frac{1}{2}$ e $j + \frac{1}{2}$, respectivamente.

Considerando, então, um reservatório retangular no domínio Ω de dimensões L_x e L_y pode-se dividi-lo em N_x partes na coordenada x e N_y na coordenada y . Cada bloco terá dimensões $\Delta x \times \Delta y$ sendo $\Delta x = \frac{L_x}{N_x}$ e $\Delta y = \frac{L_y}{N_y}$. A Fig. 4.1 ilustra como fica a malha no espaço.

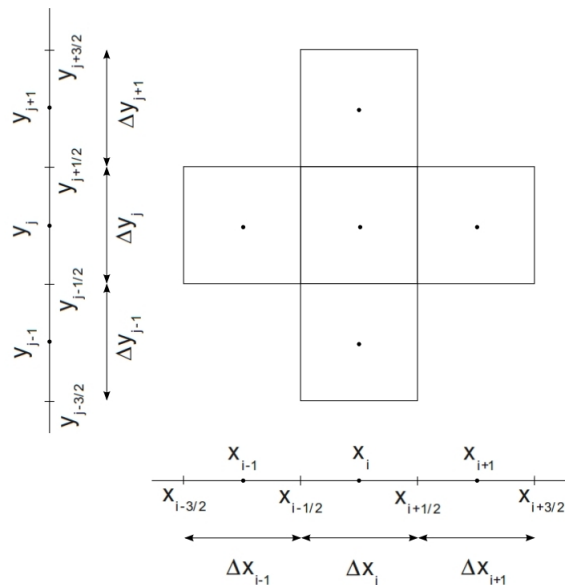


Figura 4.1: Discretização espacial

A partir dessa divisão, parte-se para a formulação das equações de diferenças finitas, onde a solução é aproximada para valores finitos $x_1, x_2, x_3, \dots, x_n$ no intervalo $[0, L_x]$ e

de maneira análoga para $y_1, y_2, y_3, \dots, y_n$ no intervalo $[0, L_y]$. Assim, as soluções obtidas para esses pontos irão aproximar a solução do problema diferencial original nesses mesmos pontos.

Serão apresentados os similares discretos dos operadores diferenciais. No sistema da Eq. 2.33, existem dois tipos de operadores: o gradiente e o divergente. Os operadores de gradiente e divergente para duas dimensões no espaço são, respectivamente:

$$\begin{aligned}\nabla f &= \left(\frac{\partial f}{\partial x}, \frac{\partial f}{\partial y} \right), \\ \nabla \cdot f &= \left(\frac{\partial f}{\partial x} + \frac{\partial f}{\partial y} \right).\end{aligned}\tag{4.1}$$

Os operadores diferenciais da Eq. 4.1 serão substituídos por operadores discretos, aproximando seus valores através das séries de Taylor. Tomando uma função f , o divergente é representado no centro do bloco na Eq. 4.2 em sua forma discreta, utilizando os valores nas interfaces dos blocos $(i - 1/2, j)$, $(i + 1/2, j)$, $(i, j - 1/2)$ e $(i, j + 1/2)$:

$$\nabla \cdot f_{i,j} = \frac{f_{i+1/2,j} - f_{i-1/2,j}}{\Delta x} + \frac{f_{i,j+1/2} - f_{i,j-1/2}}{\Delta y}.\tag{4.2}$$

Já o gradiente discreto na interface do bloco é dado pela Eq. 4.2 e utiliza os valores do centro dos blocos:

$$\begin{aligned}\nabla f_{i+1/2,j} &= \frac{f_{i+1,j} - f_{i,j}}{\Delta x}, \\ \nabla f_{i,j+1/2} &= \frac{f_{i,j+1} - f_{i,j}}{\Delta y}.\end{aligned}\tag{4.3}$$

4.1 Equação da Pressão

Recordando, a equação que deve ser resolvida para se obter a pressão é dada por:

$$\nabla \cdot (T(s^n) \nabla p^{n+1}) = q_t^n.\tag{4.4}$$

No método IMPES, a equação da pressão deve ser resolvida através de um sistema linear do tipo $Ax = b$, onde A é a matriz dos coeficientes, x é o vetor resultante desse sistema com as pressões de todos os pontos da malha e b representa as vazões totais q_t dos poços.

É importante notar que A é uma matriz singular, devido à condição de Neumann na

fronteira. Para equacionar esse problema, basta que um valor qualquer da pressão seja prescrito, de modo a tornar a matriz não-singular.

A fim de resolver a equação Eq. 4.4, aplicam-se os operadores discretos, começando pelo divergente apresentado em Eq. 4.2, substituindo-o na equação diferencial e resultando na Eq. 4.5:

$$\begin{aligned} & \frac{T_{i+1/2,j} \nabla p_{i+1/2,j} - T_{i-1/2,j} \nabla p_{i-1/2,j}}{\Delta x} \\ & + \frac{T_{i,j+1/2} \nabla p_{i,j+1/2} - T_{i,j-1/2} \nabla p_{i,j-1/2}}{\Delta y} \end{aligned} \quad (4.5)$$

$$= q_t^n.$$

Multiplicando por $\Delta x \Delta y$, resulta em:

$$\begin{aligned} & \Delta y (T_{i+1/2,j} \nabla p_{i+1/2,j} - T_{i-1/2,j} \nabla p_{i-1/2,j}) \\ & + \Delta x (T_{i,j+1/2} \nabla p_{i,j+1/2} - T_{i,j-1/2} \nabla p_{i,j-1/2}) \end{aligned} \quad (4.6)$$

$$= \Delta x \Delta y q_t^n.$$

Novamente, faz-se a substituição, agora do gradiente, utilizando o operador apresentado na Eq. 4.3:

$$\begin{aligned} & \Delta y \left[T_{i+1/2,j} \frac{p_{i+1,j} - p_{i,j}}{\Delta x} - T_{i-1/2,j} \frac{p_{i,j} - p_{i-1,j}}{\Delta x} \right] \\ & + \Delta x \left[T_{i,j+1/2} \frac{p_{i,j+1} - p_{i,j}}{\Delta y} - T_{i,j-1/2} \frac{p_{i,j} - p_{i,j-1}}{\Delta y} \right] \end{aligned} \quad (4.7)$$

$$= \Delta x \Delta y q_t^n.$$

Colocando Δx e Δy para fora do colchete, obtemos a Eq. 4.8.

$$\begin{aligned} & \frac{\Delta y}{\Delta x} [T_{i+1/2,j} (p_{i+1,j} - p_{i,j}) - T_{i-1/2,j} (p_{i,j} - p_{i-1,j})] \\ & + \frac{\Delta x}{\Delta y} [T_{i,j+1/2} (p_{i,j+1} - p_{i,j}) - T_{i,j-1/2} (p_{i,j} - p_{i,j-1})] \end{aligned} \quad (4.8)$$

$$= \Delta x \Delta y q_t^n.$$

Para facilitar a visualização da equação, podemos utilizar o termo T^* para omitir os

termos $\frac{\Delta x}{\Delta y}$ e $\frac{\Delta y}{\Delta x}$, como mostra a Eq. 4.9:

$$\begin{aligned} T_{i+1/2,j}^* &= \frac{\Delta x}{\Delta y} T_{i+1/2,j}, T_{i-1/2,j}^* = \frac{\Delta x}{\Delta y} T_{i-1/2,j}, \\ T_{i,j+1/2}^* &= \frac{\Delta y}{\Delta x} T_{i,j+1/2}, T_{i,j-1/2}^* = \frac{\Delta y}{\Delta x} T_{i,j-1/2}. \end{aligned} \quad (4.9)$$

E, finalmente, chega-se à Eq. 4.10, onde as transmissibilidades T^* formam a matriz de coeficientes, $\Delta x \Delta y q_t^n$ é o vetor de resultados e a pressão p é a incógnita do sistema linear gerado.

$$\begin{aligned} T_{i+1/2,j}^* p_{i+1,j} + T_{i-1/2,j}^* p_{i-1,j} + T_{i,j+1/2}^* p_{i,j+1} + T_{i,j-1/2}^* p_{i,j-1} \\ - (T_{i+1/2,j}^* + T_{i-1/2,j}^* + T_{i,j+1/2}^* + T_{i,j-1/2}^*) p_{i,j} \\ = \Delta x \Delta y q_t^n. \end{aligned} \quad (4.10)$$

A Eq. 4.10 permite o cálculo da pressão no ponto (i, j) , sendo necessárias tantas equações quantos pontos existentes na malha. Como o sistema utiliza condições de fronteira de Neumann, nos pontos correspondentes à fronteira da malha desconsidera-se os valores da transmissibilidade.

Nota-se também que todos os pontos do sistema dependem de quatro pontos adjacentes, além do ponto atual que se deseja calcular. Essa dependência gera uma matriz A pentadiagonal. A Fig. 4.2 ilustra a matriz para uma malha de 4×4 posições. É importante recordar também que o sistema é resolvido a menos de uma constante, ou seja, um ponto da malha tem seu valor prescrito.

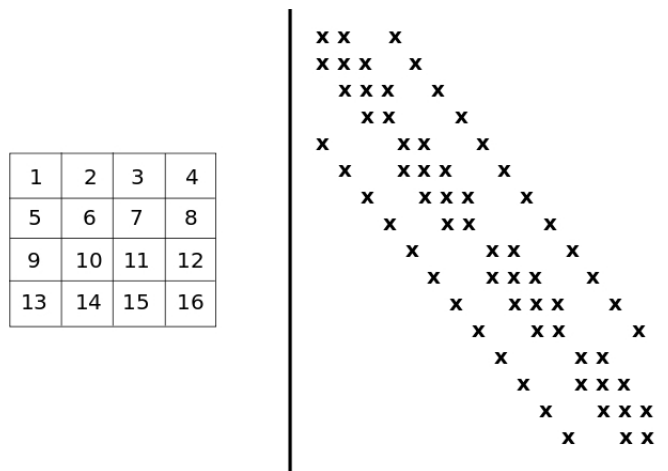


Figura 4.2: Matriz pentadiagonal.

Resolvida a Eq. 4.4, é possível calcular a velocidade total de propagação dos flui-

dos. Recordando a Lei de Darcy, tem-se $v = -T(s^n)\nabla p$. É necessário aplicar o operador gradiente discreto (Eq. 4.2) novamente e substituir a transmissibilidade $T(s^n)$ pelas transmissibilidades relativas da Eq. 2.21:

$$\begin{aligned} v_{i+1/2,j}^x &= -K \left(\frac{K_{ra}}{\mu_a} + \frac{K_{ro}}{\mu_o} \right) \left(\frac{p_{i+1,j} - p_{i,j}}{\Delta x} \right), \\ v_{i,j+1/2}^y &= -K \left(\frac{K_{ra}}{\mu_a} + \frac{K_{ro}}{\mu_o} \right) \left(\frac{p_{i,j+1} - p_{i,j}}{\Delta y} \right). \end{aligned} \quad (4.11)$$

Portanto, a velocidade é descrita nas interfaces dos blocos e é calculada separadamente para as direções dos eixos x e y .

Utilizando a solução da Equação da Pressão, avançamos a solução da Saturação no tempo. É possível escolher entre mais de uma forma de resolver a Equação da Saturação (segunda linha da Eq. 2.37): à maneira clássica, utilizando o esquema Upwind ou utilizando métodos mais recentemente desenvolvidos, como [17], [18], [19], [20], [9].

Nesse trabalho, serão considerados os métodos Upwind e Kurganov-Tadmor. O Esquema Upwind de Primeira Ordem é um método clássico apresentado em [8], que se baseia na direção de propagação do fluxo para obter as informações para sua aproximação. Já o método proposto por Kurganov-Tadmor [9] é um método central de segunda ordem semi-discreto. Outros métodos, como o *Warming-Beam Second-Order Accurate Upwind Scheme* ([17]) e o método de Lax-Wendroff ([18]), apesar de serem de segunda ordem, não conseguem representar bem as descontinuidades [21].

Os métodos Upwind e KT possuem características que os diferenciam na forma de calcular a transmissibilidade nas interfaces, como em $T_{i+1/2,j}$. O valor de $T_{i+1/2,j}$ depende da saturação na interface $i + 1/2, j$, o que é estritamente ligado ao método de discretização espacial. As seções que apresentam os métodos Upwind e KT foram, então, divididas em subseções que explicam como encontrar o valor da saturação interfacial.

4.2 Esquema Upwind

De acordo com a discretização espacial mostrada no início do Cap. 4, cada ponto da malha possui um valor de saturação. Para resolver a Equação da Velocidade (Eq. 4.11), no entanto, necessitamos de valores definidos nas interfaces dos pontos da malha. Através da direção de propagação do fluxo, o Esquema Upwind faz uso de um *stencil* adaptativo que é capaz de escolher a ponto adequado da malha para obter a saturação.

Considerando apenas a coordenada x , temos uma interface para um par de blocos, ou seja, precisamos de um critério de seleção para definir de qual dos dois blocos a saturação será utilizada. O Esquema Upwind define esse critério escolhendo a saturação dependendo da velocidade de propagação da interface. No trecho de código a seguir é exemplificado como esse processo é feito na interface $(i + \frac{1}{2}, j)$:

```

1: if  $p_{i+1,j} > p_{i,j}$  then
2:    $s_{i+1/2,j} \leftarrow s_{i+1,j}$ 
3: else
4:    $s_{i+1/2,j} \leftarrow s_{i,j}$ 
5: end if

```

Algoritmo 3: Esquema Upwind

Dessa forma garante-se a estabilidade do método se ele respeitar as condições de CFL. Esse valor da saturação interfacial é necessário no cálculo da Equação da Pressão e da Saturação.

4.2.1 Pressão

Na Equação da Pressão, o ponto de interface da saturação é necessário para o cálculo da transmissibilidade. Através da igualdade $K_\alpha = Kk_{r\alpha}$, sabemos que, para se calcular a transmissibilidade T em um ponto é necessário obter a permeabilidade absoluta K e a permeabilidade relativa $k_{r\alpha}$ nas interfaces. A permeabilidade absoluta é definida no centro de cada bloco. Para aproximar seus valores na interface, é usada uma média harmônica, como mostra a Eq. 4.12:

$$K_{i+\frac{1}{2},j} = \frac{2K_{i,j}K_{i+1,j}}{K_{i,j} + K_{i+1,j}}, \quad (4.12)$$

As permeabilidades relativas (k_{rw} and k_{ro}) dependem da saturação s , que é definida no centro do bloco. Utilizando o Algoritmo 3, podemos calcular s .

4.2.2 Saturação

Toma-se a Eq. 3.6 obtida pela discretização temporal e aplica-se a substituição do operador divergente discreto da Eq. 4.2 resultando na Equação:

$$\frac{s^{n,l+1} - s^{n,l}}{\Delta t^{n,l+1}} = \frac{1}{\phi} \left[- \left(\frac{f_{i+1/2,j}^{n,l} v_{i+1/2,j}^{n,l} - f_{i-1/2,j}^{n,l} v_{i-1/2,j}^{n,l}}{\Delta x} + \frac{f_{i,j+1/2}^{n,l} v_{i,j+1/2}^{n,l} - f_{i,j-1/2}^{n,l} v_{i,j-1/2}^{n,l}}{\Delta y} \right) + q_a^{n,l} \right]. \quad (4.13)$$

A saturação está variando no tempo e no espaço. Observando que na Eq. 4.13, o Δt pode passar a multiplicar os termos do lado direito, é possível que se aplique um artifício para obter uma discretização somente espacial. Basta aplicar o limite $\lim_{\Delta t^{n,l+1} \rightarrow 0}$. Obtém-se disso uma Equação Diferencial Ordinária (EDO) discreta, como mostra a Eq. 4.14:

$$\lim_{\Delta t^{n,l+1} \rightarrow 0} \frac{s_{i,j}^{n,l+1} - s_{i,j}^{n,l}}{\Delta t^{n,l+1}} = \frac{d}{dt} s_{i,j}^n = \frac{1}{\phi} \left[- \left(\frac{f_{i+1/2,j}^{n,l} v_{i+1/2,j}^{n,l} - f_{i-1/2,j}^{n,l} v_{i-1/2,j}^{n,l}}{\Delta x} + \frac{f_{i,j+1/2}^{n,l} v_{i,j+1/2}^{n,l} - f_{i,j-1/2}^{n,l} v_{i,j-1/2}^{n,l}}{\Delta y} \right) + q_a^{n,l} \right]. \quad (4.14)$$

Vale recordar que na Seção 3.1.1 foram apresentados os métodos utilizados para a aproximar a solução da Equação Diferencial Ordinária do método Upwind (Eq. 4.14). Na Seção 4.3 discretizamos a equação da saturação através do método KT.

4.3 Método de Kurganov-Tadmor

O Método KT se aproveita dos melhores recursos oferecidos por métodos centrados: a simplicidade de usá-los como um caixa-preta para resolver problemas gerais de leis de conservação. Portanto sua implementação e generalização para sistemas multidimensionais são consideravelmente simples. Outra vantagem apresentada pelo KT é uma quantidade pequena de difusão numérica em comparação com o Esquema de Nessyahu-Tadmor (NT), que ao contrário do KT não pode ser escrito na forma semi-discreta quando $\Delta t \rightarrow 0$ (veja [9, 20]).

É conveniente ao estudar o método de Kurganov-Tadmor, conhecer outros métodos previamente obtido. Esquemas centrais têm como base o método de Lax-Friedrichs, então esse será o primeiro a ser estudado. Com isso, é possível introduzir o método de Rusanov

[19], e então o método de Kurganov-Tadmor [9, 22].

Considere um problema de conservação hiperbólico em uma dimensão espacial dado pela Eq. 4.15:

$$\frac{\partial s}{\partial t} + \frac{\partial f(s)}{\partial x} = 0, \quad (4.15)$$

sendo $f(s)$ uma função de fluxo dependente de s e com condição inicial

$$s(x, 0) = s_0(x), x \in \Omega. \quad (4.16)$$

onde Ω é um reservatório isolado.

Com o fim de discretizar essa equação, é necessário considerar uma malha dividida em blocos separados por interfaces, como feito para duas dimensões.

Considerando S^n como a média de s em um intervalo $[x_{i+1/2}, x_{i-1/2}]$ em um instante de tempo t^n , temos:

$$S_i^n = \frac{1}{\Delta x} \int_{x_{i-1/2}}^{x_{i+1/2}} s(x, t^n) dx. \quad (4.17)$$

Pode-se integrar a Eq. 4.15 no intervalo $[x_{i+1/2}, x_{i-1/2}]$:

$$\frac{d}{dt} \int_{x_{i-1/2}}^{x_{i+1/2}} s(x, t) dx = f(s(x_{i+1/2}, t)) - f(s(x_{i-1/2}, t)). \quad (4.18)$$

Integrando essa equação no tempo:

$$\begin{aligned} & \int_{x_{i-1/2}}^{x_{i+1/2}} s(x, t^{n+1}) dx - \int_{x_{i-1/2}}^{x_{i+1/2}} s(x, t^n) dx = \\ & \int_{t^n}^{t^{n+1}} f(s(x_{i-1/2}, t)) dt - \int_{t^n}^{t^{n+1}} f(s(x_{i+1/2}, t)) dt. \end{aligned} \quad (4.19)$$

Dividindo tudo por Δx e rearranjando:

$$\begin{aligned} & \frac{1}{\Delta x} \int_{x_{i-1/2}}^{x_{i+1/2}} s(x, t^{n+1}) dx = \frac{1}{\Delta x} \int_{x_{i-1/2}}^{x_{i+1/2}} s(x, t^n) dx - \\ & \frac{1}{\Delta x} \left(\int_{t^n}^{t^{n+1}} f(s(x_{i+1/2}, t)) dt - \int_{t^n}^{t^{n+1}} f(s(x_{i-1/2}, t)) dt \right). \end{aligned} \quad (4.20)$$

Pela definição de S_i^n :

$$S_i^{n+1} = S_i^n - \frac{1}{\Delta x} \left(\int_{t^n}^{t^{n+1}} f(s(x_{i+1/2}, t)) dt - \int_{t^n}^{t^{n+1}} f(s(x_{i-1/2}, t)) dt \right). \quad (4.21)$$

Definimos o fluxo na interface $F_{i+1/2}^n = \int_{t^n}^{t^{n+1}} f(s(x_{i+1/2}, t)) dt$. Nas próximas Seções apresentamos aproximações para esse fluxos ($F_{i-1/2}^n$ e $F_{i+1/2}^n$). O método de Lax-Friedrichs é a base de todos os esquemas centrais de discretização de equações diferenciais utilizados nesse trabalho, portanto, é importante conhecer como ele funciona para que o método de Rusanov seja revisado. O método de Lax-Friedrichs e o método de Rusanov contribuem para a compreensão do método de Kurganov-Tadmor, visto que ele se aproveita de vantagens de todos esses métodos.

4.3.1 Problema de Riemann

O caso especial do Problema de Valor Inicial (PVI) com dado inicial $s(x, 0)$ composto por valores constantes por partes é conhecido como Problema de Riemann [23]:

$$\begin{aligned} s_t + as_x &= 0, \\ s(x, 0) = s_0(x) &= \begin{cases} s_E & \text{se } x < 0, \\ s_D & \text{se } x > 0. \end{cases} \end{aligned} \quad (4.22)$$

onde s_E (esquerda) e s_D (direita) são dois valores constantes. É fácil notar que há uma descontinuidade no ponto $x = 0$, e é esperado que a descontinuidade se propague a uma distância $d = at$ no tempo t . Essa característica separa as curvas características para a esquerda, onde a solução toma a forma de s_E das curvas para a direita, com solução s_D , como na Fig. 4.3. A solução do problema de Riemann é dada como a seguir:

$$s(x, t) = s_0(x - at) = \begin{cases} s_E & \text{se } x - at < 0, \\ s_D & \text{se } x - at > 0. \end{cases} \quad (4.23)$$

Essa solução pode ser representada no plano $x - t$, como mostra a Fig. 4.4. A partir do ponto x_0 é possível traçar uma característica. Como a é constante, todas as curvas são paralelas. A característica que passa em $x = 0$ é extremamente importante e divide as

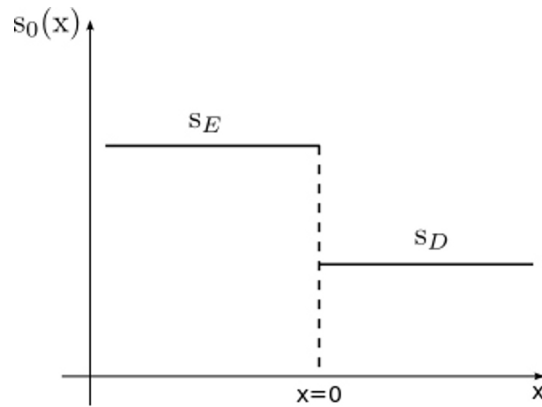


Figura 4.3: Duas constantes separadas pela descontinuidade $x = 0$.

soluções do problema de Riemann. As características da Fig. 4.4 são chamadas também de Leques de Riemann.

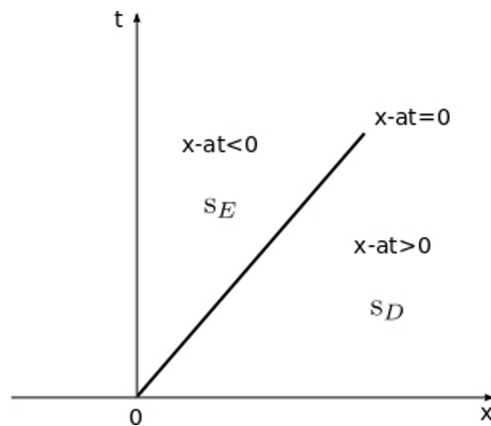


Figura 4.4: Solução do problema de Riemann no plano $x - t$ para a equação da advecção linear com velocidade a positiva.

Considerando a Equação Diferencial da Eq. 4.22, sabe-se que o esquema Upwind possui condição de CFL $\frac{a\Delta t}{\Delta x} \leq 1$. O método de Lax-Friedrichs que será apresentado na Subseção seguinte possui uma condição de CFL $\frac{a\Delta t}{\Delta x} \leq 1/2$. Esses métodos utilizam uma abertura do Leque de Riemann constante em toda a malha. Temos portanto, um Leque de Riemann com tamanho constante para todos os pontos com abertura $\frac{\Delta x}{\Delta t}$, a máxima permitida pelo CFL. O método de Rusanov introduz um Leque de Riemann de tamanho variável, calculado para cada ponto da malha, que será chamado de velocidade local de propagação. O método KT também se caracteriza por utilizar essa velocidade local.

4.3.2 Lax-Friedrichs

O método de Lax-Friedrichs é um esquema central clássico que se caracteriza por introduzir uma grande difusão numérica. Esse efeito numérico é ruim para simulações de equações hiperbólicas de transporte do tipo da Eq. 4.15. O método funciona através da integração da equação diferencial no intervalo $[x_{i-1/2}, x_{i+1/2}] \times [t^n, t^{n+1}]$. É possível, no entanto, reescrever esse método para fazer o uso de outro intervalo de integração, com o objetivo de reduzir a difusão numérica. Essa alternativa é conhecida como Lax-Friedrichs com malha deslocada.

Considerando o novo intervalo de integração $[x_i, x_{i+1}] \times [t^n, t^{n+1}]$ do método com malha deslocada, o intervalo de tempo Δt_{cfl} deve respeitar à condição explicitada na Eq. 4.24. A Fig. 4.5 ilustra como passa a ser a evolução no tempo para um ponto x_i .

$$\frac{\Delta t_{cfl}}{\Delta x} \cdot \max_s |f'(s)| < \frac{1}{2}. \quad (4.24)$$

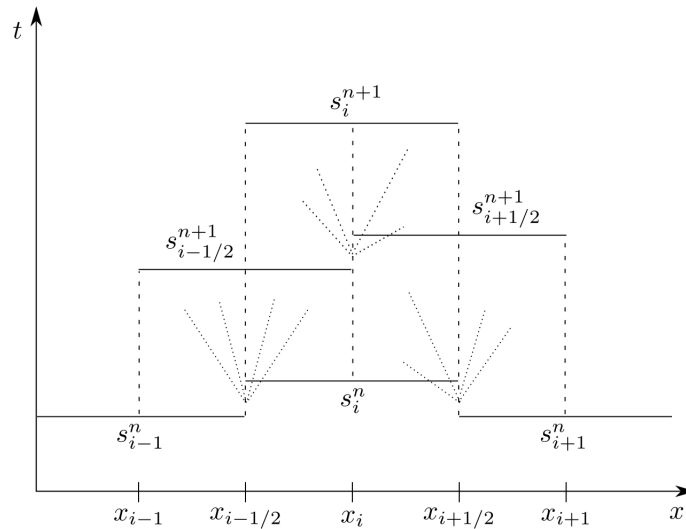


Figura 4.5: Evolução do método Lax-Friedrichs com malha deslocada.

