UNIVERSIDADE FEDERAL DE SANTA CATARINA PROGRAMA DE PÓS-GRADUAÇÃO EM ENGENHARIA MECÂNICA

UMA FORMULAÇÃO DE VOLUMES FINITOS BASEADA EM ELEMENTOS PARA A SIMULAÇÃO DO DESLOCAMENTO BIFÁSICO IMISCÍVEL EM MEIOS POROSOS

Dissertação submetida à Universidade Federal de Santa Catarina para a obtenção do grau de Mestre em Engenharia Mecânica

FERNANDO SANDRO VELASCO HURTADO

Florianópolis, março de 2005

UNIVERSIDADE FEDERAL DE SANTA CATARINA PROGRAMA DE PÓS-GRADUAÇÃO EM ENGENHARIA MECÂNICA

UMA FORMULAÇÃO DE VOLUMES FINITOS BASEADA EM ELEMENTOS PARA A SIMULAÇÃO DO DESLOCAMENTO BIFÁSICO IMISCÍVEL EM MEIOS POROSOS

FERNANDO SANDRO VELASCO HURTADO

Esta dissertação foi julgada adequada para a obtenção do grau de

MESTRE EM ENGENHARIA

Especialidade Engenharia Mecânica, sendo aprovada em sua forma final.

Prof. Clovis Raimundo Maliska, Ph. D., Orientador

Prof. José A. Bellini da Cunha Neto, Dr., Coordenador do Curso

BANCA EXAMINADORA

Prof. Paulo César Philippi, Dr. Ing., Presidente

Prof. António Fábio Carvalho da Silva, Dr. Eng.

Prof. Celso Peres Fernandes, Dr. Eng.

À minha querida mãe Gueisa e à minha tia Arminda.

AGRADECIMENTOS

Ao professor Clovis Raimundo Maliska, por todo o apoio prestado e pela confiança em mim depositada desde o primeiro momento. Tem sido uma imensa honra para mim trabalhar sob sua orientação.

Ao Programa de Pós-Graduação em Engenharia Mecânica da Universidade Federal de Santa Catarina, por ter me dado todas as condições necessárias para a realização do curso de mestrado. Um agradecimento especial aos professores do programa, pelos valiosos ensinamentos recebidos nas disciplinas do curso.

À Agência Nacional do Petróleo pelo financiamento deste trabalho mediante uma bolsa de estudos.

À empresa Petrobras S. A., pelo apoio técnico e financeiro ao Projeto RelP, o qual motivou inicialmente este trabalho de pesquisa.

Ao professor António Fábio Carvalho da Silva e ao colega e amigo Jonas Cordazzo, pelo excelente ambiente de discussão dos assuntos relacionados aos nossos trabalhos de pesquisa.

Ao pesquisador visitante Axel Dihlmann, pela constante e incondicional colaboração em todas as tarefas relacionadas ao nosso trabalho cotidiano no laboratório SINMEC.

Aos alunos de iniciação científica Jaime Ambrus, Bruno Alexandre Contessi e Gerson Bridi, pelo importante auxilio nas tarefas de programação.

A todos os colegas que durante este tempo têm formado parte do laboratório SINMEC, pelo excelente ambiente de convívio.

Ao amigo Gabriel Medina Tapia, pela colaboração na minha vinda ao Brasil.

E por sobre tudo, a toda minha família, que sempre tem me apoiado em todo momento. Ainda na distância sempre senti fortemente seu carinho e permanente estímulo.

CONTEÚDO

LISTA DE FIGURAS iv		
LISTA DE TABELAS iv		
NOTAÇÃO		
RESUMO	xiv	
ABSTRACT xv		
1 INTRODUÇÃO	1	
1.1 Preliminares	1	
1.2 Revisão bibliográfica	4	
1.3 Objetivos e contribuições	7	
1.4 Organização do trabalho	11	
2 MODELO MATEMÁTICO	14	
2.1 Introdução	14	
2.2 Descrição macroscópica	14	
2.3 Equações fundamentais do modelo	19	
2.4 Forma alternativa das equações diferenciais	22	
3 ASPECTOS GEOMÉTRICOS	27	
3.1 Introdução	27	
3.2 Entes geométricos fundamentais	27	
3.3 Definição da malha e armazenamento de variáveis	30	
3.4 Transformação de coordenadas	32	

	3.5 Interpolação de variáveis em um elemento	34
	3.6 Cálculo das grandezas geométricas	36
4	DISCRETIZAÇÃO DAS EQUAÇÕES DIFERENCIAIS	41
	4.1 Introdução	41
	4.2 Integração das equações diferenciais	42
	4.3 Discretização no tempo	44
	4.4 Equação discretizada da pressão	49
	4.5 Equação discretizada da saturação	57
	4.6 Montagem dos sistemas lineares de equações	62
5	IMPLEMENTAÇÃO DAS CONDIÇÕES DE CONTORNO	67
	5.1 Introdução	67
	5.2 Fronteira com entrada de fluido	67
	5.3 Fronteira com saída de fluido	71
	5.4 Fronteiras impermeáveis	75
	5.5 Fontes e sumidouros	76
6	ALGORITMO DE SOLUÇÃO	78
	6.1 Introdução	78
	6.2 Algoritmo seqüencial convencional	79
	6.3 Estratégia de aceleração	82
7	ESQUEMAS DE INTERPOLAÇÃO ESPACIAL	85
	7.1 Introdução	85
	7.2 Interpolação <i>upwind</i> para os termos advectivos	85
	7.3 Esquemas <i>upwind</i> bidimensionais	88

8 EXEMPLOS DE APLICAÇÃO 94
6.1 Introdução
6.2 Problemas unidimensionais
6.2.1 Deslocamento unidimensional em uma amostra de rocha 95
6.3 Problemas bidimensionais 102
6.3.1 Deslocamento em uma amostra de rocha heterogênea 102
6.3.2 Deslocamento gás-óleo em uma amostra de rocha 110
6.3.3 Deslocamento em um reservatório de petróleo 113
6.4 Desempenho do algoritmo de solução 116
6.5 Efeito de orientação de malha 123
7 CONCLUSÃO 142
7.1 Sumário142
7.2 Conclusões 144
REFERÊNCIAS BIBLIOGRÁFICAS146
A DEDUÇÃO DA FORMA ALTERNATIVA DAS
EQUAÇÕES DIFERENCIAIS 152
A.1 Equação diferencial da pressão152
A.2 Equação diferencial da saturação153
B POSITIVIDADE DOS COEFICIENTES GERADOS PELOS
ESQUEMAS DE INTERPOLAÇÃO UPWIND 155
C PASSO DE TEMPO ESTÁVEL 160
D REDUÇÃO DO PASSO DE TEMPO ESTÁVEL PELO
TRATAMENTO EXPLÍCITO DO TERMO DE PRESSÃO CAPILAR 163

NOTAÇÃO

Símbolos latinos

Α	Área transversal
$[A^{\Theta}]$	Matriz de coeficientes associada à equação da variável Θ
[<i>B</i>]	Vetor linha dependente da geometria do elemento
С	Compressibilidade
[D]	Matriz de derivadas das funções de forma
F	Função fluxo fracionário
$[F^{\Theta}]$	Vetor de termos independentes associado à equação da variável Θ
ġ	Vetor gravidade
G	Parâmetro relativo à gravidade
[]]	Matriz jacobiana
k _r	Permeabilidade relativa
Κ	Permeabilidade absoluta
Ē	Tensor de permeabilidade absoluta
L	Comprimento
'n	Fluxo de massa
М	Razão de viscosidades
Ν	Função de forma
N_e	Número total de elementos em uma malha
N_p	Número total de nós em uma malha
Р	Pressão
$[P_D]$	Vetor coluna associado à pressão da fase deslocada
q	Vazão através de uma face
Q	Vazão
[<i>R</i>]	Matriz de rotação

S	Saturação
ŝ	Saturação normalizada
$[s_I]$	Vetor coluna associado à saturação da fase injetada
$\vec{\mathbf{S}}$	Vetor área de superfície
t	Tempo
Т	Temperatura
$\vec{\mathbf{V}}$	Vetor velocidade
V	Volume
VPI	Volume poroso injetado
VPO	Volume poroso de óleo produzido
WI	Índice de poço
<i>x</i> , <i>y</i>	Coordenadas cartesianas (sistema global)
[Z]	Matriz de coordenadas nodais de um elemento

Símbolos gregos

α,β,γ,δ,κ	Coeficientes das equações discretizadas
$\Delta \dot{m}$	Fluxo de massa através de uma face
$\Delta \vec{\mathbf{S}}$, [ΔS]	Vetor área de uma face
Δt	Passo de tempo
ΔV	Volume de controle
Δx	Espaçamento de malha para um caso unidimensional
$\Delta \nu$	Sub-volume de controle
$[\Delta\sigma]$	Vetor coincidente com uma face
ϕ	Porosidade
λ	Mobilidade
Λ	Fator de interpolação
μ	Viscosidade absoluta
ω	Razão de fluxos de massa
Θ	Variável genérica

NOTAÇÃO

$[\Theta]$	Vetor coluna associado à variável genérica Θ
ρ	Densidade
ξ,η	Coordenadas locais
Ψ	Função dependente da saturação

Subindices

С	Capilar
D	Fase deslocada
е	Elemento
Ε	Efetivo
ent	Fronteira de entrada
ext	Exterior
f	Nó sobre uma fronteira
F	Fase genérica
i	Ponto de integração
Ι	Fase injetada
inj	Injeção
р	Nó
S	Referente à matriz sólida
sai	Fronteira de saída
Т	Total
w	Relativo a um poço
wb	Fundo de poço

Superíndices

inf	Limite inferior do intervalo da saturação
п	Nível de tempo discreto
Р	Matriz ou vetor do sistema linear da pressão

NOTAÇÃO

- $P_c = 0$ Valor de saturação associado à pressão capilar nula
- *s* Matriz ou vetor do sistema linear da saturação
- *sup* Limite superior do intervalo da saturação

Operadores e símbolos especiais

$\vec{\nabla}$	Operador nabla
∂ / ∂_t	Derivada parcial em relação ao tempo
$\partial_{\!x}$, $\partial_{\!y}$	Derivadas parciais em relação às coordenadas globais
$\partial_{\!\xi}$, ∂_{η}	Derivadas parciais em relação às coordenadas locais
min	Valor mínimo de um conjunto de valores
max	Valor máximo de um conjunto de valores
[]	Matriz ou vetor
^	Valor normalizado

RESUMO

O método de volumes finitos baseado em elementos é aplicado à discretização das equações diferenciais que descrevem o escoamento em meios porosos no nível macroscópico, para o desenvolvimento de uma formulação numérica destinada a simulação de processos de deslocamento bifásico imiscível. A discretização espacial é realizada considerando malhas não-estruturadas de elementos quadriláteros, com as quais é possível representar em forma precisa e eficiente domínios bidimensionais de qualquer grau de complexidade. Para lidar com a complexidade geométrica decorrente do uso de malhas não-estruturadas, todas as operações relativas à discretização das equações diferenciais são realizadas com base nos elementos, de acordo com um sistema de coordenadas local. Contudo, na abordagem considerada é mantida a essência do método convencional de volumes finitos, isto é, a construção de equações aproximadas que satisfazem a conservação das grandezas físicas no nível discreto. A formulação numérica apresentada foi desenvolvida visando sua aplicação na simulação de processos de deslocamento em amostras de rocha para a estimação de curvas de permeabilidade relativa e na simulação de processos de recuperação secundária em reservatórios de petróleo. Um dos aspectos mais promissores da formulação desenvolvida é a possibilidade de eliminar o denominado efeito de orientação de malha, uma anomalia numérica que apresentam em maior ou menor grau todas as metodologias numéricas rotineiramente usadas para simular esse tipo de processos. Segundo é mostrado mediante diversos exemplos, o uso de esquemas de interpolação consistentes com o caráter multidimensional do escoamento é uma questão-chave para a eliminação do efeito de orientação de malha. Outros exemplos de aplicação são apresentados também para avaliar o desempenho da formulação em problemas de deslocamento envolvendo diversas características físicas tais como heterogeneidade do meio, pressão capilar, compressibilidade dos fluidos, gravidade e geometrias irregulares.

xiv

ABSTRACT

The element-based finite volume method (EbFVM) is applied to the discretization of the differential equations that describe macroscopic flow in porous media, with the aim of developing a numerical formulation for simulating two-phase immiscible displacements. The spatial discretization is performed by means of quadrilateral unstructured grids, which are adequate for representing twodimensional domains of any complexity in an accurate and efficient way. For dealing with the geometric complexity of unstructured grids, all operations regarding to the discretization of differential equations are performed over grid elements, without any reference to their connectivity. However, the EbFVM approach preserves also the essence of conventional finite volume method, that is, the construction of approximate equations that guarantee the conservation of physical quantities at discrete level. The present formulation was developed aiming its application to the simulation of displacement processes in core samples for estimating relative permeability curves, and to the simulation of petroleum reservoir secondary recovery processes. One of the most promising aspects of the numerical formulation presented herein is the possibility of eliminating the so-called grid orientation effect, which is a numerical abnormality present in all customary numerical methodologies applied to reservoir simulation. As showed in several examples, an interpolation scheme consistent with the multidimensional character of the flow is the key factor for eliminating grid orientation effect. Other application examples are presented also for evaluating the formulation performance in displacement problems including physical characteristics such as heterogeneity, capillary pressure, fluid compressibility, gravity, and irregular geometries.

CAPÍTULO

1

INTRODUÇÃO

1.1 Preliminares

A simulação numérica do deslocamento de fluidos através de meios porosos é fundamental para diversas aplicações de engenharia tão importantes como a explotação de reservatórios de petróleo, o aproveitamento dos recursos hídricos existentes no subsolo ou a reabilitação de solos contaminados por derramamento de sustâncias nocivas. Esta ferramenta confere ao engenheiro a importante capacidade de predizer, com um certo grau de acúracia, os complexos fenômenos físicos relacionados ao deslocamento de fluidos, além de permitir-lhe alcançar um nível mais profundo de compreensão da dinâmica de tais fenômenos. Estas capacidades são fundamentais em atividades tais como a tomada de decisões e a otimização de processos industriais.

O principal interesse do presente trabalho está centrado em processos de deslocamento envolvendo duas fases fluidas imiscíveis. O processo típico deste tipo de deslocamentos envolve uma fase fluida que ocupa inicialmente o espaço poroso e que é gradualmente desalojada por outra fase fluida, a qual é forçada mecanicamente a ingressar no meio. A recuperação secundária de petróleo de reservatórios mediante injeção de água é um exemplo característico deste tipo de processos. Os processos de deslocamento em amostras de rocha realizados em laboratório para estimar as curvas de permeabilidade relativa podem ser citados como outros exemplos típicos de deslocamentos bifásicos imiscíveis. De fato, conforme será explicado mais adiante, a

motivação inicial para a realização deste trabalho foi a necessidade de contar com um modelo numérico de deslocamento para ser empregado em um método de estimação de parâmetros destinado a determinar curvas de permeabilidade relativa de rochas reservatório.

A base para a construção de uma formulação destinada à simulação numérica de um fenômeno físico é o modelo matemático, o qual deve compreender leis fundamentais e equações constitutivas que descrevam os detalhes essenciais do fenômeno. No caso do deslocamento de fluidos em meios porosos, o modelo matemático inclui equações diferenciais parciais e equações algébricas altamente não-lineares e fortemente acopladas. São essas características que tornam a solução numérica das equações do modelo de deslocamento um problema com um alto grau de dificuldade. Tal nível de dificuldade é usualmente incrementado por outras características freqüentes em problemas de deslocamento, tais como a heterogeneidade do meio poroso ou presença de descontinuidades nas soluções.

Numerosas formulações numéricas têm sido desenvolvidas ao longo das últimas décadas para resolver as equações do modelo de deslocamento bifásico imiscível. Os avanços nesta área têm sido motivados principalmente pelas aplicações na simulação de reservatórios de petróleo, uma vez que os processos básicos de recuperação de petróleo podem ser modelados como processos de deslocamento bifásico imiscível. Além disso, comumente novas técnicas numéricas para modelos mais complexos são inicialmente implementadas e avaliadas considerando modelos de deslocamento bifásico, os quais apresentam dificuldades semelhantes, especialmente nos aspectos relacionados a questões estritamente geométricas.

Em geral, a aplicação de métodos numéricos para resolver equações diferenciais requer a discretização do domínio de solução, processo que consiste na divisão em um número finito de blocos ou subdomínios, os quais formam a denominada malha computacional. Esta malha determina a localização de um conjunto de pontos no domínio, nos quais valores aproximados das variáveis das equações diferenciais são determinados por meio do método numérico. É interessante observar que as formulações numéricas para deslocamento de fluidos em meios porosos têm

avançado seguindo um caminho semelhante ao das formulações numéricas destinadas a resolver as equações de Navier-Stokes, quanto à evolução do tipo de malhas utilizadas. Assim, nos estágios iniciais apenas malhas ortogonais simples eram empregadas, sendo que a principal preocupação era o desenvolvimento de técnicas especiais para o tratamento das não-linearidades e os acoplamentos entre variáveis. Uma característica fundamental procurada nos métodos numéricos aplicados para resolver as equações do modelo de deslocamento em meios porosos é a estrita observância da conservação da massa das fases fluidas, requisito essencial para que a solução possua coerência física. Já que a conservação das grandezas físicas no nível discreto é uma característica intrínseca do método de volumes finitos, este método foi, e ainda é, o mais utilizado para resolver problemas de deslocamento em meios porosos.

Após serem estabelecidos certos procedimentos padrão para lidar com as nãolinearidades e acoplamentos de variáveis, a principal preocupação dos pesquisadores passou a ser a representação acurada do domínio de solução mediante malhas mais flexíveis. Gradualmente foram sendo desenvolvidas metodologias específicas para malhas estruturadas generalizadas ou malhas corner-point, como são denominadas na área de simulação de reservatórios de petróleo. Ainda que com estas malhas é possível representar geometrias relativamente complexas, o processo de geração de uma malha pode exigir um esforço computacional excessivo, devido à estrutura ordenada que devem manter as células que a formam. Por essa mesma razão, malhas deste tipo são inadequadas para realizar refinamento em regiões específicas do domínio, o que é desejável quando se requer representar com fidelidade detalhes particulares do domínio, tais como poços e falhas geológicas. Em uma tentativa por superar essas dificuldades foram propostas diversas formulações empregando malhas de Voronoi. A malha de Voronoi é uma malha não-estruturada, ou seja, uma malha que não precisa respeitar nenhuma estrutura preestabelecida, mas que é construída sob certas restrições que garantem que seja mantida ortogonalidade local. Isso permite que técnicas numéricas simples, desenvolvidas originalmente para malhas ortogonais estruturadas, possam ser empregadas também. Entretanto, uma flexibilidade geométrica completa só é possível com o emprego de malhas não-

estruturadas, semelhantes às utilizadas no método de elementos finitos para problemas estruturais, por exemplo. Embora na literatura existam diversas formulações baseadas neste método para resolver as equações do modelo de deslocamento em meios porosos, nenhuma delas têm tido aplicação efetiva, devido principalmente a que nestas formulações a conservação de massa não é garantida e além disso, freqüentemente devem ser utilizadas estratégias duvidosas, tais como a adição de termos artificiais de dissipação, para estabilizar as equações discretas e poder obter soluções fisicamente coerentes.

Na década de oitenta começaram a ser desenvolvidas metodologias numéricas para a solução de problemas de mecânica dos fluidos e transferência de calor em malhas não-estruturadas do tipo usado no método de elementos finitos, mas empregando a base conceitual do método de volumes finitos para o processo de obtenção das equações aproximadas. Essas metodologias, denominadas neste trabalho de volumes finitos baseados em elementos, possuem a flexibilidade geométrica que confere o uso de malhas não-estruturadas, junto com a garantia da conservação das grandezas físicas em nível de volumes de controle. Embora tais metodologias tenham alcançado atualmente suficiente maturidade e são amplamente empregadas em numerosos pacotes comerciais para simulação de escoamentos de diversos tipos, sua aplicação na simulação de deslocamento de fluidos em meios porosos ainda não tem sido pesquisada exaustivamente, apesar de suas evidentes vantagens para simular esse tipo de fenômeno. O assunto central do presente trabalho é precisamente o preenchimento dessa lacuna mediante o desenvolvimento e implementação de uma formulação obtida aplicando uma metodologia numérica conservativa baseada em elementos ao caso específico do deslocamento bifásico imiscível.

1.2 Revisão bibliográfica

O método de volumes finitos baseado em elementos foi desenvolvido originalmente para resolver escoamentos descritos pelas equações de Navier-Stokes. A idéia geral do método foi proposta inicialmente por Baliga e Patankar [2], no início da década de oitenta, para a solução de equações de advecção-difusão. Posteriormente a

5

metodologia foi estendida por esses mesmos autores para a resolução de problemas mais gerais de mecânica dos fluidos e transferência de calor [3]. Nesses trabalhos foram consideradas malhas não-estruturadas de elementos triangulares como base geométrica para construir volumes de controle unindo os centróides de cada triângulo com os pontos médios dos seus lados. As equações diferenciais de conservação eram integradas em cada um de tais volumes de controle para a obtenção de equações aproximadas que respeitassem a conservação das grandezas físicas no nível discreto. Foram esses autores que propuseram também o nome de Control-Volume Finite Element Method¹ (CVFEM) para este método, com o qual é mais conhecido na literatura. Contudo, conforme argumenta Maliska [31], essa denominação é imprecisa pois sugere que se trata de um método que segue a filosofia do método de elementos finitos e que também emprega volumes de controle. Entretanto, conforme mencionado acima, a realidade é que se trata de um método construído com a base conceitual do método de volumes finitos e que apenas emprega o conceito de elemento para a representação geométrica do domínio de solução. Por tal razão, é mais adequada a denominação Element-based Finite Volume Method (EbFVM) ou método de volumes finitos baseado em elementos, a qual é utilizada neste trabalho.

Alguns anos mais tarde, Raw [35] desenvolveu outra formulação numérica também destinada a problemas de mecânica dos fluidos e transferência de calor, seguindo a mesma idéia básica da metodologia de Baliga e Patankar. Do ponto de vista geométrico, a principal inovação na formulação de Raw encontra-se no uso de malhas não-estruturadas de quadriláteros. Além de obter uma formulação de grande versatilidade geométrica, Raw propôs estratégias específicas para lidar com as duas maiores dificuldades na resolução das equações de Navier-Stokes: o tratamento do acoplamento pressão-velocidade e a aproximação acurada dos termos advectivos. Todas essas características tornaram esta formulação em uma das mais robustas, precisas e versáteis até agora desenvolvidas, a tal ponto que na atualidade forma parte do núcleo numérico de um dos pacotes computacionais para simulação de escoamentos de uso mais estendido em diversas áreas da engenharia. Muitas das

¹ Método de elementos finitos com volumes de controle.

idéias apresentadas por Raw serão adaptadas no presente trabalho para a discretização do modelo de deslocamento de fluidos em meios porosos.

Uma das primeiras tentativas para aplicar metodologias de volumes finitos baseadas em elementos à simulação de escoamentos em meios porosos foi realizada por Rozon [36], que desenvolveu uma formulação com malhas de quadriláteros para resolver problemas envolvendo o escoamento de um único fluido em reservatórios de petróleo. Dado que o modelo nesse caso reduz-se a uma equação de Laplace, o autor comparou a equação discreta resultante da aplicação do EbFVM com a equação obtida mediante o método de Galerkin, concluindo que o erro de discretização associado ao EbFVM para essa equação é de menor magnitude que o erro associado ao método de Galerkin.

No final da década de oitenta e começo da década de noventa foram publicados alguns trabalhos em que o método de volumes finitos baseado em elementos foi aplicado à simulação de escoamentos multifásicos em reservatórios de petróleo, utilizando malhas de elementos triangulares. Entre eles pode-se mencionar o trabalho de Forsyth [19], que considerou problemas térmicos de simulação de reservatórios; de Gottardi e Dall'Olio [22] que aplicaram o método à simulação de deslocamentos água-óleo em reservatórios; de Fung et al. [20, 21], que sistematizaram a aplicação do método e analisaram possíveis combinações com outros tipos de malhas para representar melhor a geometria dos reservatórios; e de Sonier e Eymard [39] que estudaram algumas propriedades matemáticas e numéricas do método. Todos estes trabalhos possuem várias características comuns e descrevem basicamente a mesma formulação numérica. Contudo, o processo de aproximação numérica das equações diferenciais do escoamento multifásico descrito nessas publicações é pouco rigoroso e simplificações pouco justificáveis são introduzidas para conseguir que as equações resultantes possam ser implementadas seguindo os procedimentos normais empregados em formulações com malhas estruturadas. Conforme analisado por Cordazzo et al. [11, 12], esse tratamento, além de originar uma interpretação equivocada de certos parâmetros presentes nas aproximações numéricas usadas, impõe restrições geométricas à malha utilizada, as quais poderiam ser evitadas se uma dedução mais rigorosa das equações aproximadas fosse considerada.

Com o objetivo de simular a contaminação do subsolo por derramamento de fluidos orgânicos, Huber e Helmig [25] descreveram e compararam três metodologias de volumes finitos considerando malhas não-estruturadas mistas, compostas por triângulos e quadriláteros. Tais metodologias se originam em diferentes tipos de aproximações numéricas, uma das quais segue a filosofia da metodologia apresentada por Forsyth [19] para malhas triangulares. Embora este trabalho tenha apresentado como inovação o uso de malhas mistas, a formulação sofre das mesmas deficiências comentadas acima para as formulações com malhas triangulares.

Recentemente, Edwards [15] apresentou a generalização de uma metodologia de volumes finitos originalmente desenvolvida para malhas estruturadas, para ser aplicada também em malhas não-estruturadas de triângulos ou quadriláteros. A principal preocupação dessa metodologia é o tratamento numérico correto no caso de considerar-se meios heterogêneos anisotrópicos, em que a permeabilidade absoluta deve ser representada como um tensor de segunda ordem variável no espaço.

É reduzido o número de trabalhos publicados relacionados com a aplicação de métodos de volumes finitos baseados em elementos à simulação de processos de deslocamento em meios porosos. E conforme foi apontado acima, vários desses trabalhos apresentam formulações muito simplificadas, em que o grande potencial de metodologias baseadas em malhas não-estruturadas não foi explorado adequadamente. No âmbito da simulação de escoamentos multifásicos em meios porosos é evidente a ausência de uma formulação numérica com sólidas bases conceptuais e metodológicas que permitam aproveitar todas as vantagens que o uso de malhas não-estruturadas oferece.

1.3 Objetivos e contribuições

A presente dissertação tem como objetivo central apresentar uma formulação numérica para a simulação de processos de deslocamento bifásico imiscível em meios porosos, resultado da aplicação do método de volumes finitos baseado em elementos às equações diferenciais do modelo matemático que descreve esse tipo de deslocamentos no nível macroscópico. Serão considerados apenas problemas bidimensio-

nais, embora todos os aspectos conceituais considerados na formulação sejam factíveis de ser estendidos a problemas em três dimensões.

Do ponto de vista prático, dois tipos de problemas são de principal interesse para serem resolvidos aplicando a formulação desenvolvida. O primeiro é o deslocamento transiente em amostras de rocha reservatório, os quais rotineiramente são realizados em laboratório para a determinação de curvas de permeabilidade relativa. Estas são propriedades do sistema formado pelo meio poroso e os fluidos se deslocando nele, propriedades que não são diretamente mesuráveis e, portanto, apenas podem ser estimadas a partir de medições relativas ao escoamento realizadas durante a execução de ensaios de laboratório. Conforme mostra a figura 1.1, um ensaio desta natureza consiste basicamente na injeção de um fluido em uma amostra cilíndrica inicialmente saturada com outro fluido, o qual é deslocado gradualmente durante o experimento. Embora o escoamento nas amostras seja essencialmente unidimensional, o interesse em um modelo bidimensional mais detalhado encontrase na possibilidade de captar detalhadamente alterações provocadas pelas heterogeneidades da rocha. Na atualidade podem ser obtidas medições muito precisas da variação espacial das propriedades intrínsecas de uma amostra porosa mediante métodos de aquisição de imagens por tomografia computadorizada, os quais podem fornecer dados de alta qualidade para sua utilização em um modelo numérico. Além



Figura 1.1 Ensaio de deslocamento em uma amostra de rocha reservatório.

disso, também mediante tomografia podem ser obtidas imagens das distribuições instantâneas de fluidos durante um ensaio de deslocamento. Estas imagens podem ser confrontadas com resultados de simulações numéricas para resolver o problema inverso da determinação das curvas de permeabilidade relativa mediante um método de estimação de parâmetros. Embora neste tipo de problemas o domínio de solução seja simples e, portanto, não exista a necessidade de utilizar malhas nãoestruturadas irregulares, a simulação dos processos de deslocamento mediante uma formulação de volumes finitos baseada em elementos pode se beneficiar pelo emprego de funções de interpolação mais acuradas.

O outro problema de interesse é o processo de recuperação secundária de óleo considerando modelos bidimensionais de reservatórios, sejam areais ou de seção transversal. Nestes processos um fluido, tal como água ou gás, é injetado no reservatório através de um conjunto de poços estrategicamente localizados, para deslocar o óleo em direção a poços produtores onde o óleo é recuperado. Dado que neste caso o domínio de solução pode possuir geometrias arbitrariamente complexas, o uso de malhas não-estruturadas é muito vantajoso. Mais ainda considerando que, conforme mostra a figura 1.2, podem existir no domínio detalhes intrincados como falhas geológicas e poços irregularmente distribuídos que a discretização deve acompanhar fielmente. Uma vantagem adicional do enfoque de volumes finitos baseado em elementos é que além de obter-se flexibilidade geométrica para representar domínios complexos em forma precisa, obtém-se também suficiente flexibilidade para o uso de esquemas de interpolação que representam mais fielmente as características do escoamento. Um dos problemas mais sérios da maioria das metodologias numéricas usadas na simulação de reservatórios é o denominado efeito de orientação de malha, ou seja, a característica adversa de produzir diferentes soluções numéricas dependendo da orientação da malha empregada. A juízo de vários autores este problema é ocasionado em grande medida pelo uso de esquemas de interpolação que não representam adequadamente o caráter multidimensional do escoamento. Talvez uma das maiores contribuições deste trabalho seja o aporte de novas luzes para a resolução desse problema, mediante o estudo da influência dos esquemas de interpolação na ocorrência do efeito de orientação de malha.



Figura 1.2 Simulação de processos de recuperação secundária de petróleo.

Mesmo que uma malha não-estruturada possa ser formada por elementos triangulares e/ou quadrangulares, na formulação desenvolvida neste trabalho apenas serão consideradas malhas formadas por elementos quadriláteros. Como se detalhará na próxima seção, na literatura da área existem alguns trabalhos tratando da aplicação de metodologias de volumes finitos empregando malhas não-estruturadas de triângulos, mas praticamente nenhum considerando malhas de quadriláteros. Acredita-se que muitas vantagens que o uso deste tipo de malhas tem na solução das equações de Navier-Stokes, especialmente as relacionadas com funções de interpolação mais precisas, podem ser aproveitadas com vantagem na simulação de deslocamentos de fluidos em meios porosos.

Além das características gerais acima mencionadas, no início do trabalho foram estabelecidos alguns requisitos adicionais específicos para a formulação numérica objetivada:

i) Inclusão na modelagem de todos os fenômenos físicos que possam tornar-se relevantes nos processos de deslocamento em diferentes escalas, desde a escala das amostras de rocha até a escala dos reservatórios de petróleo. Assim por exemplo, deverão estar consideradas as influências da heterogeneidade do meio, da pressão capilar, da gravidade e da compressibilidade dos fluidos.

ii) Consideração de condições de contorno que representem as situações físicas comuns em processos de deslocamento, especialmente o denominado efeito de extremidade, causado pela ação da pressão capilar na vizinhança das superfícies com saída de fluido.

iii) Construção de uma estrutura operacional sistemática para a aplicação do método de volumes finitos baseado em elementos à discretização de equações de modelos de deslocamento. Deste modo serão estabelecidas bases sólidas para posteriores avanços na aplicação da metodologia a modelos de deslocamento mais gerais ou inclusive a modelos de outro tipo de fenômenos físicos. A formulação deve resultar também o suficientemente clara e organizada para permitir uma implementação computacional simples e eficiente.

iv) Adaptação das equações da formulação numérica para a utilização de um algoritmo de solução seqüencial. Conforme é mencionado na literatura, este tipo de algoritmos apresenta o melhor compromisso entre simplicidade e economia de tempo de computação para o tipo de problemas de interesse. Além disso, a simplicidade de implementação dos algoritmos seqüenciais torna mais fácil a avaliação de, por exemplo, novos esquemas de interpolação para melhorar a precisão da metodologia de discretização.

1.4 Organização do trabalho

O capítulo 2 descreve o modelo matemático considerado como base da formulação numérica desenvolvida nos capítulos seguintes. Além da forma tradicional das equações diferenciais do modelo, as quais representam a conservação de massa das fases fluidas, ao final do capítulo é apresentada uma forma alternativa obtida mediante manipulação algébrica, a qual permite obter uma visão mais clara das propriedades matemáticas do modelo.

O capítulo 3 resume todos os aspectos geométricos relacionados com o método de volumes finitos baseado em elementos. Os tópicos apresentados neste capítulo são de caráter geral, não estando relacionados a nenhum modelo matemático específico. Ao longo deste capítulo são introduzidos diversos conceitos, relações matemáticas e notações que serão empregados em posteriores capítulos.

No capítulo 4 é descrito em detalhes o processo de discretização das equações diferenciais do modelo de deslocamento imiscível. Diferentes aproximações temporais são consideradas para as variáveis primárias do modelo, o qual permite um desacoplamento parcial das equações diferenciais do modelo de deslocamento. Esta estratégia facilita o uso de algoritmos de solução seqüenciais para resolver o conjunto de equações resultante do processo de discretização. Embora as equações discretizadas representam balanços realizados em volumes de controle, elas são deduzidas considerando grandezas definidas usualmente em nível de elementos. Na parte final do capítulo é descrito o procedimento de montagem das equações relativas aos volumes de controle, com base nas contribuições de todos elementos de uma malha.

O capítulo 5 descreve a dedução de equações discretizadas especiais para os volumes de controle adjacentes às fronteiras do domínio. Equações especiais são necessárias para esses volumes a fim de prescrever na formulação numérica as condições de contorno que completam a descrição matemática do problema de deslocamento analisado. São consideradas as condições de contorno mais usuais, assim como a representações discretas de poços em reservatórios de petróleo.

No capítulo 6 são delineadas duas formas do algoritmo de solução seqüencial empregado para obter a evolução temporal das variáveis do modelo resolvendo o conjunto de equações discretizadas obtidas em capítulos anteriores. A primeira é a forma convencional do algoritmo seqüencial, enquanto que a segunda é uma forma alternativa proposta com o intuito de reduzir o tempo de computação em problemas de grande tamanho.

O capítulo 7 apresenta uma discussão acerca dos esquemas de interpolação espacial empregados na formulação numérica. É descrita uma família de esquemas

de interpolação para a aproximação dos termos advectivos, baseados na direção local do escoamento e que garantem a positividade dos coeficientes nas equações discretizadas.

O capítulo 8 está destinado a mostrar alguns exemplos de aplicação da formulação numérica. O objetivo deste capítulo é mostrar o desempenho da formulação em diferentes casos práticos, ressaltando suas virtudes, potencialidades e possíveis deficiências. No final deste capítulo é realizado também um estudo da influência dos esquemas de interpolação espacial sobre o efeito de orientação de malha.

Finalmente, o capítulo 9 conclui este trabalho com uma discussão geral em relação ao desenvolvimento da formulação e ao desempenho observado. Algumas sugestões para futuras pesquisas são também realizadas.

CAPÍTULO

MODELO MATEMÁTICO

2.1 Introdução

Neste capítulo são enunciadas todas as equações que formam parte do modelo de deslocamento bifásico imiscível considerado neste trabalho, além de apresentar uma breve revisão dos conceitos fundamentais relativos a tal modelagem. Foi adotada a descrição macroscópica clássica do escoamento multifásico em um meio poroso, na qual cada uma das grandezas física possui associado um campo contínuo definido sobre todo o espaço ocupado pelo meio. As equações consideradas descrevem o escoamento multidimensional isotérmico de dois fluidos compressíveis em um meio poroso consolidado e isotrópico, sob a ação de um gradiente de pressão externo e das forças viscosas, capilares e relativas à gravidade.

2.2 Descrição macroscópica

Duas são as abordagens principais empregadas para descrever o deslocamento de fluidos em meios porosos, as quais são denominadas convencionalmente como descrições microscópica e macroscópica, respectivamente. Quando uma abordagem *microscópica* é considerada, equações diferenciais de conservação de massa, quantidade de movimento e energia são empregadas para descrever o movimento dos fluidos no espaço vazio do meio poroso, ou seja, nas regiões do meio não ocupadas pela matriz sólida. Para tanto é indispensável o conhecimento detalhado da estrutura morfológica do meio, pois ela define as fronteiras do domínio de análise onde condições de contorno para as equações de diferenciais de conservação deverão ser prescritas. Tal requerimento, além do enorme custo computacional envolvido na solução das equações diferenciais, torna impraticável o emprego do enfoque microscópico para a predição de processos de deslocamento em escalas cuja ordem de grandeza for maior que a escala dos poros.

Quando o deslocamento de fluidos é descrito de acordo com um enfoque macroscópico não é necessária qualquer especificação morfológica da estrutura porosa. A descrição é realizada considerando cada uma das grandezas físicas associadas ao escoamento como variáveis contínuas definidas em todo o espaço ocupado pelo meio poroso. O valor de tais variáveis em um ponto dado representa em realidade uma média volumétrica dos valores microscópicos na região circundante, abarcando o fluido contido em dezenas ou até centenas de poros [43]. Os procedimentos de média volumétrica das equações de conservação introduzem propriedades que não são mesuráveis no nível microscópico, mas que na escala macroscópica representam os efeitos da complexa estrutura do meio poroso. É indispensável que tais propriedades sejam estimadas para tornar viável o emprego das equações de conservação macroscópicas na predição de processos de deslocamento em aplicações específicas. A estimação de tais propriedades envolve necessariamente algum tipo de trabalho experimental, sendo necessária em alguns casos a solução de um problema inverso, uma vez que a medição direta destas propriedades não é possível. É importante notar que embora o enfoque macroscópico envolva médias volumétricas de propriedades e variáveis de estado, não é necessário especificar explicitamente nas equações o tamanho dos volumes aos quais correspondem tais médias [43].

As grandezas físicas oriundas da abordagem macroscópica podem ser classificadas em dois grupos: as grandezas volumétricas e as grandezas relativas ao escoamento. Ao primeiro grupo pertencem propriedades tais como a porosidade e a saturação, cuja definição provém diretamente do conceito de média volumétrica. Ao segundo grupo pertencem, por exemplo, a permeabilidade absoluta e a permeabilidade relativa, cuja definição está estreitamente relacionada à existência de fluidos se deslocando no meio poroso. Por sua importância, a definição das principais propriedades macroscópicas é examinada brevemente a seguir.

Considerando um certo volume de referência em um meio poroso, a *porosidade* é definida como a razão entre o volume vazio e o volume total, ou seja

$$\phi = \frac{V_v}{V} = \frac{V_v}{V_v + V_s} \tag{2.1}$$

onde V_v e V_s são o volume vazio e o volume ocupado pela matriz sólida, respectivamente, em um dado volume de referência V tal como o representado na figura 2.1. A porosidade pode ser representada como uma função suave da posição, se o valor definido por meio da equação (2.1) for atribuído ao ponto coincidente com o centróide do volume de referência. Para tanto, deve ser garantido que o tamanho de tal volume seja grande em relação à dimensão característica dos poros, mas ao mesmo tempo muito menor que a dimensão macroscópica do meio poroso [43].



Figura 2.1 Volume de referência em um meio poroso.

Quando múltiplas fases fluidas estão presentes em um meio poroso, a quantidade relativa de uma fase genérica *F* está dada pela sua *saturação*, definida matematicamente mediante a expressão CAPÍTULO 2

$$s_F = \frac{V_F}{V_v} \tag{2.2}$$

onde V_F e V_v são, respectivamente, o volume ocupado pela fase F e o volume disponível ou volume de vazio, ambos relativos a um certo volume de referência no meio poroso.

A figura 2.2 ilustra uma situação típica para um processo de deslocamento bifásico, no qual duas fases podem coexistir em um mesmo volume elementar. Como resultado da interação de forças em nível molecular, a interface que separa as fases fluidas tende a formar um determinado ângulo em relação à superfície sólida no ponto de contato. Denomina-se fase *molhante* àquela fase que apresenta maior afinidade com a superfície sólida e portanto tende a cobri-la com maior facilidade, pelo fato do ângulo de contato ser menor a 90° do lado desta fase. A outra fase é denominada em contraposição, fase *não-molhante*. Esta caracterização das fases no escoamento bifásico está estreitamente relacionada com a definição da pressão capilar, a qual será examinada posteriormente.



Figura 2.2 Caracterização das fases em um deslocamento bifásico.

A *permeabilidade absoluta* é a propriedade macroscópica do meio poroso que relaciona o gradiente hidráulico com a vazão de um fluido escoando através do meio.

A definição clássica desta propriedade é realizada através da lei de Darcy, a qual pode ser representada matematicamente como

$$\vec{\mathbf{v}} = -\frac{\vec{\mathbf{k}}}{\mu} \cdot (\vec{\nabla}P - \rho \,\vec{\mathbf{g}})$$
(2.3)

Nesta expressão, \vec{v} é a velocidade média do fluido no volume de referência ou velocidade de Darcy, *P* é a pressão, \vec{g} é a aceleração da gravidade, e ρ e μ são a densidade e a viscosidade do fluido, respectivamente. A permeabilidade absoluta \vec{k} é representada em geral como um tensor de segunda ordem, entretanto, se o meio poroso for isotrópico esta propriedade poderá ser representada como uma grandeza escalar [27]. Um meio poroso pode apresentar significativa variação espacial da permeabilidade absoluta. De fato, a variação espacial desta propriedade é a principal característica de um meio heterogêneo.

A extensão da lei de Darcy para o escoamento simultâneo de várias fases em um meio poroso introduz o conceito de *permeabilidade relativa*. A idéia fundamental deste enfoque é considerar para cada fase fluida uma equação semelhante à equação (2.3). Entretanto, uma vez que a presença de outras fases no meio poroso causa um efeito adverso na capacidade de deslocamento de uma dada fase, introduz-se na equação um fator de redução da permeabilidade do meio, o qual é denominado convencionalmente como permeabilidade relativa. Assim, para uma fase genérica *F*, a lei de Darcy generalizada é usualmente escrita como

$$\vec{\mathbf{v}}_{F} = -\frac{k_{F}\vec{\mathbf{K}}}{\mu_{F}} \cdot (\vec{\nabla}P_{F} - \rho_{F}\vec{\mathbf{g}})$$
(2.4)

onde k_{rF} é a permeabilidade relativa da fase *F*. As restantes grandezas são análogas às da equação (2.3), exceto que aquelas denotadas com subíndice *F* encontram-se referidas especificamente a tal fase. Note-se que na equação (2.4) a pressão é considerada também uma grandeza associada à fase, devido a que duas fases coexistindo em um mesmo volume elementar podem possuir diferentes valores de pressão como resultado da ação da tensão interfacial atuando nas superfícies que as separam.

MODELO MATEMÁTICO

Devido à complexa interação entre fluidos e superfície sólida que se produz na escala microscópica durante um processo de deslocamento, a relação entre a permeabilidade relativa e as propriedades dos fluidos e o meio poroso é ainda pouco compreendida. Para aplicações práticas admite-se, entretanto, que a permeabilidade relativa associada a uma fase é uma função monotônica e não-negativa de sua saturação [26].

2.3 Equações fundamentais do modelo

O núcleo do modelo matemático para a descrição macroscópica do escoamento bifásico imiscível em meios porosos está constituído pela equação diferencial de conservação de massa e a relação matemática resultante da lei de Darcy generalizada, ambas as equações expressas para cada uma das fases fluidas.

A equação de conservação de massa para uma fase é simplesmente a expressão matemática do balanço entre acumulação e fluxo líquido de massa em um volume elementar. A forma diferencial desta equação é [34]

$$\frac{\partial(\phi\rho_F s_F)}{\partial t} + \vec{\nabla} \cdot (\rho_F \vec{\mathbf{v}}_F) = 0; \qquad F = I, D \qquad (2.5)$$

Todas as grandezas físicas presentes nesta equação foram definidas na seção precedente. A fim de não restringir a notação empregada a processos de deslocamento com fluidos específicos, no presente trabalho foi adotada uma nomenclatura genérica na qual a fase forçada mecanicamente a ingressar no meio poroso é denominada fase injetada, denotada portanto com o subíndice *I*, enquanto que a outra fase é denominada fase deslocada e denotada com o subíndice *D*.