Utilizando esse novo intervalo, a integral da Eq. 4.20 passa a ser escrita da seguinte forma:

$$\begin{aligned} \frac{1}{\Delta x} \int_{x_i}^{x_{i+1}} s(x, t^{n+1}) dx &= \frac{1}{\Delta x} \int_{x_i}^{x_{i+1}} s(x, t^n) dx - \\ \frac{1}{\Delta x} \left(\int_{t^n}^{t^{n+1}} f(s(x_{i+1}, t)) dt - \int_{t^n}^{t^{n+1}} f(s(x_i, t)) dt \right). \end{aligned} \quad (4.25)$$

Utilizando a mesma noção de média da Eq. 4.17 e assumindo que $\frac{1}{\Delta x} \int_{x_i}^{x_{i+1}} s(x, t^n) dx \approx$

$\frac{1}{2} [S_i^n + S_{i+1}^n]$ tem-se a evolução no tempo para um ponto entre dois blocos da malha:

$$S_{i+1/2}^{n+1} = \frac{1}{2} [S_i^n + S_{i+1}^n] - \frac{1}{\Delta x} \left(\int_{t^n}^{t^{n+1}} f(s(x_{i+1}, t)) dt - \int_{t^n}^{t^{n+1}} f(s(x_i, t)) dt \right). \quad (4.26)$$

Basta substituir as integrais das funções de fluxo que são conhecidas nos pontos da malha, para obter a solução avançada no tempo para pontos de interface:

$$S_{i+1/2}^{n+1} = \frac{1}{2} [S_i^n + S_{i+1}^n] - \frac{\Delta t_{cfl}}{\Delta x} [f(S_{i+1}^n) - f(S_i^n)]. \quad (4.27)$$

De posse da solução no ponto intermediário da malha, é possível calcular o valor no ponto central da malha avançado no tempo $s(x, t^{n+1})$. Para isso, usa-se uma aproximação polinomial por partes:

$$s(x, t^{n+1}) = \sum_i \tilde{S}_{i+1/2}^{n+1}(x) \cdot \chi_{i+1/2}(x), \quad (4.28)$$

onde $\chi_{i+1/2}(x) = 1$, se $x \in I_{i+1/2}$ e $\chi_{i+1/2}(x) = 0$ caso contrário. Como o método de Lax-Friedrichs é de primeira ordem, usa-se uma função polinomial constante.

$$\tilde{S}_{i+1/2}^{n+1}(x) = S_{i+1/2}^{n+1} \cdot \chi_{i+1/2}(x). \quad (4.29)$$

Assim, a solução na posição x_i no tempo t^{n+1} será:

$$\begin{aligned} S_i^{n+1} &= \frac{1}{\Delta x} \left[\int_{x_i}^{x_{i+1/2}} S_{i-1/2}^{n+1} dx + \int_{x_i}^{x_{i+1/2}} S_{i+1/2}^{n+1} dx \right], \\ &= \frac{1}{2} [S_{i-1/2}^{n+1} + S_{i+1/2}^{n+1}], \\ &= \frac{1}{4} [S_{i-1}^n + 2S_i^n + S_{i+1}^n] - \frac{\Delta t_{cfl}}{2\Delta x} [f(S_{i-1}^n) - f(S_{i+1}^n)], \end{aligned} \quad (4.30)$$

O método de Lax-Friedrichs com malha deslocada se caracteriza por produzir resultados menos difusivos que o método de Lax-Friedrichs original, no entanto, ainda é possível obter resultados superiores aplicando modificações nesse método, como propõe o método de Rusanov.

4.3.3 Método de Rusanov

O método de Rusanov [19] propõe uma solução semelhante ao método de Lax-Friedrichs com malha deslocada, porém, utilizando uma abertura menor do Problema de Riemann. Para viabilizar essa solução, em cada ponto da malha é calculado o valor local da velocidade de propagação.

Adotando o termo $a_{i-1/2}^n$ para denotar a velocidade de propagação local, no método de Lax-Friedrichs, essa velocidade local assume o valor $a_{i-1/2}^n = \frac{\Delta x}{2\Delta t_{cfl}}$ em toda a malha. No método proposto por Rusanov, esse valor passa a ser dependente do ponto da malha. Denotando por $\Delta x_{i+1/2}^{R^n}$ o tamanho do Leque de Riemann no tempo t^n em $x_{i+1/2}$, a velocidade assume o valor:

$$a_{i+1/2}^n = \frac{\Delta x_{i+1/2}^{R^n}}{2\Delta t_{cfl}}. \quad (4.31)$$

Considerando fluxos convexos, pode-se simplificar a Eq. 4.31 para [9]:

$$a_{i+1/2}^n = \max \left\{ |f'(S_{i+1/2}^+)|, |f'(S_{i+1/2}^-)| \right\}, \quad (4.32)$$

onde $S_{i+1/2}^+$ é o valor aproximado pela direita de s na interface do ponto $x_{i+1/2}$ e $S_{i+1/2}^-$ é a aproximação pela esquerda no mesmo ponto $x_{i+1/2}$. Utilizando uma função polinomial como no caso anterior, essas aproximações assumem os seguintes valores:

$$\begin{aligned} S_{i+1/2}^+ &= S_{i+1}^n, \\ S_{i+1/2}^- &= S_i^n. \end{aligned} \quad (4.33)$$

Como o Problema de Riemann fica limitado pela velocidade local de propagação, os intervalos $[x_{i+1/2,l}^n, x_{i+1/2,r}^n]$ passam a ser determinados pelas funções $x_{i+1/2,l}^n = x_{i+1/2} - a_{i+1/2}^n \Delta t_{cfl}$ e de maneira análoga, $x_{i+1/2,r}^n = x_{i+1/2} + a_{i+1/2}^n \Delta t_{cfl}$.

Lembrando da Fig. 4.5, são necessários dois problemas de Riemann para evoluir para os pontos de interface dos blocos. Portanto deve-se integrar a lei de conservação em três intervalos: os dois intervalos gerados pelo problema de Riemann mais o intervalo intermediário entre esses dois. Verifica-se então o novo volume de controle:

$$\left\{ [x_{i-1/2,l}^n, x_{i-1/2,r}^n] \cup [x_{i-1/2,r}^n, x_{i+1/2,l}^n] \cup [x_{i+1/2,l}^n, x_{i+1/2,r}^n] \right\} \times [t^n, t^{n+1}],$$

lembrando que os problemas de Riemann se localizam nos intervalos a esquerda $\left[x_{i-1/2,l}^n, x_{i-1/2,r}^n \right]$ e a direita $\left[x_{i+1/2,l}^n, x_{i+1/2,r}^n \right]$. A Fig. 4.6 ilustra esses intervalos.

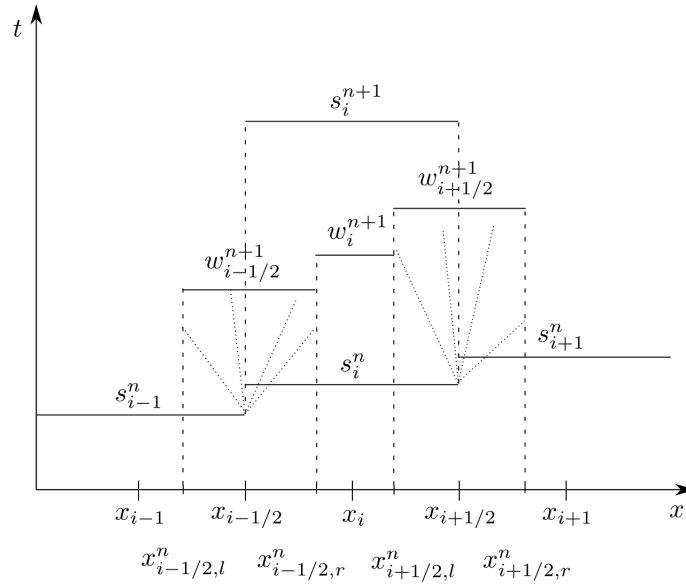


Figura 4.6: Problemas de Riemann do método Rusanov.

Para simplificar a notação, denotaremos por R_i essas regiões, sendo:

$$R_{i-1/2} = \left[x_{i-1/2,l}^n, x_{i-1/2,r}^n \right],$$

$$R_i = \left[x_{i-1/2,r}^n, x_{i+1/2,l}^n \right],$$

$$R_{i+1/2} = \left[x_{i+1/2,l}^n, x_{i+1/2,r}^n \right].$$

É importante também deixar claro quando essas regiões podem estar fora da região de interesse $\left[x_{i-1/2}, x_{i+1/2} \right]$. Chamaremos por R_i^+ as regiões dentro desse intervalo e por R_i^- as regiões que estiverem fora dele.

Integrando a região $R_i \times [t^n, t^{n+1}]$, resulta na solução para uma malha não uniforme nos pontos w_i^{n+1} . Pode-se usar o mesmo esquema do método Lax-Friedrichs em malha deslocada da Eq. 4.29 aproximando a solução como uma função polinomial constante por partes $\tilde{w}_i^{n+1}(x)$.

$$\tilde{w}_i^{n+1}(x) = w_i^{n+1}(R_i). \quad (4.34)$$

Na malha original, consideramos a integração dessas funções na região R_i^+ :

$$S_i^{n+1} = \frac{1}{\Delta x} \left[\int_{R_{i-1/2}^+} \tilde{w}_{i-1/2}^{n+1}(x) dx + \int_{R_i^+} \tilde{w}_i^{n+1}(x) dx + \int_{R_{i+1/2}^+} \tilde{w}_{i+1/2}^{n+1}(x) dx \right]. \quad (4.35)$$

Os esquemas apresentados até aqui são discretizados no espaço e no tempo, sendo chamados de esquemas totalmente discretos. Utilizaremos de agora em diante, somente uma discretização espacial, também chamado de esquema semi-discreto. Para obter esse tipo de discretização a partir de um esquema totalmente discreto, basta que se faça $\Delta t_{cfl} \rightarrow 0$. Para evitar maiores cálculos, partiremos diretamente para a formulação semi-discreta. A denotação da versão semi-discreta utiliza o conceito de derivadas, como é mostrado abaixo:

$$\lim_{\Delta t_{cfl} \rightarrow 0} \frac{S_i(t + \Delta t_{cfl}) - S_i(t)}{\Delta t_{cfl}} = \frac{d}{dt} S_i(t). \quad (4.36)$$

Para que a Eq. 4.35 assuma sua forma semi-discreta, substitui-se o valor de $S_i(t + \Delta t_{cfl})$ pelo valor de S_i^{n+1} na Eq. 4.36. Logo:

$$\begin{aligned} \frac{d}{dt} S_i(t) &= \lim_{\Delta t_{cfl} \rightarrow 0} \frac{1}{\Delta t_{cfl}} \left[\frac{1}{\Delta x} \int_{R_{i-1/2}^+} \tilde{w}_{i-1/2}(x, t + \Delta t_{cfl}) dx + \right. \\ &\quad \frac{1}{\Delta x} \int_{R_i^+} \tilde{w}_i(x, t + \Delta t_{cfl}) dx + \\ &\quad \left. \frac{1}{\Delta x} \int_{R_{i+1/2}^+} \tilde{w}_{i+1/2}(x, t + \Delta t_{cfl}) dx - S_i(t) \right]. \end{aligned} \quad (4.37)$$

Substituindo pelas funções polinomiais:

$$\begin{aligned} \frac{d}{dt} S_i(t) &= \frac{1}{\Delta x} \lim_{\Delta t_{cfl} \rightarrow 0} \frac{1}{\Delta t_{cfl}} \left[|R_{i-1/2}^+| w_{i-1/2}(x, t + \Delta t_{cfl}) + \right. \\ &\quad |R_i^+| w_i(x, t + \Delta t_{cfl}) + \\ &\quad \left. |R_{i+1/2}^+| w_{i+1/2}(x, t + \Delta t_{cfl}) - S_i(t) \right]. \end{aligned} \quad (4.38)$$

Sabe-se que os valores das regiões R_i^+ são:

$$\begin{aligned} |R_{i-1/2}^+| &= \frac{1}{2} \Delta x_{i-1/2}^n = a_{i-1/2}^n \Delta t_{cfl}, \\ |R_i^+| &= |R_i| = \Delta x_i^n = \Delta x - (a_{i-1/2}^n + a_{i+1/2}^n) \Delta t_{cfl}, \\ |R_{i+1/2}^+| &= \frac{1}{2} \Delta x_{i+1/2}^n = a_{i+1/2}^n \Delta t_{cfl}. \end{aligned}$$

Logo, reescreve-se o esquema de Rusanov da seguinte forma:

$$\begin{aligned} \frac{d}{dt} S_i(t) &= \lim_{\Delta t_{cfl} \rightarrow 0} \left\{ \frac{a_{i-1/2}^n}{\Delta x} w_{i-1/2}(x, t + \Delta t_{cfl}) + \frac{a_{i+1/2}^n}{\Delta x} w_{i+1/2}(x, t + \Delta t_{cfl}) + \right. \\ &\quad \left. \left[\frac{1}{\Delta t_{cfl}} - \frac{1}{\Delta x} (a_{i-1/2}^n + a_{i+1/2}^n) \right] w_i(x, t + \Delta t_{cfl}) - \frac{1}{\Delta t_{cfl}} S_i(t) \right\}. \end{aligned} \quad (4.39)$$

Para finalizar, é necessário calcular os valores das soluções na malha não uniforme $w_{i-1/2}(x, t + \Delta t_{cfl})$, $w_i(x, t + \Delta t_{cfl})$ e $w_{i+1/2}(x, t + \Delta t_{cfl})$.

$$\begin{aligned} w_{i+1/2}^{n+1} &= \frac{1}{|R_{i+1/2}|} \int_{R_{i+1/2}} s(x, t^{n+1}) dx \\ &= \frac{1}{|R_{i+1/2}|} \left[\int_{R_{i+1/2}^+} s(x, t^n) dx + \int_{R_{i+1/2}^-} s(x, t^n) dx \right] \\ &\quad - \frac{1}{|R_{i+1/2}|} \int_{t^n}^{t^{n+1}} [f(s(x_{i+1/2,r}, t)) - f(s(x_{i+1/2,l}, t))] dt. \end{aligned} \quad (4.40)$$

Já se sabe que a integral $\int_{R_{i+1/2}^+} s(x, t^n) dx$ tem o valor da reconstrução em S_i^n e a integral $\int_{R_{i+1/2}^-} s(x, t^n) dx$ o valor da reconstrução em S_{i+1}^n , portanto:

$$\frac{1}{|R_{i+1/2}|} \left[\int_{R_{i+1/2}^+} s(x, t^n) dx + \int_{R_{i+1/2}^-} s(x, t^n) dx \right] = \frac{1}{2} [S_i^n + S_{i+1}^n]. \quad (4.41)$$

A solução de $s(x_{i+1/2,l}, t)$ e $s(x_{i+1/2,r}, t)$ é aproximada por valores constantes, portanto, pode-se aproximar seus valores por S_i^n e S_{i+1}^n , respectivamente. É importante lembrar também da identidade da Eq. 4.31 referente ao valor de $a_{i+1/2}^n$:

$$\begin{aligned} \frac{1}{|R_{i+1/2}|} \int_{t^n}^{t^{n+1}} [f(s(x_{i+1/2,r}, t)) - f(s(x_{i+1/2,l}, t))] dt &= \\ &= \frac{1}{2a_{i+1/2}^n} [f(S_{i+1}^n) - f(S_i^n)]. \end{aligned} \quad (4.42)$$

Considerando as integrações temporais e espaciais, reescrevemos a Eq. 4.40 como:

$$w_{i+1/2}^{n+1} = \frac{1}{2} [S_i^n + S_{i+1}^n] + \frac{1}{2a_{i+1/2}^n} [f(S_i^n) - f(S_{i+1}^n)]. \quad (4.43)$$

De maneira semelhante o valor de w_i^{n+1} pode ser calculado:

$$\begin{aligned} w_i^{n+1} &= \frac{1}{|R_i|} \int_{R_i} s(x, t^{n+1}) dx \\ &= \frac{1}{|R_i|} \int_{R_i} s(x, t^n) dx - \frac{1}{|R_i|} \int_{t^n}^{t^{n+1}} [f(s(x_{i-1/2,r}, t)) - f(s(x_{i+1/2,l}, t))] dt. \quad (4.44) \\ &= S_i^n - \frac{\Delta t_{cfl}}{\Delta x - (a_{i-1/2}^n + a_{i+1/2}^n) \Delta t_{cfl}} [f(S_{i+1}^n) - f(S_i^n)] = S_i^n. \end{aligned}$$

O valor de $w_{i-1/2}^{n+1}$ equivale ao valor de $w_{i+1/2}^{n+1}$ subtraindo uma posição em todos os índices. Tem-se então:

$$w_{i-1/2}^{n+1} = \frac{1}{2} [S_{i-1}^n + S_i^n] + \frac{1}{2a_{i-1/2}^n} [f(S_{i-1}^n) - f(S_i^n)]. \quad (4.45)$$

Finalizando a revisão do método de Rusanov, é feita a substituição dos valores da malha não uniforme na Eq. 4.39:

$$\begin{aligned} \frac{d}{dt} S_i(t) &= \lim_{\Delta t_{cfl} \rightarrow 0} \left\{ \frac{a_{i-1/2}^n}{\Delta x} \left[\frac{1}{2} (S_{i-1}^n + S_i^n) + \frac{1}{2a_{i-1/2}^n} (f(S_{i-1}^n) - f(S_i^n)) \right] \right. \\ &\quad + \frac{a_{i+1/2}^n}{\Delta x} \left[\frac{1}{2} (S_i^n + S_{i+1}^n) + \frac{1}{2a_{i+1/2}^n} (f(S_i^n) - f(S_{i+1}^n)) \right] + \quad (4.46) \\ &\quad \left. \left[\frac{1}{\Delta t_{cfl}} - \frac{1}{\Delta x} (a_{i-1/2}^n + a_{i+1/2}^n) \right] S_i^n - \frac{1}{\Delta t_{cfl}} S_i(t) \right\}. \end{aligned}$$

Resumindo:

$$\begin{aligned} \frac{d}{dt} S_i(t) &= \frac{1}{\Delta x} \left[\frac{f(S_{i-1}^n) - f(S_i^n)}{2} - \frac{f(S_{i+1}^n) - f(S_i^n)}{2} \right] + \\ &\quad \frac{1}{2\Delta x} \left[a_{i-1/2}^n (S_{i-1}^n - S_i^n) + a_{i+1/2}^n (S_{i+1}^n - S_i^n) \right]. \quad (4.47) \end{aligned}$$

Ou, escrito na forma conservativa:

$$\frac{d}{dt}S_i(t) = -\frac{H_{i+1/2} - H_{i-1/2}}{\Delta x}, \quad (4.48)$$

onde o fluxo $H_{i+1/2}$ é dado por:

$$H_{i+1/2} = \frac{f(S_{i+1}^n) + f(S_i^n)}{2} - \frac{a_{i+1/2}^n}{2} \left[S_{i+1}^n - S_i^n \right]. \quad (4.49)$$

4.3.4 Método de Kurganov-Tadmor (KT) em uma dimensão

O Método numérico de Kurganov-Tadmor (KT) é uma extensão de segunda ordem do Método de Rusanov, que também introduz o cálculo da velocidade local de propagação no método de Lax-Friedrichs. A diferença essencial entre esses métodos se dá pela aproximação da solução. Enquanto no método de Rusanov utilizou-se uma aproximação através de uma função constante por partes, no método KT essa aproximação será substituída por uma função linear por partes do tipo MUSCL (Monotonic Upstream-Centered Scheme for Conservation Laws), introduzida em [24]. A forma final do método KT é dada pela Eq. 4.50:

$$\begin{aligned} \frac{d}{dt}S_i(t) = & -\frac{1}{2\Delta x} \left[\left(f(S_{i+1/2}^+) + f(S_{i+1/2}^-) \right) - \left(f(S_{i-1/2}^+) + f(S_{i-1/2}^-) \right) \right] \\ & + \frac{a_{i+1/2}^n}{2\Delta x} \left(S_{i+1/2}^+ - S_{i+1/2}^- \right) - \frac{a_{i-1/2}^n}{2\Delta x} \left(S_{i-1/2}^+ - S_{i-1/2}^- \right), \end{aligned} \quad (4.50)$$

onde são feitas aproximações em cada ponto pela esquerda e pela direita, dessa vez utilizando as aproximações lineares de segunda ordem:

$$\begin{aligned} S_{i+1/2}^+ &= S_{i+1}^n - \frac{\Delta x}{2}(S_x)_{i+1}^n, \\ S_{i+1/2}^- &= S_i^n + \frac{\Delta x}{2}(S_x)_i^n. \end{aligned} \quad (4.51)$$

É fácil notar que o método KT é uma generalização do método de Rusanov: zere as derivadas do tipo $(S_x)_i^n$ na Eq. 4.51 e substitua as novas aproximações na Eq. 4.50, assim, obtém-se o método de Rusanov como na Eq. 4.47.

A diferença entre os métodos KT e Rusanov está justamente na aproximação de segunda ordem linear por partes ao invés da aproximação constante por partes do método

Rusanov. A aproximação para o método KT é mostrada na Eq. 4.52:

$$s(x, t^n) \approx \sum_i \tilde{S}_i^n(x) \cdot \chi_i(x) = \sum_i [S_i^n + (S_x)_i^n (x - x_i)] \cdot \chi_i(x), \quad x \in I_i, \quad (4.52)$$

onde $\chi_i = 1$ se $x \in I_i$ e $\chi_i = 0$ se $x \notin I_i$; $(S_x)_i^n$ é a representação da derivada $\frac{\partial}{\partial x} s(x_i, t)$ com precisão de segunda ordem.

A derivada numérica é reconstruída a partir dos valores da média da célula. O comportamento dos esquemas centrais depende da escolha apropriada para aproximar as derivadas, e existe uma grande variedade de receitas para esses esquemas. Uma estabilidade TVD (*Total Variation Diminishing*), um princípio de máximo ou uma propriedade não-oscilatória mais fraca dessa aproximação linear por partes pode ser satisfeita por diversos métodos propostos em diversos estudos. Por exemplo, uma reconstrução simples pode ser obtida pelo limitador *MinMod* [24].

$$(S_x)_i^n = \text{MinMod} \left(\frac{S_i - S_{i-1}}{\Delta x}, \frac{S_{i+1} - S_i}{\Delta x} \right), \quad (4.53)$$

O operador $\text{MinMod}(q_1, q_2, \dots, q_{n-1}, q_n)$ é definido de acordo com a seguinte expressão:

$$\text{MinMod}(q_1, q_2, \dots, q_{n-1}, q_n) = \begin{cases} \min q_i, & \text{se } q_i \geq 0 \quad \forall i, \\ \max q_i, & \text{se } q_i \leq 0 \quad \forall i, \\ 0 & \text{caso contrário.} \end{cases} \quad (4.54)$$

A partir de um ponto aproximado S_i^{n+1} tem-se a possibilidade de obter o valor $s(x, t^{n+1})$ na célula $I_i = [x_{i-1/2}, x_{i+1/2}]$. Com esse fim, segue-se a estratégia utilizada no método de Rusanov (Eq. 4.34), dessa vez substituindo uma aproximação da solução obtida no futuro por uma função polinomial linear por partes:

$$\tilde{w}_{i+1/2}^{n+1}(x) = w_{i+1/2}^{n+1} + (w_{i+1/2})_x^{n+1} \cdot (x - x_{i-1/2}) \quad (4.55)$$

com definição análoga para $\tilde{w}_{i+1/2}^{n+1}(x)$. Na região central \tilde{w}_i^{n+1} não há a necessidade de reconstruir a região R_i^n , já que não há descontinuidade. A Fig. 4.7 ilustra como ficam as regiões do método KT com a aproximação por função polinomial linear por partes.

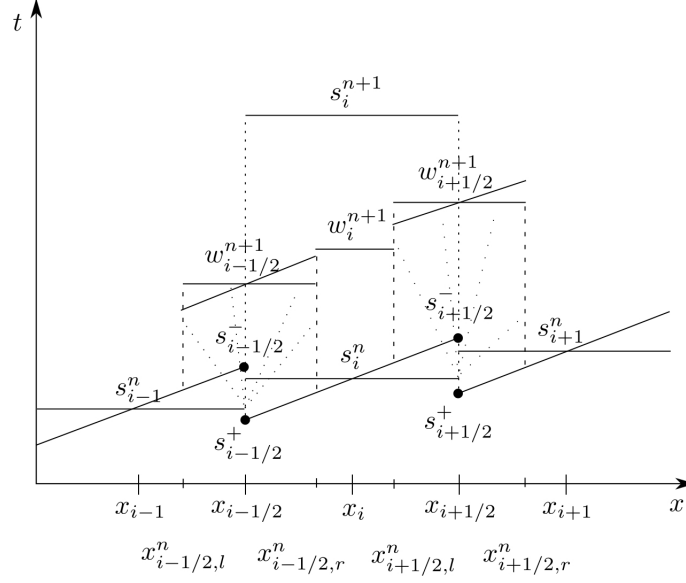


Figura 4.7: Problemas de Riemann do método KT.

Novamente partiremos diretamente para a formulação semi-discreta do método, forçando o valor Δt tender para 0.

$$\begin{aligned}
 \lim_{\Delta t_{cfl} \rightarrow 0} \frac{S_i(t + \Delta t_{cfl}) - S_i(t)}{\Delta t_{cfl}} &= \frac{d}{dt} S_i(t) = \\
 &= \lim_{\Delta t_{cfl} \rightarrow 0} \frac{1}{\Delta t_{cfl}} \left\{ \frac{1}{\Delta x} \int_{R_{i-1/2}^+} \tilde{w}_{i-1/2}^{n+1}(x) dx + \frac{1}{\Delta x} \int_{R_i^+} \tilde{w}_i^{n+1}(x) dx \right. \\
 &\quad \left. + \frac{1}{\Delta x} \int_{R_{i+1/2}^+} \tilde{w}_{i+1/2}^{n+1}(x) dx - S_i(t) \right\}.
 \end{aligned} \tag{4.56}$$

Fazendo a substituição da aproximação da Eq. 4.55 na Eq. 4.56, tem-se:

$$\int_{R_{i+1/2}^+} \tilde{w}_{i+1/2}^{n+1}(x) dx = w_{i+1/2}^{n+1} \cdot |R_{i+1/2}^+| + \mathcal{O}(\Delta t_{cfl}^2). \tag{4.57}$$

Na região $R_{i-1/2}^+$, o processo é feito de maneira semelhante. Porém, na região R_i^+ não há reconstrução:

$$\int_{R_i^+} \tilde{w}_i^{n+1}(x) dx = w_i^{n+1} \cdot |R_i^+|. \tag{4.58}$$

Pode-se agora substituir as reconstruções das Eq. 4.58 e Eq. 4.57 em Eq. 4.56:

$$\begin{aligned} \frac{d}{dt}S_i(t) = \lim_{\Delta t_{cfl} \rightarrow 0} \left\{ \frac{a_{i-1/2}^n}{\Delta x} w_{i-1/2}^{n+1} + \frac{a_{i+1/2}^n}{\Delta x} w_{i+1/2}^{n+1} \right. \\ \left. + \left[\frac{1}{\Delta t_{cfl}} - \frac{a_{i-1/2}^n + a_{i+1/2}^n}{\Delta x} \right] w_i^{n+1} - \frac{1}{\Delta t_{cfl}} S_i(t), \right\}. \end{aligned} \quad (4.59)$$

resultando na mesma solução do método Rusanov na Eq. 4.39. Agora, é necessário encontrar a solução das aproximações no futuro dos pontos $w_{i-1/2}^{n+1}$, w_i^{n+1} e $w_{i+1/2}^{n+1}$, lembrando que $w_{i-1/2}^{n+1} = w_{i+(1/2)-1}^{n+1}$:

$$\begin{aligned} w_{i+1/2}^{n+1} &= \frac{1}{|R_{i+1/2}|} \int_{R_{i+1/2}} s(x, t^{n+1}) dx \\ &= \frac{1}{|R_{i+1/2}|} \left[\int_{R_{i+1/2}^+} s(x, t^n) dx + \int_{R_{i+1/2}^-} s(x, t^n) dx \right] \\ &\quad - \frac{1}{|R_{i+1/2}|} \int_{t^n}^{t^{n+1}} [f(s(x_{i+1/2,r}, t)) - f(s(x_{i+1/2,l}, t))] dt \\ &= \frac{1}{2} [S_i^n + S_{i+1}^n] + \frac{\Delta x - a_{i+1/2}^n \Delta t_{cfl}}{4} [(S_x)_i^n - (S_x)_{i+1}^n] \\ &\quad - \frac{1}{|R_{i+1/2}|} \int_{t^n}^{t^{n+1}} [f(s(x_{i+1/2,r}, t)) - f(s(x_{i+1/2,l}, t))] dt. \end{aligned} \quad (4.60)$$

$$\begin{aligned} w_i^{n+1} &= \frac{1}{|R_i|} \int_{R_i^+} s(x, t^n) dx - \frac{1}{|R_i|} \int_{t^n}^{t^{n+1}} [f(s(x_{i+1/2,l}, t)) - f(s(x_{i-1/2,r}, t))] dt \\ &= S_i^n + \frac{\Delta t_{cfl}}{2} (a_{i-1/2}^n - a_{i+1/2}^n) (S_x)_i^n \\ &\quad - \frac{1}{|R_i|} \int_{t^n}^{t^{n+1}} [f(s(x_{i+1/2,l}, t)) - f(s(x_{i-1/2,r}, t))] dt. \end{aligned} \quad (4.61)$$

Com a condição de CFL

$$\frac{\Delta t_{cfl}}{\Delta x} \cdot \max_s |f'(s)| < \frac{1}{2}. \quad (4.62)$$

satisfeita, as funções $f(s(x_{i+1/2,l}, t))$, $f(s(x_{i+1/2,r}, t))$, $f(s(x_{i-1/2,l}, t))$ e $f(s(x_{i-1/2,r}, t))$ podem ser resolvidas numericamente através da Regra do Ponto Médio, com um erro de

truncamento local de $\mathcal{O}(\Delta t_{cfl}^3)$. Logo, verifica-se que:

$$\begin{aligned} w_{i+1/2}^{n+1} &= \frac{1}{|R_{i+1/2}|} \int_{R_{i+1/2}} s(x, t^{n+1}) dx \\ &= \frac{1}{2} [S_i^n + S_{i+1}^n] + \frac{\Delta x - a_{i+1/2}^n \Delta t_{cfl}}{4} [(S_x)_i^n - (S_x)_{i+1}^n] \\ &\quad - \frac{1}{2a_{i+1/2}^n} [f(S_{i+1/2,r}^{n+1/2}) - f(S_{i+1/2,l}^{n+1/2})]. \end{aligned} \quad (4.63)$$

$$\begin{aligned} w_i^{n+1} &= S_i^n + \frac{\Delta t_{cfl}}{2} (a_{i-1/2}^n - a_{i+1/2}^n) (S_x)_i^n - \frac{(\Delta t_{cfl}/\Delta x)}{1 - (\Delta t_{cfl}/\Delta x)(a_{i-1/2}^n - a_{i+1/2}^n)} \\ &\quad \cdot [f(S_{i+1/2,l}^{n+1/2}) - f(S_{i-1/2,r}^{n+1/2})]. \end{aligned} \quad (4.64)$$

Através das séries de Taylor, podemos aproximar o valor das soluções no tempo $t^{n+1/2}$ utilizadas pelas Eq. 4.63 e Eq. 4.64 em $S_{i+1/2,r}^{n+1/2}$.

$$\begin{aligned} S_{i+1/2,r}^{n+1/2} &= S_{i+1/2,r}^n - \frac{\Delta t_{cfl}}{2} f(S_{i+1/2,r}^n)_x + \mathcal{O}(\Delta t_{cfl}^2) \\ S_{i+1/2,r}^n &= S_{i+1}^n - \frac{\Delta x}{2} (S_x)_{i+1}^n + \frac{\Delta t_{cfl}}{\Delta x} ((S_x)_{i+1}^n a_{i+1/2}^n \Delta x), \end{aligned} \quad (4.65)$$

e para $S_{i+1/2,l}^{n+1/2}$:

$$\begin{aligned} S_{i+1/2,l}^{n+1/2} &= S_{i+1/2,l}^n - \frac{\Delta t_{cfl}}{2} f(S_{i+1/2,l}^n)_x + \mathcal{O}(\Delta t_{cfl}^2) \\ S_{i+1/2,l}^n &= S_i^n + \frac{\Delta x}{2} (S_x)_{i+1}^n + \frac{\Delta t_{cfl}}{\Delta x} ((S_x)_{i+1}^n a_{i+1/2}^n \Delta x). \end{aligned} \quad (4.66)$$

Verifica-se, pela Eq. 4.59 que $\lim_{\Delta t_{cfl} \rightarrow 0}$, logo todos os termos multiplicados por Δt_{cfl} serão zerados e não haverá a necessidade de calcular a derivada de f em relação a x . Sabendo disso, é conveniente então simplificar essas equações:

$$\begin{aligned} f(S_{i+1/2,r}^{n+1/2}) &= f \left(\lim_{\Delta t_{cfl} \rightarrow 0} \left[S_{i+1/2,r}^n - \frac{\Delta t}{2} f(S_{i+1/2,r}^n)_x \right] \right) \\ &= f \left(\lim_{\Delta t_{cfl} \rightarrow 0} [S_{i+1/2,r}^n] \right) \\ &= f \left(\lim_{\Delta t_{cfl} \rightarrow 0} \left[S_{i+1}^n - \frac{\Delta x}{2} (S_x)_{i+1}^n + \frac{\Delta t_{cfl}}{\Delta x} ((S_x)_{i+1}^n a_{i+1/2}^n \Delta x) \right] \right) \\ &= f \left(S_{i+1}^n - \frac{\Delta x}{2} (S_x)_{i+1}^n \right) \\ &= f \left(S_{i+1/2}^+ \right). \end{aligned} \quad (4.67)$$

Analogamente, observa-se que $f\left(S_{i+1/2,l}^{n+1/2}\right) = f\left(S_{i+1/2}^-\right)$. Parte-se então para a substituição das reconstruções da Eq. 4.64 e Eq. 4.63 na Eq. 4.59 já substituindo o Δt_{cfl} por 0:

$$\begin{aligned} \frac{d}{dt}S_i(t) &= \frac{a_{i-1/2}^n}{2\Delta x} (S_{i-1}^n + S_i^n) + \frac{a_{i-1/2}^n}{4} ((S_x)_{i-1}^n - (S_x)_i^n) - \frac{1}{2\Delta x} \left[f\left(S_{i-1/2,r}^{n+1/2}\right) - f\left(S_{i-1/2,l}^{n+1/2}\right) \right] \\ &+ \frac{a_{i+1/2}^n}{2\Delta x} (S_i^n + S_{i+1}^n) + \frac{a_{i+1/2}^n}{4} ((S_x)_i^n - (S_x)_{i+1}^n) - \frac{1}{2\Delta x} \left[f\left(S_{i+1/2,r}^{n+1/2}\right) - f\left(S_{i+1/2,l}^{n+1/2}\right) \right] \\ &+ \left(\frac{1}{\Delta t_{cfl}} - \frac{a_{i-1/2}^n + a_{i+1/2}^n}{\Delta x} \right) \left[S_i^n + \frac{\Delta t_{cfl}}{2} (a_{i-1/2}^n - a_{i+1/2}^n) (S_x)_i^n \right. \\ &\quad \left. - \frac{\frac{\Delta t_{cfl}}{\Delta x}}{1 - \frac{\Delta t_{cfl}}{\Delta x} (a_{i-1/2}^n - a_{i+1/2}^n)} \left(f(S_{i+1/2,l}^{n+1/2}) - f(S_{i-1/2,r}^{n+1/2}) \right) \right] + \frac{1}{\Delta t_{cfl}} S_i^n. \end{aligned} \quad (4.68)$$

A Eq. 4.67 permite substituir as aproximações para $S_{i-1/2,l}^{n+1/2}$, $S_{i-1/2,r}^{n+1/2}$, $S_{i+1/2,l}^{n+1/2}$, $S_{i+1/2,r}^{n+1/2}$ através das Séries de Taylor na Eq. 4.68. Fazendo essa substituição e rearranjando os termos, obtém-se:

$$\begin{aligned} \frac{d}{dt}S_i(t) &= -\frac{1}{2\Delta x} \left[\left(f\left(S_{i+1/2}^+\right) + f\left(S_{i+1/2}^-\right) \right) - \left(f\left(S_{i-1/2}^+\right) + f\left(S_{i-1/2}^-\right) \right) \right] \\ &+ \frac{a_{i-1/2}^n}{2\Delta x} \left[\left(S_{i-1}^n + \frac{\Delta x}{2} (S_x)_{i-1}^n \right) - \left(S_i^n - \frac{\Delta x}{2} (S_x)_i^n \right) \right] \\ &+ \frac{a_{i+1/2}^n}{2\Delta x} \left[-\left(S_i^n + \frac{\Delta x}{2} (S_x)_i^n \right) + \left(S_{i+1}^n - \frac{\Delta x}{2} (S_x)_{i+1}^n \right) \right]. \end{aligned} \quad (4.69)$$

É interessante notar que a reorganização dos termos da Eq. 4.69 conduz a outra simplificação, simplesmente substituindo novamente as aproximações da variável pela direita e esquerda nos pontos. Chega-se então, na forma final da resolução do método, como mostra a Eq. 4.50. Outra forma de se escrever a Eq. 4.50 é através da sua forma conservativa. Para isso, considera-se a solução no ponto i como sendo a diferença entre os fluxos numéricos $\frac{d}{dt}S_i = -\frac{H_{i+1/2} - H_{i-1/2}}{\Delta x}$, sendo o fluxo numérico $H_{i+1/2}$ dado por:

$$H_{i+1/2}(t) = \frac{f\left(S_{i+1/2}^+\right) + f\left(S_{i+1/2}^-\right)}{2} - \frac{a_{i+1/2}^n}{2} \left(S_{i+1/2}^+ - S_{i+1/2}^- \right). \quad (4.70)$$

4.3.5 Extensão em duas dimensões do Método KT

Antes de apresentar a extensão em duas dimensões do Método KT, recordaremos que existe a necessidade de se saber quais valores de saturação serão utilizados na interface para o cálculo da transmissibilidade ($T(s)$). A transmissibilidade é necessária para obter o resultado da Equação da Pressão. Completaremos então o cálculo da transmissibilidade para o KT, para em seguida apresentar a parte final do método com sua extensão em duas dimensões.

4.3.5.1 Pressão

Como foi visto na Eq. 4.12, é necessário avaliar as permeabilidades em cada uma das interfaces entre os blocos da malha. No entanto, para calcular a permeabilidade relativa não é possível utilizar o mesmo esquema empregado no Upwind (3) para escolher a saturação. Como o KT é um esquema centrado, é possível então, calcular a transmissibilidade (Eq. 3.2) através da média harmônica, como utilizado na Eq. 4.12 anteriormente:

$$T_{i+\frac{1}{2},j} = \frac{2T_{i,j}T_{i+1,j}}{T_{i,j} + T_{i+1,j}}, \quad (4.71)$$

e de maneira análoga para $T_{i,j+\frac{1}{2}}$, lembrando ainda que $T_{i-\frac{1}{2},j} = T_{(i+\frac{1}{2})-1,j}$. Expandindo a Eq. 4.71, tem-se:

$$T_{i+\frac{1}{2},j} = \frac{2K_{i,j} \left(\frac{k_{ra}(S_{i,j})}{\mu_a} + \frac{k_{ro}(S_{i,j})}{\mu_o} \right) K_{i+1,j} \left(\frac{k_{ra}(S_{i+1,j})}{\mu_a} + \frac{k_{ro}(S_{i+1,j})}{\mu_o} \right)}{K_{i,j} \left(\frac{k_{ra}(S_{i,j})}{\mu_a} + \frac{k_{ro}(S_{i,j})}{\mu_o} \right) + K_{i+1,j} \left(\frac{k_{ra}(S_{i+1,j})}{\mu_a} + \frac{k_{ro}(S_{i+1,j})}{\mu_o} \right)}, \quad (4.72)$$

Então, a Eq. 4.71 aproxima as permeabilidades nas interfaces, enquanto o gradiente de pressão é calculado por diferenças finitas.

4.3.5.2 Saturação

O método de Kurganov-Tadmor pode ser utilizado para resolver problemas de mais uma dimensão, considerando-se um fluxo unidimensional para cada uma das duas direções, e somando-os. Além de duas dimensões, é de interesse desse trabalho resolver uma equação

de conservação da forma da Eq. 4.73:

$$\frac{\partial s}{\partial t} = \frac{1}{\phi} [-\nabla \cdot (f(s)v(s,p)) + q_a]. \quad (4.73)$$

Considerando a porosidade ϕ constante, uma velocidade v e fluxo f nas direções x e y , e uma vazão de água q_a , verifica-se que a Eq. 4.73 pode ser discretizada através do método KT em duas dimensões, como mostra a Eq. 4.74:

$$\frac{d}{dt} S_{i,j} = \frac{1}{\phi} \left[-\frac{H_{i+1/2,j}^x - H_{i-1/2,j}^x}{\Delta x} - \frac{H_{i,j+1/2}^y - H_{i,j-1/2}^y}{\Delta y} + q_a \right], \quad (4.74)$$

onde os fluxos nas direções x e y são representados por:

$$\begin{aligned} H_{i+1/2,j}^x &= \frac{v_{i+1/2,j}^x f(S_{i+1/2,j}^+) + v_{i+1/2,j}^x f(S_{i+1/2,j}^-)}{2} - \frac{a_{i+1/2,j}^x}{2} (S_{i+1/2,j}^+ - S_{i+1/2,j}^-), \\ H_{i,j+1/2}^y &= \frac{v_{i,j+1/2}^y f(S_{i,j+1/2}^+) + v_{i,j+1/2}^y f(S_{i,j+1/2}^-)}{2} - \frac{a_{i,j+1/2}^y}{2} (S_{i,j+1/2}^+ - S_{i,j+1/2}^-). \end{aligned} \quad (4.75)$$

O valor intermediário $S_{i+1/2,j}^+$ é o valor da saturação aproximada sobre a solução na malha deslocada, como mostra a Eq. 4.76.

$$S_{i+1/2,j}^+ = S_{i+1,j} - \frac{\Delta x}{2} (S_x)_{i+1,j}. \quad (4.76)$$

De maneira similar, a reconstrução na coordenada y é feita (Eq. 4.77):

$$S_{i,j+1/2}^+ = S_{i,j+1} - \frac{\Delta y}{2} (S_y)_{i,j+1}. \quad (4.77)$$

As velocidades locais de propagação $a_{i+1/2,j}^x$ são dadas por:

$$\begin{aligned} a_{i+1/2,j}^x &= \max\{|v_{i+1/2,j}^x f'(S_{i+1/2,j}^+)|, |v_{i+1/2,j}^x f'(S_{i+1/2,j}^-)|\}, \\ a_{i,j+1/2}^y &= \max\{|v_{i,j+1/2}^y f'(S_{i,j+1/2}^+)|, |v_{i,j+1/2}^y f'(S_{i,j+1/2}^-)|\}. \end{aligned} \quad (4.78)$$

Aproximar as derivadas de $(S_x)_{i,j}$ e $(S_y)_{i,j}$ requer o uso do limitador de fluxo *MinMod* [24].

$$(S_x)_{i,j} = \text{MinMod} \left(\theta \frac{S_{i,j} - S_{i-1,j}}{\Delta x}, \frac{S_{i+1,j} - S_{i-1,j}}{2\Delta x}, \theta \frac{S_{i+1,j} - S_{i,j}}{\Delta x} \right), \quad (4.79)$$

e é feito de maneira análoga para a coordenada y . O valor de θ deve estar no intervalo $1 < \theta < 2$. No nosso trabalho, adotamos $\theta = 1.8$. O operador $MinMod(q_1, q_2, \dots, q_{n-1}, q_n)$ é definido de acordo com a expressão da Eq. 4.54.

Analogamente à Eq. 4.62, com o fim garantir que o método KT em duas dimensões esteja dentro das condições de CFL, o Δt_{cfl} deve respeitar a restrição:

$$\max \left\{ \frac{\Delta t_{cfl}}{\Delta x} \cdot \max_s |f'(s)v_x(s)|, \frac{\Delta t_{cfl}}{\Delta y} \cdot \max_s |f'(s)v_y(s)| \right\} < \frac{1}{2}. \quad (4.80)$$

4.4 Totalmente Implícito

Assim como no método IMPES, utilizamos o operador de divergência discreto:

$$\nabla_h \cdot v_\alpha = \frac{(v_\alpha)_{i+1/2,j} - (v_\alpha)_{i-1/2,j}}{\Delta x} + \frac{(v_\alpha)_{i,j+1/2} - (v_\alpha)_{i,j-1/2}}{\Delta y}. \quad (4.81)$$

A fim de simplificar a notação, trataremos o produto $\Delta x \Delta y \Delta t$ por Δ_{xyt} e da mesma forma, essa notação análoga será utilizada para outros produtos. Reescrevendo a Eq. 3.16 utilizando o operador discreto de divergência (Eq. 4.81), tem-se:

$$\begin{aligned} F(p^{n+1}, s^{n+1}) = & \phi \Delta_{xy}(s_\alpha)^{n+1} + \Delta_{yt} \left(v_{\alpha_{i+1/2,j}} - v_{\alpha_{i-1/2,j}} \right) \\ & + \Delta_{xt} \left(v_{\alpha_{i,j+1/2}} - v_{\alpha_{i,j-1/2}} \right) - \Delta_{xyt}(q_\alpha)^{n+1} = \phi \Delta_{xy}(s_\alpha)^n, \end{aligned} \quad (4.82)$$

onde os subscritos α representam as fases tratadas nesse trabalho $\alpha = a$ (água) e $\alpha = o$ (óleo). Reescreve-se então F em termos de s_a, p_o . A equação para F_a é:

$$\begin{aligned} F_{a,p_o^n, s_a^n, I} = & \phi \Delta_{xy}(s_{i,j}) + \Delta_{yt} \{ v_{a_{i+1/2,j}} - v_{a_{i-1/2,j}} \} \\ & + \Delta_{xt} \{ v_{a_{i,j+1/2}} - v_{a_{i,j-1/2}} \} - \Delta_{xyt}(q_a)^{n+1}. \end{aligned} \quad (4.83)$$

Enquanto para F_o , tem-se que $s_o = 1 - s_a$, portanto:

$$\begin{aligned} F_{o,p_o^n, s_a^n, I} = & \phi \Delta_{xy}((1 - s_{i,j})) + \Delta_{yt} \{ v_{o_{i+1/2,j}} - v_{o_{i-1/2,j}} \} \\ & + \Delta_{xt} \{ v_{o_{i,j+1/2}} - v_{o_{i,j-1/2}} \} - \Delta_{xyt}(q_o)^{n+1}. \end{aligned} \quad (4.84)$$

onde as velocidades nas interfaces para as direções x e y para água e óleo são dadas por:

$$\begin{aligned}
v_{a_{i+1/2,j}} &= -T_a(s_{i+1/2,j}^{up}) \left(\frac{p_{i+1,j} - p_{i,j}}{\Delta x} \right) & v_{o_{i+1/2,j}} &= -T_o(s_{i+1/2,j}^{up}) \left(\frac{p_{i+1,j} - p_{i,j}}{\Delta x} \right), \\
v_{a_{i-1/2,j}} &= -T_a(s_{i-1/2,j}^{up}) \left(\frac{p_{i,j} - p_{i-1,j}}{\Delta x} \right) & v_{o_{i-1/2,j}} &= -T_o(s_{i-1/2,j}^{up}) \left(\frac{p_{i,j} - p_{i-1,j}}{\Delta x} \right), \\
v_{a_{i,j+1/2}} &= -T_a(s_{i,j+1/2}^{up}) \left(\frac{p_{i,j+1} - p_{i,j}}{\Delta y} \right) & v_{o_{i,j+1/2}} &= -T_o(s_{i,j+1/2}^{up}) \left(\frac{p_{i,j+1} - p_{i,j}}{\Delta y} \right), \\
v_{a_{i,j-1/2}} &= -T_a(s_{i,j-1/2}^{up}) \left(\frac{p_{i,j} - p_{i,j-1}}{\Delta y} \right) & v_{o_{i,j-1/2}} &= -T_o(s_{i,j-1/2}^{up}) \left(\frac{p_{i,j} - p_{i,j-1}}{\Delta y} \right).
\end{aligned} \tag{4.85}$$

Como visto anteriormente, utiliza-se nesse trabalho o método de Newton para resolver o sistema. O método de Newton é calculado através de uma equação do tipo:

$$F'_k(\Delta p_k, \Delta s_k) = -F_k + \phi \Delta_{xy}(s_\alpha)^n \tag{4.86}$$

onde $\Delta p_k = p^{k+1} - p^k$, $\Delta s_k = s^{k+1} - s^k$, $F_k = F(p_k, s_k)$, $F'_k = F'(p_k, s_k)$. É necessário então calcular a matriz Jacobiano $F'(p, s)$. A matriz $F'(p, s)$ se caracteriza por ser pentadiagonal por blocos 2×2 do tipo:

$$\begin{pmatrix} a_{I,J} & b_{I,J} \\ c_{I,J} & d_{I,J} \end{pmatrix} \Rightarrow a = \frac{\partial F_a(s_I, p_I)}{\partial s_J}; b = \frac{\partial F_a(s_I, p_I)}{\partial p_J}; c = \frac{\partial F_o(s_I, p_I)}{\partial s_J}; d = \frac{\partial F_o(s_I, p_I)}{\partial p_J}. \tag{4.87}$$

sendo I pertencente ao intervalo $[0, \dots, n \times m]$ e J pertencente a um intervalo de mesmo tamanho $[0, \dots, n \times m]$ para um problema discretizado em malha de tamanho $i = 0, \dots, n$ e $j = 0, \dots, m$.

O método de Newton exige que seja calculado o valor da matriz jacobiana $F'(p, s)$ em relação aos pontos (i, j) , $(i + 1, j)$, $(i - 1, j)$, $(i, j + 1)$ e $(i, j - 1)$ para todo ponto (i, j) da malha. Detalhes de como calcular o jacobiano em todos esses pontos estão disponíveis no Apêndice B.

4.5 Difusão Numérica dos Métodos

É possível comparar os métodos apresentados anteriormente através do cálculo da difusão numérica gerada por cada um deles [25], [9]. O método de Lax-Friedrichs, por exemplo,

acrescenta uma difusão de acordo com a equação abaixo:

$$\mathcal{O}\left(\frac{\Delta m^2}{\Delta t}\right), \quad (4.88)$$

onde Δm é igual a Δx em faces verticais e Δy em faces horizontais. O método de Nessyahu-Tadmor, por sua vez consegue reduzir a difusão do método de maneira significativa. Na Eq. 4.89 pode-se ver que a difusão desse método é menor que de Lax-Friedrichs.

$$\mathcal{O}\left(\frac{\Delta m^4}{\Delta t}\right). \quad (4.89)$$

Outros métodos que detalhamos nesse trabalho e que utilizam a forma semi-discreta para serem resolvidos não geram difusão numérica dependentes do intervalo de tempo. Repare por exemplo, na difusão numérica do método Upwind, onde não há dependência do Δt :

$$\mathcal{O}(\Delta m). \quad (4.90)$$

Da mesma forma, o método de Rusanov possui uma difusão numérica muito grande, e comparável ao método Upwind, dada por:

$$\mathcal{O}(\Delta m). \quad (4.91)$$

Já o método de Kurganov-Tadmor em sua forma semi-discreta, além de não possuir difusão numérica dependente do intervalo de tempo, tem um valor muito inferior aos outros métodos, como pode ser visto na Eq. 4.92:

$$\mathcal{O}(\Delta m^3). \quad (4.92)$$

Podemos considerar outros esquemas numéricos, como o esquema Lax-Wendroff ou o método de Warming-Beam, também conhecido como Upwind de Segunda Ordem. O esquema de Warming-Beam [17] funciona adicionando uma correção da difusão numérica ao esquema Upwind tradicional:

$$s_{i,j}^{n+1} = s_{i,j}^n - u \frac{\Delta t}{\Delta x} (s_{i,j}^n - s_{i,j-1}^n) + \frac{1}{2} u \frac{\Delta t}{\Delta x} (u \frac{\Delta t}{\Delta x} - 1) (s_{i,j}^n - 2s_{i,j-1}^n + s_{i-2}^n). \quad (4.93)$$

O último termo aparece como uma correção de segunda-ordem tomada no ponto $(i-1)$, e compensa a difusão numérica gerada pelo esquema de primeira ordem. Esquemas de Lax-Wendroff e Warming-Beam são os únicos capazes de alcançar uma acurácia de segunda ordem nos suportes $(i-1, i, i+1)$ e $(i-2, i-1, i)$, respectivamente. Esquemas com maiores suportes também podem ser utilizados para gerar métodos de segunda e terceira ordem, veja [26].

O método de Kurganov-Tadmor é formado no suporte $(i-1, i, i+1, i+2)$. No entanto, os valores da aproximada da derivada são zerados nos extremos, portanto o método satisfaz essencialmente uma consistência de três pontos. Maiores detalhes em [9].

O esquema de Warming-Beam não consegue representar bem as descontinuidades e pode gerar resultados que não correspondem fisicamente ao problema, pois assim como o método de Lax-Wendroff, ele não é TVD (Total Variation Diminishing), veja [21].