A lei de Darcy substitui no nível macroscópico à equação de conservação de quantidade de movimento, na descrição do escoamento a baixa velocidade de um fluido através de um meio poroso [26]. Quando o escoamento envolve múltiplas fases fluidas, esse papel é desempenhado pela lei de Darcy generalizada, cuja expressão matemática foi enunciada na seção precedente como a equação que define a permeabilidade relativa. Uma vez que no presente trabalho apenas será

considerado o deslocamento de fluidos em meios porosos isotrópicos, a equação (2.4) simplificar-se-á a

$$\vec{\mathbf{v}}_{F} = -\frac{Kk_{rF}}{\mu_{F}} (\vec{\nabla}P_{F} - \rho_{F}\vec{\mathbf{g}}); \qquad F = I, D \qquad (2.6)$$

Uma vez que as equações (2.5) e (2.6) envolvem grandezas associadas apenas a uma fase, são necessárias equações adicionais de acoplamento que envolvam simultaneamente variáveis correspondentes as duas fases. As saturações podem ser relacionadas entre si mediante a equação de balanço de volume ou equação de restrição volumétrica, a qual se origina na hipótese que todo o espaço poroso é ocupado completamente pelas fases fluidas [34]. Para o caso de escoamento bifásico esta equação toma a forma

$$s_I + s_D = 1 \tag{2.7}$$

A segunda equação de acoplamento relaciona as pressões de ambas as fases por meio da definição da pressão capilar. Conforme já mencionado, a pressão associada a cada fase pode adquirir valores diferentes em um mesmo volume elementar devido à ação da tensão interfacial nas superfícies de contato entre fases. Esta tensão interfacial é por sua vez resultado da interação de forças em nível molecular entre os fluidos e a superfície sólida. A pressão capilar é então definida como a diferença entre os valores das pressões associadas às duas fases em um volume elementar. Para manter unicidade na definição das variáveis do modelo apresentado, optou-se por definir a pressão capilar independentemente das características de molhabilidade da rocha¹, empregando para todos os casos a relação matemática

$$P_{\rm C} = P_{\rm D} - P_{\rm I} \tag{2.8}$$

Para completar o modelo matemático do deslocamento bifásico imiscível é necessário um conjunto de equações constitutivas que descrevam o comportamento específico dos fluidos considerados e do sistema constituído pelo meio poroso e tais

¹ Na literatura, costuma-se definir a pressão capilar como sendo igual à pressão da fase nãomolhante menos a pressão da fase molhante. Tal definição conduz sempre a valores positivos de pressão capilar, se o meio poroso possuir molhabilidade uniforme, entretanto, o uso desta definição requer do conhecimento prévio das características de molhabilidade do meio.

fluidos. Assim, para os fluidos considerados, a densidade pode estar relacionada com a pressão² mediante relações funcionais da forma

$$\rho_F = \rho_F(P_F); \qquad F = I, D \qquad (2.9)$$

Quanto às permeabilidades relativas e a pressão capilar, neste trabalho será aceito como fato empírico sua dependência em relação à saturação dos fluidos. Uma vez que para o deslocamento bifásico os valores das saturações não são independentes, pois estão relacionados linearmente através da equação (2.7), as permeabilidades relativas e a pressão capilar podem ser expressas em função apenas da saturação de uma das fases. Portanto, ao longo deste trabalho estas propriedades serão consideradas definidas mediante relações funcionais da forma

$$k_{rF} = k_{rF}(s_{I}); \qquad F = I, D$$
 (2.10)

$$P_{\rm C} = P_{\rm C}(s_{\rm I}) \tag{2.11}$$

É comum a representação destas relações funcionais mediante curvas, as quais são usualmente estimadas a partir de ensaios de deslocamento realizados em amostras de rocha [44]. Conforme mostra a figura 2.3, as duas curvas de permeabilidade relativa, bem como a curva de pressão capilar, encontram-se



Figura 2.3 Domínio de definição das curvas de permeabilidade relativa e pressão capilar.

² Não será considerada a dependência da densidade em relação à temperatura, uma vez que apenas serão modelados escoamentos isotérmicos.

definidas em um determinado intervalo de valores da saturação o qual será denotado como $s_I^{inf} \leq s_I \leq s_I^{sup}$. Os valores extremos do intervalo possuem diferentes interpretações dependendo do processo de deslocamento considerado. Assim por exemplo para o processo de deslocamento de óleo por água em um reservatório, s_I^{inf} corresponderá à saturação de água irredutível, geralmente denotada na literatura como s_{wi} , enquanto que s_I^{sup} será igual a $1 - s_{or}$, onde s_{or} é a saturação de óleo residual.

As equações (2.5) a (2.12) formam um sistema de equações fechado, a partir do qual, após serem definidas condições de contorno e iniciais de acordo com o processo específico sendo modelado, poder-se-á obter a evolução temporal dos campos associados às variáveis de estado do problema: a saturação e a pressão associadas a cada uma das fases. A discussão sobre as condições de contorno e iniciais apropriadas para modelar processos de deslocamento específicos, assim como a representação das propriedades do meio poroso, será realizada posteriormente com base na forma discretizada das equações diferenciais do modelo.

2.4 Forma alternativa das equações diferenciais

Embora o sistema de equações diferenciais e algébricas estabelecido na seção precedente seja suficiente para descrever o deslocamento bifásico imiscível, a forma desagregada em que se encontram tais equações não permite obter uma percepção clara das características e propriedades matemáticas do modelo. Estes aspectos podem ser elucidados a partir da análise de duas novas equações diferenciais que podem ser obtidas combinando as equações de conservação de massa, as expressões correspondentes à lei de Darcy e as equações de acoplamento. Mediante manipulação algébrica pode-se conseguir que a pressão de uma das fases se torne a variável dominante em uma de tais equações, a qual é denominada portanto *equação da pressão*. A restante equação possui como variável dominante a saturação de uma das fases, e então ela recebe a denominação de *equação da saturação*.

Formas levemente diferentes da equação da pressão podem ser obtidas dependendo de qual pressão for escolhida como variável primária na equação. Considerando como tal a pressão da fase deslocada, a seguinte forma da equação da pressão é obtida³

$$\phi(s_{I}c_{I}+s_{D}c_{D})\frac{\partial P_{D}}{\partial t} = \left(\frac{\vec{\nabla}\cdot\rho_{I}\lambda_{I}\vec{\nabla}P_{D}}{\rho_{I}} + \frac{\vec{\nabla}\cdot\rho_{D}\lambda_{D}\vec{\nabla}P_{D}}{\rho_{D}}\right) + \phi s_{I}c_{I}\frac{\partial P_{C}}{\partial t} - \frac{\vec{\nabla}\cdot\rho_{I}\lambda_{I}\vec{\nabla}P_{C}}{\rho_{I}} - \left(\frac{\vec{\nabla}\cdot\rho_{I}^{2}\lambda_{I}\vec{\mathbf{g}}}{\rho_{I}} + \frac{\vec{\nabla}\cdot\rho_{D}^{2}\lambda_{D}\vec{\mathbf{g}}}{\rho_{D}}\right)$$
(2.12)

Nesta equação foram empregados os conceitos de mobilidade de fase e compressibilidade isotérmica, os quais encontram-se definidos, respectivamente, pelas expressões matemáticas seguintes

$$\lambda_F \equiv \frac{k_{rF}K}{\mu_F} \tag{2.13}$$

$$c_F = \left. \frac{1}{\rho_F} \frac{\partial \rho_F}{\partial P_F} \right|_T \tag{2.14}$$

Apesar da aparente complexidade da equação (2.12), ela representa simplesmente o balanço entre a variação do volume ocupado pelas duas fases fluidas e o fluxo volumétrico de ambos os fluidos em um volume elementar. Se os termos relativos à pressão capilar e à gravidade forem considerados como termos fonte da equação da pressão, poder-se-á advertir que existe uma notável similitude com a equação de condução de calor. Esta analogia é mais evidente para o caso especial em que as duas fases são incompressíveis, em que a equação de pressão reduz-se a

$$\vec{\nabla} \cdot (\lambda_I + \lambda_D) \vec{\nabla} P_D - \vec{\nabla} \cdot \lambda_I \vec{\nabla} P_C - \vec{\nabla} \cdot (\lambda_I \rho_I + \lambda_D \rho_D) \vec{\mathbf{g}} = 0$$
(2.15)

Esta forma da equação da pressão é equivalente à equação de condução em regime estacionário e, portanto, trata-se de uma equação elíptica. A forma mais geral, equação (2.12), é uma equação parabólica [34] com propriedades semelhantes às da equação de condução de calor em regime transiente. Contudo, para a maioria dos processos de deslocamento de interesse neste trabalho, onde uma das fases é forçada mecanicamente a invadir o meio poroso, mesmo quando a compressibilidade dos

³ A dedução desta equação é apresentada na seção A.1 do apêndice A.
MODELO MATEMÁTICO

fluidos não for desprezível, os termos elípticos relacionados com o gradiente de pressão serão os termos dominantes na equação (2.12). Portanto, ainda no caso geral com fluidos compressíveis, a equação de pressão no modelo de deslocamento bifásico poderá ser considerada para fins práticos como uma equação de natureza predominantemente elíptica [34].

Ainda considerando a versão simplificada da equação da pressão, é possível mostrar [34] que ela é equivalente a

$$\vec{\nabla} \cdot \vec{\mathbf{v}}_{\mathrm{T}} = 0 \tag{2.16}$$

onde \vec{v}_{T} é o vetor velocidade total, definido como a soma dos vetores velocidade das duas fases, ou seja,

$$\vec{\mathbf{v}}_{T} \equiv \vec{\mathbf{v}}_{I} + \vec{\mathbf{v}}_{D} \tag{2.17}$$

A notável simplicidade da equação (2.17) é um indicador da importância do vetor velocidade total como variável do modelo de deslocamento bifásico⁴. Porém, a maior relevância desta variável está no seu papel como nexo principal entre a equação da pressão e a equação da saturação.

A equação da saturação quando escrita em função da velocidade total é denominada na literatura como forma de Buckley-Leverett da equação da saturação. Expressa para a saturação da fase injetada, esta equação toma a forma⁵

$$\phi \frac{\partial (\rho_I s_I)}{\partial t} + \vec{\nabla} \cdot \rho_I F_I \left[\vec{\mathbf{v}}_T + \lambda_D (\rho_I - \rho_D) \vec{\mathbf{g}} \right] + \vec{\nabla} \cdot \rho_I \Psi \vec{\nabla} P_C = 0$$
(2.18)

Nesta equação F_1 denota a denominada função fluxo fracionário, a qual é uma função que depende apenas da saturação, definida mediante a expressão matemática

$$F_{I} = \frac{\lambda_{I}}{\lambda_{I} + \lambda_{D}}$$
(2.19)

⁴ A equação geral (2.12) pode ser expressa também em função da velocidade total, contudo, a presença neste caso de vários termos de menor importância relativos à compressibilidade dos fluidos obscurece a relevância desta variável nessa equação.

⁵ A dedução desta equação é apresentada no na seção A.2 do apêndice A. Cabe notar que esta forma da equação da saturação é a própria equação de conservação de massa da fase injetada, apenas expressa empregando a velocidade total.

A função Ψ possui uma definição semelhante,

$$\Psi = \frac{\lambda_I \lambda_D}{\lambda_I + \lambda_D} \tag{2.20}$$

A equação de saturação na forma de Buckley-Leverett pode ser interpretada como uma equação de advecção-difusão não-linear [34]. De acordo com esta interpretação, a saturação poderia ser concebida como uma grandeza sendo transportada por advecção e por difusão em um escoamento cuja velocidade é uma composição da velocidade total, definida na equação (2.17), e uma velocidade secundária responsável pela segregação gravitacional. O segundo termo da equação (2.18), o qual representa o transporte advectivo, é claramente de natureza não-linear já que o fluxo fracionário é em geral uma função não-linear da saturação. Uma situação semelhante acontece com o terceiro termo, o qual representa o transporte difusivo, uma vez que a pressão capilar é também uma função não-linear da saturação. Além disso, o coeficiente que faz o papel de coeficiente de difusão nesse termo é também uma função não-linear da saturação.

Do ponto de vista matemático, a equação da saturação na forma de Buckley-Leverett é uma equação de natureza parabólica ou hiperbólica, dependendo da importância relativa do termo de difusivo em relação ao termo advectivo [34]. Em processos de deslocamento com injeção de fluido, o termo advectivo será em geral o termo dominante e, portanto, nesses casos a equação da saturação tornar-se-á uma equação predominantemente hiperbólica. No caso limite, quando o termo de pressão capilar for desconsiderado, obter-se-á uma equação hiperbólica pura cuja solução poderá apresentar descontinuidades, as quais representarão à frente de fluido injetado avançando no meio poroso. Em qualquer outra situação, tais descontinuidades serão suavizadas em maior ou menor grau pela ação difusiva do termo de pressão capilar [5].

Além de possibilitar a elucidação de aspectos matemáticos importantes do modelo de deslocamento bifásico imiscível, a forma alternativa das equações diferenciais apresentada nesta seção sugere a conveniência da utilização de algoritmos de solução seqüenciais considerando a pressão da fase deslocada e a

MODELO MATEMÁTICO

saturação da fase injetada como variáveis principais da formulação. Uma vez que na forma alternativa examinada, cada uma das equações diferenciais possui uma variável dominante, pode-se conceber um algoritmo de solução em que a evolução no tempo do processo seja determinada resolvendo cada equação em forma segregada para sua própria variável. Este será o enfoque abordado na formulação numérica apresentada neste trabalho. Os posteriores capítulos estarão dedicados a descrever em detalhes todo o processo de obtenção de tal formulação, com base no modelo matemático apresentado no presente capítulo.

CAPÍTULO

ASPECTOS GEOMÉTRICOS

3.1 Introdução

Para que um problema físico descrito por um conjunto de equações diferenciais possa ser resolvido em um computador, as equações diferenciais devem ser transformadas em um conjunto finito de equações algébricas. Tal processo de transformação é denominado *discretização*, já que um problema contínuo é transformado em um problema discreto. O processo de discretização está estreitamente relacionado a uma questão estritamente geométrica, ou seja, a divisão do domínio de solução em porções menores que estarão diretamente relacionadas às equações algébricas resultado da discretização. Portanto, muitos aspectos de um método de discretização estão vinculados a aspectos puramente geométricos, os quais são comuns a um amplo conjunto de problemas físicos. Todos esse aspectos serão analisados sistematicamente neste capítulo para o método de volumes finitos baseado em elementos.

3.2 Entes geométricos fundamentais

Quando um conjunto de equações diferenciais descrevendo um problema físico é resolvido empregando um método numérico, apenas é possível obter uma solução aproximada do problema. Tal solução consiste em um conjunto finito de valores das variáveis dependentes, correspondendo a um conjunto discreto de localizações no espaço e no tempo. Em geral, a distribuição de tais localizações no domínio de solução está definida pela *malha computacional*, a qual simplesmente é uma representação discreta da geometria do domínio.

No método numérico considerado no presente trabalho, o método de volumes finitos baseado em elementos (EbFVM), a discretização do domínio de solução é realizada considerando uma malha não-estruturada. Os entes geométricos que definem esta malha são denominados *elementos*, os quais cobrem completamente o domínio sem se sobrepor ou deixar espaços vazios. A disposição dos elementos na malha pode ser completamente arbitrária, não existindo necessidade alguma de manter uma ordenação preestabelecida. Embora tampouco exista nenhuma restrição relativa à forma dos elementos, unicamente malhas de elementos quadriláteros serão consideradas neste trabalho, uma vez que elas fornecem suficiente flexibilidade geométrica para representar satisfatoriamente qualquer domínio bidimensional e ao mesmo tempo possuem propriedades geométricas vantajosas para a implementação de esquemas de interpolação acurados, conforme foi discutido no capítulo 1.

Os pontos onde são determinados os valores das variáveis de estado do problema encontram-se localizados nos vértices dos elementos; tais pontos serão denominados *nós*. Embora as entidades básicas para a definição da malha sejam os elementos, a integração das equações diferenciais de conservação é realizada em entidades duais denominadas *volumes de controle*, construídas em torno a todos os nós da malha, tal como mostrado na figura 3.1. Cada volume de controle é formado por porções de todos os elementos que compartilham um dado nó; tais porções serão denominadas *sub-volumes de controle*. Independentemente de sua posição ou tamanho, cada elemento quadrilátero contém sempre quatro sub-volumes de controle, os quais se encontram comunicados entre si por superfícies planas denominadas *faces*. A fim de obter uma configuração simétrica, é usual construir as faces unindo o centróide do elemento em questão com os pontos médios dos seus lados. O contorno completo de um volume de controle não é mais que a união das faces de todos os sub-volumes que o formam.



Figura 3.1 Entes geométricos associados ao processo de discretização.

Na integração das equações diferenciais de conservação é necessário calcular os valores de integrais de superfície representando os fluxos que atravessam as faces dos volumes de controle. Para tanto, a melhor opção é empregar a regra do ponto médio [18], com a qual tais integrais são aproximadas mediante o produto do valor do integrando no ponto central da face e a área da face. Seguindo a terminologia empregada em [35], os pontos centrais das faces de um volume de controle serão denominados *pontos de integração*. Além disso, a superfície de cada face será representada por um vetor normal à face, com módulo igual a sua área e orientado apontando para fora do volume de controle. Todos os entes geométricos descritos encontram-se representados esquematicamente na figura 3.1, a qual mostra também a notação associada à cada um deles.

É importante notar que muitas das denominações empregadas para as grandezas geométricas têm origem em malhas tridimensionais. No presente trabalho tais denominações serão mantidas na maioria dos casos, apesar de que para malhas bidimensionais como as consideradas, os volumes degenerem em polígonos planos e as superfícies degenerem em linhas.

3.3 Definição da malha e armazenamento de variáveis

Uma das formas mais simples para definir uma malha não-estruturada de elementos é mediante a especificação da localização dos nós e da conectividade dos elementos. Para a definição da localização dos nós é necessário estabelecer um sistema de numeração que permita identificar univocamente todos os nós na malha, este esquema de identificação será denominado de numeração global. Por outro lado, a conectividade dos elementos é tipicamente representada em uma tabela, denominada tabela de conectividade, na qual para cada elemento são especificados os nós que o formam, identificados de acordo com o esquema de numeração global. A figura 3.2(c) ilustra a construção de uma tabela de conectividade para uma malha simples de três elementos, a qual é mostrada na figura 3.2(a) junto com a numeração global considerada para os nós nesse caso. A ordem na qual são especificados os nós na tabela de conectividade define um outro esquema de numeração para os nós, o qual será denominado de numeração local. Neste esquema, válido apenas para todas aquelas operações realizadas considerando um elemento isolado, cada nó deve ser identificado com um número compreendido entre 1 e 4, tal como mostra a figura 3.2(b). Para garantir a compatibilidade entre a numeração local de todos os elementos em uma malha, a ordenação na qual são especificados os nós na tabela de conectividade deve ser único, já seja no sentido dos ponteiros do relógio ou no sentido contrário. Conforme é mostrado na figura 3.2(b), ao longo deste trabalho será considerada convencionalmente uma ordenação em sentido contrário aos ponteiros do relógio.

Conforme foi mencionado na seção precedente, as variáveis de estado de um modelo matemático cujas equações diferenciais são discretizadas com o EbFVM são determinadas em localizações coincidentes com os nós da malha. Pode-se definir então uma representação discreta do campo associado a uma determinada variável na forma de um vetor reunindo todos os valores nodais da variável, ordenados de acordo com o esquema de numeração global estabelecido para os nós. Para uma variável genérica Θ , por exemplo, a aproximação discreta do campo será representada então como

$$\begin{bmatrix} \boldsymbol{\Theta} \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} \boldsymbol{\Theta}_{1} \\ \boldsymbol{\Theta}_{2} \\ \boldsymbol{\Theta}_{3} \\ \vdots \\ \boldsymbol{\Theta}_{N_{p}-1} \\ \boldsymbol{\Theta}_{N_{p}} \end{bmatrix}$$
(3.1)

onde N_p é o número total de nós na malha. O resultado final da solução numérica das equações do modelo matemático de um problema físico será então um conjunto de vetores com o formato da equação (3.1), um para cada variável dependente, associados aos nós da malha computacional empregada para resolver as equações.



Figura 3.2 Definição da topologia de uma malha. (a) Numeração global dos nós e elementos. (b) Numeração local dos nós em cada elemento. (c) Tabela de conectividade.

Um vetor como $[\Theta]$, associado à numeração global da malha será denominado *vetor global*. Entretanto, no EbFVM muitas operações associadas ao processo de

discretização das equações diferenciais devem ser realizadas em nível de elemento. Para tanto, é vantajoso definir um *vetor local* associado a uma determinada variável, contendo apenas os valores nodais correspondentes a um dado elemento. Por exemplo, para a variável genérica Θ ter-se-ia

$$\begin{bmatrix} \boldsymbol{\Theta} \end{bmatrix}_{e} = \begin{bmatrix} \boldsymbol{\Theta}_{1} \\ \boldsymbol{\Theta}_{2} \\ \boldsymbol{\Theta}_{3} \\ \boldsymbol{\Theta}_{4} \end{bmatrix}_{e}$$
(3.2)

onde neste caso os valores nodais estão referidos à numeração local. Este tipo de notação será usado amplamente ao longo deste trabalho. Toda a informação necessária para a construção de vetores locais para todos os elementos a partir do vetor global está contida na tabela de conectividade da malha.

3.4 Transformação de coordenadas

A operação fundamental do processo de discretização empregando o EbFVM é a integração das equações de conservação em todos os volumes de controle construídos sobre a malha de elementos. No entanto, uma vez que a configuração geométrica dos volumes de controle pode resultar arbitrariamente complexa, é requerido um enfoque especial para realizar eficientemente todos os cálculos envolvidos no processo de discretização. A estratégia empregada, originária do método de elementos finitos, é a realização de todos os cálculos em elementos isolados, considerando um sistema de coordenadas local definido para cada elemento. Quando representado em um sistema de coordenadas local apropriado, um elemento de tamanho e posição arbitrários em relação ao sistema de coordenadas global, transforma-se em um elemento regular de tamanho e forma fixos, comumente denominado elemento-padrão. Portanto, a representação em coordenadas locais de qualquer expressão matemática envolvida nas equações de conservação torna-se também idêntica para qualquer elemento da malha. Tal característica permite formular expressões matemáticas simples e genéricas em nível de elemento, as quais depois podem ser reorganizadas para formar as equações discretas de conservação em nível de volumes de controle. A figura 3.3 ilustra de forma esquemática o processo de transformação de coordenadas para elementos quadriláteros.



Figura 3.3 Transformação de coordenadas. **(a)** Elemento arbitrário no sistema de coordenadas global. **(b)** Elemento padrão no sistema de coordenadas local.

Uma vez que as equações de conservação estão definidas com base nas coordenadas globais $x \in y$, são necessárias relações matemáticas que expressem a transformação às coordenadas locais $\xi \in \eta$. Uma forma simples de obter tais relações é através das denominadas *funções de forma*,

$$N_{1}(\xi,\eta) = \frac{1}{4}(1+\xi)(1+\eta)$$

$$N_{2}(\xi,\eta) = \frac{1}{4}(1-\xi)(1+\eta)$$

$$N_{3}(\xi,\eta) = \frac{1}{4}(1-\xi)(1-\eta)$$

$$N_{4}(\xi,\eta) = \frac{1}{4}(1+\xi)(1-\eta)$$
(3.3)

Empregando tais funções é possível expressar as coordenadas globais de um ponto qualquer dentro de um dado elemento, mediante as relações de transformação seguintes **CAPÍTULO 3**

$$x(\xi,\eta) = \sum_{j=1}^{4} N_j(\xi,\eta) x_j$$

$$y(\xi,\eta) = \sum_{j=1}^{4} N_j(\xi,\eta) y_j$$
(3.4)

onde x_j e y_j são as coordenadas globais dos nós nos vértices do elemento, de acordo com a numeração local. Conforme mencionado na seção anterior, convencionalmente tal numeração será considerada em sentido contrário aos ponteiros do relógio, conforme mostra a figura 3.3.