5 METODOLOGIA

5.1 Implementação

A implementação do método KT utilizou como base um simulador previamente implementado por [7, 6]. Todos os códigos de todas as versões foram escritos em linguagens C/C++ e a solução do BDF faz uso das bibliotecas CVODE (veja [16]) para resolver o problema hiperbólico, e PETSc (veja [27]) para a solução do problema elíptico. O problema totalmente implícito é resolvido através de um simulador que utiliza a biblioteca PETSc e foi implementado por Elisa Portes dos Santos [6]. Esse simulador sofreu adaptações para se adequar aos problemas que serão tratados nesse capítulo. A Tabela Tab. 5.1 mostra em detalhes a linguagem usada por todos os métodos e as bibliotecas que cada um utiliza.

Tabela 5.1: Linguagem e Bibliotecas utilizadas nas implementações.

Esquema	Discret. Temporal	Discret. Espacial	C/C++	PETSc	CVODE
Implícito	Newton	Upwind	×	×	
IMPES	Euler	Upwind	×	×	
IMPIS	BDF	Upwind	×	×	×
IMPES	Euler	KT	×	×	
IMPIS	BDF	KT	×	×	×

Os tempos foram medidos em ambiente Linux (distribuição Ubuntu 9.10) em uma máquina com 8GB de memória RAM e processador Intel Core I7 860 com 2.80GHz. Para computar os tempos de maneira mais precisa, cada uma das simulações foi repetida três vezes e consideramos a média desse tempo. O desvio padrão entre esses tempos também foi calculado.

Para comparar os métodos, dois diferentes experimentos foram realizados. Em um deles, utilizou-se funções de permeabilidade relativa para a água e óleo de forma que a função de fluxo fracionário $f(s)$ se tornasse linear, e a velocidade, constante. Dessa forma, podemos comparar as soluções numéricas obtidas pelos métodos com a solução analítica do problema, que se traduz na simples translação da condição inicial. No outro caso, utilizamos configurações bastante conhecidas na área de reservatório de petróleo, o *Five-Spot* e o *Two-Spot*.

A Norma L2 foi utilizada para calcular o erro gerado por cada um dos métodos,

seguinto a fórmula da Eq. 5.1:

$$e = \frac{\sqrt{\sum_i \sum_j (s_{i,j} - \bar{s}_{i,j})^2}}{\sqrt{\sum_i \sum_j (\bar{s}_{i,j})^2}}, \quad (5.1)$$

onde $s_{i,j}$ é a solução numérica do simulador na posição (i, j) e $\bar{s}_{i,j}$ a solução analítica do problema nessa mesma posição.

Diferentes tolerâncias de erro absolutas foram testadas ($1.0e^{-1}$, $1.0e^{-3}$ e $1.0e^{-9}$) para os métodos do CVODE mas os resultados com tolerância maior que $1.0e^{-9}$ apresentaram inconsistências (como saturação negativa) portanto foram descartados e apenas resultados com tolerância $1.0e^{-9}$ foram considerados. Somente o método BDF se comportou de maneira estável para qualquer valor de tolerância, e apenas no caso do fluxo linear para o Esquema Upwind. Isso é facilmente explicado pelo fato de o Esquema Upwind ser um método incondicionalmente estável para fluxos lineares.

5.2 Fluxo fracionário linear

Nessas simulações, definimos as seguintes equações para as permeabilidades relativas:

$$\begin{aligned} k_{rw} &= s, \\ k_{ro} &= 1 - s. \end{aligned} \quad (5.2)$$

Além disso, definimos um reservatório isolado sem poços, de dimensões 4×4 e sujeito a uma velocidade $v = (v^x, v^y)$ constante e diagonal $v^x = v^y = 1$.

As viscosidades da água e óleo iguais a um ($\mu_a = \mu_o = 1$), saturação residual do óleo e saturação irreduzível da água iguais a zero ($s_{ai} = s_{or} = 0$) com permeabilidade absoluta ($K = 1$) e porosidade constante ($\phi = 1$).

Como solução inicial, geramos uma malha com valores nulos exceto para a região com $1 < x < 2$ e $1 < y < 2$. Após 1s de simulação temos um deslocamento diagonal de uma posição na malha para x e y . Para esse caso é conhecida a solução analítica, ou seja, pode-se comparar a resolução numérica obtida pelo simulador com o resultado analítico. A Fig. 5.1 mostra o deslocamento executado por essa simulação.

Para cada um dos métodos (KT e Upwind) foram feitas simulações com malhas de três diferentes tamanhos (33×33 , 99×99 e 297×297).

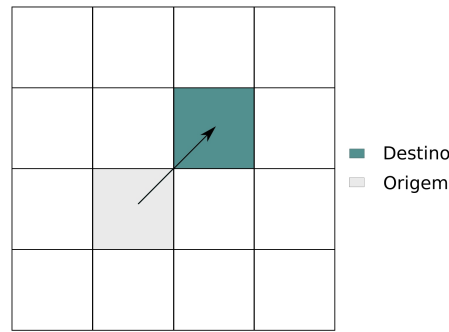


Figura 5.1: Deslocamento da solução inicial

5.3 Permeabilidade homogênea

Problemas do tipo *five-spot* são conhecidos na extração de petróleo como reservatórios com 5 poços perfurados, sendo um centralizado e outros quatro poços, cada um em uma extremidade. Neste exemplo, o poço centralizado é o chamado poço produtor, de onde se pretende recolher o óleo extraído e outros quatro poços são injetores de água (veja Fig. 5.2). Na simulação do problema *five-spot* definimos as seguintes permeabilidades relativas para água e óleo:

$$\begin{aligned} k_{rw} &= 0.4 \left(\frac{s - s_{ai}}{1 - s_{or} - s_{ai}} \right)^2, \\ k_{ro} &= 0.8 \left(\frac{1 - s - s_{or}}{1 - s_{or} - s_{ai}} \right)^2. \end{aligned} \quad (5.3)$$

onde $s_{ai} = 0.2$ é a saturação irreduzível da água e $s_{or} = 0.2$ é a saturação residual do óleo. A viscosidade da água vale 1 ($\mu_a = 1.0cp$).

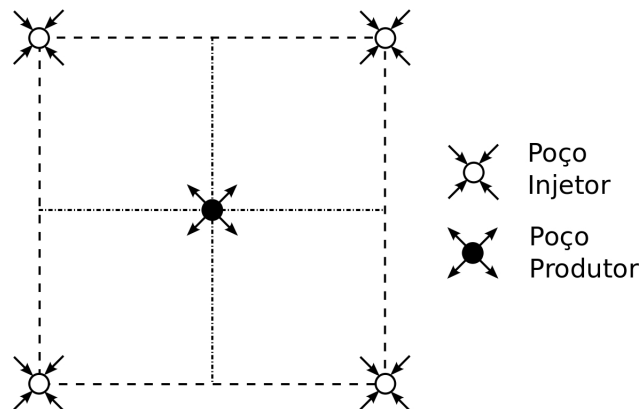


Figura 5.2: Reservatório do tipo Five-spot

Dessa vez, foi utilizado um reservatório de tamanho $200 \times 200m$ com altura de $h = 20m$.

Em cada um dos poços injetores são injetados $Q_{inj} = 100.0m^3/dia$ e produzidos $Q_{prod} = -400.0m^3/dia$ nos poços produtores. A solução inicial desse problema é uma malha com uma saturação igual ao valor da saturação irreduzível da água, ou seja, $s_{i,j} = s_{ai} = 0.2$, $\forall (x, y) \in \Omega$.

Ao contrário do problema linear, o problema *five-spot* não possui solução analítica. Realizamos, então, uma simulação com malha de tamanho 567×567 . A solução gerada foi utilizada como solução analítica para o problema e com ela os erros das simulações com tamanho de malha (21×21 , 63×63 e 189×189) foram comparados. O erro relativo foi calculado através da Eq. 5.1.

Com essas mesmas características foram realizadas simulações para dois casos, considerando o óleo com viscosidade relativamente próxima à da água e com viscosidades altas, ou seja, com óleo pesado. Enquanto no primeiro caso a água vai empurrando o óleo para o poço produtor de maneira gradual, no outro, a água consegue abrir caminho e chegar mais rapidamente no poço produtor, tornando a extração mais complexa.

O óleo de baixa viscosidade ($\mu_o = 5.0cp$), conhecido na indústria como óleo leve, foi simulado em um reservatório com porosidade constante igual a 0.2 ($\phi = 0.2$) e permeabilidade constante igual a $100mD$. O óleo pesado, por sua vez, possui alta viscosidade ($\mu_o = 200.0cp$) e foi considerado escoando em reservatório com porosidade constante igual a 0.096 ($\phi = 0.096$) e permeabilidade igual a $0.9mD$.

5.4 Permeabilidade heterogênea

Utilizando as mesmas configurações do *five-spot*, também comparamos os métodos utilizando uma malha de permeabilidade heterogênea, já que nesse caso ocorrem as chamadas formações de dedos [28]. Como esse estudo se aproxima mais de casos reais, é possível ter uma visão geral do comportamento dos métodos ao resolverem situações mais complexas.

Novamente as Equações de Permeabilidade Relativas não Lineares (Eq. 5.3) são utilizadas com os mesmos valores para a saturação irreduzível da água ($s_{ai} = 0.2$), mesma saturação residual do óleo ($s_{or} = 0.2$).

Nessas simulações um outro modelo de reservatório foi utilizado: um quarto de *five-spot* ou *two-spot*, que nada mais é que uma parcela do *five-spot* da Fig. 5.2. Nesse caso existe um poço produtor e outro injetor, apenas. A Fig. 5.3 ilustra como fica o 1/4 de

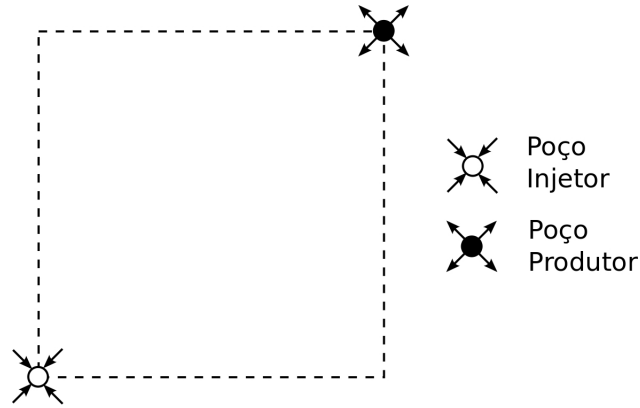


Figura 5.3: Reservatório Two-spot

five-spot. O reservatório tem um tamanho de $200 \times 200\text{m}$ com altura de $h = 20\text{m}$ e permeabilidade variável. No poço injetor é introduzido $Q_{inj} = 100.0\text{m}^3/\text{dia}$ de água e produzido $Q_{prod} = -100.0\text{m}^3/\text{dia}$ no poço produtor. Novamente, a solução inicial é a o valor da saturação irreduzível da água, ou seja, $s_{i,j} = s_{ai} = 0.2, \forall (x, y) \in \Omega$.

Da mesma forma que o problema *five-spot*, não há como calcular a solução analítica, portanto uma simulação com malha de tamanho 567×567 é tratada como solução exata e o erro relativo é calculado através da Eq. 5.1. Novamente, foram utilizadas malhas de tamanho $21 \times 21, 63 \times 63$ e 189×189 .

Novamente, foram feitas simulações considerando dois tipos de óleo. O óleo leve ($\mu_o = 5.0\text{cp}$) foi simulado em um reservatório com porosidade constante igual a 0.2 ($\phi = 0.2$) e o óleo pesado ($\mu_o = 200.0\text{cp}$) foi considerado escoando em reservatório com porosidade constante igual a 0.096 ($\phi = 0.096$). Em ambos os casos o campo de permeabilidade utilizado é o mesmo.

6 RESULTADOS

Os resultados dos experimentos foram divididos em duas seções: primeiro apresentamos uma comparação dos métodos de discretização temporal (IMPES/Euler, IMPIS/BDF e Totalmente Implícito), sendo que todos utilizam o Esquema Upwind de discretização espacial; para depois apresentarmos os resultados com a discretização espacial produzidos pelo KT. Para cada seção, temos dois tipos de simulações: Five-Spot e Two-Spot (ou um quarto de Five-Spot).

6.1 Métodos de discretização temporal

6.1.1 *Five-Spot*

6.1.1.1 Óleo leve

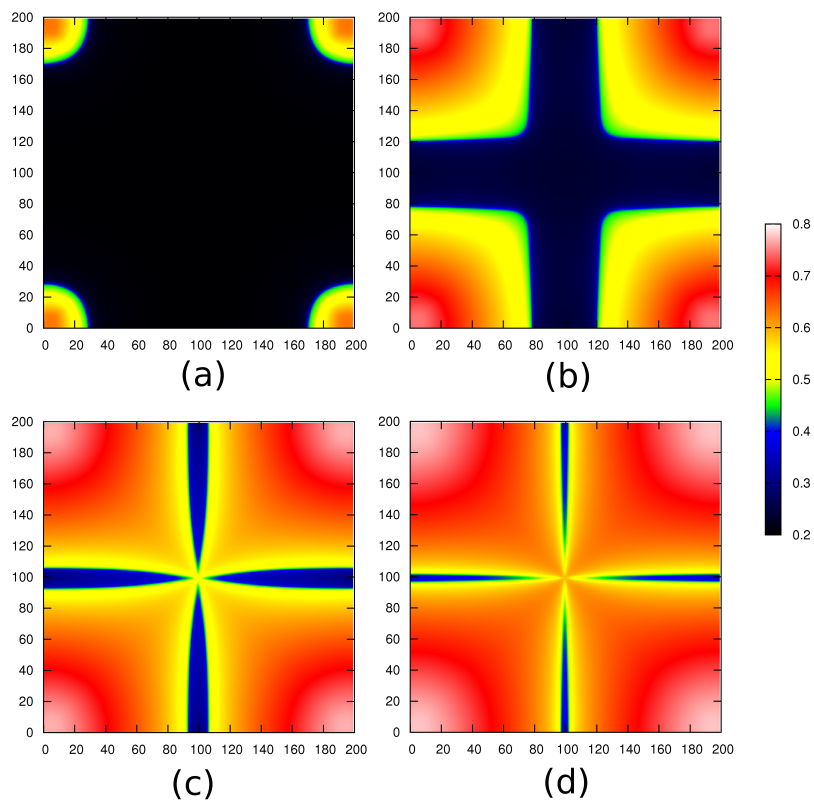


Figura 6.1: Mapa de cores para a saturação com óleo leve em (a) 6 dias, (b) 100 dias, (c) 200 dias e (d) 600 dias no reservatório Five-Spot.

Iniciamos a apresentação dos resultados através dos experimentos utilizando o reservatório Five-Spot com óleo leve. A Fig. 6.1 mostra como é a evolução da água no reservatório após 6, 100, 200 e 600 dias. Nesse tipo de simulação a água é injetada nos extremos do reservatório. Através da figura pode-se notar que a água chega ao poço produtor entre o centésimo e o ducentésimo dia de simulação. Assim como em todos os gráficos apresentados neste capítulo, temos três tamanhos diferentes de malha (21×21 , 63×63 e 189×189) para cada tipo de método avaliado.

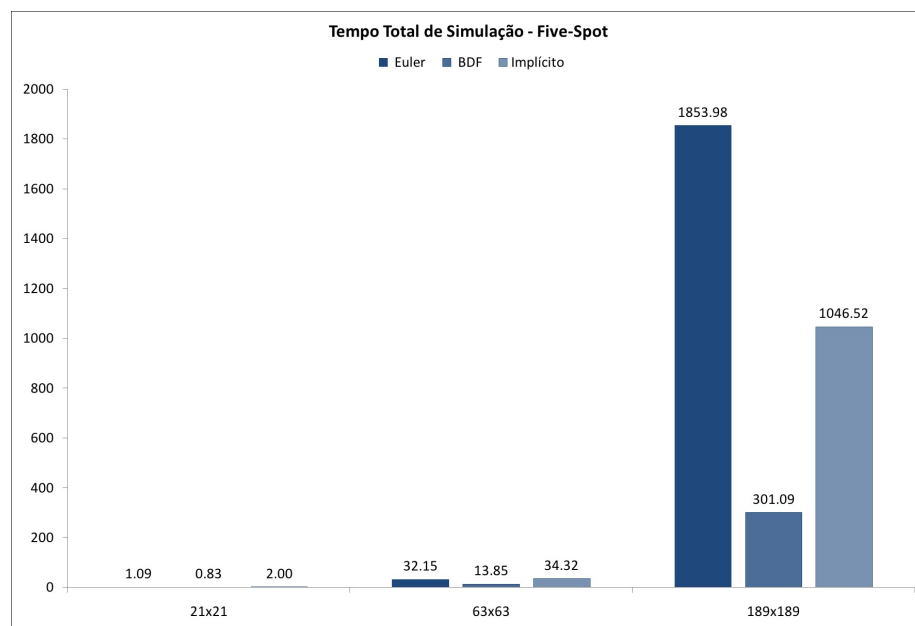


Figura 6.2: Tempo total (em segundos) de simulação para resultados com malhas de tamanho 21×21 , 63×63 e 189×189 .

A Fig. 6.2 ilustra o tempo total de simulação em cada método. É fácil notar que os métodos Implícito e Euler Explícito são os que exigem maior tempo de computação.

Analisando mais a fundo os tempos de simulação para o problema Five-Spot, temos, na Fig. 6.3 a distribuição do tempo de simulação entre a pressão e a saturação. Enquanto para o método de Euler a saturação é a parte do problema onde se gasta mais tempo, no método BDF a pressão passa a ser o gargalo. O método Implícito calcula a pressão e saturação ao mesmo tempo.

As Figuras 6.4 e 6.5 ilustram o erro numérico da pressão e da saturação em comparação com uma solução de malha mais refinada.

Os erros numéricos do método Implícito se destacam por apresentar os maiores valores na maioria dos casos, aumentando relativamente à medida que a malha é refinada. O método de Euler chega a apresentar erros menores para a saturação, apesar de ainda

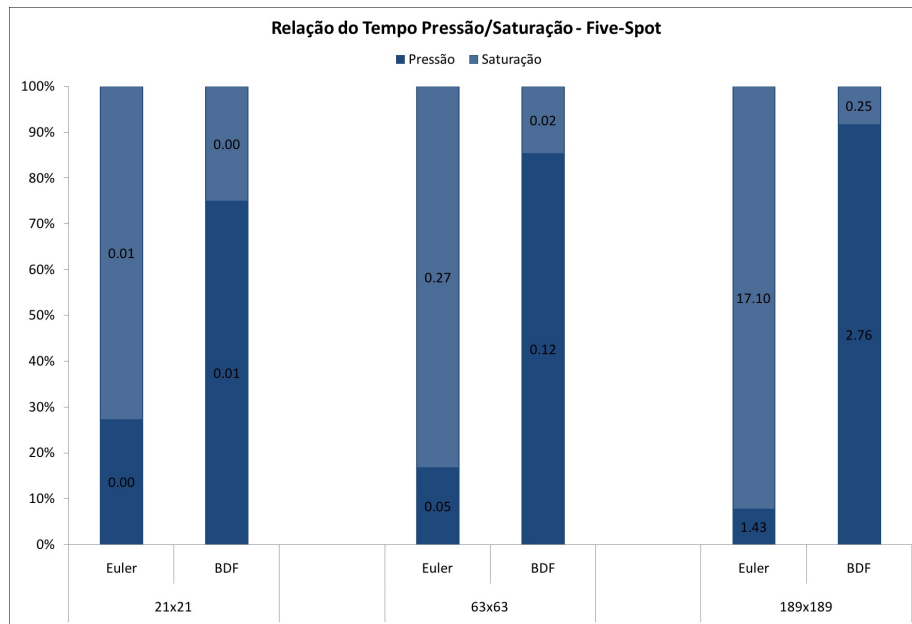


Figura 6.3: Relação entre o tempo utilizado no processamento da pressão e da saturação agrupados de acordo com o método e tamanho de malha.

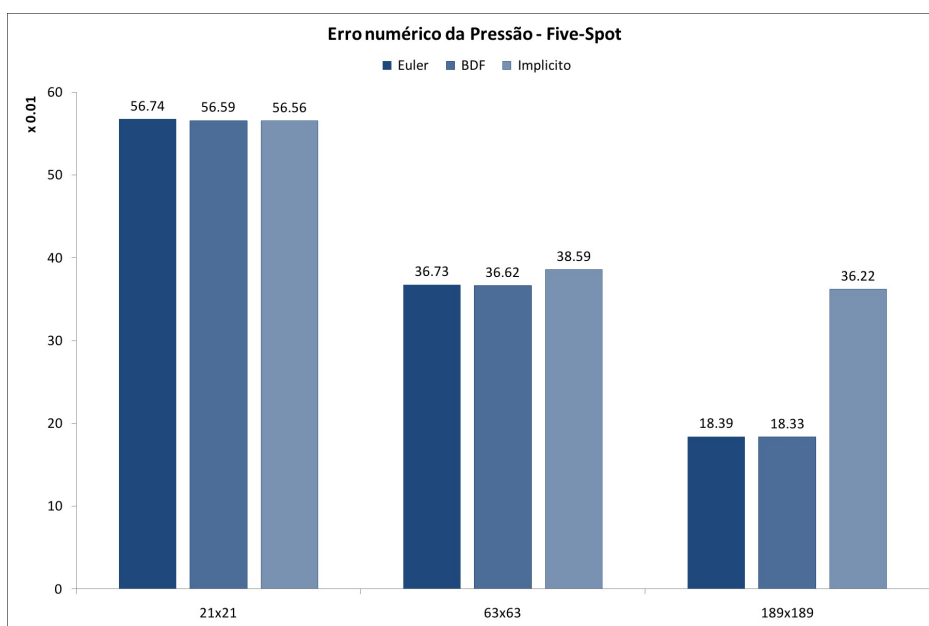


Figura 6.4: Erro numérico dos métodos relativos à pressão.

muito próximos dos erros do BDF. Isso pode ser explicado analisando o próximo gráfico (Fig. 6.6) onde se apresenta o tamanho médio dos intervalos de tempo dos métodos. Como o método de Euler utiliza intervalos menores, ele é capaz de resolver o problema introduzindo erros menores.

Apesar de possuir erros numéricos pouco maiores que outros métodos em alguns casos, o BDF ainda consegue resolver o problema em menor tempo, portanto pode-se recomen-

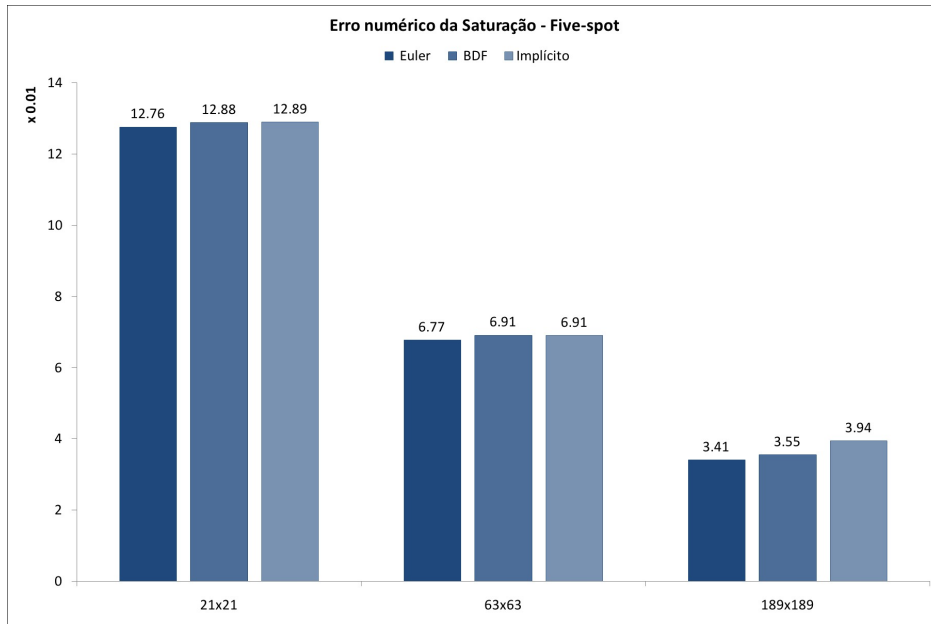


Figura 6.5: Erro numérico dos métodos relativos à saturação.

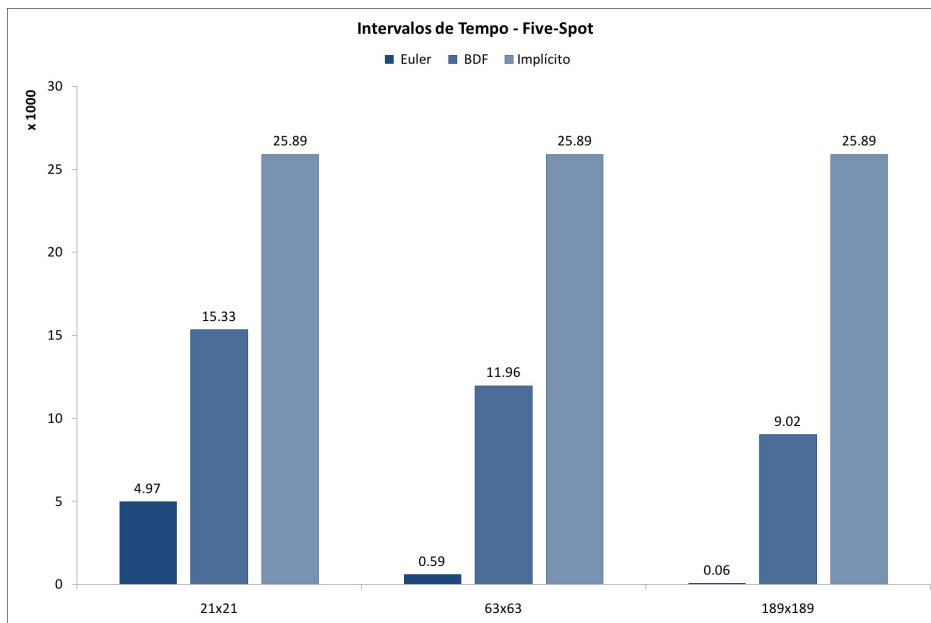


Figura 6.6: Tamanho médio dos intervalos de tempo utilizados para resolver a equação da saturação (em milhares de segundos).

dar, entre esses métodos, o BDF para esse tipo de problema. O método Totalmente Implícito, ao contrário, produziu erros maiores que os outros métodos.