As equações (3.4) representam uma transformação bilinear, na qual o intervalo de variação das coordenadas locais é de -1 a 1, no interior do elemento-padrão. Assim, as linhas correspondendo aos valores constantes $\xi = 1$, $\xi = -1$, $\eta = 1$ e $\eta = -1$ representam a cada um os lados do elemento-padrão, enquanto que a origem do sistema de coordenadas locais coincide com seu centróide. Isto implica que as faces que separam os sub-volumes de controle estão representadas pelas linhas $\xi = 0$ e $\eta = 0$. De acordo com esta forma de construção resultam quatro sub-volumes idênticos no elemento padrão, conforme pode-se observar na figura 3.3. É fácil comprovar que as coordenadas dos quatro pontos de integração no elemento são respectivamente $(\frac{1}{2}, 0)$, $(0, \frac{1}{2})$, $(-\frac{1}{2}, 0)$ e $(0, -\frac{1}{2})$, no sistema de referência local. Esses pontos de integração serão convencionalmente identificados mediante o esquema de numeração mostrado também na figura 3.3.

3.5 Interpolação de variáveis em um elemento

Durante o processo de discretização das equações diferenciais de conservação, será necessário expressar a variação espacial de uma variável de estado do problema em função das coordenadas locais. Para tanto, a alternativa mais simples é considerar as mesmas funções de forma empregadas para realizar a transformação de coordenadas. Considerando uma variável genérica Θ , ter-se-ia

$$\Theta(\xi,\eta) \approx \sum_{j=1}^{4} N_j(\xi,\eta) \,\Theta_j \tag{3.5}$$

onde Θ_j são os valores nodais de tal variável, sendo que o índice j representa a numeração local dos nós.

Com base na aproximação dada pela equação (3.5), é possível expressar o gradiente da variável genérica em termos das coordenadas no sistema local de referência. Diferenciando tal equação em relação às duas coordenadas globais, o vetor gradiente pode ser escrito como

$$[\nabla\Theta] \equiv \begin{bmatrix} \partial_x \Theta \\ \partial_y \Theta \end{bmatrix} = \sum_{j=1}^4 \begin{bmatrix} \partial_x N_j \\ \partial_y N_j \end{bmatrix} \Theta_j$$
(3.6)

As funções de forma são funções contínuas das coordenadas locais, e portanto elas podem ser derivadas em relação a tais coordenadas. Considerando a regra da cadeia, pode-se escrever [35] empregando notação matricial

$$\begin{bmatrix} \partial_{\xi} N_{j} \\ \partial_{\eta} N_{j} \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} \partial_{\xi} x & \partial_{\xi} y \\ \partial_{\eta} x & \partial_{\eta} y \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \partial_{x} N_{j} \\ \partial_{y} N_{j} \end{bmatrix}$$
(3.7)

A matriz de dimensão 2×2 no lado direito da equação anterior é conhecida como matriz jacobiana da transformação, a qual é usualmente denotada como [*J*]. Expressões para as derivadas que formam tal matriz podem ser obtidas formalmente diferenciando as equações (3.4). Após substituir tais expressões na definição de [*J*], obtém-se

$$[J] = \sum_{j=1}^{4} \begin{bmatrix} \partial_{\xi} N_j \\ \partial_{\eta} N_j \end{bmatrix} \begin{bmatrix} x_j & y_j \end{bmatrix}$$
(3.8)

Considerando a definição do produto de duas matrizes, esta equação pode ser expressa na forma equivalente mais compacta

$$[J] = [D][Z]_e (3.9)$$

onde [D] é uma matriz contendo as derivadas das funções de forma em relação às coordenadas locais, definida por

$$[D] = \begin{bmatrix} \partial_{\xi} N_{1} & \partial_{\xi} N_{2} & \partial_{\xi} N_{3} & \partial_{\xi} N_{4} \\ \partial_{\eta} N_{1} & \partial_{\eta} N_{2} & \partial_{\eta} N_{3} & \partial_{\eta} N_{4} \end{bmatrix}$$
(3.10)

ASPECTOS GEOMÉTRICOS

enquanto que $[Z]_e$ é uma matriz contendo as coordenadas dos nós localizados nos vértices do elemento considerado, ordenadas de acordo com o esquema de numeração local, ou seja

$$[Z]_{e} = \begin{bmatrix} x_{1} & y_{1} \\ x_{2} & y_{2} \\ x_{3} & y_{3} \\ x_{4} & y_{4} \end{bmatrix}$$
(3.11)

Após calculada a matriz jacobiana mediante a equação (3.9), as derivadas das funções de forma em relação as coordenadas globais podem ser facilmente determinadas empregando a equação (3.7), a qual pode ser reescrita como

$$\begin{bmatrix} \partial_x N_j \\ \partial_y N_j \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} J \end{bmatrix}^{-1} \begin{bmatrix} \partial_{\xi} N_j \\ \partial_{\eta} N_j \end{bmatrix}$$
(3.12)

e depois substituída na equação (3.6), para se obter

$$\left[\nabla\Theta\right] = \left[J\right]^{-1} \sum_{j=1}^{4} \begin{bmatrix} \partial_{\xi} N_j \\ \partial_{\eta} N_j \end{bmatrix} \Theta_j$$
(3.13)

Considerando a definição do vetor local associado a uma variável, dada na equação (3.2), a equação precedente pode ser expressa na forma mais compacta

$$\left[\nabla\Theta\right] = \left[J\right]^{-1} \left[D\right] \left[\Theta\right]_{e} \tag{3.14}$$

Esta equação permite aproximar o gradiente de uma variável em qualquer ponto de coordenadas (ξ , η) no interior de um elemento, em função apenas dos valores nodais da variável em questão e das coordenadas dos vértices do elemento. Segundo se verá posteriormente, esta expressão é adequada para aproximar os termos de natureza elíptica nas equações diferenciais do modelo.

3.6 Cálculo de grandezas geométricas

O vetor área de face definido na seção 3.2 é uma das grandezas geométricas requeridas durante o processo de discretização. Uma vez que apenas estão

considerando-se malhas bidimensionais, o módulo de tal vetor será numericamente igual ao comprimento da face em questão. Conseqüentemente, uma simples rotação em ângulo reto de um vetor construído coincidindo com a face fornecerá o vetor desejado, conforme mostra a figura 3.4. Matematicamente, tal operação pode ser expressa da forma seguinte

$$\Delta \vec{\mathbf{S}}_{i} \equiv \left[\Delta S\right]_{i} = \left[R\right] \begin{bmatrix} \Delta x \\ \Delta y \end{bmatrix}_{i}$$
(3.15)

onde [R] é uma matriz de rotação, dada por

$$[R] = \begin{bmatrix} 0 & 1 \\ -1 & 0 \end{bmatrix}$$
(3.16)

enquanto que Δx e Δy são as componentes cartesianas do vetor coincidindo com a face, tal como mostrado também na figura 3.4. Tais componentes poderiam ser calculadas com base nas coordenadas globais dos vértices do elemento, entretanto, resulta mais simples fazê-lo considerando coordenadas locais. É possível mostrar que as componentes Δx e Δy estão relacionadas com as correspondentes componentes em coordenadas locais, $\Delta \xi$ e $\Delta \eta$, através da expressão¹

$$\begin{bmatrix} \Delta x \\ \Delta y \end{bmatrix}_{i} = \begin{bmatrix} \partial_{\xi} x & \partial_{\eta} x \\ \partial_{\xi} y & \partial_{\eta} y \end{bmatrix}_{i} \begin{bmatrix} \Delta \xi \\ \Delta \eta \end{bmatrix}_{i}$$
(3.17)

É fácil reconhecer a matriz na equação anterior como a transposta da matriz jacobiana definida na equação (3.7), avaliada no ponto de integração localizado sobre a face em questão. Substituindo a equação (3.17) na equação (3.15), e denotando como $[\Delta\sigma]_i$ o vetor de componentes $\Delta\xi$ e $\Delta\eta$, obtém-se finalmente a seguinte expressão condensada para o vetor área de face

$$\left[\Delta S\right]_{i} = \left[R\right] \left[J\right]_{i}^{T} \left[\Delta\sigma\right]_{i} \tag{3.18}$$

Uma vez que um ponto de integração é compartilhado por dois sub-volumes de controle adjacentes, a escolha de uma determinada orientação fixa para o vetor $[\Delta\sigma]_i$

¹ Conforme é mostrado em [35], tal expressão unicamente é valida para funções de forma bilineares, as quais possuem derivadas lineares em relação às coordenadas locais.



Figura 3.4 Construção do vetor área de face.

em um dado ponto de integração dará origem a um vetor área de face que é positivo em relação a um dos sub-volumes adjacentes e negativo em relação ao outro. Convencionalmente foi escolhida a orientação mostrada na figura 3.5(a) para os quatro vetores $[\Delta\sigma]_i$ em um elemento, a qual originará quatro vetores área de face no plano físico com a orientação mostrada na figura 3.5(b). Logo, dependendo do sub-volume considerado, o sinal adequado para o vetor área de face deverá ser explicitado nas equações onde esta grandeza geométrica esteja sendo utilizada. No sistema de coordenadas local, as componentes dos quatro vetores $[\Delta\sigma]_i$ definidos na figura 3.5(a) são, respectivamente

$$\begin{bmatrix} \Delta \sigma \end{bmatrix}_1 = \begin{bmatrix} 1 \\ 0 \end{bmatrix}; \quad [\Delta \sigma]_2 = \begin{bmatrix} 0 \\ 1 \end{bmatrix}$$

$$\begin{bmatrix} \Delta \sigma \end{bmatrix}_3 = \begin{bmatrix} -1 \\ 0 \end{bmatrix}; \quad [\Delta \sigma]_4 = \begin{bmatrix} 0 \\ -1 \end{bmatrix}$$
(3.19)

Uma outra grandeza geométrica necessária durante o processo de discretização é o volume dos sub-volumes de controle. O cálculo de tal grandeza resulta também mais simples considerando o sistema de coordenadas local, já que no elemento padrão os sub-volumes possuem também forma regular, encontrando-se limitados pelas quatro superfícies $\xi = \xi_a$, $\xi = \xi_b$, $\eta = \eta_a$ e $\eta = \eta_b$, conforme mostra a figura 3.6. É possível mostrar [35] que o cálculo do volume em tal domínio reduz-se a



Figura 3.5 (a) Vetores área de face em um elemento no plano físico.(b) Vetores coincidentes com as faces no elemento padrão.

O jacobiano |J| é o determinante da matriz jacobiana definida pela equação (3.7). A aplicação da regra do ponto médio [35] para o cálculo da integral conduz a

$$\Delta \nu_m = \left| J \right|_m (\xi_b - \xi_a) \left(\eta_b - \eta_a \right) = \left| J \right|_m \tag{3.21}$$

onde *m* denota o ponto médio do sub-volume transformado, segundo mostra também a figura 3.6. Conclui-se que o volume de cada sub-volume de controle é numericamente igual ao jacobiano da transformação avaliado no ponto central do sub-volume. A simplificação na equação anterior é possível pelo fato de que os quatro sub-volumes contidos em um elemento possuem dimensões unitárias, ou seja, tem-se $(\xi_b - \xi_a) = (\eta_b - \eta_a) = 1$, para qualquer um dos sub-volumes. É possível mostrar também que, embora a equação (3.21) tenha sido obtida empregando um método de integração aproximado, o valor do volume calculado com tal equação é exato [35], devido à natureza bilinear das equações de transformação.



Figura 3.6 Sub-volume de controle no elemento padrão.

Para um volume de controle completo em torno a um nó p, a magnitude do seu volume pode ser calculado simplesmente somando os volumes de todos os subvolumes que o formam, ou seja

$$\Delta V_p = \sum_m \Delta v_m \tag{3.22}$$

CAPÍTULO

DISCRETIZAÇÃO DAS EQUAÇÕES DIFERENCIAIS

4.1 Introdução

Este é o capítulo fundamental do presente trabalho, pois nele é descrito em detalhes o processo de aplicação do EbFVM ao desenvolvimento de uma formulação destinada à simulação do deslocamento bifásico imiscível. Embora a forma final das equações discretizadas que formam parte da formulação esteja adaptada para a utilização de um algoritmo de solução seqüencial, a maioria das operações e procedimentos descritos neste capítulo é de aplicação geral. O processo de discretização será iniciado a partir das equações diferenciais de conservação de massa, e após estabelecer claramente todas as aproximações numéricas e operações algébricas necessárias, serão obtidos os equivalentes discretos das equações diferenciais da pressão e da saturação, os quais formam a base da formulação numérica apresentada neste trabalho. Seguindo a filosofia do EbFVM, a maioria das expressões matemáticas deduzidas será adaptada para ser computada na forma de contribuições parciais em nível de elementos, embora as equações estejam referidas a balanços nos volumes de controle. No final do capítulo é descrito o procedimento de montagem dos sistemas lineares de equações, com base nas contribuições determinadas em todos os elementos da malha.

4.2 Integração das equações diferenciais

Em geral, uma formulação de volumes finitos caracteriza-se por equações discretizadas que satisfazem a conservação das propriedades do escoamento em nível de volumes de controle discretos [31]. Independentemente do tipo de malha considerada, esta característica do método pode ser garantida iniciando o processo de discretização pela integração das equações diferenciais expressas na forma conservativa, considerando como domínio de integração um volume de controle genérico na malha empregada.

Realizando a integração da equação diferencial de conservação de massa da fase *F*, equação (2.5), obtém-se

$$\int_{\Delta V} \left[\frac{\partial (\phi \rho_F s_F)}{\partial t} + \vec{\nabla} \cdot (\rho_F \vec{\mathbf{v}}_F) \right] dV = 0$$
(4.1)

Nesta equação, a integral de volume pode ser separada em duas integrais, a segunda das quais pode ser transformada por sua vez em uma integral de superfície mediante a aplicação do teorema da divergência [28]. A equação toma então a forma

$$\int_{\Delta V} \frac{\partial (\phi \rho_F s_F)}{\partial t} dV + \int_{\Delta S} \rho_F \vec{\mathbf{v}}_F \cdot \mathbf{d}\vec{\mathbf{S}} = 0$$
(4.2)

onde **dS** é o vetor diferencial de área, normal ao contorno do volume de controle em qualquer ponto e apontando para fora do volume. A integral de superfície está definida sobre o contorno completo do volume de controle ΔV .

A equação (4.2) é a forma integral da equação de conservação de massa, a qual é válida inclusive para um volume de controle abrangendo o domínio de solução completo. O primeiro termo nessa equação representa a acumulação de massa da fase F no interior do volume de controle, enquanto que o segundo representa o fluxo de massa líquido da mesma fase atravessando o contorno do volume¹.

Considerando agora um volume de controle poligonal do tipo que surge no contexto do EbFVM, pode ser empregada a propriedade de aditividade das integrais

¹ É usual na literatura efetuar o processo inverso ao realizado aqui, iniciando a dedução da equação diferencial de conservação de massa a partir da forma integral, a qual possui uma interpretação física mais intuitiva.

para expressar a integral de superfície da equação (4.2) como uma soma de integrais definidas sobre as faces que formam o contorno do volume de controle. Ter-se-ia assim, para um volume de controle como o da figura 3.1,

$$\int_{\Delta V} \frac{\partial (\phi \rho_F s_F)}{\partial t} \, dV + \sum_{\Delta S_i} \rho_F \vec{\mathbf{v}}_F \cdot \mathbf{d}\vec{\mathbf{S}} = 0 \tag{4.3}$$

Tanto a integral de volume quanto as integrais de superfície podem ser aproximadas empregando a regra do ponto médio [18]. Conforme já mencionado, uma integral de superfície aproximada pela regra do ponto médio é expressa como o produto do valor do integrando no ponto central do domínio de integração pela área de tal domínio. Uma aproximação semelhante pode ser utilizada para integrais de volume, substituindo a área pelo volume do domínio de integração. De acordo com o esquema de construção de volumes de controle descrito no capítulo 3, um nó p da malha estará sempre localizado aproximadamente no centro de cada volume de controle. Além disso, no centro de cada face no contorno do volume é considerada a existência de um ponto de integração i. Conseqüentemente, a equação (4.3) pode ser aproximada pela equação

$$\left[\frac{\partial(\rho_F s_F)}{\partial t}\right]_p \phi_p \Delta V_p + \sum_i (\rho_F \vec{\mathbf{v}}_F)_i \cdot \Delta \vec{\mathbf{S}}_i = 0; \qquad F = I, D \qquad (4.4)$$

Nesta equação o somatório estende-se a todos os pontos de integração localizados no contorno do volume de controle em questão. De acordo com a notação adotada neste trabalho, os subíndices fora dos parêntesis indicam a localização onde são avaliadas todas as variáveis que se encontram dentro deles. Convencionalmente, o volume de controle contendo o nó *p* será denotado como ΔV_p , enquanto que o vetor área da face contendo o ponto de integração *i* será denotado como $\Delta \vec{S}_i$.

A equação (4.4) é a forma parcialmente discretizada da equação de conservação de massa para uma fase fluida. Resta ainda considerar a discretização no tempo, a qual merece uma análise separada por estar estreitamente relacionada ao algoritmo de solução que deve ser empregado para resolver o conjunto de equações resultante do processo de discretização.

4.3 Discretização no tempo

Na descrição matemática de um escoamento, a principal diferença entre as coordenadas espaciais e o tempo é a direção de influência. Enquanto que uma perturbação em um dado ponto pode se propagar em qualquer direção espacial e, portanto, influir em toda sua vizinhança, uma perturbação em um dado tempo apenas pode influir na configuração posterior do escoamento. Dada esta característica dos processos físicos, essencialmente todos os métodos numéricos destinados a resolver equações diferenciais que descrevem processos transientes empregam uma estratégia de solução baseada em procedimentos de marcha. Nestes procedimentos a solução é avançada considerando sucessivos níveis de tempo discretos, obtendo-se como resultado uma aproximação numérica da configuração instantânea do escoamento para cada um desses níveis de tempo.

Para a discretização no tempo da equação (4.4) será considerada uma partição finita do intervalo de interesse $t_0 < t_1 < t_2 < ... < t_{N_t-1} < t_{N_t}$, na qual cada nível de tempo discreto t_n pode ser interpretado como um nó em uma malha unidimensional na linha do tempo. Antes de examinar possíveis aproximações nesta malha temporal, é conveniente empregar a identidade

$$\frac{\partial(\rho_F s_F)}{\partial t} \equiv \rho_F \frac{\partial s_F}{\partial t} + s_F \frac{\partial \rho_F}{\partial t}$$
(4.5)

além da definição de compressibilidade² para reescrever a equação (4.4) como

$$\left(\rho_F \frac{\partial s_F}{\partial t} + \rho_F c_F s_F \frac{\partial P_F}{\partial t}\right)_p \phi_p \Delta V_p + \sum_i (\rho_F \vec{\mathbf{v}}_F)_i \cdot \Delta \vec{\mathbf{S}}_i = 0$$
(4.6)

Cada termo da equação anterior precisa ser aproximado em um nível de tempo genérico. Para tanto, será empregada a notação simplificada $\Theta(t_n) \equiv (\Theta)^n$ a fim de associar Θ , uma variável qualquer do modelo, ao nível de tempo definido por t_n . Seguindo a filosofia do método de diferenças finitas [31], derivadas de primeira ordem como as que figuram na equação (4.6) podem ser aproximadas por meio de uma expressão de diferenças para trás,

² Esta propriedade foi definida na equação (2.14).

$$\left(\frac{\partial \Theta}{\partial t}\right)^n \approx \frac{(\Theta)^n - (\Theta)^{n-1}}{\Delta t^n} \tag{4.7}$$

ou por meio de uma expressão de diferenças para a frente

$$\left(\frac{\partial \Theta}{\partial t}\right)^{n} \approx \frac{(\Theta)^{n+1} - (\Theta)^{n}}{\Delta t^{n+1}}$$
(4.8)

onde o denominado passo de tempo é aqui definido como

$$\Delta t^n = t_n - t_{n-1} \tag{4.9}$$

Empregando a primeira opção para aproximar as duas derivadas na equação (4.6), obtém-se a equação discretizada

$$\left[\left(\rho_{F}\right)_{p}^{n}\frac{\left(s_{F}\right)_{p}^{n}-\left(s_{F}\right)_{p}^{n-1}}{\Delta t^{n}}+\left(\rho_{F}c_{F}s_{F}\right)_{p}^{n}\frac{\left(P_{F}\right)_{p}^{n}-\left(P_{F}\right)_{p}^{n-1}}{\Delta t^{n}}\right]\phi_{p}\Delta V_{p}+\sum_{i}\left(\rho_{F}\vec{\mathbf{v}}_{F}\right)_{i}^{n}\cdot\Delta\vec{\mathbf{S}}_{i}=0$$
(4.10)

Nesta equação são incógnitas todas as variáveis correspondentes ao tempo t_n , enquanto que os valores das variáveis correspondentes ao tempo t_{n-1} são conhecidas. O enfoque empregado para obter a equação (4.10) dá origem ao denominado método totalmente implícito [32]. A principal característica deste método é que todas as equações resultantes da discretização das equações diferenciais de conservação de massa para as duas fases devem ser resolvidas simultaneamente, formando um sistema de equações único junto com as equações de restrição e as equações constitutivas. Isto porque cada equação possui simultaneamente como incógnitas a pressão, a saturação, a densidade e a velocidade. E fácil perceber que a equação (4.10) é altamente não-linear devido a presença de produtos de incógnitas e relações inerentemente não-lineares entre algumas variáveis. O produto da mobilidade pelo gradiente de pressão que é uma das principais não-linearidades do modelo, por ser responsável pelo acoplamento entre os campos de saturação e pressão, irá se manifestar quando a expressão da lei de Darcy for substituída na equação (4.10) a fim de eliminar a variável velocidade. Para lidar com tais não-linearidades, em cada nível de tempo o sistema de equações para todos os volumes de controle deve ser resolvido em forma iterativa, usualmente empregando o método de Newton ou uma de suas variantes.

Um esquema de solução alternativo pode ser obtido desacoplando parcialmente os campos de pressão e saturação, mediante o emprego de aproximações numéricas envolvendo diferentes níveis de tempo para as derivadas na equação (4.6). Assim, uma expressão em diferenças para a frente pode ser empregada para a derivada envolvendo a saturação, obtendo-se a equação

$$\left[\left(\rho_{F}\right)_{p}^{n}\frac{\left(s_{F}\right)_{p}^{n+1}-\left(s_{F}\right)_{p}^{n}}{\Delta t^{n+1}}+\left(\rho_{F}c_{F}s_{F}\right)_{p}^{n}\frac{\left(P_{F}\right)_{p}^{n}-\left(P_{F}\right)_{p}^{n-1}}{\Delta t^{n}}\right]\phi_{p}\Delta V_{p}+\sum_{i}\left(\rho_{F}\vec{\mathbf{v}}_{F}\right)_{i}^{n}\cdot\Delta\vec{\mathbf{S}}_{i}=0$$
(4.11)

Nesta nova forma discretizada, a saturação no nível de tempo t_{n+1} e a pressão e a densidade no nível t_n são as incógnitas. Uma das principais vantagens deste enfoque é que a maioria das não-linearidades oriundas de produtos de incógnitas envolvendo a saturação são eliminadas, pois os valores do campo de saturação em t_n na equação (4.11) são já conhecidos. Além do mais, mediante a combinação das equações discretizadas para ambas as fases e o uso da equação de restrição volumétrica, as duas saturações em t_{n+1} podem ser eliminadas como incógnitas, obtendo-se uma equação que pode ser considerada a versão discreta da equação da pressão apresentada na seção 2.4. O sistema formado pelas equações da pressão para todos os volumes de controle pode ser então resolvido para determinar o campo de pressão de uma das fases no nível de tempo t_n . Note-se que após conhecido esse campo de pressão, a única incógnita que restará na equação (4.11)³ será o valor nodal da saturação em t_{n+1} , portanto, o novo campo de saturação poderá ser obtido resolvendo esta equação para cada volume de controle. Ou seja, não será necessária a resolução de um sistema linear para determinar o campo associado à saturação, já que esta variável estaria sendo aproximada em forma explícita. Este procedimento de solução corresponde ao denominado método IMPES⁴ [32], cujo nome origina-se precisamente na sua característica distintiva, isto é, a de resolver seqüencialmente a pressão em forma implícita e a saturação em forma explícita.

³ Expressa para qualquer uma das fases, porque após serem conhecidos os valores discretos da pressão de uma das fases em um dado nível de tempo, os valores da velocidade das duas fases podem ser determinados facilmente empregando a lei de Darcy generalizada.

⁴ Acrônimo de Implicit Pressure, Explicit Saturation (pressão implícita, saturação explícita)

O método totalmente implícito é incondicionalmente estável, o qual significa que podem ser empregados passos de tempo de qualquer magnitude sem comprometer a estabilidade do método de solução. Já a estabilidade do método IMPES está condicionada a uma restrição no passo de tempo, a qual se origina na aproximação explícita da saturação. Contudo, o fato do método IMPES ser um procedimento de solução segregado, no qual apenas é necessário resolver um sistema linear de equações em cada nível de tempo, reduz drasticamente o esforço computacional necessário e facilita significativamente a implementação. No método totalmente implícito deve ser resolvido um sistema de equações não apenas maior, mas também envolvendo muitas não-linearidades, o qual implica na necessidade de utilizar um esquema iterativo de solução em cada nível de tempo.

Na presente formulação numérica decidiu-se empregar um método de solução seqüencial que apresenta as características básicas do método IMPES. Para empregar este método serão obtidas versões discretizadas das equações da pressão e da saturação apresentadas na seção 2.4, as quais serão resolvidas seqüencialmente, de modo similar ao método IMPES. Conforme foi explicado no capítulo 2, quando as equações diferenciais do modelo de deslocamento bifásico são expressas na forma das equações da pressão e da saturação, as variáveis não apenas são parcialmente desacopladas, mas também cada equação apresenta propriedades matemáticas completamente diferentes. Uma vez que estas propriedades matemáticas são apenas um reflexo do comportamento físico das grandezas envolvidas, funções de interpolação que reproduzam tal comportamento podem ser empregadas em cada equação. Como será mostrado em capítulos posteriores este enfoque permitirá uma redução substancial do denominado efeito de orientação de malha, uma das maiores deficiências dos modelos numéricos para deslocamento em meios porosos. É principalmente por essa razão que foi considerado um algoritmo de solução seqüencial, no entanto, é importante notar que o EbFVM também pode ser empregado junto com o método totalmente implícito, ainda que sem a suficiente flexibilidade para implementar as funções de interpolação que serão empregadas neste trabalho.

Antes de continuar com a descrição do processo de obtenção das formas discretizadas das equações da pressão e da saturação, é necessário realizar algumas considerações em relação à densidade. Embora a utilização de um nível de tempo diferente para a saturação tenha suprimido a maioria das não-linearidades envolvendo esta variável, ainda subsistem na equação (4.11) as não-linearidades relacionadas à densidade. Esta equação dará origem à versão discreta da equação da pressão, a qual procura-se que seja linear para viabilizar a resolução do sistema formado pelas equações correspondentes a todos os volumes de controle. Portanto, é necessário procurar uma forma de linearizá-la antes de efetuar qualquer manipulação algébrica com ela. A alternativa mais simples para linearizar a equação (4.11) é considerar apenas valores de densidade e compressibilidade correspondentes ao nível de tempo anterior, ou seja, a t_{n-1} . A equação discretizada de conservação de massa resulta então em

$$\left[(\rho_F)_p^{n-1} \frac{(s_F)_p^{n+1} - (s_F)_p^n}{\Delta t^{n+1}} + (\rho_F c_F)_p^{n-1} (s_F)_p^n \frac{(P_F)_p^n - (P_F)_p^{n-1}}{\Delta t^n} \right] \phi_p \Delta V_p$$

$$+ \sum_i (\rho_F)_i^{n-1} (\vec{\mathbf{v}}_F)_i^n \cdot \Delta \vec{\mathbf{S}}_i = 0$$

$$(4.12)$$

A pesar de que tal linearização introduz um tipo de aproximação explícita para a densidade na equação de conservação de massa, pode-se presumir que a precisão geral da discretização não é afetada por esta aproximação. Isto porque o maior fator de influência da densidade na equação de conservação de massa, ou seja o termo que inclui a derivada $\partial \rho_F / \partial t$, está sendo aproximado de forma semi-implícita na equação (4.12)⁵. Conforme foi mencionado anteriormente, esta equação será a base para a obtenção da forma discretizada da equação da pressão, e aproximações numéricas idênticas às consideradas para a obtenção da equação (4.12) serão empregadas posteriormente para obter uma versão discreta da forma de Buckley-Leverett da equação da saturação.

⁵ Lembre-se que a derivada da densidade foi expressa na forma $\rho_F c_F (\partial P_F / \partial t)$ e esta expressão está sendo aproximada uma parte em forma implícita, a derivada da pressão $\partial P_F / \partial t$, e outra em forma explícita, o produto $\rho_F c_F$. Este tipo de aproximação é denominado na literatura como semi-implícito.

4.4 Equação discretizada da pressão

Para o emprego de um algoritmo de solução seqüencial é necessária a existência de uma equação exclusiva para a pressão de uma das fases, por meio da qual será possível avançar esta variável no tempo. Uma vez que usualmente no início de um processo de deslocamento apenas a fase residente no meio poroso, aqui denominada fase deslocada, é continua em todo o domínio de solução, a pressão associada a esta fase será considerada como incógnita da equação da pressão⁶. Nesta seção será descrito em detalhes o procedimento de obtenção da forma discretizada desta equação.

Mediante manipulação algébrica é possível isolar a saturação $(s_F)_p^{n+1}$ na equação (4.12) e depois, lembrando que tal equação é valida tanto para a fase injetada quanto para a fase deslocada, podem ser somadas as equações expressas especificamente para tais fases. Na equação resultante da adição, por virtude da equação (2.7) de restrição volumétrica, podem ser simplificadas as somas das saturações, obtendo-se então a equação

$$\begin{bmatrix} (c_l)_p^{n-1} (s_l)_p^n \frac{(P_l)_p^n - (P_l)_p^{n-1}}{\Delta t^n} + (c_D)_p^{n-1} (s_D)_p^n \frac{(P_D)_p^n - (P_D)_p^{n-1}}{\Delta t^n} \end{bmatrix} \phi_p \Delta V_p \\ + \frac{\sum_i (\rho_l)_i^{n-1} (\vec{\mathbf{v}}_l)_i^n \cdot \Delta \vec{\mathbf{S}}_i}{(\rho_l)_p^{n-1}} + \frac{\sum_i (\rho_D)_i^{n-1} (\vec{\mathbf{v}}_D)_i^n \cdot \Delta \vec{\mathbf{S}}_i}{(\rho_D)_p^{n-1}} = 0$$

$$(4.13)$$

Esta equação representa o balanço entre a variação de volume ocupado pelas fases e o fluxo volumétrico líquido das duas fases, em um volume de controle durante um intervalo de tempo Δt^n . O passo seguinte deve ser a eliminação de qualquer variável que não seja a pressão da fase deslocada. Em primeiro lugar, substituir-se-ão na equação (4.13) as expressões provenientes da lei de Darcy para as velocidades das fases. Nessas expressões, a densidade será aproximada também pelo valor do nível de tempo anterior, ou seja,

⁶ Já que a pressão da fase deslocada estará presente na maioria das equações posteriores, para facilitar a explicação dos procedimentos considerados, daqui em diante essa variável será referida simplesmente como pressão. Apenas quando o significado possa tornar-se ambíguo se mencionará à fase associada.

$$(\vec{\mathbf{v}}_F)_i^n \approx -(\lambda_F)_i^n \left[(\vec{\nabla} P_F)_i^n - (\boldsymbol{\rho}_F)_i^{n-1} \vec{\mathbf{g}} \right]; \qquad F = I, D$$
(4.14)

Por outro lado, a pressão na fase injetada está relacionada com a pressão na fase deslocada mediante a equação que define a pressão capilar. Assim, pode-se escrever a partir da equação (2.8),

$$(P_I)_p^n = (P_D)_p^n - (P_C)_p^n$$
(4.15)

A pressão capilar no nível de tempo t_n pode ser facilmente calculada já que, de acordo com o enfoque considerado, o campo de saturação para esse nível de tempo é conhecido. Substituindo as equações (4.14) e (4.15) na equação (4.13) e rearranjando convenientemente a equação resultante, obtém-se

$$\begin{bmatrix} (c_l)_p^{n-1}(s_l)_p^n + (c_D)_p^{n-1}(s_D)_p^n \end{bmatrix} \frac{(P_D)_p^n - (P_D)_p^{n-1}}{\Delta t^n} \phi_p \Delta V_p - \sum_i \begin{bmatrix} \frac{(\rho_l)_i^{n-1}(\lambda_l)_i^n}{(\rho_l)_p^{n-1}} + \frac{(\rho_D)_i^{n-1}(\lambda_D)_i^n}{(\rho_D)_p^{n-1}} \end{bmatrix} (\vec{\nabla} P_D)_i^n \cdot \Delta \vec{\mathbf{S}}_i = (c_l)_p^{n-1}(s_l)_p^n \frac{(P_C)_p^n - (P_C)_p^{n-1}}{\Delta t^n} \phi_p \Delta V_p$$
(4.16)
$$- \sum_i \begin{bmatrix} \frac{(\rho_l)_i^{n-1}(\lambda_l)_i^n}{(\rho_l)_p^{n-1}} \end{bmatrix} (\vec{\nabla} P_C)_i^n \cdot \Delta \vec{\mathbf{S}}_i - \sum_i \begin{bmatrix} \frac{(\rho_l^2)_i^{n-1}(\lambda_l)_i^n}{(\rho_l)_p^{n-1}} + \frac{(\rho_D^2)_i^{n-1}(\lambda_D)_i^n}{(\rho_D)_p^{n-1}} \end{bmatrix} \vec{\mathbf{g}} \cdot \Delta \vec{\mathbf{S}}_i$$

Esta equação é o equivalente discreto para um volume de controle da equação diferencial (2.12), podendo-se estabelecer uma correspondência termo a termo entre ambas as equações. Empregando os coeficientes definidos na tabela 4.1, a equação (4.16) pode ser rescrita na forma mais compacta⁷

$$\alpha_p^P(P_D)_p^n + \sum_i \beta_{p,i}^P(\vec{\nabla}P_D)_i^n \cdot \Delta \vec{\mathbf{S}}_i = \gamma_p^P + \sum_i \delta_{p,i}^P(\vec{\nabla}P_C)_i^n \cdot \Delta \vec{\mathbf{S}}_i + \sum_i \kappa_{p,i}^P \vec{\mathbf{g}} \cdot \Delta \vec{\mathbf{S}}_i$$
(4.17)

Se bem a única variável-incógnita nesta equação é a pressão no nível de tempo t_n , tal equação ainda não pode ser utilizada para obter uma aproximação do campo de pressão nesse nível de tempo, já que inclui grandezas referidas aos pontos de integração localizados sobre o contorno do volume de controle. Para que a partir da

⁷ O superíndice carregado pelos coeficientes significa neste caso que eles estão referidos à equação da pressão. Usa-se esta notação para distingui-los dos coeficientes da equação da saturação, os quais serão obtidos posteriormente.

equação discretizada da pressão seja possível formar um sistema de equações fechado, ou seja, com o mesmo número de incógnitas que de equações, ela deve conter apenas valores referidos aos nós da malha⁸. Logo, para aproximar valores referidos aos pontos de integração deverão ser empregados esquemas de interpolação que os relacionem com os valores nodais.

$\alpha_p^P \equiv \left[\left(C_l \right)_p^{n-1} \left(S_l \right)_p^n + \left(C_D \right)_p^{n-1} \left(S_D \right)_p^n \right] \frac{\phi_p \Delta V_p}{\Delta t^n}$
$\beta_{p,i}^{p} \equiv -\left[\frac{(\rho_{l})_{i}^{n-1}(\lambda_{l})_{i}^{n}}{(\rho_{l})_{p}^{n-1}} + \frac{(\rho_{D})_{i}^{n-1}(\lambda_{D})_{i}^{n}}{(\rho_{D})_{p}^{n-1}}\right]$
$\gamma_{p}^{P} \equiv (c_{I})_{p}^{n-1}(s_{I})_{p}^{n} \left[(P_{C})_{p}^{n} - (P_{C})_{p}^{n-1} \right] \frac{\phi_{p} \Delta V_{p}}{\Delta t^{n}} + \alpha_{p}^{P} (P_{D})_{p}^{n-1}$
$\delta_{p,i}^{p} \equiv -\left[\frac{(\rho_{l})_{i}^{n-1}(\lambda_{l})_{i}^{n}}{(\rho_{l})_{p}^{n-1}}\right]$
$\kappa_{p,i}^{P} \equiv - \left[rac{(arPhi_{l}^{2})_{i}^{n-1} (oldsymbol{\lambda}_{l})_{i}^{n}}{(arPhi_{l})_{p}^{n-1}} + rac{(arPhi_{D}^{2})_{i}^{n-1} (oldsymbol{\lambda}_{D})_{i}^{n}}{(arPhi_{D})_{p}^{n-1}} ight]$

Tabela 4.1 Coeficientes da equação discretizada da pressão.

No capítulo 2, a equação diferencial da pressão foi caracterizada como uma equação parabólica, a qual se reduz a uma equação elíptica para o caso em que ambas as fases fluidas são incompressíveis. Em todo caso, como são os termos diferenciais de segunda ordem em relação às coordenadas espaciais os que conferem o caráter elíptico à equação da pressão no caso incompressível, é possível afirmar que a pressão se comportará em geral como uma variável elíptica em relação ao espaço. A aproximação da variação da pressão no interior de um elemento mediante uma função bilinear é concordante com o caráter elíptico desta variável [35], já que desta forma o valor em um dado ponto estará influenciado simultaneamente pelos quatro

⁸ O método de construção dos volumes de controle empregado garante a existência de um volume de controle associado a cada nó da malha de elementos. Logo, como existirá uma equação discretizada para cada volume de controle, se cada equação conter só incógnitas referidas aos nós no final obter-seá um sistema de equações com igual número de equações e incógnitas.

valores nodais vizinhos⁹. Conseqüentemente, para aproximar o gradiente de pressão nos pontos de integração poder-se-á utilizar a expressão (3.14) deduzida na seção 3.5 para uma aproximação bilinear. Considerando além desta aproximação a expressão (3.18) deduzida para o vetor área de face, o produto escalar $(\vec{\nabla}P_D)_i^n \cdot \Delta \vec{\mathbf{S}}_i$ pode ser representado como

$$(\vec{\nabla}P_D)_i^n \cdot \Delta \vec{\mathbf{S}}_i \approx [\Delta\sigma]_i^T [J]_i [R]^T [J]_i^{-1} [D]_i [P_D]_e^n$$
(4.18)

onde, conforme a notação estabelecida na seção 3.3, $[P_D]_e^n$ é o vetor coluna contendo os quatro valores nodais da pressão no nível de tempo t_n , no elemento onde o ponto de integração em questão encontra-se localizado. Uma vez que todos os fatores no lado direito da equação (4.18) exceto $[P_D]_e^n$ dependem exclusivamente da geometria do elemento e da posição do ponto de integração, é conveniente definir o vetor linha

$$[B]_i \equiv [\Delta\sigma]_i^T[J]_i [R]^T[J]_i^{-1}[D]_i$$

$$(4.19)$$

com o qual a aproximação de $(\vec{\nabla}P_D)_i^n \cdot \Delta \vec{\mathbf{S}}_i$ pode ser representada na forma compacta

$$(\vec{\nabla}P_D)_i^n \cdot \Delta \vec{\mathbf{S}}_i \approx [B]_i [P_D]_e^n \tag{4.20}$$

Uma expressão equivalente será usada para aproximar o gradiente da pressão capilar na equação (4.17). Também nessa equação, o fator $\vec{\mathbf{g}} \cdot \Delta \vec{\mathbf{S}}_i$, presente no último termo no lado direito, será representado pelo parâmetro escalar

$$G_i \equiv \vec{\mathbf{g}} \cdot \Delta \vec{\mathbf{S}}_i = [g_x \ g_y][R][J]_i^T [\Delta \sigma]_i$$
(4.21)

onde g_x e g_y são as componentes cartesianas do vetor gravidade. Do ponto de vista da implementação computacional é muito vantajosa a definição de $[B]_i$ e G_i , pois estes parâmetros dependem apenas da geometria do elemento e de grandezas que não mudam ao longo do tempo, portanto, eles podem ser calculados apenas uma vez, no início do processo de simulação transiente.

⁹ Isso pode ser comprovado facilmente examinando a equação (3.5).

A aproximação dada pela equação (4.20) e o parâmetro definido na equação (4.21) poderiam ser substituídos na equação (4.17) para obter a forma final da equação da pressão, a qual por sua vez daria origem ao sistema linear de equações para essa variável. Entretanto, a obtenção de uma representação genérica mediante tal procedimento é inviável, tanto para fins ilustrativos quanto para a implementação computacional. Isto porque a aproximação do gradiente de pressão em um ponto de integração envolve informação geométrica do elemento que o contém e a quantidade de elementos que contribuem a um dado volume de controle é em geral variável em uma malha irregular.

Alternativamente, será utilizada uma estratégia similar à empregada no método dos elementos finitos, na qual o processo de construção do sistema linear reunindo as equações correspondentes a todos os volumes de controle compreende duas etapas. Na primeira, todos os cálculos requeridos para a construção das equações são realizados elemento por elemento, armazenando então as contribuições de cada elemento em uma matriz e um vetor coluna. Na segunda etapa é realizada a montagem de uma matriz e um vetor coluna globais a partir das matrizes e vetores coluna de todos elementos, empregando para tal fim a informação topológica da malha. No final, a matriz e o vetor globais obtidos definirão o sistema linear cuja solução fornecerá o campo de valores discretos da incógnita, neste caso a pressão no nível de tempo t_n . A matriz e o vetor coluna que reúnem todas as contribuições de um elemento nas equações discretizadas dos volumes de controle serão denominadas simplesmente como *matriz do elemento* e *vetor do elemento*, respectivamente. A obtenção destas grandezas para a equação da pressão a partir das equações (4.17), (4.20) e (4.21) será esboçada a seguir.

Considere-se por exemplo o sub-volume representado na figura 4.1, o qual formará parte do volume de controle construído em torno ao nó identificado com o número 1, de acordo com a numeração local do elemento. Conforme se pode comprovar facilmente, a equação discretizada correspondente a tal volume de controle terá contribuições associadas aos pontos de integração 1 e 2, os quais se encontram localizados sobre as faces do sub-volume considerado. Empregando a aproximação dada pela equação (4.20), as contribuições daqueles pontos de integração no somatório do lado esquerdo da equação (4.18) podem ser escritas da seguinte forma

$$\left[\sum_{i} \beta_{p,i}^{P} (\vec{\nabla} P_{D})_{i}^{n} \cdot \Delta \vec{\mathbf{S}}_{i}\right]_{e}^{p=1} = \beta_{1,1}^{P} [B]_{1} [P_{D}]_{e}^{n} - \beta_{1,2}^{P} [B]_{2} [P_{D}]_{e}^{n}$$

$$= \left(\beta_{1,1}^{P} [B]_{1} - \beta_{1,2}^{P} [B]_{2}\right) [P_{D}]_{e}^{n}$$
(4.22)

O sinal negativo do termo correspondente ao ponto de integração 2 obedece ao fato que o vetor área de face com o qual é calculado $[B]_2$ foi definido convencionalmente¹⁰ com a orientação mostrada na figura 4.1, apontando para dentro do subvolume de controle considerado. Uma vez que na equação (4.17) todos os termos envolvendo grandezas avaliadas nos pontos de integração provêm da aproximação de integrais de superfície onde o vetor área é definido apontando para fora do volume de controle, o sinal de $[B]_2$ deve ser invertido para torná-lo concordante com aquela definição. Esta situação se repete para os outros três sub-volumes no elemento. De fato, pode-se mostrar que para tais sub-volumes expressões semelhantes à equação (4.22) podem ser obtidas apenas permutando ciclicamente os



Figura 4.1 Sub-volume de controle, mostrando a orientação convencional dos vetores área de face.

¹⁰ Veja-se a seção 3.6 para maiores detalhes.

subíndices dos parâmetros nessa equação. Todas essas expressões matemáticas podem ser reunidas na seguinte expressão matricial

$$\left[\sum_{i} \beta_{p,i}^{P} (\vec{\nabla} P_{D})_{i}^{n} \cdot \Delta \vec{\mathbf{S}}_{i}\right]_{e} = \begin{pmatrix} \beta_{1,1}^{P} [B]_{1} - \beta_{1,2}^{P} [B]_{2} \\ \beta_{2,2}^{P} [B]_{2} - \beta_{2,3}^{P} [B]_{3} \\ \beta_{3,3}^{P} [B]_{3} - \beta_{3,4}^{P} [B]_{4} \\ \beta_{4,4}^{P} [B]_{4} - \beta_{4,1}^{P} [B]_{1} \end{bmatrix}_{e} \begin{bmatrix} P_{D1} \\ P_{D2} \\ P_{D3} \\ P_{D4} \end{bmatrix}_{e} \equiv [A^{P}]_{e} [P_{D}]_{e}^{n}$$
(4.23)

Esta expressão define a matriz do elemento $[A^p]_e$ para a equação da pressão, a qual está ordenada de acordo com o esquema de numeração local para nós e pontos de integração, definido no capítulo 3. Uma vez que $[B]_i$ é um vetor linha de quatro componentes, a matriz $[A^p]_e$ será uma matriz 4×4 , onde cada linha estará relacionada com a equação discretizada de um dos quatro volumes de controle associados ao elemento. Posteriormente, durante o processo de montagem do sistema linear de equações, as células das matrizes de todos elementos que contribuem a um dado volume de controle serão somados para completar o termo $\sum \beta_{p,i}^p (\vec{\nabla}P_D)_i^n \cdot \Delta \vec{\mathbf{S}}_i$ da equação (4.17).