6.1.1.2 Óleo pesado

Repetimos o experimento anterior utilizando configurações diferentes para a viscosidade do óleo e a porosidade. Dessa vez, a simulação ocorre em um reservatório com o chamado

óleo pesado. Nesse caso a água penetra mais facilmente no óleo e chega mais cedo ao poço produtor, como pode ser observado na Fig. 6.7:

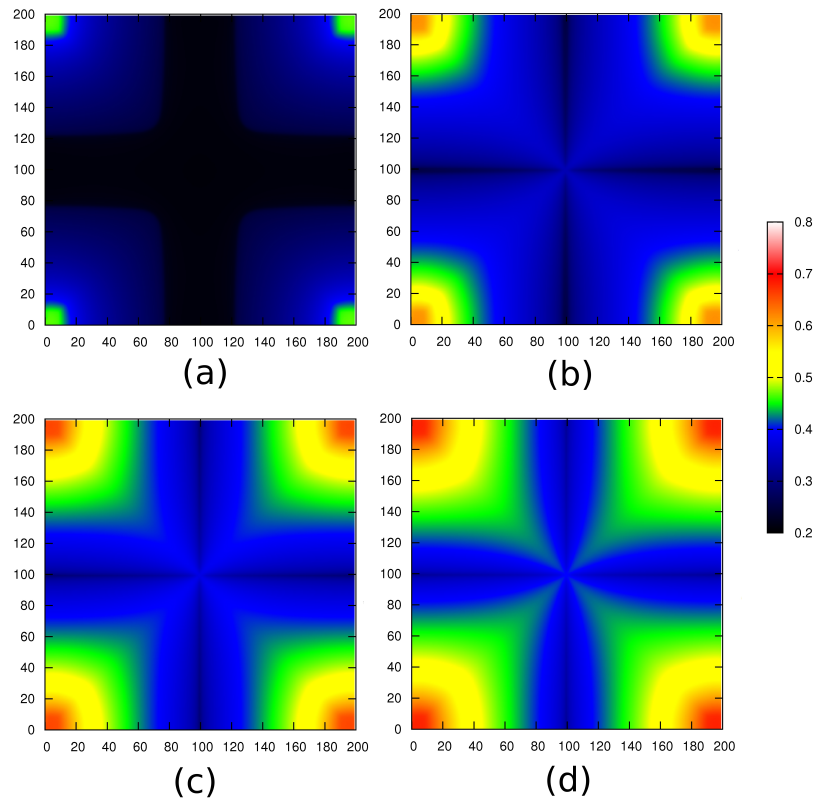


Figura 6.7: Mapa de cores para a saturação da água com óleo pesado em (a) 6 dias, (b) 100 dias, (c) 200 dias e (d) 600 dias no reservatório Five-Spot.

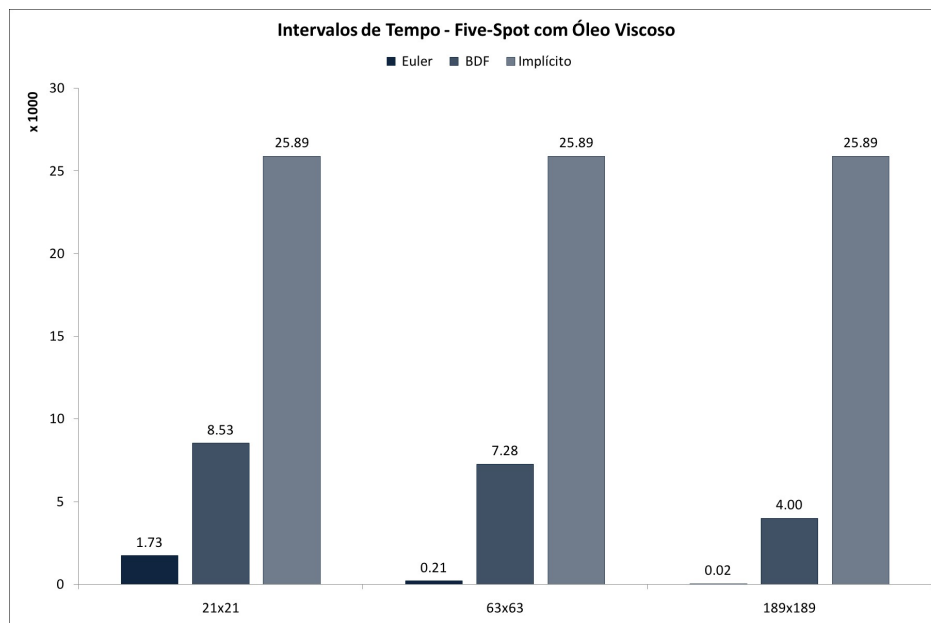


Figura 6.8: Tamanho dos intervalos de tempo utilizados para resolver a equação da saturação.

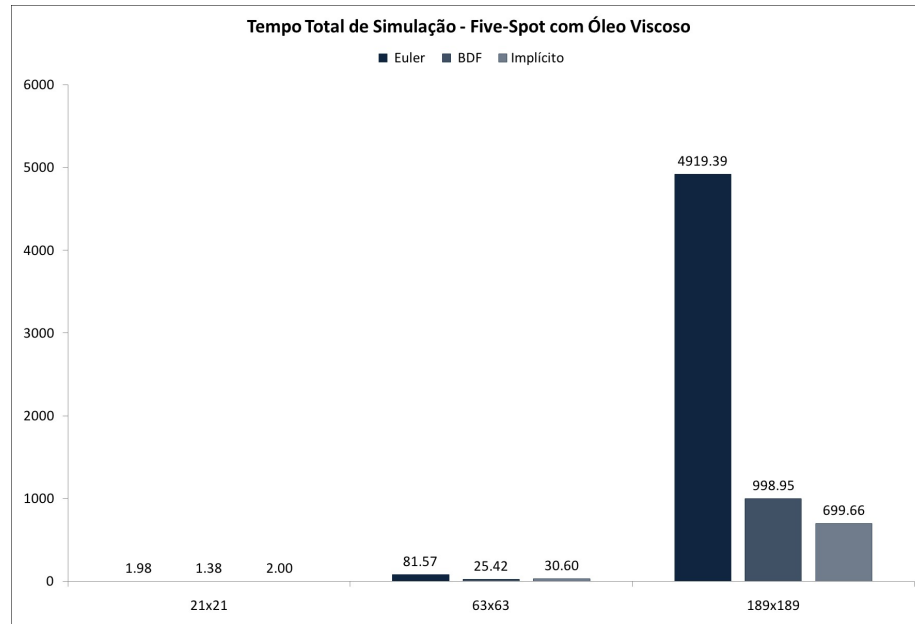


Figura 6.9: Tempo total (em segundos) de simulação para resultados com malhas de tamanho 21×21 , 63×63 e 189×189 .

A água chega ao poço produtor antes de 100 dias, enquanto no caso anterior ela chegava após esse tempo. Além disso, nesse caso temos condições de CFL mais restritas. A Fig. 6.8 mostra que o método de Euler, o único método de discretização explícito avaliado, evolui com passos de tempo menores.

Devido a essa maior restrição nos intervalos de tempo, o método de Euler demora mais tempo que os demais para resolver o problema na maioria das configurações, como pode ser visto na Fig. 6.9. Nessas simulações, o método BDF chega à solução com os menores tempos de execução em malhas mais grossas, porém o método Implícito gasta menos tempo com a malha mais refinada.

Em relação aos erros numéricos não ocorrem grandes diferenças entre os métodos com óleo leve e óleo pesado, portanto omitiremos os resultados. Como nas simulações com óleo leve, a saturação foi a computação mais custosa para o método de Euler enquanto a pressão foi mais custosa para o método BDF.

6.1.2 *Two-Spot*

6.1.2.1 Óleo leve

Nessa subseção serão comparados os métodos de discretização temporal em reservatórios do tipo Two-Spot. A Fig. 6.10 mostra como a água percorre o reservatório em 10, 250, 500

e 1000 dias. Nesse caso foi utilizado um campo de permeabilidade que varia espacialmente, o que causa a formação dos chamados "dedos", como pode se observar.

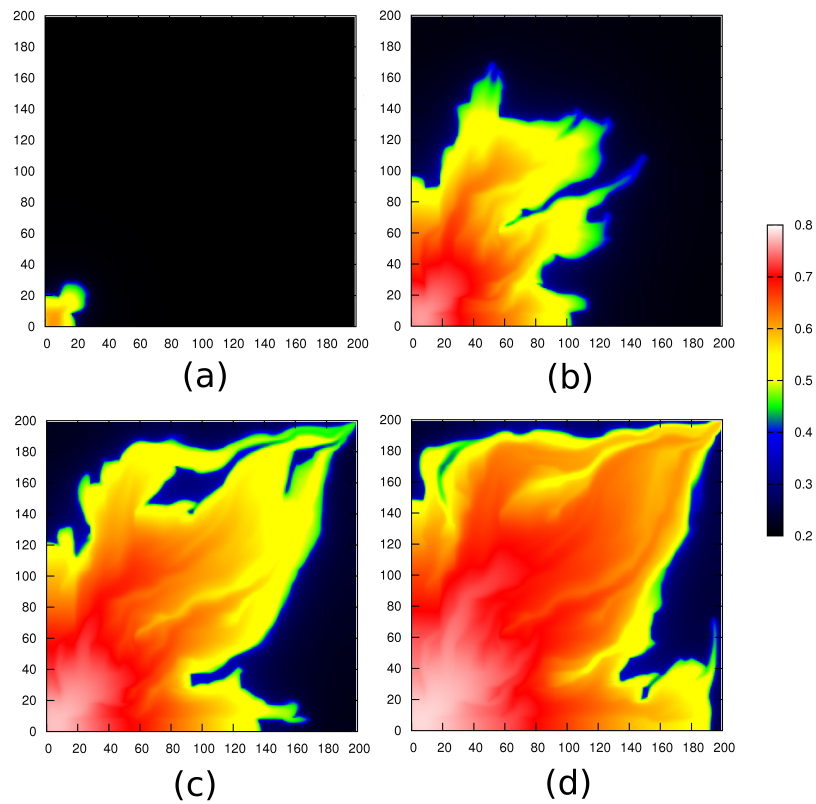


Figura 6.10: Mapa de cores para a saturação da água com óleo leve em (a) 10 dias, (b) 250 dias, (c) 500 dias e (d) 1000 dias no reservatório Two-Spot.

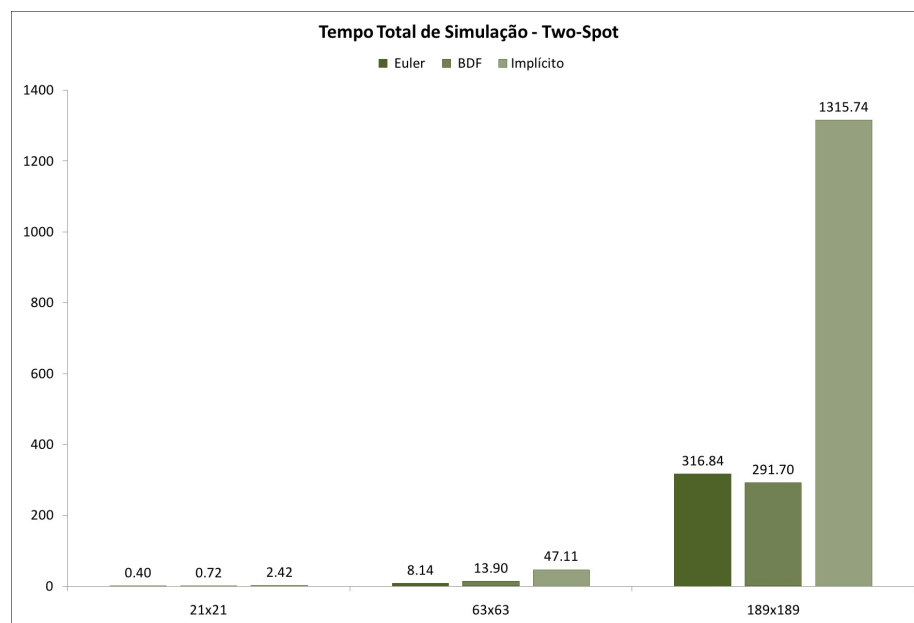


Figura 6.11: Tempo total de simulação.

Nessas simulações a relação do tempo de resolução entre os métodos (Fig. 6.11) ficou semelhante ao caso Five-Spot com óleo leve. Novamente o método BDF conseguiu resolver os problemas em menor tempo, além de manterem relações próximas aos casos anteriores de tempo entre o cálculo da pressão e da saturação, como mostra a Fig. 6.12.

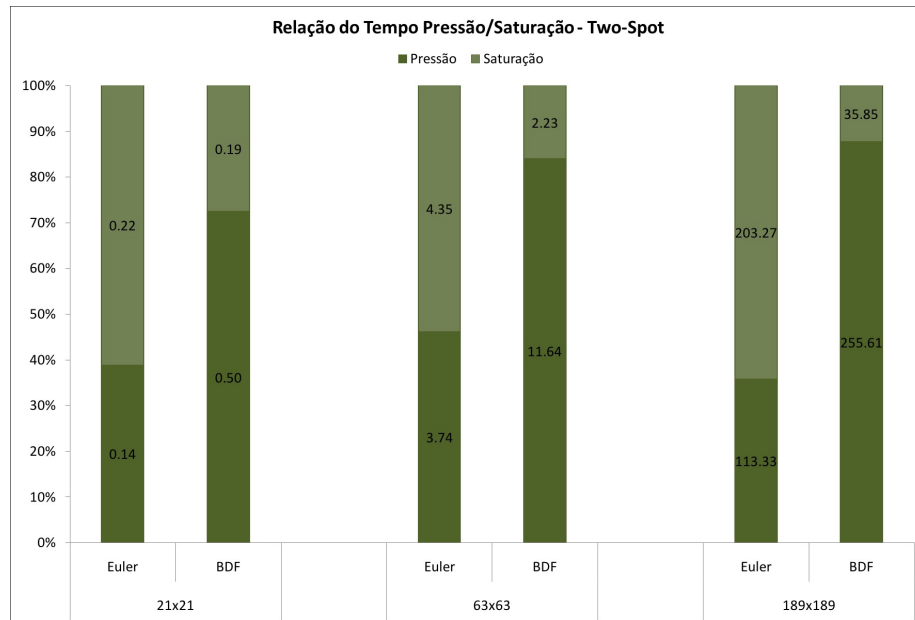


Figura 6.12: Relação entre o tempo utilizado no processamento da pressão e da saturação agrupados de acordo com o método e tamanho de malha.

Como esperado, os intervalos de tempo do método Euler foram os menores, e os intervalos do método Totalmente Implícito, os maiores. Os erros numéricos mantiveram a mesma proporção dos casos anteriores. Omitiremos então esses resultados para tornar mais fácil a leitura.

Vale ressaltar, no entanto, que considerando erros muito próximos e tempos inferiores do método BDF, ele pode ser considerado como o método que melhor resolve o problema nesse tipo de simulação entre os métodos avaliados.

6.1.2.2 Óleo pesado

Em simulações com reservatórios do tipo Two-Spot e permeabilidade variável no espaço é importante verificar também a influência que características do óleo e do reservatório, como viscosidade e porosidade respectivamente, exercem sobre as condições de CFL. A Fig. 6.13 mostra como ocorre uma simulação com óleo pesado e baixa porosidade nos intervalos de 10, 250, 500 e 1000 dias. Repare que ao utilizar óleo pesado, novamente, a água chega ao poço produtor com menos de 250 dias, ao contrário do caso com óleo leve.

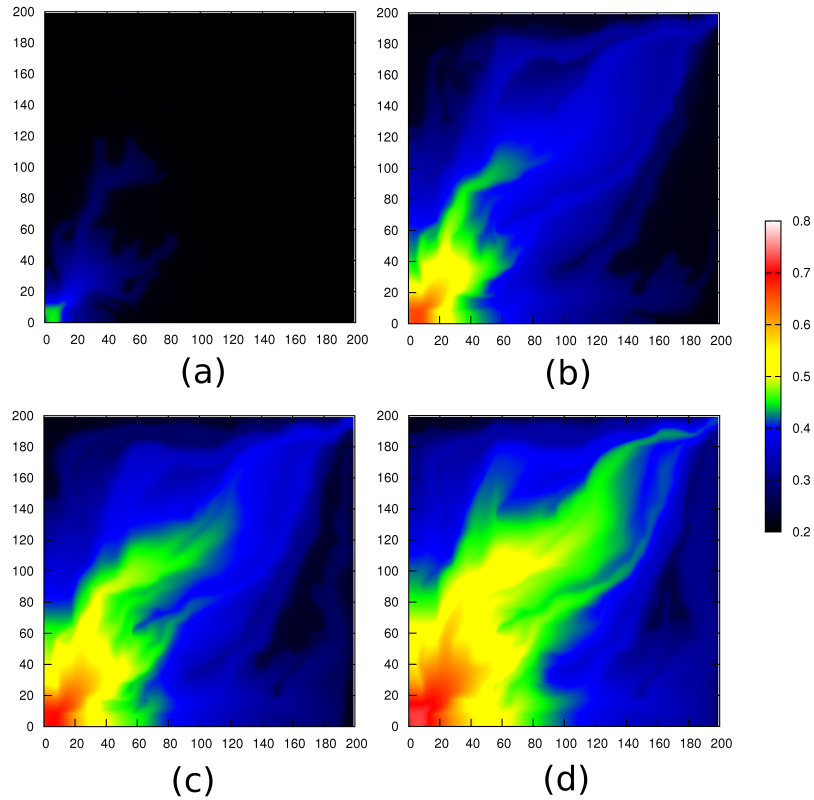


Figura 6.13: Mapa de cores para a saturação da água com óleo pesado em (a) 10 dias, (b) 250 dias, (c) 500 dias e (d) 1000 dias no reservatório Two-Spot.

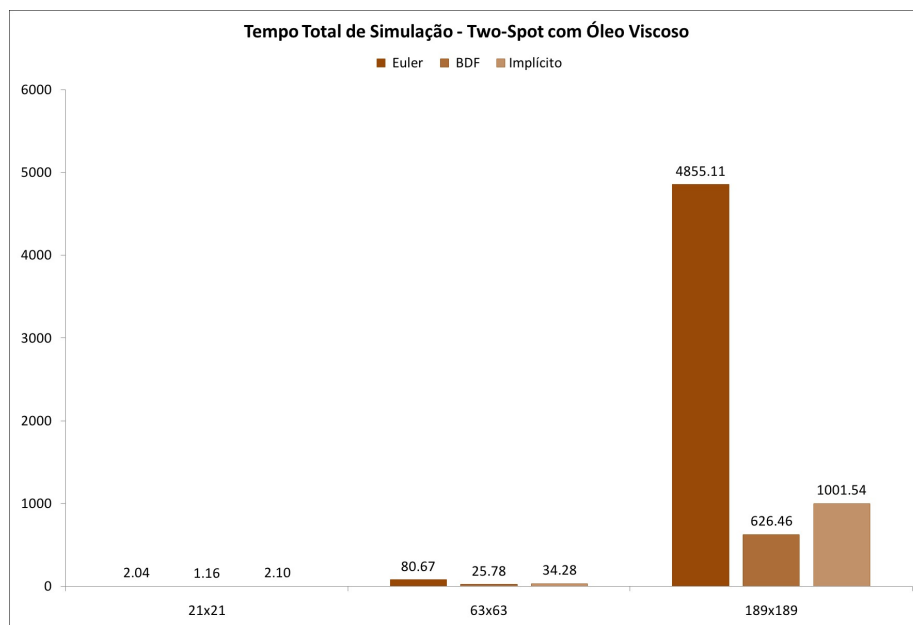


Figura 6.14: Tempo total (em segundos) de simulação para os diferentes métodos.

Novamente comparamos os tempos, erros e intervalo de tempo de cada um dos métodos de evolução no tempo. A Fig. 6.14 apresenta o tempo de simulação total dos métodos. Nota-se uma grande diferença entre os tempos do método de Euler em relação aos outros

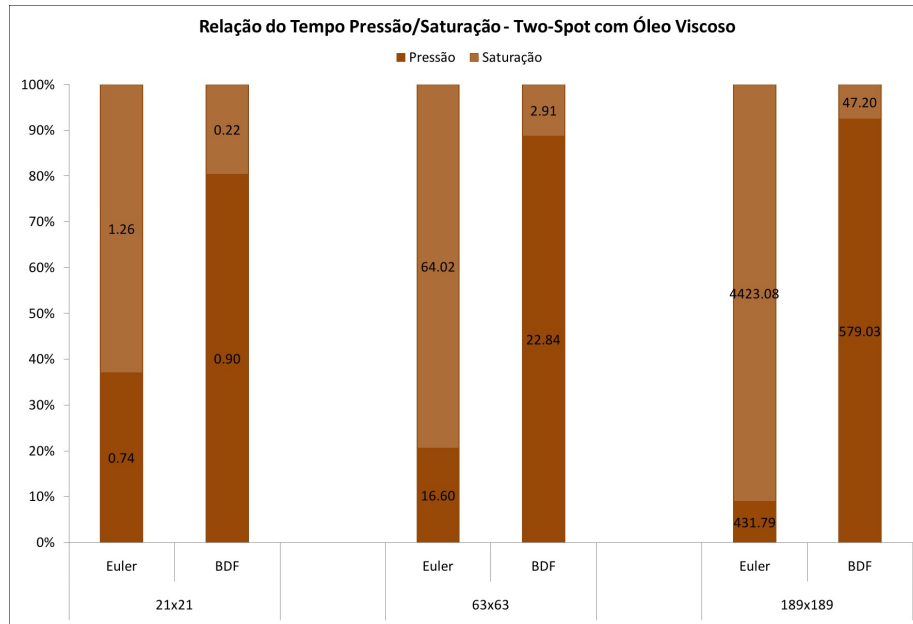


Figura 6.15: Relação entre o tempo utilizado no processamento da pressão e da saturação agrupados de acordo com o método e tamanho de malha.

métodos. É importante ressaltar que essa característica se repetiu em simulações com óleo pesado, onde o método de Euler obteve um tempo de simulação de ordem superior a todos os outros.

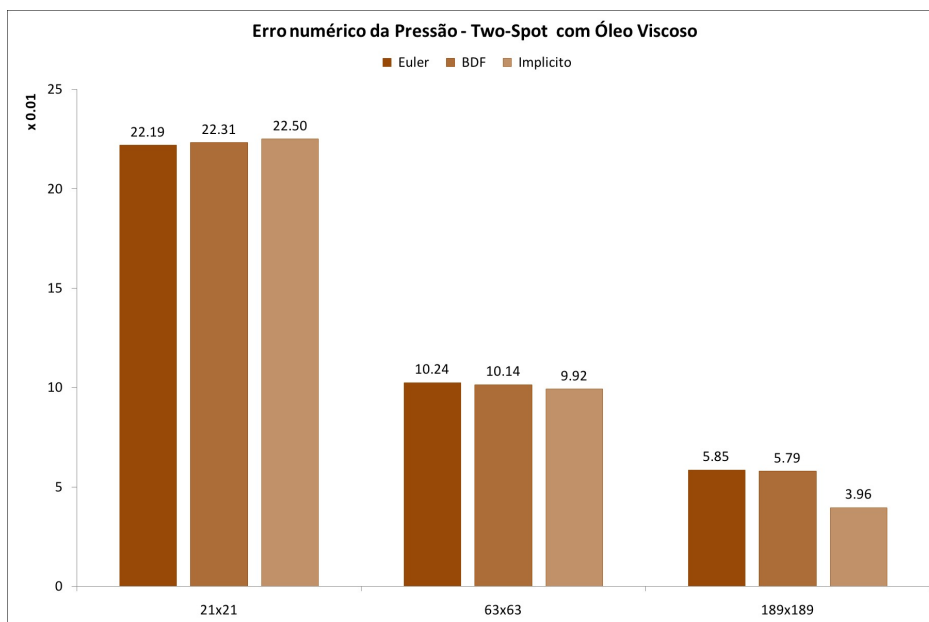


Figura 6.16: Erro numérico dos métodos relativos à pressão.

Na Fig. 6.15 é possível comparar o total de tempo gasto com a saturação e com a pressão. Naturalmente, à medida que se refina a malha, o tempo relativo de solução da saturação aumenta. Além disso, novamente ocorre uma proporção de tempo maior gasto

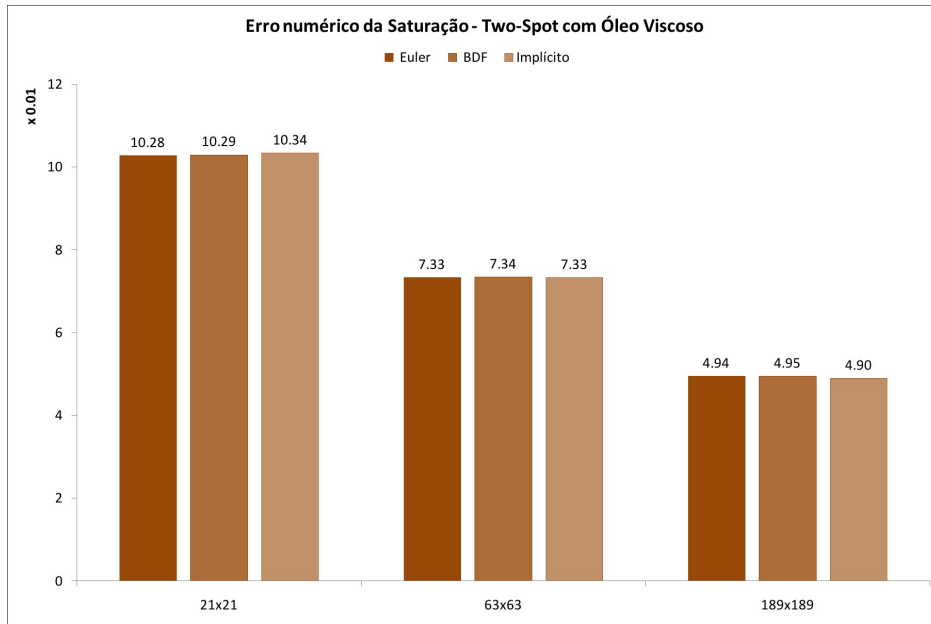


Figura 6.17: Erro numérico dos métodos relativos à saturação.

no cálculo da saturação para o método de Euler, ao passo que o método BDF demora mais tempo no cálculo da pressão.

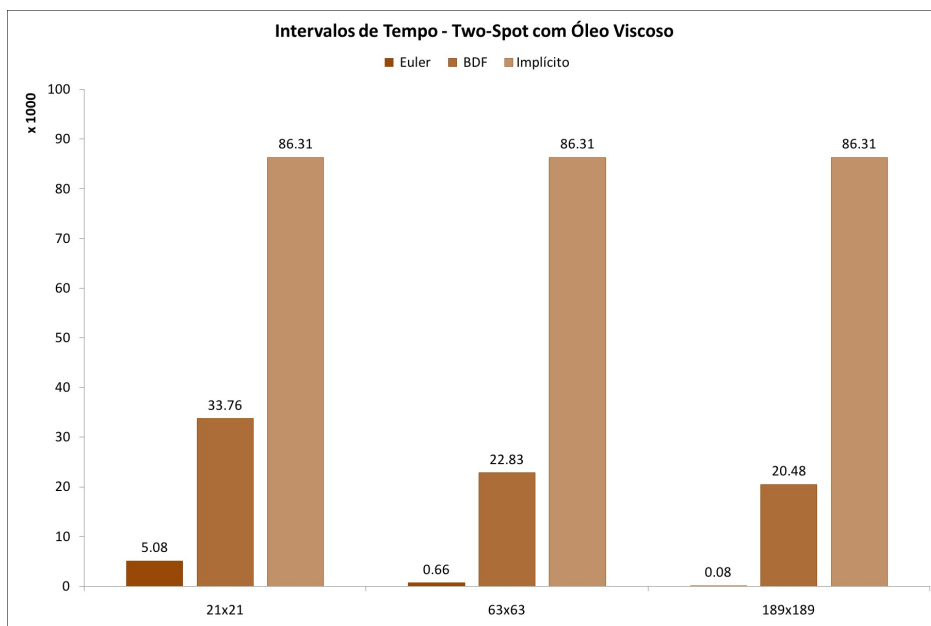


Figura 6.18: Intervalo de tempo dos métodos.