Um procedimento semelhante pode ser empregado para obter o equivalente matricial dos somatórios presentes no lado direito da equação (4.17). As contribuições de um dado elemento sobre tais somatórios pode ser escrita na forma

$$\begin{bmatrix} \sum_{i} \delta_{p,i}^{P} (\vec{\nabla} P_{C})_{i}^{n} \cdot \Delta \vec{\mathbf{S}}_{i} + \sum_{i} \kappa_{p,i}^{P} \vec{\mathbf{g}} \cdot \Delta \vec{\mathbf{S}}_{i} \end{bmatrix}_{e} = \\ \begin{bmatrix} \delta_{1,1}^{P} [B]_{1} - \delta_{1,2}^{P} [B]_{2} \\ \delta_{2,2}^{P} [B]_{2} - \delta_{2,3}^{P} [B]_{3} \\ \delta_{3,3}^{P} [B]_{3} - \delta_{3,4}^{P} [B]_{4} \\ \delta_{4,4}^{P} [B]_{4} - \delta_{4,1}^{P} [B]_{1} \end{bmatrix}_{e} \begin{bmatrix} P_{C1} \\ P_{C2} \\ P_{C3} \\ P_{C4} \end{bmatrix}_{e} + \begin{bmatrix} \kappa_{1,1}^{P} G_{1} - \kappa_{1,2}^{P} G_{2} \\ \kappa_{2,2}^{P} G_{2} - \kappa_{2,3}^{P} G_{3} \\ \kappa_{3,3}^{P} G_{3} - \kappa_{3,4}^{P} G_{4} \\ \kappa_{4,4}^{P} G_{4} - \kappa_{4,1}^{P} G_{1} \end{bmatrix}_{e} \equiv [F^{P}]_{e}$$

$$(4.24)$$

Esta equação define o vetor do elemento $[F^p]_e$, o qual reúne todas as contribuições que independem da incógnita da equação da equação da pressão, relacionadas aos pontos de integração. Trata-se de um vetor coluna de quatro componentes, cada uma das quais contribuirá no termo independente da equação discretizada de um dos quatro volumes de controle associados ao elemento em questão. Como já mencionado anteriormente, a estrutura da matriz $[A^p]_e$ e do vetor $[F^p]_e$ resulta vantajosa do ponto de vista da implementação computacional da formulação, já que cada contribuição associada aos pontos de integração é expressa como o produto de apenas dois fatores, um dependente de propriedades que mudam ao longo do tempo e outro dependente apenas da geometria dos elementos e de outras grandezas invariáveis. Enquanto que o valor do primeiro precisa ser atualizado em cada nível de tempo, o valor do segundo pode ser calculado apenas uma vez e armazenado na memória para sua utilização durante o processo completo de solução das equações.

Note-se que na definição das matrizes e vetores por elemento estão incluídas apenas as contribuições à equação (4.17) relacionadas com os pontos de integração, cuja identificação está sempre referida aos elementos aos quais pertencem. Isso não acontece com os termos restantes nessa equação, os quais estão associados aos nós. Conforme discutido na seção 3.3, os nós possuem um sistema de identificação independente dos elementos, e portanto os coeficientes α_p^p e γ_p^p podem ser calculados em forma separada. Conseqüentemente, serão necessárias duas seqüências de cálculos para reunir todas as contribuições necessárias para montar um sistema de equações a partir da equação (4.17), uma percorrendo todos os elementos da malha, para calcular as matrizes $[A^p]_e$ e os vetores $[F^p]_e$, e outra percorrendo todos os nós da malha, para calcular os coeficientes α_p^p e γ_p^p . O procedimento de montagem do sistema linear de equações a partir destas contribuições será descrito em detalhes posteriormente na seção 4.6.

Se N_p é o número total de nós da malha, após a montagem, o sistema de equações resultante reunirá as N_p equações da pressão correspondentes aos também N_p volumes de controle na malha, uma vez que por definição existe um volume de controle por cada nó da malha. Contudo, ainda será necessário introduzir algumas modificações nas equações correspondentes aos volumes de controle adjacentes às fronteiras, a fim de atender as condições de contorno do problema de deslocamento sendo simulado. Isto será discutido em detalhes no capítulo 5.

Após a introdução de tais condições de contorno, o sistema de equações da pressão estará completo e poderá ser escrito como

$$[A^{P}][P_{D}]^{n} = [F^{P}]$$
(4.25)

A matriz $[A^p]$ é a matriz global de coeficientes, $[F^p]$ é o vetor global de termos independentes e $[P_D]^n$ é o vetor de valores nodais da pressão, todos eles organizados de acordo com o esquema de numeração global dos nós na malha. A solução deste sistema linear fornecerá a aproximação discreta do campo de pressão no nível de tempo t_n . Este campo de pressão gerará campos de velocidade para as duas fases que satisfarão simultaneamente a conservação de massa de ambas as fases, para uma dada distribuição de fluidos no domínio de solução nesse nível de tempo. A fim de completar o algoritmo seqüencial de solução, resta agora delinear um procedimento para o avanço no tempo do campo de saturação, o qual definirá a distribuição instantânea de fluidos no próximo nível de tempo. Este será o tópico abordado na seção seguinte.

4.5 Equação discretizada da saturação

Após ser resolvido o sistema linear de equações da pressão, os valores nos pontos de integração das velocidades das fases poderiam ser calculados a partir da lei de Darcy, e depois com eles a equação (4.12) poderia ser resolvida em cada volume de controle, para obter os valores nodais da saturação no nível t_{n+1} . Dado que na discretização das equações de conservação de massa foi considerada uma aproximação explícita para todos os termos relacionados à saturação, tornar-se-ia desnecessária a solução de um sistema linear de equações para avançar no tempo essa variável. O procedimento de solução empregado corresponderia então ao método IMPES convencional.

Entretanto, na formulação numérica apresentada neste trabalho será empregado um enfoque levemente diferente, baseado nas idéias de Spillette et al. [40]. A principal diferença deste enforque encontra-se no uso da forma de Buckley-Leverett da equação da saturação. Conforme mencionado no capítulo 2, esta equação é a própria equação de conservação de massa da fase injetada, na qual o fluxo é expresso não em função velocidade individual da fase, mas em função da velocidade total¹¹. De forma condensada, a equação da saturação na forma de Buckley-Leverett pode ser reescrita como

$$\phi \frac{\partial (\rho_I s_I)}{\partial t} + \vec{\nabla} \cdot \rho_I F_I \vec{\mathbf{v}}_E + \vec{\nabla} \cdot \rho_I \Psi \vec{\nabla} P_C = 0 \qquad (4.26)$$

onde a velocidade \vec{v}_E , a qual será denominada velocidade efetiva de advecção, é a composição da velocidade total e a velocidade secundária responsável pela segregação gravitacional das fases, ou seja

$$\vec{\mathbf{v}}_{E} \equiv \vec{\mathbf{v}}_{T} + \lambda_{D} (\rho_{I} - \rho_{D}) \vec{\mathbf{g}}$$
(4.27)

Uma primeira vantagem do emprego de uma versão discretizada da equação (4.26) em vez da equação (4.12) é que a velocidade total, e conseqüentemente a velocidade efetiva, é menos sensível à variação da distribuição instantânea dos fluidos no domínio de solução. Enquanto que o campo de velocidade da fase injetada pode apresentar uma descontinuidade ou um gradiente muito pronunciado avançando junto com a frente de fluido, o campo de velocidade total apresenta comumente variações espaciais e temporais muito menos expressivas. Esta característica permitirá delinear posteriormente uma variante do algoritmo de solução seqüencial que apresenta um desempenho significativamente superior ao do algoritmo IMPES.

Outra característica vantajosa da equação (4.26) é que na sua discretização podem ser empregadas aproximações semi-implícitas para os parâmetros dependentes da saturação. Esta estratégia tem a finalidade de reduzir a severa restrição no passo de tempo que a aproximação explícita destes parâmetros provoca no método IMPES convencional. Esta estratégia consiste em extrapolar os valores de tais parâmetros para o nível de tempo t_{n+1} a partir de uma expansão em série de Taylor truncada. Para a pressão capilar, por exemplo, ter-se-ia

¹¹ Veja-se a equação (2.18) na seção 2.4.

$$(P_C)^{n+1} \approx (P_C)^n + \left(\frac{dP_C}{ds_I}\right)^n \left[(s_I)^{n+1} - (s_I)^n\right]$$
 (4.28)

Uma expressão semelhante poderia ser usada para aproximar a função fluxo fracionário, contudo, na presente formulação a aproximação semi-implícita será apenas empregada para a pressão capilar. Será mostrado posteriormente que desta forma conseguir-se-á eliminar a restrição de estabilidade causada pela avaliação explícita da pressão capilar e, portanto, restará apenas a restrição relacionada com a avaliação explícita do termo advectivo na equação (4.26). Isto produzirá uma importante economia de tempo de computação já que, quando a influência da pressão capilar sobre um processo de deslocamento for significante, o critério de estabilidade para o método IMPES poderá ser bem mais restritivo que o critério para uma situação equivalente na qual a pressão capilar não for considerada. No apêndice D é mostrado, com base em uma análise de estabilidade do método IMPES para um deslocamento unidimensional, que o passo de tempo estável tende a ser proporcional ao quadrado do espaçamento de malha ($\Delta t \sim \Delta x^2$) quando a pressão capilar é importante no processo, enquanto que tal passo de tempo é apenas proporcional ao espaçamento de malha ($\Delta t \sim \Delta x$) quando não existe pressão capilar. Este comportamento do passo de tempo estável, o qual deteriora extremamente o desempenho do método IMPES quando a pressão capilar se torna importante, tem sido observado de forma ainda mais acentuada em casos bidimensionais. Portanto, a obtenção de um comportamento $\Delta t \sim \Delta x$ para o passo de tempo estável, mesmo com a pressão capilar incluída na formulação, é uma importante motivação para o uso de uma estratégia de avaliação semi-implícita para o termo de pressão capilar.

Repetindo todos os passos que conduziram à equação (4.12), obtém-se a seguinte versão discretizada da equação (4.26)

$$= \frac{(\rho_l)_p^{n-1} \frac{(s_l)_p^{n+1} - (s_l)_p^n}{\Delta t^{n+1}} + (s_l)_p^n \frac{(\rho_l)_p^n - (\rho_l)_p^{n-1}}{\Delta t^n} \right] \phi_p \Delta V_p$$

$$+ \sum_i (\rho_l)_i^{n-1} (F_l)_i^n (\vec{\mathbf{v}}_E)_i^n \cdot \Delta \vec{\mathbf{S}}_i + \sum_i (\rho_l)_i^{n-1} (\Psi)_i^n (\vec{\nabla} P_C)_i^{n+1} \cdot \Delta \vec{\mathbf{S}}_i = 0$$

$$(4.29)$$
Esta equação é consistente com todas as aproximações numéricas consideradas para a obtenção da equação discretizada da pressão, exceto na aproximação do gradiente de pressão capilar. Esta grandeza é considerada agora no nível de tempo t_{n+1} a fim de introduzir o tratamento semi-implícito discutido previamente. Assim, a partir da aproximação definida na equação (4.28), o gradiente de pressão capilar pode ser escrito como

$$\left(\vec{\nabla}P_{C}\right)^{n+1} \approx \left(\frac{dP_{C}}{ds_{I}}\right)^{n} (\vec{\nabla}s_{I})^{n+1}$$
(4.30)

Depois de substituir esta aproximação na equação (4.29) e de rearranjar convenientemente alguns termos, obtém-se a equação

$$(\rho_{I})_{p}^{n-1} \frac{(s_{I})_{p}^{n+1} - (s_{I})_{p}^{n}}{\Delta t^{n+1}} \phi_{p} \Delta V_{p} + \sum_{i} (\rho_{I})_{i}^{n-1} (\Psi)_{i}^{n} \left(\frac{dP_{C}}{ds_{I}}\right)_{i}^{n} (\vec{\nabla}s_{I})_{i}^{n+1} \cdot \Delta \vec{\mathbf{S}}_{i}$$

$$= -(s_{I})_{p}^{n} \frac{(\rho_{I})_{p}^{n} - (\rho_{I})_{p}^{n-1}}{\Delta t^{n}} \phi_{p} \Delta V_{p} - \sum_{i} (\rho_{I})_{i}^{n-1} (F_{I})_{i}^{n} (\vec{\mathbf{v}}_{E})_{i}^{n} \cdot \Delta \vec{\mathbf{S}}_{i}$$

$$(4.31)$$

Os coeficientes definidos na tabela 4.2 permitem escrever esta equação na forma mais compacta

$$\alpha_p^s(s_l)_p^{n+1} + \sum_i \beta_i^s (\vec{\nabla}s_l)_i^{n+1} \cdot \Delta \vec{\mathbf{S}}_i = \gamma_p^s + \sum_i \delta_i^s (\vec{\mathbf{v}}_E)_i^n \cdot \Delta \vec{\mathbf{S}}_i$$
(4.32)

Pode-se observar que a estrutura desta equação é semelhante à que tinha sido obtida anteriormente para a equação da pressão. Portanto, todo o procedimento considerado na seção anterior para a obtenção da representação matricial das contribuições em nível de elemento pode ser repetido para a equação (4.32) sem maiores alterações. Como produto de tal procedimento obtêm-se as expressões seguintes que definem a matriz e o vetor coluna por elemento, relativas à equação da saturação

$$\left[\sum_{i} \beta_{i}^{s} (\vec{\nabla} s_{I})_{i}^{n+1} \cdot \Delta \vec{\mathbf{S}}_{i}\right]_{e} = \begin{bmatrix} \beta_{1}^{s} [B]_{1} - \beta_{2}^{s} [B]_{2} \\ \beta_{2}^{s} [B]_{2} - \beta_{3}^{s} [B]_{3} \\ \beta_{3}^{s} [B]_{3} - \beta_{4}^{s} [B]_{4} \\ \beta_{4}^{s} [B]_{4} - \beta_{1}^{s} [B]_{1} \end{bmatrix}_{e} \begin{bmatrix} s_{I1} \\ s_{I2} \\ s_{I3} \\ s_{I4} \end{bmatrix}_{e}^{n+1} = [A^{s}]_{e} [s_{I}]_{e}^{n+1}$$
(4.33)

$$\left[\sum_{i} \delta_{i}^{s} (\vec{\mathbf{v}}_{E})_{i}^{n} \cdot \Delta \vec{\mathbf{S}}_{i}\right]_{e} = \begin{bmatrix} \delta_{1}^{s} q_{E1} - \delta_{2}^{s} q_{E2} \\ \delta_{2}^{s} q_{E2} - \delta_{3}^{s} q_{E3} \\ \delta_{3}^{s} q_{E3} - \delta_{4}^{s} q_{E4} \\ \delta_{4}^{s} q_{E4} - \delta_{1}^{s} q_{E1} \end{bmatrix}_{e} \equiv [F^{s}]_{e}$$

$$(4.34)$$

Nesta última equação, q_{Ei} representa a vazão $(\vec{v}_E)_i^n \cdot \Delta \vec{S}_i$, a qual será denominada como vazão efetiva através de uma face. Antes de ser construído o sistema de equações para a saturação será necessário avaliar esta vazão nas faces internas de todos os elementos da malha. Uma vez que nesse ponto já estará disponível o campo de pressão em t_n , a expressão seguinte, obtida a partir da definição do vetor velocidade efetiva, poderá ser empregada

$$q_{Ei} = -(\lambda_I + \lambda_D)_i^n [B]_i [P_D]_e^n + (\lambda_I)_i^n [B]_i [P_C]_e^n + (\rho_I)_i^{n-1} (\lambda_I + \lambda_D)_i^n G_i$$
(4.35)

Esta expressão é totalmente consistente com a equação discretizada da pressão, pois foi deduzida empregando aproximações numéricas idênticas às consideradas anteriormente na obtenção da equação da pressão.

 Tabela 4.2
 Coeficientes da equação da saturação.

$\alpha_p^s \equiv (\rho_l)_p^{n-1} \frac{\phi_p \Delta V_p}{\Delta t^{n+1}}$
$\beta_i^s \equiv (\rho_l)_i^{n-1} (\Psi)_i^n \left(\frac{\partial P_C}{\partial s_I}\right)_i^n$
$\gamma_p^s \equiv -\left[\left(\rho_I\right)_p^n - \left(\rho_I\right)_p^{n-1}\right]\left(s_I\right)_p^n \frac{\phi_p \Delta V_p}{\Delta t_n} + \alpha_p^s \left(s_I\right)_p^n$
$\delta_i^s = -(\rho_I)_i^{n-1}(F_I)_i^n$

Deve ser enfatizado também que para calcular os valores de alguns coeficientes da equação (4.32) será necessário aproximar os valores de algumas grandezas nos pontos de integração, empregando para tanto os valores nodais conhecidos. Uma vez que algumas dessas grandezas são dependentes da saturação, a qual é a incógnita da equação, as funções de interpolação empregadas para aproximar seus valores nos pontos de integração possuem uma importante influência sobre a qualidade da solução numérica. As funções de interpolação consideradas neste trabalho serão descritas em detalhes no capítulo 7.

Após serem calculadas todas as contribuições necessárias para a construção das equações da saturação, na forma das matrizes $[A^s]_e$, os vetores $[F^s]_e$, e os coeficientes α_p^s e γ_p^s , poderá ser montado o sistema linear de equações de acordo com o procedimento geral que será descrito na seção 4.6. Assim, após serem incluídas as alterações relacionadas à imposição das condições de contorno, poder-se-á escrever tal sistema linear na sua forma final

$$[A^{s}][s_{l}]^{n+1} = [F^{s}]$$
(4.36)

A solução deste sistema linear proporcionará o campo de saturação no nível de tempo t_{n+1} . A necessidade de resolver um sistema linear para avançar no tempo a saturação foi uma conseqüência direta do tratamento semi-implícito do termo de pressão capilar na forma de Buckley-Leverett da equação da saturação. Se bem a resolução de um sistema linear demanda maior tempo de computação que o simples processo de avaliação explícita usado no método IMPES, o tratamento semi-implícito da pressão capilar permite usar passos de tempo maiores que os admissíveis para tal método. Globalmente isto produz uma significativa economia de tempo de computação, a qual será maior quanto maior for a influência da pressão capilar sobre o processo de deslocamento simulado. No extremo oposto, quando a influência da pressão capilar for insignificante, a matriz [A^s] tornar-se-á uma matriz diagonal e o algoritmo seqüencial será equivalente ao algoritmo IMPES.

4.6 Montagem dos sistemas lineares de equações

Nas seções 4.4 e 4.5 foram derivadas expressões para as contribuições às equações discretizadas da pressão e da saturação, associadas a diferentes entes geométricos da malha. Nesta seção se descreverá o procedimento de montagem que

permitirá obter a partir de tais contribuições os sistemas lineares que reúnem as equações discretizadas associadas a todos os volumes de controle da malha. Deve ser lembrado que tanto para a equação da pressão quanto para a equação da saturação foram obtidas contribuições associadas aos elementos, agrupadas nas matrizes $[A^{\Theta}]_e$ e os vetores $[F^{\Theta}]_e$, além de contribuições associadas aos nós, na forma dos coeficientes α_p^{Θ} e γ_p^{Θ} . Nestas expressões e nas posteriores, Θ é uma variável genérica que pode representar à pressão ou à saturação, segundo seja o caso.

Como resultado do processo de montagem obter-se-ão uma matriz reunindo os coeficientes de todas as equações do sistema linear, a qual será denotada como $[A^{\Theta}]$ e denominada como *matriz global*, e um vetor reunindo os termos independentes de tais equações, o qual será denotado como $[F^{\Theta}]$ e denominado *vetor global*. O sistema linear poderá ser representado então como

$$[A^{\Theta}][\Theta] = [F^{\Theta}] \tag{4.37}$$

onde $[\Theta]$ é o vetor de valores nodais da variável incógnita, arranjado de acordo com o esquema de numeração global dos nós, conforme definido na seção 3.3

O procedimento de montagem do sistema linear de equações compreende duas etapas. Na primeira são reunidas as contribuições associadas aos elementos da malha e na segunda são adicionadas as contribuições associadas aos nós. O princípio básico da primeira etapa de montagem da matriz de coeficientes do sistema linear é simples: todas as contribuições na equação de um dado volume de controle, representadas por determinados coeficientes das matrizes $[A^{\Theta}]_{e}$ dos elementos contíguos ao volume, devem ser somadas entre si e armazenadas em determinadas células da matriz global. O mesmo pode-se dizer a respeito dos vetores $[F^{\Theta}]_{e}$ dos elementos que contribuem a um volume de controle, cujas componentes deverão ser adicionadas e armazenadas em uma determinada posição do vetor global de termos independentes. Enquanto que a matriz e o vetor globais devem estar arranjados de acordo com a numeração global dos nós na malha, as matrizes e vetores associados aos elementos estão arranjados de acordo com o esquema de numeração local em cada elemento, conforme foi explicado no capítulo 3. Portanto, a relação entre os

esquemas de numeração local e global dos nós é a única informação adicional requerida para realizar a primeira etapa da montagem do sistema linear de equações. Lembre-se que essa informação está contida na tabela de conectividade da malha, a qual foi definida na seção 3.3.

Fazendo-se uso de um pseudocódigo, o procedimento associado à etapa inicial da montagem pode ser representado como

```
for each Elemento_ID on Malha
for each Linha_E on MatrizElemento
set Linha_G = TabelaDeConectividade(Elemento_ID, Linha_E)
for each Coluna_E on MatrizElemento
set Coluna_G = TabelaDeConectividade(Elemento_ID, Coluna_E)
add MatrizElemento (Linha_E, Coluna_E) to MatrizGlobal(Linha_G, Coluna_G)
end for
end for
end for
```

Neste procedimento são visitados todos os elementos da malha (Elemento_ID é o número de identificação dos elementos) e para cada um deles todos os coeficientes da matriz $[A^{\Theta}]_e$ são adicionados a células da matriz global. A partir da posição original de cada coeficiente na matriz do elemento, dada por Linha_E e Coluna _E, é determinada a correspondente posição na matriz global, dada por Linha_G e Coluna_G, onde deve ser adicionado seu valor. Para tanto é usada apenas a informação contida na tabela de conectividade. Uma operação semelhante é realizada com as componentes do vetor $[F^{\Theta}]_e$ associado a cada elemento da malha.