A Fig. 6.16 mostra o erro numérico da pressão obtido pelos métodos. Já na Fig. 6.17, temos o erro numérico da saturação. Podemos observar que não há grande diferença entre os erros numéricos dos métodos de Euler, BDF e Implícito.

O tamanho dos intervalos de tempo são mostrados no gráfico da Fig. 6.18. Novamente

os métodos que utilizam esquemas implícitos (BDF e Totalmente Implícito) evoluem mais rapidamente, como era de se esperar.

Como todos os métodos analisados apresentaram erros numéricos similares, tanto para a pressão quanto para a saturação, basta analisar o tempo de simulação para notarmos que o método BDF se saiu melhor que os demais também nesse caso.

6.2 Discretização no espaço

Como é um método de segunda ordem, o KT é menos difusivo que o Upwind. Para visualizar essa diferença mais claramente, foi realizado um experimento com uma função de fluxo linear, como descrito na Seção 5.2. Nas outras seções na sequência serão apresentados os resultados do KT para os mesmos testes realizados com o Upwind.

6.2.1 Função de Fluxo Linear

A Fig. 6.19 ilustra a solução desse tipo de simulação. A partir dela é possível comparar visualmente a difusão numérica gerada pelos métodos Upwind e KT, ambos usando o método BDF. Facilmente podemos ver o método Upwind com bordas mais arredondadas que o KT, além de possuir valores menores nas bordas, caracterizando uma deformação causada pela sua difusão numérica. No KT também ocorre uma deformação na forma original, porém em menor magnitude.

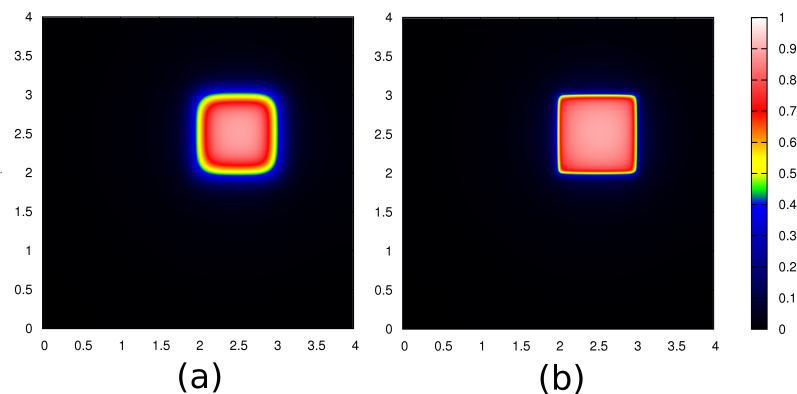


Figura 6.19: Comparação da difusão numérica gerada pelos métodos (a) Upwind/BDF e (b) KT/BDF.

Através da Fig. 6.20 pode-se observar o tempo de execução em simulações com fluxo linear para os métodos KT e Upwind. É fácil observar que o método KT é mais demorado

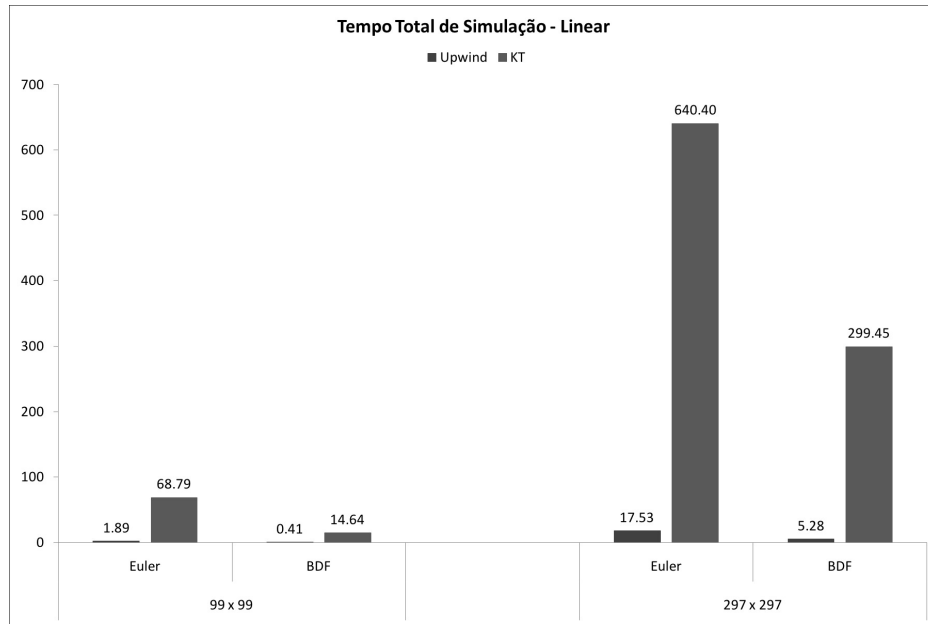


Figura 6.20: Tempo total (em segundos) de simulação para os diferentes métodos.

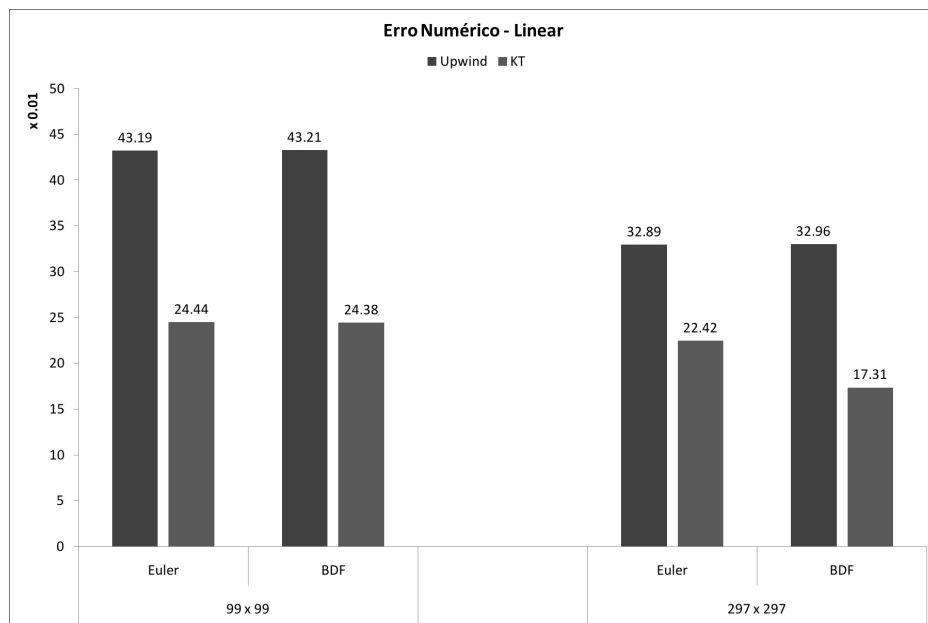


Figura 6.21: Erro numérico dos métodos com fluxo linear.

que o método Upwind, como era de se esperar. Também observa-se que a resolução através do método de discretização temporal Euler foi mais custosa em relação ao esquema BDF.

A Fig. 6.21 mostra o erro numérico da saturação e a Fig. 6.22 mostra o tamanho do Δt médio para os casos avaliados. Os métodos de Euler e BDF produzem erros numéricos muito semelhantes, sempre com o KT produzindo erros menores. Os maiores intervalos de tempo ajudam a entender porque o método BDF conseguiu resolver o problema em menor tempo. Também notamos que o Upwind consegue evoluir em passos de tempo

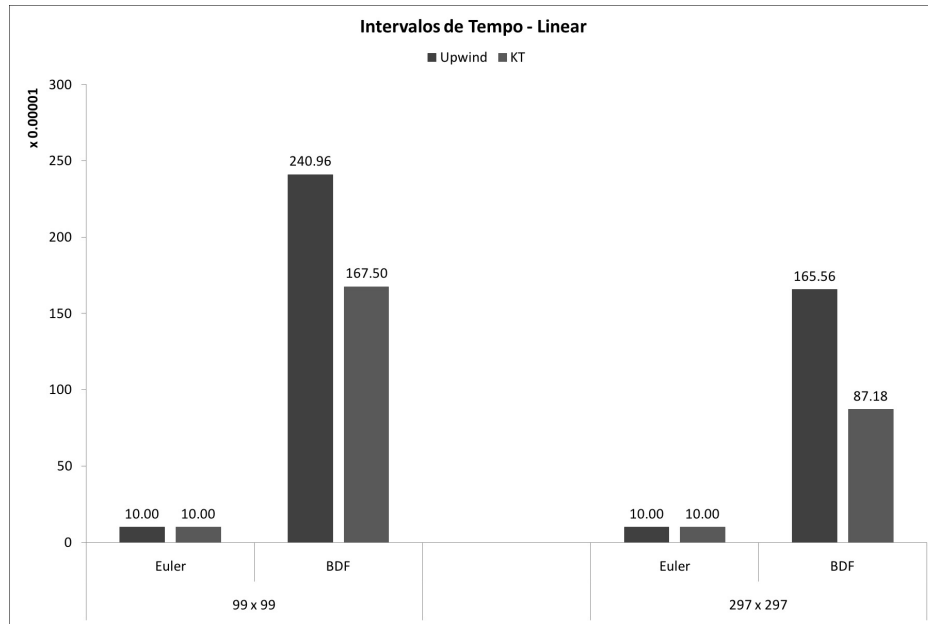


Figura 6.22: Tamanho dos intervalos de tempo utilizados para resolver o problema linear ($\times 0.00001$).

maiores que o KT nessa simulação.

Pode-se fazer uma análise mais justa entre os métodos Upwind e KT se os compararmos através de simulações com erros numéricos semelhantes. Tomando por exemplo, o método KT/BDF com malha de 99×99 , tem-se um erro de 24.38×10^{-2} . O método Upwind/BDF, por sua vez, com malha de tamanho 297×297 tem erro de 32.96×10^{-2} , ou seja, o método KT/BDF produz erros menores que o método Upwind/BDF mesmo quando resolvido com uma malha mais grossa. De fato, o método Upwind necessita de uma malha mais refinada (de tamanho 891×891) capaz de gerar um erro próximo (25.6×10^{-2}) ao obtido pelo método KT com malha de tamanho 99×99 . No entanto, nesse caso o Upwind demora um tempo de mais de 6 minutos e meio para computar essa solução enquanto o KT leva 14.64s.

Concluindo, temos, para uma malha de mesmo tamanho, o método KT gerando um erro menor em maiores tempos de simulação que o Upwind. Quando temos um erro semelhante, no entanto, o KT é capaz de processar o problema de maneira mais rápida.

Podemos mostrar que o KT é mais custoso que o Upwind através do número de acessos feitos à memória, multiplicações e divisões que ocorrem durante a sua computação. Considerando os cálculos que são feitos em ambos os métodos (fluxo fracionário, derivada do fluxo fracionário e velocidade) como um acesso, temos no KT para cada ponto calculado: 40 acessos (24 das velocidades e derivadas, e 16 dos fluxos), 32 multiplicações (16

das derivadas, 12 dos fluxos e 8 das velocidades) e 20 divisões (16 das derivadas e 4 dos fluxos). O Upwind, por sua vez realiza 12 acessos (2 pressões * 4 fluxos + 4 saturações), 4 multiplicações e 2 divisões.

Nos casos seguintes fazemos uma comparação das soluções obtidas por Euler e BDF do método KT. Esses métodos são comparados por sua vez, com a resolução do método Upwind através do esquema BDF, que obteve melhores resultados nas simulações da seção anterior. Nos gráficos, os resultados do método Upwind/BDF serão tratados apenas por Upwind por questões de simplicidade.

6.2.2 Five-Spot

6.2.2.1 Óleo leve

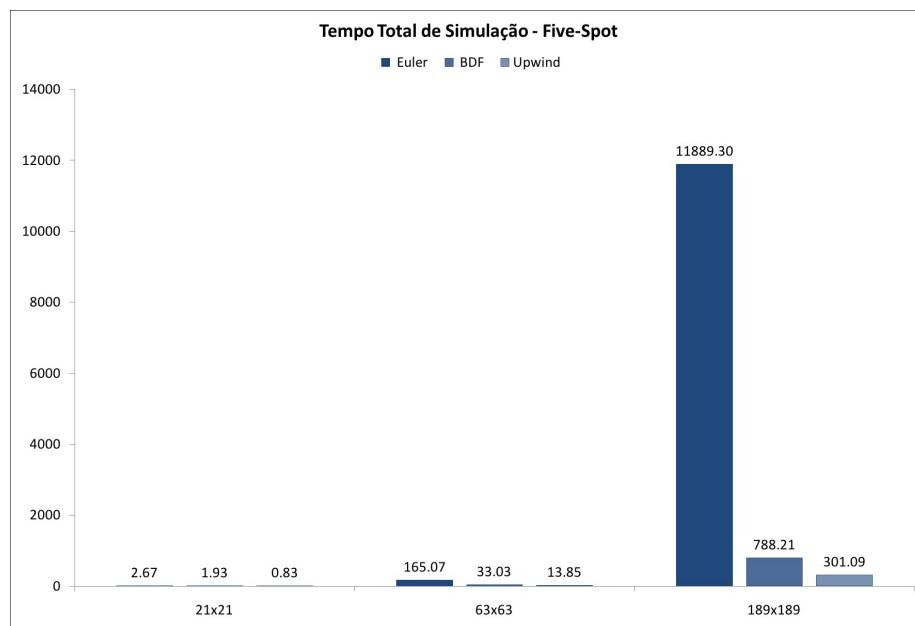


Figura 6.23: Tempo total (em segundos) de simulação.

Nas avaliações de fluxo não linear para reservatórios do tipo five-spot, o método de Kurganov-Tadmor também foi avaliado para os mesmos dois métodos de evolução no tempo (Euler e BDF). Como pode-se observar na Fig. 6.23, o método de Euler foi, em todas as simulações, mais lento que o BDF e o Upwind/BDF.

Através da Fig. 6.24 pode-se analisar onde se gasta mais tempo na resolução dos problemas. Comparando proporcionalmente a parcela do tempo gasto entre pressão e saturação pelo método KT/BDF com o método Upwind/BDF notamos que no primeiro um maior tempo é despendido calculando a saturação do que no segundo.

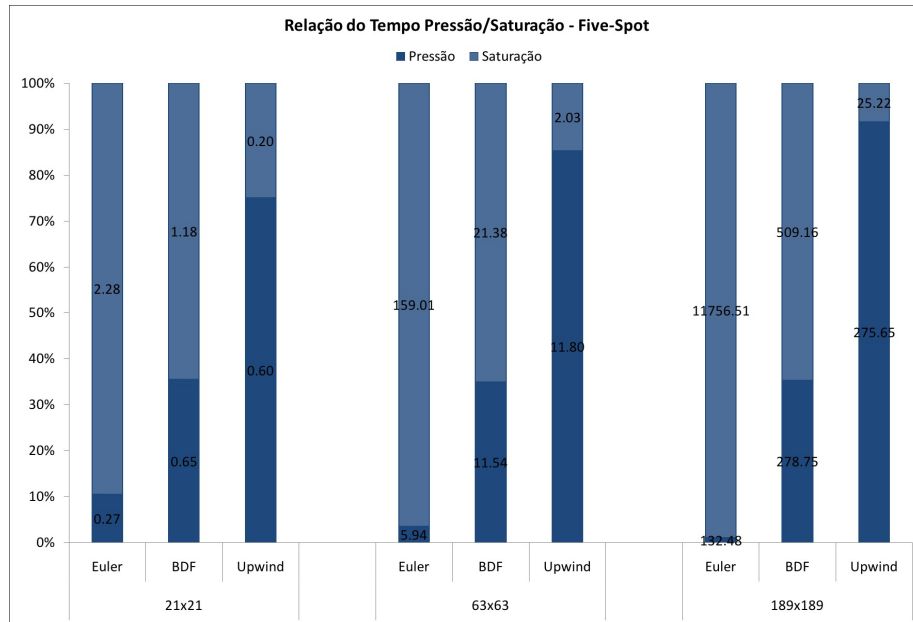


Figura 6.24: Relação entre o tempo utilizado no processamento da pressão e da saturação agrupados de acordo com o método e tamanho de malha.

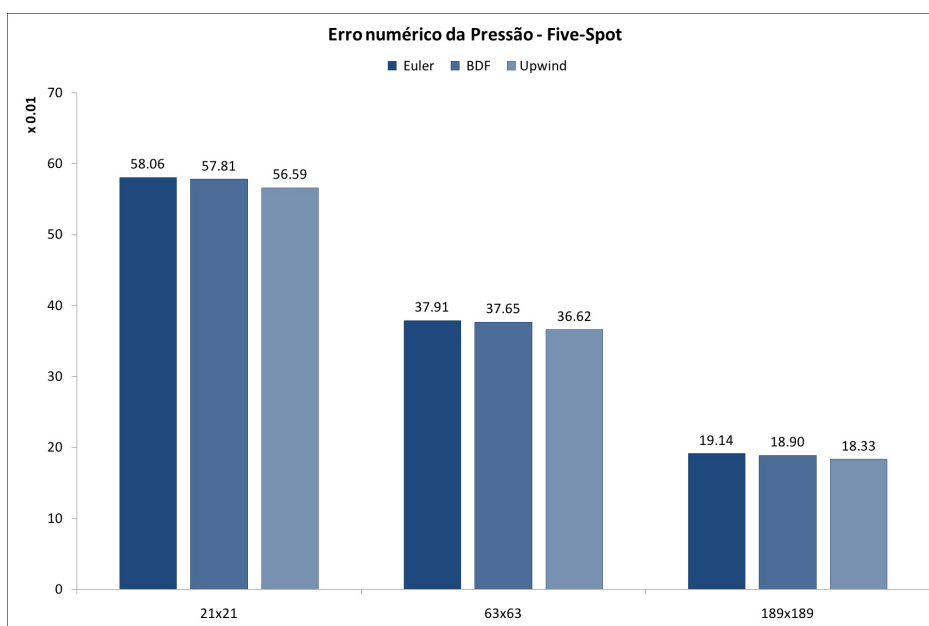


Figura 6.25: Erro numérico dos métodos relativos à pressão.

Com relação aos erros numéricos, (Fig. 6.25 e Fig. 6.26), observa-se que os erros da pressão são menores para o método Implícito, sem apresentar grandes diferenças, entretanto. Nos erros da saturação já é possível observar uma superioridade do método KT, que consegue produzir menores erros que o Upwind com ambas as formas de discretização temporal (Euler e BDF).

O método KT/BDF, corroborando os resultados do problema linear, produziu erros

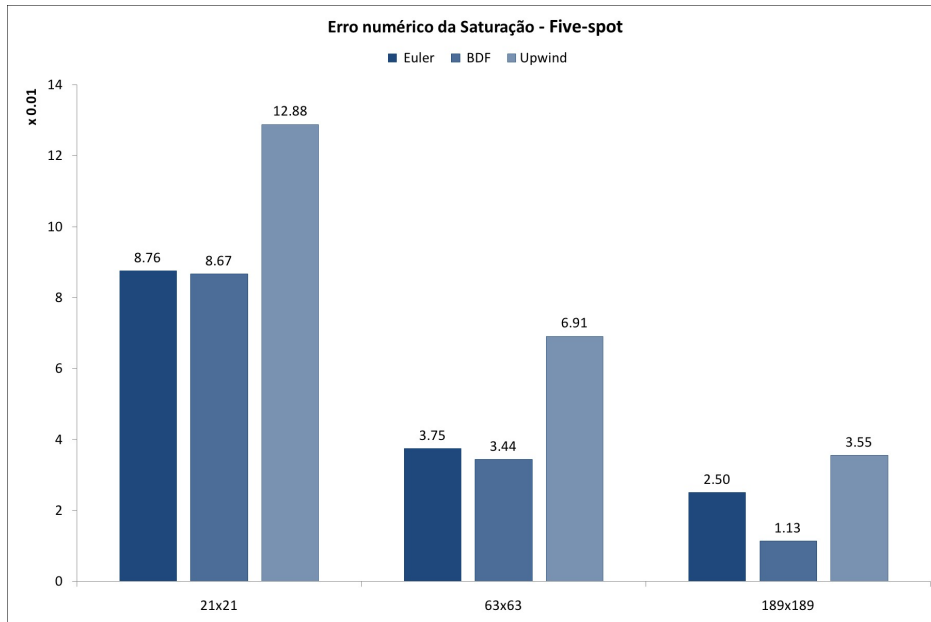


Figura 6.26: Erro numérico dos métodos relativos à saturação.

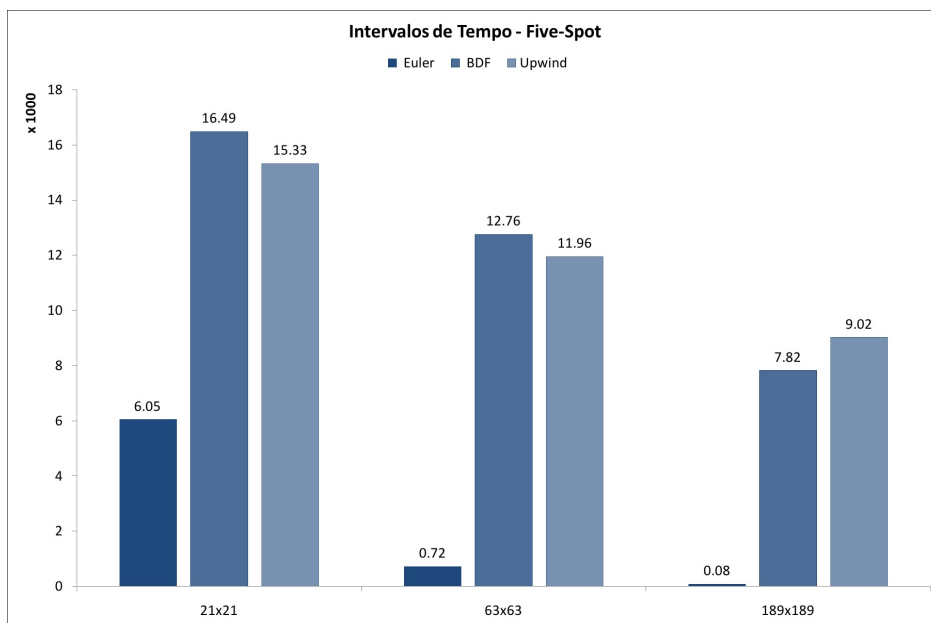


Figura 6.27: Tamanho dos intervalos de tempo utilizados para resolver a equação da saturação (em milhares).

menores que o método de Upwind/BDF com malha mais refinada para a saturação. Além disso foi capaz de obter melhor tempo se observarmos a comparação com erros semelhantes. O método KT/BDF foi resolvido em 33,03s com malha de 63×63 enquanto o método Upwind/BDF é resolvido em 301.09s com malha mais fina.

A Fig. 6.27 mostra o tamanho dos intervalos de tempo. Como esperado, o método de Euler, possui os menores intervalos. O método BDF utilizando esquema Upwind possui

maiores intervalos que o BDF com esquema KT na malha mais refinada e menores em malhas mais grosseiras.

6.2.2.2 Óleo pesado

As simulações do método KT em reservatório Five-Spot com óleo pesado produziram resultados semelhantes aos resultados anteriores, com menores tempos para o Upwind/BDF e maiores tempos para o KT/Euler, na maioria dos casos.

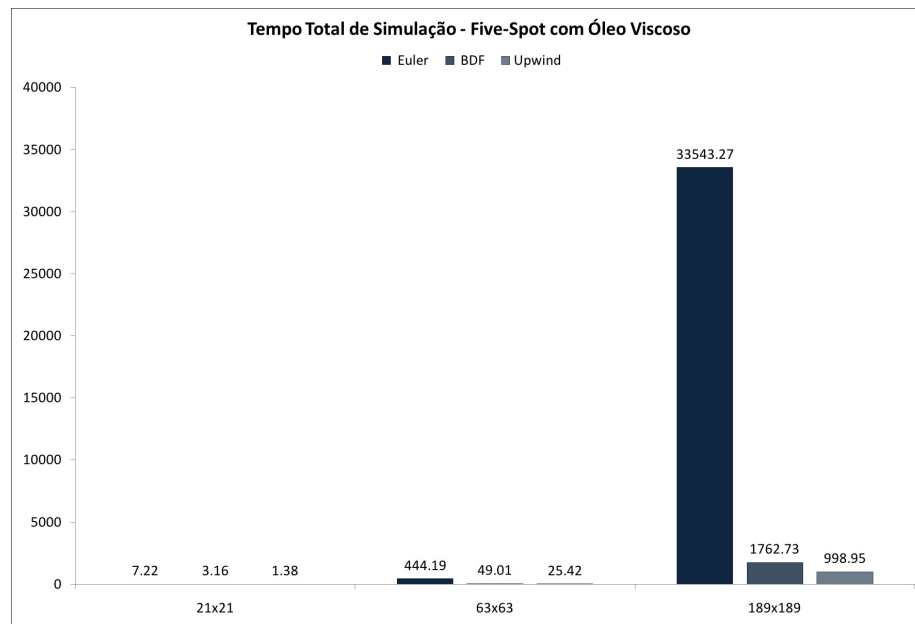


Figura 6.28: Tempo total (em segundos) de simulação para os diferentes métodos.

Para uma análise minuciosa de tempo total de simulação na Fig. 6.28 e dos erros numéricos da pressão na Fig. 6.29 é recomendável que comparemos os métodos através da proximidade dos erros numéricos. Tomando os resultados do KT com malha de tamanho 63×63 e o Upwind com malha 189×189 temos que o KT é 1.78 vezes mais impreciso. Ao mesmo tempo, o KT resolveu o problema vinte vezes mais rápido. A mesma análise pode ser feita para malhas de 21×21 com o KT e 63×63 com o Upwind. Nesse caso, o KT é 2.38 vezes mais impreciso, porém 8 vezes mais rápido. É admissível afirmar que o KT novamente foi superior ao Upwind utilizando uma malha 9 vezes mais grossa.

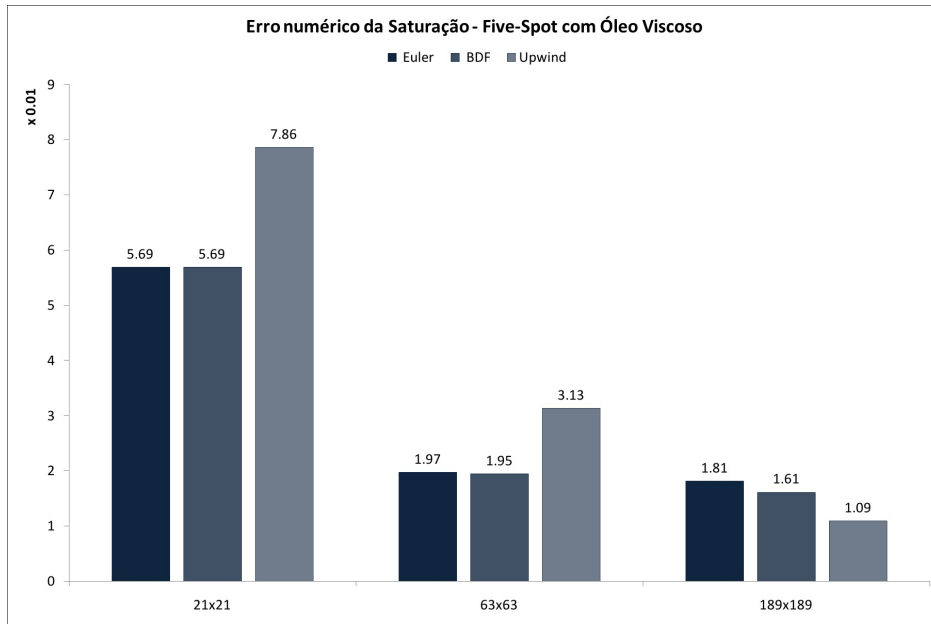


Figura 6.29: Erro numérico dos métodos relativos à saturação.

6.2.3 Two-Spot

6.2.3.1 Óleo leve

Nessa subsecção serão apresentados os resultados para escoamentos em reservatórios do tipo Two-Spot com óleo leve. Iniciaremos a demonstração dos resultados comparando os tempos totais de simulação através da Fig. 6.30. Nessas simulações o método Upwind/BDF é capaz de resolver o problema em menor tempo, assim como aconteceu nos casos anteriores.

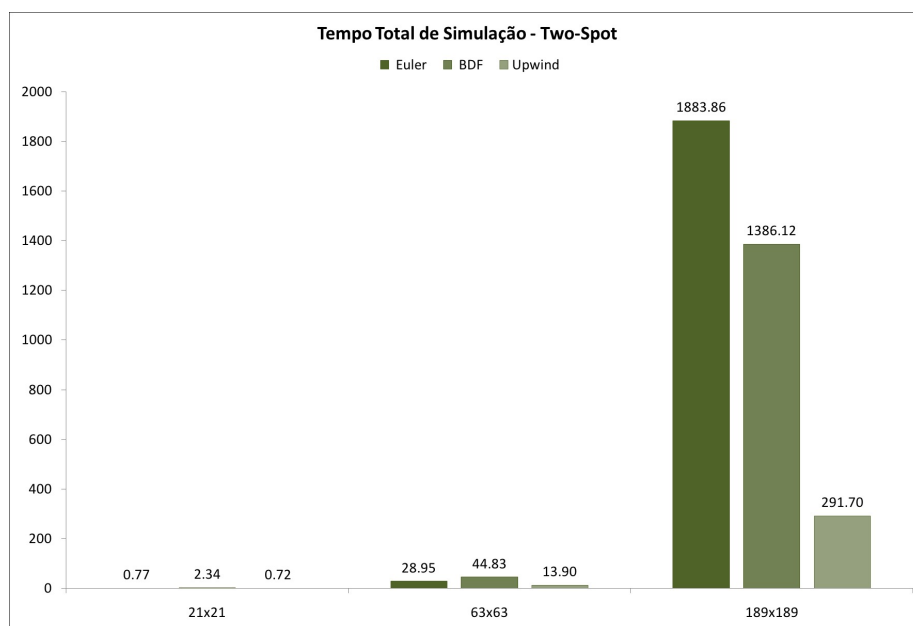


Figura 6.30: Tempo total (em segundos) de simulação para os diferentes métodos.

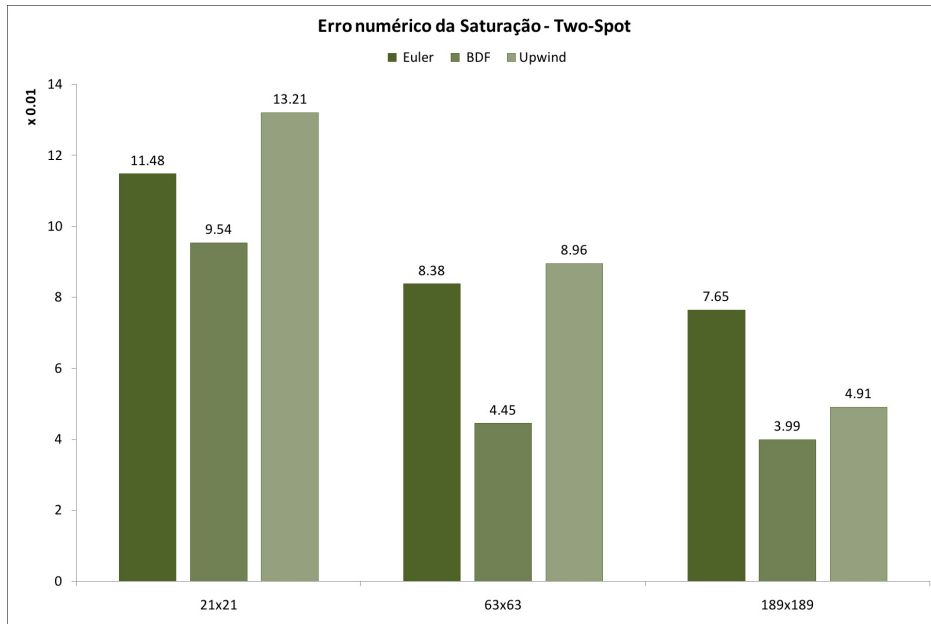


Figura 6.31: Erro numérico dos métodos relativos à saturação.

Novamente os métodos que utilizam o KT possuem uma predominância de tempo na resolução da saturação, ao contrário do método Upwind/BDF, que demora mais tempo computando a pressão. Os erros numéricos produzidos pela saturação podem ser vistos na Fig. 6.31.

Nessa simulação, novamente o método KT (quando resolvido em conjunto com o BDF) produz erros de saturação menores que o método Upwind/BDF, mesmo ao compararmos malhas mais grossas do KT com malhas mais refinadas do Upwind. Voltando ao gráfico dos tempos (Fig. 6.30) podemos observar que além disso, nesses casos o método KT/BDF consegue ser mais rápido que o método Upwind/BDF.

Através da Fig. 6.31 também podemos comparar os métodos numéricos de discretização temporal através de simulações com erros semelhantes. O método KT/Euler com malha 63×63 tem erros próximos ao método Upwind/BDF com malha de mesmo tamanho. Ao analisarmos os tempos dessas simulações, notamos que o BDF consegue ser superior ao Euler mesmo quando se utiliza o Upwind para evoluir a solução no espaço e o Euler utiliza o KT.

6.2.3.2 Óleo pesado

Nessa subseção serão apresentados os resultados para escoamentos em reservatórios do tipo Two-Spot com óleo pesado, mais viscoso que no caso anterior.

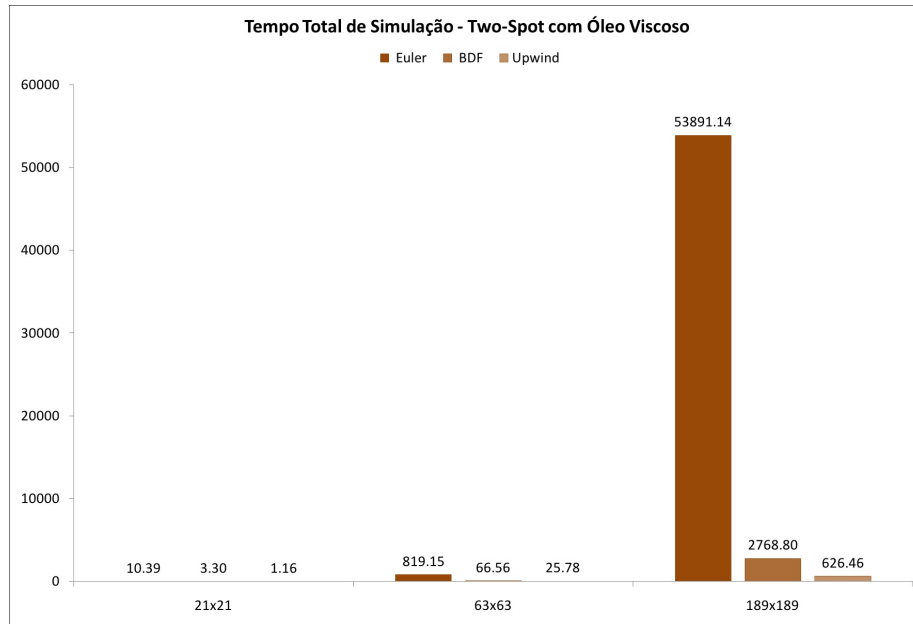


Figura 6.32: Tempo total (em segundos) de simulação para os diferentes métodos.

A Fig. 6.32 mostra o tempo total de simulação dos métodos. Como pode ser observado, em todos os casos o método KT/Euler exigiu mais tempo que os outros métodos, com o método Upwind/BDF sendo o menos custoso. Nesse tipo de simulação, devido às características dos fluidos e do reservatório, as condições de CFL restringem o tamanho do intervalo de tempo de maneira significativa. Assim, é possível observar o quanto os métodos explícitos (como Euler) sofrem com essas limitações.

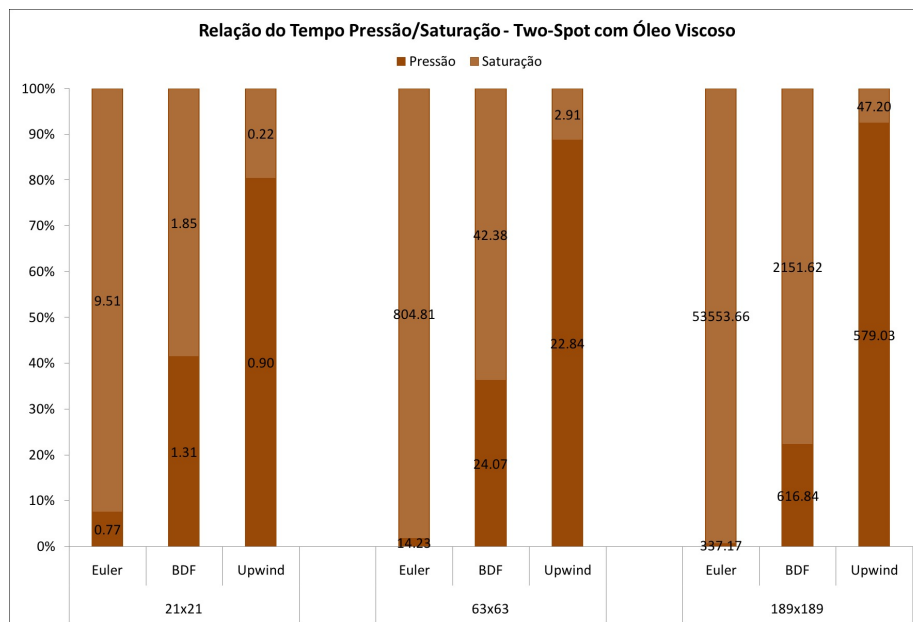


Figura 6.33: Relação entre o tempo utilizado no processamento da pressão e da saturação agrupados de acordo com o método, tamanho de malha.

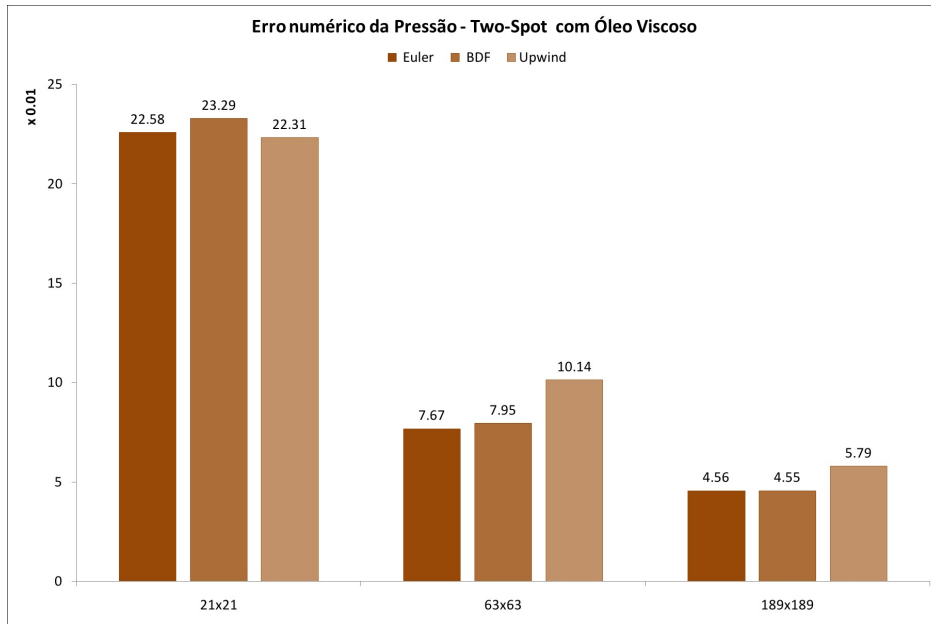


Figura 6.34: Erro numérico dos métodos relativos à pressão.

A relação entre os tempos de simulação da pressão e da saturação é mostrado na Fig. 6.33. Novamente pode-se observar que a saturação é o fator determinante no tempo de simulação para os métodos que utilizaram o KT, assim como no caso do óleo leve.

Os erros numéricos da pressão e da saturação são apresentados na Fig. 6.34 e na Fig. 6.35, respectivamente. Novamente, nos erros da saturação é possível observar que os métodos que utilizam o KT conseguem obter melhores resultados com malha mais grossa em relação ao método Upwind/BDF. No caso do erro da pressão, existe maior semelhança entre os resultados, o que é justificável, já que todos os métodos utilizam o mesmo método para resolvê-la.

Exemplificando, o KT produz um erro de 4.11×10^{-2} com malha de 63×63 e precisa de 44.83s para ser resolvido. O método Upwind, por outro lado, produz um erro de 4.95×10^{-2} em malha de tamanho 189×189 , e é resolvido em 291.7s. Pode-se dizer, então, que nesse tipo de simulação, o Upwind precisa de seis vezes mais tempo para produzir um resultado quase tão preciso quanto o KT.

Na Fig. 6.36 são apresentados os intervalos de tempo médio de cada um dos métodos. Novamente, os métodos resolvidos pelo BDF (tanto KT quanto Upwind) possuem maior intervalo de tempo, como esperado. Esses resultados também esclarecem quantitativamente como o método explícito de Euler sofre mais com as condições desse experimento que os métodos implícitos de discretização temporal.

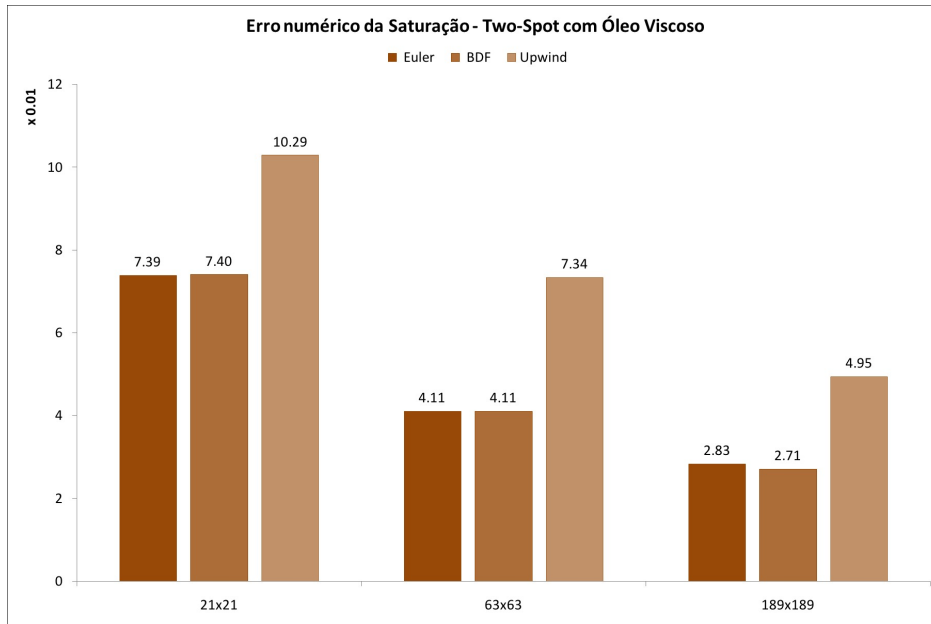


Figura 6.35: Erro numérico dos métodos relativos à saturação.

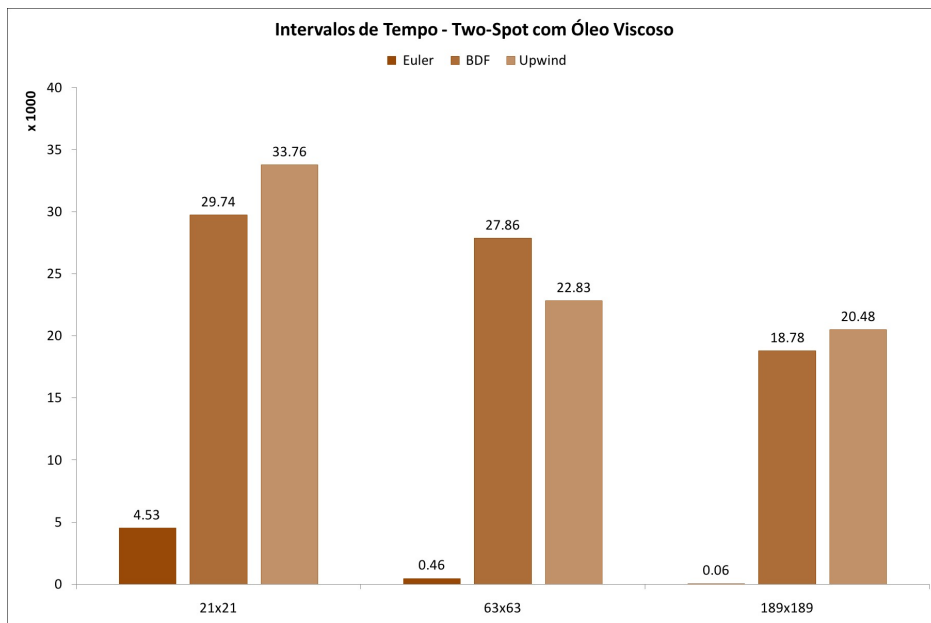


Figura 6.36: Intervalo de tempo dos métodos.

Encerrando os resultados, apresentamos um resumo dos tempos e erros dos métodos numéricos avaliados nesse trabalho através das Tabelas 6.1 e 6.2.

A Tab. 6.1 mostra de maneira sucinta o tempo total de computação (em segundos) dos métodos utilizados para solucionar o problema não-linear em todos os tipos de simulações utilizadas nesse trabalho.

Na Tab. 6.2 temos uma comparação de todos os erros numéricos da saturação em todas as simulações com malhas de 63×63 . Além disso, temos os resultados obtidos com

Tabela 6.1: Resumo dos tempos de computação em segundos.

Poços	Óleo	Malha	Up/Euler	Up/BDF	KT/Euler	KT/BDF	Implícito
5	Leve	63×63	32.15	13.85	165.07	33.03	34.32
5	Leve	189×189	1853.98	301.09	11889.30	788.21	1046.52
5	Pesado	63×63	81.57	25.42	444.19	49.01	30.60
5	Pesado	189×189	4919.39	998.95	33543.27	1762.73	699.66
2	Leve	63×63	8.14	13.90	28.95	44.83	47.11
2	Leve	189×189	316.84	291.70	1883.86	1386.12	1315.74
2	Pesado	63×63	80.67	25.78	819.15	66.56	34.28
2	Pesado	189×189	4855.11	626.46	53891.14	2768.80	1001.54

Tabela 6.2: Resumo dos erros numéricos da saturação com malha 189×189 em relação ao erro do KT/BDF com malha 63×63 . Entre parênteses a relação $\frac{\text{Erro do método}}{KT/BDF}$.

	Poços	Five-Spot Óleo Leve	Five-Spot Óleo Pesado	Two-Spot Óleo Leve	Two-Spot Óleo Pesado
63×63	KT/BDF	1.13	1.61	3.99	2.71
189×189	KT/Euler	3.75 (3.31×)	1.97 (1.22×)	8.38 (2.10×)	4.11 (1.52×)
	KT/BDF	3.44 (3.03×)	1.95 (1.21×)	4.45 (1.12×)	4.11 (1.52×)
	Up/Euler	6.77 (5.97×)	3.12 (1.94×)	8.89 (2.23×)	7.33 (2.71×)
	Up/BDF	6.91 (6.10×)	3.13 (1.94×)	8.96 (2.25×)	7.34 (2.71×)
	Implícito	6.91 (6.09×)	3.37 (2.09×)	8.97 (2.25×)	7.33 (2.71×)

a utilização do método KT/BDF com malha de tamanho 63×63 em destaque. Entre parênteses, à frente do erro de cada método pode-se observar a relação entre o erro do método utilizado (malha de 189×189) e o erro do KT/BDF com malha nove vezes menor.

7 CONCLUSÃO

Modelos que simulam o escoamento bifásico de fluidos em meios poroso são constituídos por sistemas de equações diferenciais parciais em duas variáveis (pressão e saturação), que representam o estado dos fluidos no reservatório ao longo do tempo. O problema pode ser visto como um sistema com uma equação elíptica acoplada a uma hiperbólica. Mostramos como essas equações são deduzidas a partir de conceitos físicos. Ao mesmo tempo, mostramos que resolvê-las é outro grande desafio. Inúmeros métodos de resolução foram propostos ao longo dos anos. A contribuição deste trabalho é comparar diferentes métodos de discretização temporais e espaciais.

Uma das formas utilizadas para tratar o sistema de equações é através de um método de discretização Implícito, capaz de evoluir a pressão e a saturação ao mesmo tempo. Outras formas utilizadas envolveram técnicas de desacoplamento, através das quais é possível dividir o sistema em diferentes equações. Essas equações foram resolvidas através de um sistema implícito-explícito (IMPES/Euler) e implícito-implícito (IMPIS/BDF).

Com o objetivo de comparar os métodos, utilizamos quatro tipos de simulação. Dois tipos de configurações de poços foram utilizadas e para cada uma delas, dois tipos de óleo: leve e pesado (mais viscoso). Em reservatórios com quatro poços injetores, utilizamos um campo de permeabilidade homogêneo, enquanto em reservatórios com um poço injetor utilizamos um campo de permeabilidade heterogêneo. Essa diferença se fez evidente nos gráficos, onde ocorre a formação de "dedos" em poços com permeabilidade heterogênea.

Através dos resultados e estudos feitos, foi possível comparar os métodos e indicar aquele mais indicado para resolver cada tipo de simulação. Entre os métodos utilizados para resolver a discretização temporal, Euler Explícito foi mais rápido que o esquema totalmente implícito em grande parte das simulações. Nas simulações onde o CFL é muito restritivo (com óleo pesado), no entanto, o método totalmente implícito foi sempre mais rápido que o método de Euler Explícito. O método BDF pode ser considerado o melhor entre os avaliados, pois foi o mais rápido em todas as situações avaliadas e produziu erros muito próximos aos dos outros métodos.

A solução numérica no espaço utilizou em primeiro lugar o Upwind, um método clássico de primeira ordem de discretização espacial, que se baseia na direção de propagação dos

fluidos. Apesar de antigo, é um método amplamente utilizado para a solução de escoamentos, se caracterizando principalmente pela sua simplicidade. O método Kurganov-Tadmor, outro utilizado neste trabalho, é um método central de segunda ordem, desenvolvido recentemente, e que incorpora avanços de métodos anteriores para produzir resultados com maior confiabilidade. Devido a esses detalhes, acaba sendo um método mais custoso computacionalmente.

O método KT, por sua natureza, é um método que produz erros numéricos menores. Mostramos que isso ocorre devido à sua menor difusão numérica, ao transportar os fluidos entre pontos da malha. Essa maior precisão vem com um custo: o KT é um método mais custoso computacionalmente e demora mais tempo para resolver um mesmo problema em comparação ao Upwind.

Em todos os casos simulados, o método KT se mostrou bem eficiente, resolvendo o problema introduzindo erros numéricos menores que o método Upwind. No entanto, devido a sua robustez, demorou sempre mais tempo em sua solução. Fizemos também uma análise mais apurada para comparar os métodos, utilizando erros numéricos semelhantes. Através dessa comparação, o Upwind chegou a ser mais de seis vezes mais lento que o KT, já que, para produzir os mesmos erros numéricos, o método KT pode utilizar em grande parte dos casos uma malha mais grossa, e assim chegar à solução mais rapidamente.

Esse trabalho indica que existe uma relação de proporcionalidade entre erros produzidos por cada um dos métodos e o tempo de computação para cada um deles. Dependendo dos objetivos buscados, um desses dois critérios pode se sobrepor ao outro. Esse trabalho pretende contribuir nesse processo de decisão, a partir do momento que quantifica essas medidas para os métodos avaliados.

É conveniente ressaltar que o método KT produz erros menores em condições onde se tem a liberdade de utilizar uma malha mais grosseira de resolução. Há situações, no entanto, que não necessitam de resultados precisos, ou que exigem o uso de malhas mais refinadas, como quando se tem um campo de permeabilidade detalhado ou mesmo para resultados mais definidos no espaço. Nesses casos, o uso do KT pode não ser viável, devido ao seu maior tempo de computação. Um estudo desses casos pode determinar se outro método seria mais aconselhável.

Métodos explícitos estão sujeitos às condições de CFL, o que praticamente inviabiliza o uso desse tipo de resolução em simulações mais complexas. Para exemplificar o pior

caso, o método de Euler chegou a ser aproximadamente 19 vezes mais lento que uma outra solução utilizando o BDF, no caso de um reservatório Two-Spot com óleo pesado.

Apesar da razão do erro do KT ao se refinar a malha seja maior em comparação à razão do método de Euler, nenhum dos resultados obteve uma diminuição dos erros esperada pela teoria. Porém, investigações a cerca desta diferença serão feitas em novos trabalhos.