Para melhor compreensão do procedimento de montagem, a figura 4.2 mostra como exemplo ilustrativo a montagem de uma matriz global para uma malha simples de três elementos. Uma vez que esta malha possui sete nós, cuja numeração global está representada na figura 4.2(a), a matriz global será uma matriz de dimensão 7×7. Segundo o procedimento descrito, os valores das células das três dimensão 7×7. Segundo o procedimento descrito, os valores das células das três matrizes correspondentes aos três elementos da malha são adicionados a células da matriz global, cuja posição é determinada de acordo com a tabela de conectividade mostrada na figura 4.2(b). Ao final do processo obtém-se uma matriz global de estrutura esparsa, contendo as contribuições dos três elementos nas equações discretizadas dos sete volumes de controle existentes na malha considerada. Cada linha dessa matriz contém os coeficientes da equação de cada um de tais volumes de controle. Note-se que o volume de controle contendo o nó 5 possui contribuições dos três elementos e, portanto, a linha da matriz global que corresponde a sua equação é a única que possui todas suas células diferentes de zero.



Figura 4.2 Esquema ilustrativo da primeira etapa do processo de montagem da matriz global, para uma malha de três elementos.

Após terem-se reunido as contribuições por elemento na matriz e vetor globais, resta ainda adicionar as contribuições associadas aos nós, as quais provém da discretização dos termos transientes das equações diferenciais, conforme mostrado nas seções 4.4 e 4.5. Para tanto, é importante notar que a equação discretizada correspondente ao volume de controle associado a um nó genérico p pode ser isolada do sistema linear e escrita como

$$\sum_{j=1}^{N_p} A_{p,j}^{\Theta} \Theta_j = F_p^{\Theta}$$
(4.38)

na qual os coeficientes $A_{p,j}^{\Theta}$ correspondem à *p*-ésima linha da matriz global e F_p^{Θ} é a *p*-ésima componente do vetor global. Note-se também que o coeficiente da diagonal $A_{p,p}^{\Theta}$ deve multiplicar ao valor nodal Θ_p , o qual corresponde ao nó *p* associado ao volume de controle em questão. Uma vez que nas equações (4.17) e (4.32) o coeficiente α_p^{Θ} multiplica precisamente à incógnita correspondente ao nó *p*, para que a equação (4.38) seja totalmente equivalente às referidas equações, α_p^{Θ} deve ser então adicionado ao coeficiente $A_{p,p}^{\Theta}$ da diagonal na matriz global. De forma semelhante, como nas equações (4.17) e (4.32) γ_p^{Θ} é um termo independente, ele deve ser adicionado à componente F_p^{Θ} do vetor global de termos independentes. Esta operação deve ser realizada visitando todos os nós da malha. O pseudocódigo para a execução desta segunda parte da montagem do sistema linear é

```
for each Nó_ID on Malha
    add CoeficienteAlfa( Nó_ID ) to MatrizGlobal( Nó_ID, Nó_ID )
    add CoeficienteGama( Nó_ID ) to VetorGlobal( Nó_ID )
end for
```

Neste código, N6_ID é o número de identificação de um nó de acordo com o esquema de numeração global. Após executar este procedimento apenas restará a imposição das condições de contorno respectivas ao problema sendo resolvido. Esta tarefa será tratada no seguinte capítulo.

CAPÍTULO5IMPLEMENTAÇÃO DAS
CONDIÇÕES DE CONTORNO

5.1 Introdução

No capítulo anterior foram derivadas as equações discretizadas para volumes de controle genéricos, porém, localizados no interior do domínio de solução. As equações correspondentes aos volumes adjacentes às fronteiras do domínio precisam ser modificadas para atender as condições de contorno do problema específico sendo resolvido. Além disso, se o problema estiver relacionado a processos de recuperação de petróleo de reservatórios, no interior do domínio podem ser considerados também fontes e sumidouros para representar a presença de poços injetores e produtores. Uma vez que a inclusão de tais fontes e sumidouros na formulação numérica é semelhante à implementação de determinadas condições de contorno, esse tópico será abordado também neste capítulo.

5.2 Fronteira com entrada de fluido

A figura 5.1 mostra um volume de controle adjacente a uma fronteira com entrada de fluido. Do ponto de vista geométrico, um volume contíguo a uma fronteira diferencia-se de um volume interior em que está formado por apenas dois subvolumes de controle, ou até mesmo por um único sub-volume se o volume estiver adjacente a duas fronteiras simultaneamente. Além disso, o nó associado a um destes volumes de controle encontra-se localizado sobre a face coincidente com a fronteira em questão. Nesta seção um nó deste tipo, ou seja sobre uma fronteira do domínio, será denotado com o subíndice *f*, para distingui-lo de um nó interior.

Na situação mais geral para um modelo bifásico, através da fronteira de entrada poderá existir ingresso simultâneo de fluxos de massa correspondentes as duas fases fluidas. As equações discretizadas de conservação de massa para esta situação possuirão a forma

$$\left[\frac{\partial(\rho_F s_F)}{\partial t}\right]_f \phi_f \Delta V_f + \sum_i (\rho_F \vec{\mathbf{v}}_F)_i \cdot \Delta \vec{\mathbf{S}}_i - (\Delta \dot{m}_F)_{ent} = 0; \qquad F = I, D \qquad (5.1)$$

onde $(\Delta \dot{m}_F)_{ent}$ é o fluxo de massa da fase *F*, que ingressa através da face do volume de controle coincidente com a fronteira de entrada. O sinal negativo deste termo obedece ao fato que, convencionalmente, os fluxos que saem de um volume de controle são considerados positivos e, portanto, os fluxos que ingressam são negativos.

Duas situações podem ser consideradas para a condição de contorno de entrada. Na primeira são conhecidos os fluxos de massa que ingressam ao domínio, correspondentes às duas fases. No segundo caso, a grandeza conhecida é a pressão de injeção, aplicada na fronteira de entrada.



Figura 5.1 Volume de controle adjacente à fronteira de entrada.

Para o primeiro caso, repetindo os mesmos passos descritos no capítulo 4 para a obtenção da equação discretizada de pressão, obtém-se a equação seguinte, para um volume de controle como o mostrado na figura 5.1,

$$\begin{bmatrix} (c_{l})_{f}^{n-1}(s_{l})_{f}^{n} \frac{(P_{l})_{f}^{n} - (P_{l})_{f}^{n-1}}{\Delta t_{n}} + (c_{D})_{f}^{n-1}(s_{D})_{f}^{n} \frac{(P_{D})_{f}^{n} - (P_{D})_{f}^{n-1}}{\Delta t_{n}} \end{bmatrix} \phi_{f} \Delta V_{f} + \frac{\sum_{i} (\rho_{i})_{i}^{n-1} (\vec{\mathbf{v}}_{I})_{i}^{n} \cdot \Delta \vec{\mathbf{S}}_{i}}{(\rho_{l})_{f}^{n-1}} + \frac{\sum_{i} (\rho_{D})_{i}^{n-1} (\vec{\mathbf{v}}_{D})_{i}^{n} \cdot \Delta \vec{\mathbf{S}}_{i}}{(\rho_{D})_{f}^{n-1}} - \frac{(\Delta \dot{m}_{l})_{ent}}{(\rho_{D})_{f}^{n-1}} = 0$$
(5.2)

a qual é idêntica à equação para um volume interior¹, salvo a presença dos dois últimos termos relativos aos fluxos de massa $(\Delta \dot{m}_I)_{ent}$ e $(\Delta \dot{m}_D)_{ent}$, os quais assumemse conhecidos para todos os volumes contíguos à fronteira de entrada. Conseqüentemente, a implementação desse tipo de condição requer apenas a inclusão dos fluxos de massa conhecidos nos termos independentes das equações discretizadas correspondentes aos volumes de controle adjacentes à fronteira de entrada. Para a equação da pressão, por exemplo, será necessário realizar a alteração

$$F_f^{P} = (F_f^{P})' + \frac{(\Delta \dot{m}_I)_{ent}}{(\rho_I)_f^{n-1}} + \frac{(\Delta \dot{m}_D)_{ent}}{(\rho_D)_f^{n-1}}$$
(5.3)

onde $(F_f^p)'$ é o termo independente da equação do volume de controle f, antes da inclusão da condição de contorno. É possível mostrar também que para a equação da saturação do mesmo volume, apenas é necessária a modificação seguinte no termo independente correspondente

$$F_{f}^{s} = (F_{f}^{s})' + (\Delta \dot{m}_{I})_{ent}$$
(5.4)

Para o segundo caso considerado, no qual o valor da pressão aplicada na fronteira de entrada é conhecido, a especificação completa de um problema de deslocamento requer uma condição de contorno adicional para ser usada na equação da saturação. Uma situação comum em experimentos de laboratório é a utilização de um dispositivo que impede o fluxo a contracorrente da fase deslocada através da superfície de entrada ao meio poroso. Para tal situação é admissível a consideração

¹ Compare-se esta equação com a equação (4.13).

de fluxo de massa nulo de tal fase como condição de contorno adicional nessa superfície. Também nesse cenário, o valor conhecido da pressão de injeção, o qual será denotado como P_{inj} , deve ser prescrito como valor da pressão da fase injetada, uma vez que esta pressão será aplicada externamente para que tal fase ingresse no meio poroso. Para um volume de controle adjacente à fronteira de entrada, essas condições de contorno podem ser expressas da seguinte forma

$$\begin{array}{l} (\Delta \dot{m}_D)_{ent} = 0 \\ (P_I)_f = P_{inj} \end{array}$$

$$(5.5)$$

O valor da pressão de injeção pode ser introduzido no sistema linear da pressão substituindo a equação discretizada de todo volume de controle *f* contíguo à fronteira de entrada, pela equação

$$(P_D)_f^n = P_{inj} + (P_C)_f^n$$
(5.6)

a qual pode ser rescrita na forma

$$\begin{bmatrix} 0 & 0 & \cdots & 0 & 1 & 0 & \cdots & 0 & 0 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} P_D \end{bmatrix}^n = P_{inj} + (P_C)_f^n$$
(5.7)

Conseqüentemente, para impor uma condição de contorno de valor prescrito para um volume f no sistema linear é necessário substituir todas as células da f-ésima linha da matriz global por valores nulos, exceto a célula da diagonal que deve ser igual a um. Além disso a componente f do vetor de termos independentes deve ser substituída pelo valor prescrito. No caso da equação (5.7), está-se impondo que a pressão da fase deslocada² em todo nó sobre a fronteira de entrada adquira o valor calculado com o valor prescrito da pressão da fase injetada e o valor já calculado da pressão capilar³.

Entretanto, ao empregar-se a equação (5.6), está-se deixando de utilizar a equação (5.2), a qual representa a conservação das duas fases nos volumes adjacentes à entrada. Uma vez que para a equação discretizada da saturação nesses volumes é necessário o valor de $(\Delta \dot{m}_{I})_{ent}$, resta para tal equação a função de fornecer o valor do

² Lembre-se que a incógnita da equação da pressão é a pressão da fase deslocada.

³ A partir da equação (2.8) deduz-se que $P_D = P_I + P_C$.

fluxo de massa que satisfaça a conservação de massa. Considerando a condição de contorno $(\Delta \dot{m}_D)_{ent} = 0$ discutida previamente, a partir da equação (5.2) pode-se obter a expressão para o fluxo de massa da fase injetada

$$(\Delta \dot{m}_{l})_{ent} = \left[(c_{D})_{f}^{n-1} (s_{D})_{f}^{n} \frac{(P_{D})_{f}^{n} - (P_{D})_{f}^{n-1}}{\Delta t_{n}} \right] (\rho_{l})_{f} \phi_{f} \Delta V_{f} + \sum_{i} (\rho_{l})_{i}^{n-1} (\vec{\mathbf{v}}_{l})_{i}^{n} \cdot \Delta \vec{\mathbf{S}}_{i} + \frac{(\rho_{l})_{f}}{(\rho_{D})_{f}^{n-1}} \sum_{i} (\rho_{D})_{i}^{n-1} (\vec{\mathbf{v}}_{D})_{i}^{n} \cdot \Delta \vec{\mathbf{S}}_{i}$$
(5.8)

Após resolver o sistema linear para a pressão, o valor de $(\Delta m_I)_{ent}$ pode ser calculado para todos os volumes contíguos à fronteira de entrada e incluído no termo independente da equação da saturação, usando a equação (5.4). Esta operação completa a implementação da condição de contorno de pressão prescrita em uma fronteira de entrada.

5.3 Fronteira com saída de fluido

Em vários sentidos, a situação para os volumes de controle adjacentes a uma fronteira com saída de fluido é semelhante à considerada para os volumes em uma fronteira de entrada. Assim, a geometria destes volumes é semelhante à mostrada na figura 5.1, exceto que neste caso uma face dos volumes coincide com a fronteira de saída, a qual é atravessada, na situação mais geral, pelos fluxos de massa $(\Delta \dot{m}_I)_{sai}$ e $(\Delta \dot{m}_D)_{sai}$.

Entretanto, as condições de contorno em uma fronteira de saída devem representar também um comportamento observado experimentalmente, o qual é denominado na literatura como *efeito de extremidade* [5, 23]. Este efeito se manifesta como uma acumulação da fase molhante na vizinhança da superfície que separa um meio poroso do meio exterior. A razão disso é que, quando a pressão capilar não for nula, a pressão na fase molhante será menor que a pressão no ambiente exterior e, portanto, não poderá fluir para fora do meio poroso. Nesta condição, apenas a fase não-molhante poderá atravessar a superfície de saída e abandonar o meio poroso. Após a chegada da fase molhante a essa superfície, a retenção desta fase produzirá uma rápida variação da saturação na sua vizinhança, até que em um momento dado o valor da saturação atingirá o valor para o qual a pressão capilar tornar-se-á nula [4]. Nesse instante as pressões de ambas as fases se igualarão à pressão no meio exterior e então ambas poderão fluir atravessando a superfície de saída.

Este fenômeno pode ser modelado mediante as seguintes expressões para as condições na face de um volume de controle *f* , coincidente com a fronteira de saída

$$\begin{cases} (\Delta \dot{m}_I)_{sai} = 0\\ (P_D)_f = P_{ext} \end{cases}; \qquad se \ (P_C)_f > 0 \qquad (5.9a)$$

$$\begin{cases} (\Delta \dot{m}_D)_{sai} = 0\\ (P_I)_f = P_{ext} \end{cases}; \qquad se \ (P_C)_f < 0 \tag{5.9b}$$

$$\begin{cases} (s_I)_f = s_I^{(P_C=0)} \\ (P_D)_f = (P_I)_f = P_{ext} \end{cases}; se (P_C)_f = 0$$
(5.9c)

onde P_{ext} é a pressão exterior à qual os fluidos abandonam o meio poroso, enquanto que $s_1^{(P_C=0)}$ é o valor da saturação para o qual a pressão capilar é nula. Este valor depende da curva de pressão capilar, a qual é uma característica própria do sistema formado pelos fluidos e o meio poroso. A maior vantagem das condições de contorno expressas nas equações (5.9) é que elas abrangem todas as situações possíveis e, além disso, não é necessária a identificação a priori das fases molhante e não-molhante. Assume-se que essa informação está contida na curva de pressão capilar fornecida ao modelo numérico.

Assim por exemplo, se o processo de deslocamento for uma embebição, em cujo caso a fase injetada seria a fase molhante, a curva de pressão capilar apresentará aproximadamente o formato da curva mostrada na figura 5.2(c), a qual respeita a definição de pressão capilar considerada neste trabalho⁴. A forma em que o efeito de extremidade é modelado nesse caso está representada esquematicamente nas figuras 5.2(a) e 5.2(b). Estas figuras mostram os perfis de saturação⁵ em uma amostra de

⁴ Ou seja, $P_C = P_D - P_I$.

⁵ Representações dos valores da saturação ao longo do eixo paralelo à direção principal do escoamento.

rocha, para dois instantes de tempo diferentes. O primeiro corresponde a um instante posterior à chegada da frente da fase injetada, para o qual, no entanto, a pressão capilar na face de saída possui um valor maior que zero. Segundo a equação (5.9a), nesse caso a condição prescrita deve ser de fluxo de massa nulo da fase injetada através da face de saída e, como conseqüência, o valor da saturação deve incrementar-se nessa região devido à acumulação dessa fase. Em um instante dado, a saturação na face de saída atingirá o valor para o qual a pressão capilar se anula (segundo a curva da figura 5.2(c), $s_1^{(P_c=0)} = s_1^{sup}$ nesse exemplo), e a partir de então devem prescrever-se as condições (5.11c). É nesse instante que se produz o *breakthrough*⁶ e as duas fases começam a fluir simultaneamente através da face de saída. O perfil de saturação correspondente a esse instante de tempo está representado na figura 5.2(b). Tal perfil apresenta um gradiente pronunciado na proximidade da face de saída, o qual é a manifestação típica do efeito de extremidade.



Figura 5.2 Efeito de extremidade para um processo típico de embebição.

Para o caso oposto, ou seja, quando a fase injetada for a fase não-molhante, o processo será uma drenagem. De acordo com a definição empregada, a pressão capilar será nesse caso predominantemente negativa, pois ter-se-á $P_1 > P_D$ para a maior parte do intervalo de saturação. As figuras 5.3(a) e 5.3(b) mostram dois perfis de saturação típicos para um processo de drenagem, um deles prévio ao *breakthrough* e outro posterior. Uma vez que nesse exemplo a saturação inicial é s_1^{inf} , e segundo a

⁶ Denominação comum na literatura para a irrupção da fase injetada no ponto de produção de óleo.

curva de pressão capilar da figura 5.3(c) para essa saturação a pressão capilar é nula (ou seja $s_1^{(P_c=0)} = s_1^{inf}$), as condições (5.11c) devem ser prescritas desde o início da simulação. Quando a fase injetada chegar na fronteira de saída produzir-se-á o *breakthrough* e essa fase poderá fluir para o exterior do meio poroso. Uma vez que dai em diante o valor da saturação na fronteira de saída manter-se-á invariável, o efeito de extremidade manifestar-se-á novamente como um gradiente pronunciado na vizinhança dessa fronteira, tal como mostra a figura 5.3(b).



Figura 5.3 Efeito de extremidade para um processo típico de drenagem.

A implementação das condições de contorno dadas pelas equações (5.9a) e (5.9b) é semelhante à implementação da condição de entrada com pressão prescrita. Assim por exemplo, para a equação (5.9a), o valor de pressão P_{ext} pode ser prescrito substituindo as equações discretizadas da pressão correspondentes aos volumes adjacentes à fronteira de saída pela equação

$$\begin{bmatrix} 0 & 0 & \cdots & 0 & 1 & 0 & \cdots & 0 & 0 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} P_D \end{bmatrix} = P_{ext}$$
(5.10)

Na seção anterior viu-se que quando o valor do fluxo de massa da fase injetada deve ser prescrito, tal valor tem de ser somado ao termo independente da correspondente equação da saturação. Uma vez que para a condição dada pela equação (5.9a) o fluxo prescrito é $(\Delta \dot{m}_I)_{sai} = 0$, isso implica que não é necessário realizar nenhuma modificação na equação da saturação dos volumes contíguos à fronteira de saída.

Para a condição da equação (5.9b) a implementação é semelhante. As equações correspondentes aos volumes da fronteira no sistema linear da pressão deverão ser substituídas por uma equação similar à equação (5.10), na qual o termo independente deve ser agora $P_{ext} + (P_C)_f^n$, já que o valor prescrito nesse caso é o valor da pressão da fase injetada. Quanto à equação da saturação, uma vez que agora o valor do fluxo de massa prescrito corresponde à fase deslocada, o valor de $(\Delta in_I)_{sai}$ necessário para ser incluído nessa equação deve ser determinado a partir de uma equação de conservação equivalente à equação (5.2), obtida para os volumes na fronteira de saída. Fazendo em tal equação (Δin_D)_{sai} = 0, obtém-se

$$(\Delta \dot{m}_{I})_{sai} = -\left[(c_{D})_{f}^{n-1} (s_{D})_{f}^{n} \frac{(P_{D})_{f}^{n} - (P_{D})_{f}^{n-1}}{\Delta t_{n}} \right] (\rho_{I})_{f} \phi_{f} \Delta V_{f} - \sum_{i} (\rho_{I})_{i}^{n-1} (\vec{\mathbf{v}}_{I})_{i}^{n} \cdot \Delta \vec{\mathbf{S}}_{i} - \frac{(\rho_{I})_{f}}{(\rho_{D})_{f}^{n-1}} \sum_{i} (\rho_{D})_{i}^{n-1} (\vec{\mathbf{v}}_{D})_{i}^{n} \cdot \Delta \vec{\mathbf{S}}_{i}$$
(5.11)

Finalmente, para a situação expressa na equação (5.9c), pode ser empregada novamente a equação (5.10) para prescrever o valor da pressão P_{ext} . Quanto à condição para a equação da saturação, o valor $s_1^{(P_c=0)}$ deve ser imposto sobre os nós na fronteira substituindo a equação discretizada da saturação por

$$\begin{bmatrix} 0 & 0 & \cdots & 0 & 1 & 0 & \cdots & 0 & 0 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} s_I \end{bmatrix} = s_I^{(P_C=0)}$$
(5.12)

para todos os volumes contíguos à fronteira de saída. Uma vez que neste caso para tais volumes não se estão usando as equações de conservação das fases, estas podem ser usadas para determinar os dos fluxos de massa $(\Delta \dot{m}_{1})_{sai}$ e $(\Delta \dot{m}_{D})_{sai}$, cujos valores não são conhecidos a priori. Somando estes valores para todos os volumes adjacentes à fronteira de saída poder-se-á obter o fluxo total de cada uma das fases que abandonam o meio poroso.

5.4 Fronteiras impermeáveis

Quando não é especificada nenhuma condição de contorno para um volume de controle adjacente a uma fronteira, está-se assumindo que tal fronteira é impermeá-

vel. Isso pode ser comprovado facilmente examinando a equação (5.1), a qual é a equação discretizada de conservação de massa de um volume adjacente a uma fronteira de entrada. Se $(\Delta \dot{m}_F)_{ent} = 0$, situação que acontece simultaneamente para ambas as fases quando a fronteira é impermeável, a equação (5.1) reduz-se à equação de um volume interior, com contribuições apenas dos fluxos através das faces que o comunicam com os volumes vizinhos. Como conseqüência, após a montagem dos sistemas de equações para a pressão e para a saturação, as equações para os volumes contíguos às fronteiras impermeáveis estarão prontas, sem ser necessária nenhuma alteração.

5.5 Fontes e sumidouros

Quando os problemas de deslocamento sendo resolvidos correspondem a processos de recuperação de petróleo de reservatórios, dado que as dimensões do domínio de solução são consideravelmente maiores que as dimensões dos poços de injeção e produção, estes são representados comumente como fontes e sumidouros, respectivamente, no modelo matemático do escoamento. Na representação discreta do problema pode-se fazer que nós da malha coincidam com a posição dos poços e considerar as grandezas prescritas como correspondendo a tais nós. Desta forma, por exemplo, as condições em um poço injetor podem ser consideradas como condições de contorno de entrada de fluido aplicadas apenas a um nó (ou mais precisamente, ao volume de controle que o contém). Para tanto, são válidas todas as considerações feitas em seções anteriores em relação à implementação destas condições de contorno.