Em trabalhos futuros, pretendemos evidenciar melhor a diferença entre os dois métodos realizando experimentos em campos de porosidade variável no espaço. Além disso, é possível estender essa análise para outros métodos, como o KT de terceira ordem. Outro objetivo é utilizar o método KT em problemas de ajuste de histórico de reservatórios de petróleo, já que nesse tipo de simulação tanto o tempo de computação quanto a precisão são fatores cruciais. É possível analisar os efeitos de se utilizar o método KT a fim de determinar se uma maior precisão na solução do problema direto é capaz de produzir melhores resultados no problema conhecido como inverso, assim como determinar se o uso de malhas menos refinadas auxilia na resolução de problemas envolvendo otimizações.

REFERÊNCIAS

- [1] THOMAS, J. E., *Fundamentos de Engenharia de Petróleo*. Interciência, 2001.
- [2] TZIMAS, E., *Enhanced Oil Recovery using Carbon Dioxide in the European Energy System*, Tech. rep., European Commission Joint Research Center., 2005.
- [3] CHEN, Z., HUAN, G., MA, Y., *Computational Methods for Multiphase Flows in Porous Media*. Society for Industrial and Applied Mathematics, 2006.
- [4] KOEDERITZ, F., *Lecture Notes on Applied Reservoir Simulation*. World Scientific Publishing Company, 2005.
- [5] CHEN, Z., HUAN, G., LI, B., “An Improved IMPES Method for Two-Phase Flow in Porous Media”, *Transport in Porous Media*, v. 54, pp. 361–376, 2004.
- [6] AMORIM, E. P. S., “Ajuste Automático de Histórico em Reservatórios de Petróleo Utilizando o Método TSVD”, Dissertação, Universidade Federal de Juiz de Fora, 2009.
- [7] XAVIER, C. R., “Comparação de Métodos de Otimização para o Problema de Ajuste de Histórico em Ambientes Paralelos”, Dissertação, Universidade Federal de Juiz de Fora, 2009.
- [8] R. COURANT, E. I., REES, M., “On the Solution of Nonlinear Hyperbolic Differential Equations by Finite Differences”, *Comm. Pure Appl. Math.*, v. 5, pp. 243–255, 1952.
- [9] KURGANOV, A., TADMOR, E., “New High-Resolution Central Schemes for Nonlinear Conservation Laws and Convection-Diffusion Equations”, *Journal of Computational Physics*, 2000.
- [10] TEIXEIRA, G. M., DOS SANTOS, R. W., CORRÊA, M. R., “Comparando Diferentes Implementações do Método Kurganov-Tadmor e do Esquema Upwind para a Solução do Escoamento Bifásico em Meios Porosos”, *Asociación Argentina de Mecánica Computacional*, 2010.

- [11] COSSE, R., *Basics of Reservoir Engineering*. Institut Francais Du Petrole Publications, 1993.
- [12] TIAB, D., DONALDSON, E. C., *Petrophysics: theory and practice of measuring reservoir rock and fluid transport properties*. Gulf Publ, 1996.
- [13] DARCY, H., “Les fontaines publiques de la ville de dijon: Exposition et application des principes à suivre et des formules à employer dans les questions de distribution d’eau”, *Victor Dalamont, Paris*, pp. 150, 1856.
- [14] SHELDON, J. W., ZONDECK, B., CARDWELL, W. T., “One-dimensional, incompressible, non-capillary, two-phase fluid flow in a porous medium”, *Trans. SPE AIME*, 1959.
- [15] STONE, H. L., A. O. GARDER, J., “Analysis of gas-cap or dissolved-gas reservoirs”, *Trans. SPE AIME*, 1961.
- [16] HINDMARSH, A. C., SERBAN, R., *User Documentation for ccode v2.6.0*, Center for Applied Scientific Computing, Lawrence Livermore National Laboratory, v2.6.0 ed., 2009.
- [17] WARMING, R. F., BEAM, R. W., “Upwind second order difference schemes and applications in aerodynamic flows”, *AIAA Journal*, 1976.
- [18] LAX, P. D., WNDROFF, B., “Systems of conservation laws”, *Commun. Pure Appl Math*, 1960.
- [19] RUSANOV, V. V., “On difference shemes of third order accuracy for non-linear hyperbolic systems”, *Journal of Computational Physics*, v. 5, pp. 507–516, 1970.
- [20] NESSYAHU, H., TADMOR, E., “Non-oscillatory central differencing for hyperbolic conservation laws”, *Journal of Computational Physics*, v. 87, pp. 408, 1990.
- [21] DURRAN, D. R., *Numerical methods for wave equations in geophysical fluid dynamics*. Springer, 1998.

- [22] RIBEIRO, S. S., “*Novos Esquemas Centrais de Diferenças Finitas para a Simulação de Escoamentos Multifásicos em Reservatórios de Petróleo*”, Tese, Universidade do Estado do Rio de Janeiro, 2007.
- [23] TORO, E. F., *Riemann Solvers and Numerical Methods for Fluid Dynamics: A Practical Introduction*. Springer, 1999.
- [24] VAN LEER, B., “Towards the ultimate conservative difference scheme. V. A second order sequel to Godunov’s method”, *Journal of Computational Physics*, v. 32, pp. 101, 1979.
- [25] CORRÊA, M. R., BORGES, M. R., “Métodos Numéricos para o Escoamento Bifásico em Meios Porosos Heterogêneos”, *Asociación Argentina de Mecánica Computacional*, 2010.
- [26] HIRSCH, C., *Numerical Computation of Internal and External Flows, volume 2: Computational Methods for Inviscid and Viscous Flows*. Wiley, 1990.
- [27] BALAY, S., BUSCHELMAN, K., EIJKHOUT, V., GROPP, W. D., KAUSHIK, D., KNEPLEY, M. G., MCINNES, L. C., SMITH, B. F., ZHANG, H., *PETSc Users Manual*, 2008.
- [28] HOMSÝ, G. M., “Viscous Fingering in Porous Media”, *Ann. Rev. Fluid Mech*, v. 19, pp. 271–280, 1987.

APÊNDICE A - INTERVALO DE TEMPO DO MÉTODO DE EULER

Considerando a Eq. 3.6 (discretizada no tempo e no espaço) com velocidade v positiva em todas as interfaces, é possível reescrevê-la como:

$$\begin{aligned} s^{n,l+1} - s^{n,l} + \frac{\Delta t^{n,l+1}}{\phi \Delta x} \left(f(s_{i,j}^{n,l}) v_{i+1/2,j}^n - f(s_{i-1,j}^{n,l}) v_{i-1/2,j}^n \right) + \\ \frac{\Delta t^{n,l+1}}{\phi \Delta y} \left(f(s_{i,j}^{n,l}) v_{i,j+1/2}^n - f(s_{i,j-1}^{n,l}) v_{i,j-1/2}^n \right) = \frac{\Delta t^{n,l+1}}{\phi} q_a^{n,l}. \end{aligned} \quad (\text{A.1})$$

Sabe-se também que $\nabla \cdot v = q_t$ e, novamente substituindo o operador gradiente discreto da Eq. 4.2, resulta em:

$$\frac{1}{\Delta x} (v_{i+1/2,j}^n - v_{i-1/2,j}^n) + \frac{1}{\Delta y} (v_{i,j+1/2}^n - v_{i,j-1/2}^n) = q_t^n. \quad (\text{A.2})$$

Multiplicando tudo por $\frac{\Delta t^{n,l+1}}{\phi} f(s_{i,j}^{n,l})$, chega-se à Eq. A.3:

$$\begin{aligned} \frac{\Delta t^{n,l+1}}{\phi \Delta x} f(s_{i,j}^{n,l}) (v_{i+1/2,j}^n - v_{i-1/2,j}^n) + \\ \frac{\Delta t^{n,l+1}}{\phi \Delta y} f(s_{i,j}^{n,l}) (v_{i,j+1/2}^n - v_{i,j-1/2}^n) = \frac{\Delta t^{n,l+1}}{\phi} f(s_{i,j}^{n,l}) q_t^n. \end{aligned} \quad (\text{A.3})$$

Já a Eq. A.4 provém da subtração da Eq. A.3 em Eq. A.1:

$$\begin{aligned} s^{n,l+1} - s^{n,l} + \frac{\Delta t^{n,l+1}}{\phi \Delta x} \left(f(s_{i,j}^{n,l}) - f(s_{i-1,j}^{n,l}) \right) v_{i-1/2,j}^n + \\ \frac{\Delta t^{n,l+1}}{\phi \Delta y} \left(f(s_{i,j}^{n,l}) - f(s_{i,j-1}^{n,l}) \right) v_{i,j-1/2}^n = \frac{\Delta t^{n,l+1}}{\phi} \left(q_a^{n,l} - f(s_{i,j}^{n,l}) q_t^n \right). \end{aligned} \quad (\text{A.4})$$

Agora, é preciso analisar à parte cálculos com poços. Considerando inicialmente o caso onde não há poços, ou seja, o lado direito da Eq. A.4 é nulo, utilizando o Teorema do Valor Médio, temos:

$$\begin{aligned} s^{n,l+1} = s^{n,l} \left(1 - \frac{\Delta t^{n,l+1}}{\phi \Delta x} f'(s_1) v_{i-1/2,j}^n - \frac{\Delta t^{n,l+1}}{\phi \Delta y} f'(s_2) v_{i,j-1/2}^n \right) + \\ \frac{\Delta t^{n,l+1}}{\phi \Delta x} f'(s_1) v_{i-1/2,j}^n s_{i-1,j}^{n,l} - \frac{\Delta t^{n,l+1}}{\phi \Delta y} f'(s_2) v_{i,j-1/2}^n s_{i,j-1}^{n,l}, \end{aligned} \quad (\text{A.5})$$

para algum s_1 e s_2 . Assim, se:

$$1 - \frac{\Delta t^{n,l+1}}{\phi \Delta x} f'(s_1) v_{i-1/2,j}^n - \frac{\Delta t^{n,l+1}}{\phi \Delta y} f'(s_2) v_{i,j-1/2}^n \geq 0, \quad (\text{A.6})$$

garantimos que:

$$\min\{s_{i-1,j}^{n,l}, s_{i,j}^{n,l}, s_{i,j-1}^{n,l}\} < s_{i,j}^{n,l+1} < \max\{s_{i+1,j}^{n,l}, s_{i,j}^{n,l}, s_{i,j+1}^{n,l}\}. \quad (\text{A.7})$$

No entanto, onde a velocidade não é positiva em todas interfaces, a condição da Eq. A.6 deve ser reescrita como:

$$\sum_m \frac{(\Delta t)^{n,l}}{\phi \Delta m} f'(s_m) |v_m^n| \leq 1, \quad (\text{A.8})$$

onde o índice m indica as interfaces com fluxo entrante, Δm é igual a Δx em faces verticais e Δy em faces horizontais. Além disso, s_m está situado entre a menor e a maior saturação do bloco e seus vizinhos no instante (n, l) . Na implementação, o esquema utilizado é reescrito como:

$$\max f'(s_m) \sum_m \frac{(\Delta t)^{n,l}}{\phi \Delta m} |v_m^n| \leq \rho_1, \quad (\text{A.9})$$

onde $0 < \rho_1 < 1$ é um parâmetro a escolher e o máximo é tomado entre a menor e a maior saturação de cada bloco e seus vizinhos, cuja interface seja de fluxo entrante no bloco, ou seja, velocidade positiva nas interfaces à esquerda e negativa nas interfaces à direita. A análise da Eq. A.9 serve também para blocos com poços produtores.

Em blocos com poços injetores, admite-se que não ocorra fluxo entrando. Nesses blocos também ocorre que a vazão total é igual à vazão de água $q_t = q_a$.

$$s^{n,l+1} - s^{n,l} = \frac{\Delta t^{n,l+1}}{\phi} q_a^{n,l} \left(1 - f(s_{i,j}^{n,l})\right). \quad (\text{A.10})$$

Então $\Delta t^{n,l+1}$ precisa obedecer a:

$$s_{i,j}^{n,l} + \rho_2 \frac{(\Delta t)^{n,l}}{\phi} (q_a^{n,l} (1 - f(s_{i,j}^{n,l}))) < 1 - s_{o,res}, \quad (\text{A.11})$$

onde ρ_2 é um parâmetro a ser determinado e s_{or} é a saturação residual do óleo.

É necessário que $(\Delta t)^{n,l}$ satisfaça as condições dadas pelas Eqs. A.9 e A.11. Obe-

decendo a essas restrições, pode-se garantir que os valores da água serão sempre valores admissíveis, dentro dos limites estabelecidos pela saturação residual do óleo e da saturação irreduzível da água (s_{or} e s_{ai} , respectivamente).

APÊNDICE B - CÁLCULO DO JACOBIANO

É necessário calcular as derivadas de F_a em relação à saturação da água. Essa derivada será tratada como $a = \frac{\partial F}{\partial s_a}$:

$$a = \frac{\partial F}{\partial s_a} = \phi \Delta_{xy} + \Delta_{xyt} \nabla_h \cdot (\partial_{s_a} v_a^k) - \Delta_{xyt} f'(s_a^k) q_t^{n+1}, \quad (\text{B.1})$$

onde

$$\partial_{s_{i,j}} v_a^k = \begin{cases} -T'_a(s_{i,j}^k) \left(\frac{\Delta p}{\Delta y} \right), & \text{se } s_{up} = s_{i,j}; \\ 0, & \text{caso contrário.} \end{cases} \quad (\text{B.2})$$

Portanto, a derivada a é calculada da seguinte forma:

$$a = \phi \Delta_{xy} + \Delta_{yt} [(\partial_{s_a}(v_{a_{i+1/2,j}}) - \partial_{s_a}(v_{a_{i-1/2,j}}))] + \Delta_{xt} [(\partial_{s_a}(v_{a_{i,j+1/2}}) - (\partial_{s_a}(v_{a_{i,j-1/2}}))] - (\Delta_{xyt} f'(s_{i,j}) q_t^{n+1})_{prod}, \quad (\text{B.3})$$

onde os valores das derivadas da velocidade multiplicada pela saturação são dadas por:

$$\begin{aligned} \partial_{s_{i,j}}(v_{a_{i+1/2,j}}) &= -T'_a(s_{i+1/2,j}^{up}) \left(\frac{p_{i+1,j} - p_{i,j}}{\Delta x} \right), \\ \partial_{s_{i,j}}(v_{a_{i-1/2,j}}) &= -T'_a(s_{i-1/2,j}^{up}) \left(\frac{p_{i,j} - p_{i-1,j}}{\Delta x} \right), \\ \partial_{s_{i,j}}(v_{a_{i,j+1/2}}) &= -T'_a(s_{i,j+1/2}^{up}) \left(\frac{p_{i,j+1} - p_{i,j}}{\Delta y} \right), \\ \partial_{s_{i,j}}(v_{a_{i,j-1/2}}) &= -T'_a(s_{i,j-1/2}^{up}) \left(\frac{p_{i,j} - p_{i,j-1}}{\Delta y} \right). \end{aligned} \quad (\text{B.4})$$

Vale lembrar que, pela Eq. B.2, os termos $T'_a(s)$ só aparecem se $s = s_{up}$, enquanto os termos $T_a(s)$ aparecem sempre. Além disso, o termo $-f'(s_{i,j}) q_t^{n+1}$ aparece apenas em células com poços produtores.

A derivada de F_a em relação à pressão da água é chamada $b = \frac{\partial F_a}{\partial p_o}$:

$$\begin{aligned} b &= \frac{\partial F_a}{\partial p_o} = \Delta_{xyt} \nabla_h \cdot (\partial_{p_o} v_a) \\ &= \Delta_{yt} \{ (\partial_{p_o} v_{a_{i+1/2,j}}) - (\partial_{p_o} v_{a_{i-1/2,j}}) \} + \Delta_{xt} \{ (\partial_{p_o} v_{a_{i,j+1/2}}) - (\partial_{p_o} v_{a_{i,j-1/2}}) \}. \end{aligned} \quad (\text{B.5})$$

sendo as derivadas da velocidade pela pressão nas interfaces dadas por:

$$\begin{aligned} \partial_{p_o} v_{a_{i+1/2,j}} &= -T_a(s_{i+1/2,j}^{up}) \left(-\frac{1}{\Delta x} \right), \\ \partial_{p_o} v_{a_{i-1/2,j}} &= -T_a(s_{i-1/2,j}^{up}) \left(\frac{1}{\Delta x} \right), \\ \partial_{p_o} v_{a_{i,j+1/2}} &= -T_a(s_{i,j+1/2}^{up}) \left(-\frac{1}{\Delta y} \right), \\ \partial_{p_o} v_{a_{i,j-1/2}} &= -T_a(s_{i,j-1/2}^{up}) \left(\frac{1}{\Delta y} \right). \end{aligned} \quad (\text{B.6})$$

Sendo $c = \frac{\partial F_o}{\partial s_a}$ a derivada de F_o em relação a s_a :

$$\begin{aligned} c &= \frac{\partial F_o}{\partial s_a} = -\phi \Delta_{xy} + \Delta_{xyt} \nabla_h \cdot (\partial_{s_a} v_o) \\ &= -\phi \Delta_{xy} + \Delta_{yt} [(\partial_{s_{i,j}} v_{o_{i+1/2,j}}) - (\partial_{s_{i,j}} v_{o_{i-1/2,j}})] \\ &\quad + \Delta_{xt} [(\partial_{s_{i,j}} v_{o_{i,j+1/2}}) - (\partial_{s_{i,j}} v_{o_{i,j-1/2}})] + \Delta_{xyt} f'(s_{i,j}) q_t, \end{aligned} \quad (\text{B.7})$$

sendo as derivadas da saturação e velocidade do óleo dadas por:

$$\begin{aligned} (\partial_{s_{i,j}} v_{o_{i+1/2,j}}) &= -T'_o(s_{i+1/2,j}^{up}) \left(\frac{p_{i+1,j} - p_{i,j}}{\Delta x} \right), \\ (\partial_{s_{i,j}} v_{o_{i-1/2,j}}) &= -T'_o(s_{i-1/2,j}^{up}) \left(\frac{p_{i,j} - p_{i-1,j}}{\Delta x} \right), \\ (\partial_{s_{i,j}} v_{o_{i,j+1/2}}) &= -T'_o(s_{i,j+1/2}^{up}) \left(\frac{p_{i,j+1} - p_{i,j}}{\Delta y} \right), \\ (\partial_{s_{i,j}} v_{o_{i,j-1/2}}) &= -T'_o(s_{i,j-1/2}^{up}) \left(\frac{p_{i,j} - p_{i,j-1}}{\Delta y} \right). \end{aligned} \quad (\text{B.8})$$

No caso das derivadas de F_o em relação, a p_o , tem-se $d = \frac{\partial F_o}{\partial p_o}$:

$$\begin{aligned} d &= \frac{\partial F_o}{\partial p_o} = \Delta_{xyt} \nabla_{h \cdot} (\partial_{p_o} v_o) \\ &= \Delta_{yt} \{(\partial_{p_{i,j}} v_{o_{i+1/2,j}}) - (\partial_{p_{i,j}} v_{o_{i-1/2,j}})\} + \Delta_{xt} \{(\partial_{p_{i,j}} v_{o_{i,j+1/2}}) - (\partial_{p_{i,j}} v_{o_{i,j-1/2}})\}, \end{aligned} \quad (\text{B.9})$$

com as derivadas de $\partial_{p_{i,j}} v_{o_{i+1/2,j}}$ e similares dadas por:

$$\begin{aligned} \partial_{p_{i,j}} v_{o_{i+1/2,j}} &= -T_o(s_{i+1/2,j}^{up}) \left(\frac{-1}{\Delta x} \right), \\ \partial_{p_{i,j}} v_{o_{i-1/2,j}} &= -T_o(s_{i-1/2,j}^{up}) \left(\frac{1}{\Delta x} \right), \\ \partial_{p_{i,j}} v_{o_{i,j+1/2}} &= -T_o(s_{i,j+1/2}^{up}) \left(\frac{-1}{\Delta y} \right), \\ \partial_{p_{i,j}} v_{o_{i,j-1/2}} &= -T_o(s_{i,j-1/2}^{up}) \left(\frac{1}{\Delta y} \right). \end{aligned} \quad (\text{B.10})$$

É necessário calcular as derivadas em relação aos termos $(i+1, j)$, $(i-1, j)$, $(i, j+1)$ e $(i, j-1)$. Adotando a notação $a_{i+1,j}$, $a_{i-1,j}$, $a_{i,j+1}$ e $a_{i,j-1}$ para esses pontos, respectivamente, tem-se as derivadas de F_a em relação à saturação nesses pontos da malha:

$$\begin{aligned} a_{i+1,j} &= \frac{\partial F_a}{s_{a_{i+1,j}}} = \Delta_{yt} \left[(\partial_{s_{i+1,j}} v_{a_{i+1/2,j}}) \right] = \Delta_{yt} \left[-T'_a(s_{i+1/2,j}^{up}) \left(\frac{p_{i+1,j} - p_{i,j}}{\Delta x} \right) \right], \\ a_{i-1,j} &= \frac{\partial F_a}{s_{a_{i-1,j}}} = -\Delta_{yt} \left[(\partial_{s_{i-1,j}} v_{a_{i-1/2,j}}) \right] = -\Delta_{yt} \left[-T'_a(s_{i-1/2,j}^{up}) \left(\frac{p_{i,j} - p_{i-1,j}}{\Delta x} \right) \right], \\ a_{i,j+1} &= \frac{\partial F_a}{s_{a_{i,j+1}}} = \Delta_{xt} \left[(\partial_{s_{i,j+1}} v_{a_{i,j+1/2}}) \right] = \Delta_{xt} \left[-T'_a(s_{i,j+1/2}^{up}) \left(\frac{p_{i,j+1} - p_{i,j}}{\Delta y} \right) \right], \\ a_{i,j-1} &= \frac{\partial F_a}{s_{a_{i,j-1}}} = -\Delta_{xt} \left[(\partial_{s_{i,j-1}} v_{a_{i,j-1/2}}) \right] = -\Delta_{xt} \left[-T'_a(s_{i,j-1/2}^{up}) \left(\frac{p_{i,j} - p_{i,j-1}}{\Delta y} \right) \right]. \end{aligned} \quad (\text{B.11})$$

De maneira similar, para as derivadas de F_a em relação à pressão p nos pontos $(i+1, j)$,

$(i-1, j)$, $(i, j+1)$ e $(i, j-1)$, tem-se:

$$\begin{aligned}
b_{i+1,j} &= \frac{\partial F_a}{\partial p_{o_{i+1,j}}} = \Delta_{yt} \left[(\partial_{p_{i+1,j}} v_{a_{i+1/2,j}}) \right] = \Delta_{yt} \left[-T_a(s_{i+1/2,j}^{up}) \left(\frac{1}{\Delta x} \right) \right], \\
b_{i-1,j} &= \frac{\partial F_a}{\partial p_{o_{i-1,j}}} = -\Delta_{yt} \left[(\partial_{p_{i-1,j}} v_{a_{i-1/2,j}}) \right] = -\Delta_{yt} \left[-T_a(s_{i-1/2,j}^{up}) \left(-\frac{1}{\Delta x} \right) \right], \\
b_{i,j+1} &= \frac{\partial F_a}{\partial p_{o_{i,j+1}}} = \Delta_{xt} \left[(\partial_{p_{i,j+1}} v_{a_{i,j+1/2}}) \right] = \Delta_{xt} \left[-T_a(s_{i,j+1/2}^{up}) \left(\frac{1}{\Delta y} \right) \right], \\
b_{i,j-1} &= \frac{\partial F_a}{\partial p_{o_{i,j-1}}} = -\Delta_{xt} \left[(\partial_{p_{i,j-1}} v_{a_{i,j-1/2}}) \right] = -\Delta_{xt} \left[-T_a(s_{i,j-1/2}^{up}) \left(-\frac{1}{\Delta y} \right) \right].
\end{aligned} \tag{B.12}$$

Novamente, é necessário calcular as derivadas de F_o em relação à saturação s :

$$\begin{aligned}
c_{i+1,j} &= \frac{\partial F_o}{\partial s_{a_{i+1,j}}} = \Delta_{yt} \left[(\partial_{s_{i+1,j}} v_{o_{i+1/2,j}}) \right] = \Delta_{yt} \left[-T'_o(s_{i+1/2,j}^{up}) \left(\frac{p_{i+1,j} - p_{i,j}}{\Delta x} \right) \right], \\
c_{i-1,j} &= \frac{\partial F_o}{\partial s_{a_{i-1,j}}} = -\Delta_{yt} \left[(\partial_{s_{i-1,j}} v_{o_{i-1/2,j}}) \right] = -\Delta_{yt} \left[-T'_o(s_{i-1/2,j}^{up}) \left(\frac{p_{i,j} - p_{i-1,j}}{\Delta x} \right) \right], \\
c_{i,j+1} &= \frac{\partial F_o}{\partial s_{a_{i,j+1}}} = \Delta_{xt} \left[(\partial_{s_{i,j+1}} v_{o_{i,j+1/2}}) \right] = \Delta_{xt} \left[-T'_o(s_{i,j+1/2}^{up}) \left(\frac{p_{i,j+1} - p_{i,j}}{\Delta y} \right) \right], \\
c_{i,j-1} &= \frac{\partial F_o}{\partial s_{a_{i,j-1}}} = -\Delta_{xt} \left[(\partial_{s_{i,j-1}} v_{o_{i,j-1/2}}) \right] = -\Delta_{xt} \left[-T'_o(s_{i,j-1/2}^{up}) \left(\frac{p_{i,j} - p_{i,j-1}}{\Delta y} \right) \right].
\end{aligned} \tag{B.13}$$

Finalmente, calcula-se as derivadas de F_o em relação à pressão p :

$$\begin{aligned}
d_{i+1,j} &= \frac{\partial F_o}{\partial p_{o_{i+1,j}}} = \Delta_{yt} \left[(\partial_{p_{i+1,j}} v_{o_{i+1/2,j}}) \right] = \Delta_{yt} \left[-T_o(s_{i+1/2,j}^{up}) \left(\frac{1}{\Delta x} \right) \right], \\
d_{i-1,j} &= \frac{\partial F_o}{\partial p_{o_{i-1,j}}} = -\Delta_{yt} \left[(\partial_{p_{i-1,j}} v_{o_{i-1/2,j}}) \right] = -\Delta_{yt} \left[-T_o(s_{i-1/2,j}^{up}) \left(-\frac{1}{\Delta x} \right) \right], \\
d_{i,j+1} &= \frac{\partial F_o}{\partial p_{o_{i,j+1}}} = \Delta_{xt} \left[(\partial_{p_{i,j+1}} v_{o_{i,j+1/2}}) \right] = \Delta_{xt} \left[T_o(s_{i,j+1/2}^{up}) \left(\frac{1}{\Delta y} \right) \right], \\
d_{i,j-1} &= \frac{\partial F_o}{\partial p_{o_{i,j-1}}} = -\Delta_{xt} \left[(\partial_{p_{i,j-1}} v_{o_{i,j-1/2}}) \right] = -\Delta_{xt} \left[-T_o(s_{i,j-1/2}^{up}) \left(-\frac{1}{\Delta y} \right) \right].
\end{aligned} \tag{B.14}$$