O mesmo é aplicável às condições em poços produtores, as quais podem ser consideradas como casos especiais de condições de contorno com saída de fluidos. Contudo, podem ser mencionadas duas diferenças importantes em relação à situação considerada na seção 5.3. Em primeiro lugar, dado que o domínio de solução terá as dimensões do reservatório, o tamanho característico dos volumes de controle na malha empregada deverá ser significativamente maior que a dimensão característica da região onde se produz o efeito de extremidade. Por tal razão, na simulação de reservatórios este fenômeno é desconsiderado na modelagem, sendo inclusive em muitos casos desprezada qualquer influência da pressão capilar no deslocamento de fluidos em reservatórios de petróleo.

Além dessa característica, nesses problemas geralmente é especificada a denominada *pressão de fundo poço*, a qual está relacionada com o fluxo de massa de uma fase que abandona o domínio através do poço, mediante a relação seguinte [13]

$$(\dot{m}_F)_w = (\rho_F)_p (\lambda_F)_p W I_w (P_p - P_{wb}); \qquad F = I, D$$
 (5.13)

onde $(\dot{m}_F)_w$ é o fluxo de massa que atravessa o poço, P_p é a pressão⁷ no nó onde está localizado o poço e P_{wb} é a pressão de fundo de poço, cujo valor deve ser conhecido. WI_w é um parâmetro denominado *índice de poço*, o qual está relacionado com a geometria do poço. Incluindo o fluxo de massa dado pela equação (5.13) nas equações de conservação de massa para o volume onde se encontra um poço produtor, chega-se a uma equação de pressão similar à de um volume normal, mas cujo coeficiente diagonal e termo independente incluem parcelas adicionais, da seguinte forma

$$A_{p,p}^{P} = (A_{p,p}^{P})' + (\lambda_{I} + \lambda_{D})_{p} WI_{w}$$
(5.14)

$$F_p^P = (F_p^P)' + (\lambda_I + \lambda_D)_p W I_w P_{wb}$$
(5.15)

onde p é o número de identificação do nó coincidente com o poço. $(A_{p,p}^{p})'$ e $(F_{p}^{p})'$ são o coeficiente diagonal e o termo independente obtidos após a montagem do sistema linear para a pressão. Quanto à equação da saturação, apenas no termo independente da equação do volume onde se encontra o poço deve ser realizada a subtração

$$F_p^s = (F_p^s)' - (\dot{m}_I)_w \tag{5.16}$$

onde o fluxo de massa $(\dot{m}_I)_w$ deve ser calculado com a equação (5.13) particularizada para a fase injetada, após resolver o sistema linear da pressão.

⁷ Uma vez que, conforme já se mencionou, a pressão capilar é ordinariamente desconsiderada na simulação de reservatórios, a pressão torna-se uma grandeza única, independente das fases.

CAPÍTULO 6 ALGORITMO DE SOLUÇÃO

6.1 Introdução

A simulação numérica de um processo transiente consiste em geral em um procedimento de marcha, no qual são obtidas aproximações dos campos associados às variáveis em uma seqüência de níveis discretos de tempo. Uma vez que na presente formulação o desacoplamento das variáveis foi conseguido graças ao emprego de diferentes aproximações temporais, as equações discretizadas resultaram com incógnitas correspondentes a níveis de tempo diferentes. Assim, enquanto o sistema linear resultante da montagem das equações da pressão possui incógnitas relativas ao nível de tempo t_n , no sistema linear da saturação as incógnitas correspondem ao nível de tempo subseqüente, ou seja, t_{n+1} . Esse tipo de aproximações facilita o emprego de um algoritmo seqüencial para a obtenção da simulação numérica de processos de deslocamento transiente. Neste capítulo serão descritos os passos fundamentais de duas formas do algoritmo seqüencial, uma forma convencional e uma variante proposta para reduzir o tempo de computação em problemas de grande tamanho.

6.2 Algoritmo sequencial convencional

Um bloco de solução¹ do algoritmo seqüencial convencional compreende três passos fundamentais, os quais encontram-se representados esquematicamente na figura 6.1. Nestes diagramas, cada nível de tempo é representado como um nó sobre a linha de tempo. As variáveis correspondentes a um dado nível estão representadas na vertical que passa pelo seu respectivo nó na linha do tempo. Tal representação é realizada apenas para fins ilustrativos e por essa razão não foi especificada nos diagramas qualquer relação entre variáveis e fases específicas.

Na figura 6.1(a) está representado esquematicamente o avanço no tempo do campo de pressão² ao nível genérico t_n , o qual é o primeiro passo do bloco de solução. Dado o desacoplamento de variáveis já comentado, o campo de saturação no nível t_n já teve de ser determinado durante a execução do bloco de solução anterior e, portanto, nesta etapa do processo tal campo deve ser conhecido. Empregando os valores do campo de saturação, além dos valores correspondentes ao nível de tempo t_{n-1} dos outros campos, pode ser construído o sistema linear para a pressão usando as expressões matemáticas deduzidas seção 4.4. A solução de tal sistema linear fornecerá o campo da pressão associado à fase deslocada no nível t_n . Se necessário, o campo associado à fase injetada pode ser determinado simplesmente a partir da relação algébrica

$$(P_{I})_{p}^{n} = (P_{D})_{p}^{n} - (P_{C})_{p}^{n}$$
(6.1)

obtida a partir da definição da pressão capilar. Uma vez que a saturação é conhecida em t_n , a pressão capilar também estará disponível nesse nível de tempo.

O segundo passo do bloco de solução, representado na figura 6.1(b), consiste na avaliação das densidades das fases e o cálculo da velocidade efetiva no nível de tempo t_n . Uma vez que nesta etapa já se encontram disponíveis os campos de

¹ Assim será denominado o conjunto completo de operações necessárias para avançar todas as variáveis do modelo até o próximo nível de tempo.

² Quando se menciona campo de pressão e campo de saturação, subentende-se que se trata dos campos associados à pressão da fase deslocada e à saturação da fase injetada, respectivamente, já que as equações discretizadas foram construídas com base nestas variáveis.

ALGORITMO DE SOLUÇÃO

pressão para as duas fases, as suas densidades podem ser determinadas mediante avaliação direta das equações de estado. No caso da velocidade efetiva, em vez de calcular as componentes desta velocidade é mais prático calcular diretamente os valores das vazões associadas a ela, nas faces dos volumes de controle. Note-se que a forma matricial da equação discretizada da saturação já tinha sido expressa em função dessas vazões, as quais podem ser calculadas facilmente em nível de elemento empregando a equação (4.35).



Figura 6.1 Passos fundamentais de um bloco de solução do algoritmo seqüencial.

O passo final do bloco de solução é a construção do sistema linear para a saturação e para tanto será necessário empregar todas as grandezas determinadas previamente. Produto da solução de tal sistema linear será obtido o campo de saturação, relativo à fase injetada, no nível de tempo t_{n+1} , conforme mostra a figura 6.1(c). Valores da saturação da outra fase, quando necessários, são facilmente obtidos através da expressão proveniente da equação de restrição volumétrica

$$(s_D)_p^{n+1} = 1 - (s_I)_p^{n+1}$$
(6.2)

A execução seqüencial de blocos de solução como o descrito, partindo das condições iniciais prescritas para o problema até um certo nível de tempo final, fornecerá a evolução transiente de todas as variáveis dependentes do problema. Entretanto, o primeiro bloco de solução requer um tratamento especial por causa do uso de diferentes aproximações temporais para desacoplar as variáveis. Em t_0 são conhecidas a pressão, a densidade e a saturação a partir das condições iniciais do problema. O seguinte passo lógico seria determinar o campo de saturação em t_1 , contudo, para isso seria requerido o campo de velocidade efetiva, o qual não foi determinado ainda para esse nível de tempo. A estratégia considerada para determinar este campo é incluir no primeiro bloco de solução um nível de tempo auxiliar t_{0^+} tal que $\Delta t_0 = t_{0^+} - t_0 \approx 0$, como representado esquematicamente na figura 6.2. Nestas condições será admissível assumir que o campo de saturação neste nível é igual ao campo prescrito como condição inicial e com ele será possível resolver a equação de pressão. Uma vez obtido o campo de pressão em t_{0^+} pode ser determinado o campo de velocidade efetiva e realizadas as restantes operações já descritas para os blocos de solução normais. O campo de pressão determinado no nível t_{0^+} pode ser interpretado como o campo estabelecido imediatamente depois de iniciada a injeção de fluido no meio poroso. Se as fases fluidas forem altamente compressíveis, o campo de pressão obtido em t_{0^+} será muito próximo ao prescrito como condição inicial do problema. No extremo oposto, quando as duas fases forem modeladas como incompressíveis, o campo de pressão determinado em t_{0^+} independerá de qualquer condição inicial prescrita para este campo. De fato, nesse

caso a equação de pressão torna-se elíptica e, portanto, não requer nenhuma condição inicial.



Figura 6.2 Bloco inicial do algoritmo.

6.3 Estratégia de aceleração

Segundo já mencionado, a maior desvantagem de um algoritmo seqüencial como o descrito na seção anterior é o fato da estabilidade estar condicionada ao uso de passos de tempo restritos. Tal restrição origina-se na aproximação explícita das grandezas relativas à saturação nas equações de conservação de massa das fases, a qual permitiu o desacoplamento parcial das variáveis nessas equações. Como resultado foi possível obter uma equação implícita para a pressão e uma equação explícita para a saturação³. É importante destacar que a equação discretizada da pressão, por ser uma equação implícita, não possui nenhuma restrição de estabilidade e, portanto, seria possível em princípio empregar passos de tempo arbitrariamente grandes para esta equação sem que a estabilidade do algoritmo de solução ficasse comprometida.

Esta característica motiva o delineamento de uma variante acelerada do algoritmo seqüencial descrito anteriormente, no qual diferentes passos de tempo são

³ Posteriormente esta equação foi modificada para introduzir o tratamento semi-implícito do termo de pressão capilar, mas as restantes grandezas dependentes da saturação continuaram sendo aproximadas explicitamente na equação da saturação.

considerados para as equações da saturação e da pressão. A figura 6.3 mostra esquematicamente esta variante, na qual cada passo de tempo empregado para a equação da pressão é equivalente a um certo número de passos de tempo da equação da saturação, determinados de modo que a restrição de estabilidade do algoritmo seja satisfeita. Desta forma após resolver a equação da pressão e obter o campo de velocidade efetiva em um dado nível de tempo, é realizado um ciclo interno ao bloco de solução em que a equação da saturação é resolvida um certo número de vezes, empregando o último campo de velocidade efetiva determinado. A razão entre os passos de tempo da equação da pressão e da equação da saturação definirá a quantidade de vezes que o campo de saturação poderá ser avançado nesse ciclo interno antes de ser necessária a resolução da equação da pressão para iniciar um novo bloco de solução do algoritmo.



Figura 6.3 Dois passos consecutivos de avanço no tempo do campo de saturação, na variante acelerada do algoritmo seqüencial.

ALGORITMO DE SOLUÇÃO

A estratégia de aceleração descrita acima permite reduzir significativamente o tempo de computação necessário para completar a simulação de um processo de deslocamento, uma vez que o volume de cálculo é diminuído expressivamente⁴. Esta estratégia possui algumas características comuns com o denominado *método das linhas de corrente* [42] para simulação de reservatórios, cuja maior vantagem sobre os métodos numéricos tradicionais é a notável rapidez de computação. Esta característica é conseguida em grande parte graças a que as linhas de corrente, as quais são construídas com base em um campo de velocidade determinado após resolver a equação da pressão, são atualizadas um número mínimo de vezes durante uma simulação, a fim de reduzir o tempo de computação. Recentemente uma estratégia desta natureza, semelhante também à considerada neste trabalho, foi descrita em [8] para tornar o método IMPES apto para resolver alguns problemas de simulação de reservatórios cuja solução era inviável anteriormente com a forma convencional desse método.

No capítulo 8 serão comparados os resultados obtidos empregando a estratégia de aceleração com os obtidos mediante o algoritmo seqüencial inicialmente descrito. Poder-se-á comprovar que uma significativa economia de tempo de computação é obtida mediante tal estratégia, sem nenhuma perda significativa na qualidade da solução, especialmente em problemas com fluidos incompressíveis ou quase-incompressíveis.

⁴ Entre todas as operações realizadas em um bloco de solução do algoritmo, a que exige maior tempo de computação é a resolução do sistema linear da pressão, pela sua natureza elíptica.

ESQUEMAS DE INTERPOLAÇÃO ESPACIAL

7.1 Introdução

A acurácia de um método de discretização espacial depende em grande medida das funções de interpolação empregadas para aproximar valores das variáveis em localizações diferentes dos nós. Conforme visto durante o processo de discretização das equações do modelo, no EbFVM são necessários valores das variáveis e de algumas propriedades nos pontos de integração localizados no centro das faces dos volumes de controle. Esses valores devem ser relacionados com valores nodais mediante esquemas de interpolação, para ser possível o fechamento dos sistemas de equações discretizadas. Neste capítulo serão revisados os esquemas de interpolação empregados para realizar tais aproximações.

7.2 Interpolação *upwind* para os termos advectivos

Deve ser lembrado que quando foi considerada a discretização dos termos de caráter elíptico nas equações da pressão e da saturação, empregou-se uma função de interpolação bilinear para aproximar os gradientes dessas variáveis nos pontos de integração. Como já mencionado, este tipo de interpolação é a melhor opção para aproximar esses termos, já que dessa forma está-se assumindo que o valor em um ponto interior a um elemento está influenciado por todos os valores nodais circundantes, o qual é o comportamento esperado para uma variável elíptica. Além

disso, esta interpolação possui precisão de segunda ordem [35], o qual significa que o erro de truncamento associado a ela se reduz proporcionalmente ao quadrado do tamanho característico dos elementos, para uma malha suficientemente refinada.

De fato, do ponto de vista da precisão do método de discretização, seria extremamente favorável se todas as variáveis e propriedades nos pontos de integração pudessem ser aproximadas mediante interpolação bilinear quando o problema for bidimensional e malhas de quadriláteros estiverem sendo usadas. Contudo, isso não é possível no modelo de deslocamento imiscível, já que a equação da saturação é uma equação predominantemente hiperbólica que freqüentemente admite soluções com descontinuidades ou gradientes muito pronunciados. Como é relatado na literatura, o uso de funções de interpolação lineares ou bilineares para aproximar os termos advectivos neste tipo de equações conduz a soluções não realísticas, com oscilações espúrias e valores não limitados [31, 33, 34, 35]. Por tal razão, tradicionalmente nas formulações numéricas para deslocamento de fluidos em meios porosos são utilizados quase exclusivamente esquemas de interpolação tipo upwind para a aproximação das grandezas dependentes da saturação. Estes esquemas são os únicos esquemas que garantem soluções absolutamente livres de oscilações e com valores limitados a um certo intervalo. Entretanto, este tipo de interpolação possui precisão apenas de primeira ordem e introduz erros de caráter dissipativo nas soluções numéricas [31, 34]. Infelizmente, erros deste tipo tendem a suavizar extremamente descontinuidades e gradientes pronunciados, os quais, como já se mencionou, são comuns na solução das equações do modelo de deslocamento imiscível.

Para a aproximação dos termos advectivos da equação da saturação, neste trabalho são considerados esquemas de interpolação *upwind* porque, se adequadamente definidos, estes esquemas representam apropriadamente a natureza física desses termos. Se a equação diferencial da saturação for considerada como uma equação não-linear de advecção-difusão, o termo advectivo $\vec{\nabla} \cdot \rho_1 F_1 \vec{v}_E$ poderá ser enxergado como representando o transporte da grandeza F_1 por uma corrente com velocidade \vec{v}_E . Para tal transporte existe uma direção preferencial, a qual coincide com a direção das linhas de corrente associadas ao campo de velocidade \vec{v}_E . Logo,

uma função de interpolação *upwind* da grandeza F_i nessa direção é consistente com a física representada pelo termo advectivo.

Contudo, em formulações tradicionais baseadas em malhas estruturadas é costumeiro o emprego de esquemas de interpolação *upwind* unidimensionais seguindo a direção das linhas da malha, mesmo tratando-se de problemas de deslocamento multidimensionais. A razão dessa prática provavelmente esteja relacionada à relativa dificuldade encontrada para implementar esquemas de interpolação *upwind* verdadeiramente multidimensionais no contexto de metodologias convencionais de diferenças finitas ou volumes finitos em malhas estruturadas. Apenas para fins de comparação, no contexto do EbFVM pode ser definido um esquema equivalente, o qual será denominado de esquema *upwind* unidimensional. Para tanto será conveniente definir o seguinte fluxo de massa associado à face de um volume de controle¹

$$(\Delta \dot{m}_E)_i \equiv (\rho_I)_i^{n-1} (\vec{\mathbf{v}}_E)_i^n \cdot \Delta \vec{\mathbf{S}}_i$$
(7.1)

Considerando o ponto de integração 1 em um elemento, o esquema de interpolação *upwind* unidimensional pode ser definido pela expressão

$$\begin{cases} (F_l)_{i=1} = (F_l)_{p=1} & se \ (\Delta \dot{m}_E)_1 > 0; \\ (F_l)_{i=1} = (F_l)_{p=4} & se \ (\Delta \dot{m}_E)_1 < 0 \end{cases}$$
(7.2)

Expressões similares podem ser obtidas para os outros pontos de integração apenas permutando ciclicamente os subíndices das variáveis. A aplicação deste esquema de interpolação está exemplificada na figura 7.1, a qual mostra as duas possíveis situações consideradas na equação (7.2). Como se pode observar, apenas o sentido do fluxo de massa² é considerado para determinar o valor nodal a montante do ponto de integração.

A denominação de esquema *upwind* unidimensional provém do fato que apenas são considerados os valores nodais na direção perpendicular à face em questão, sem

¹ Examinando a versão discretizada da equação da saturação, equação (4.29), pode-se comprovar que este fluxo de massa é o que 'transporta' a grandeza F_I no termo advectivo.

² O sinal dos fluxos de massa está de acordo com a definição convencional do sentido positivo dos vetores área de face dada na figura 3.5(a).

importar a direção real do escoamento que atravessa essa face. Como se observa na figura 7.1(a), a linha de corrente que passa pelo ponto de integração pode ter uma direção muito diferente da direção considerada na interpolação e, portanto, o valor determinado pela equação (7.2) é uma aproximação pobre do valor a montante do ponto de integração. O fato de desconsiderar a direção real do escoamento na aproximação numérica dos termos advectivos é uma das principais causas do denominado *efeito de orientação de malha*. Este fenômeno se manifesta por uma marcada preferência do escoamento para seguir as linhas da malha, como conseqüência de que a interpolação é realizada na direção de tais linhas, em vez de ser realizada na direção das linhas de corrente. Por causa deste fenômeno numérico anómalo, quando se resolve um mesmo problema com malhas diferentes, existe o potencial problema de se obter soluções diferentes, especialmente em situações adversas tais como quando a mobilidade da fase injetada é muito maior que a mobilidade da fase deslocada.



Figura 7.1 Dois casos possíveis na interpolação *upwind* unidimensional para o ponto de integração 1 no elemento padrão.

7.3 Esquemas upwind bidimensionais

Uma das vantagens adicionais da flexibilidade conseguida pelo uso dos elementos como base geométrica dos cálculos envolvidos no processo de discretização é a possibilidade de implementar diversos esquemas de interpolação em nível de elemento. Desta forma pode-se conseguir que os esquemas de interpolação levem em conta o caráter bidimensional do escoamento sem incrementar excessivamente o grau de complexidade na implementação do método. Assim por exemplo, um possível esquema de interpolação seria aquele em que fossem determinados os valores nos pontos de interseção das linhas de corrente que passam pelo ponto de integração com o lado do elemento localizado a montante. Para tanto poderia ser considerado um esquema de interpolação linear dos valores nodais no lado do elemento onde estiver tal ponto de interseção. Mesmo que neste esquema os valores interpolados seriam os verdadeiros valores a montante e a interpolação teria precisão de segunda ordem [35], existiria o potencial problema de que a molécula computacional³ resultante da montagem das contribuições por elemento para o termo advectivo possua coeficientes negativos, os quais são os responsáveis das oscilações e os valores não limitados nas soluções numéricas [35].

No contexto da aplicação do EbFVM à solução das equações de Navier-Stokes, Schneider e Raw [38] propuseram um esquema de interpolação que combina duas características extremamente favoráveis para a simulação do escoamento em meios porosos: leva em conta a direção local do escoamento nos pontos de integração e por construção é garantida a positividade da molécula computacional resultante da discretização do termo advectivo. Isto garante que as soluções numéricas obtidas empregando-o resultem livres de oscilações espúrias e valores não limitados. A expressão matemática deste esquema de interpolação, equivalente à equação (7.2) do esquema *upwind* unidimensional, é a seguinte⁴

$$\begin{cases} (F_{I})_{i=1} = (1 - \Lambda_{1})(F_{I})_{p=1} + \Lambda_{1} \cdot (F_{I})_{i=2} & se \ (\Delta \dot{m}_{E})_{1} > 0; \\ (F_{I})_{i=1} = (1 - \Lambda_{1})(F_{I})_{p=4} + \Lambda_{1} \cdot (F_{I})_{i=4} & se \ (\Delta \dot{m}_{E})_{1} < 0 \end{cases}$$
(7.3)

onde o fator de interpolação Λ_1 está definido mediante a expressão

$$\Lambda_1 = \max[\min(\omega_1, 1), 0] \tag{7.4}$$

³ Denominar-se-á molécula computacional ao arranjo de nós próximos a um volume de controle, e por extensão ao arranjo dos coeficientes associados a esses nós, para os quais os coeficientes resultantes da discretização da equação diferencial para tal volume são não nulos.

⁴ Esta expressão e as seguintes correspondem ao ponto de integração 1. Expressões equivalentes para os outros pontos de integração podem ser obtidas apenas permutando ciclicamente os subíndices.

onde, por sua vez, ω_1 é uma razão de fluxos de massa que depende da orientação do fluxo que passa pela face onde o ponto de integração está localizado. Também para o ponto de integração 1, esta razão está dada por

$$\begin{cases} \omega_1 = \frac{(\Delta \dot{m}_E)_2}{(\Delta \dot{m}_E)_1} & \text{se } (\Delta \dot{m}_E)_1 > 0; \\ \omega_1 = \frac{(\Delta \dot{m}_E)_4}{(\Delta \dot{m}_E)_1} & \text{se } (\Delta \dot{m}_E)_1 < 0 \end{cases}$$
(7.5)

A figura 7.2 ilustra a interpretação física do esquema upwind definido acima, para três situações representativas correspondentes ao caso com $(\Delta \dot{m}_{\rm E})_1 > 0$. Uma primeira característica de destaque deste esquema é que, conforme expressa a equação (7.3), no caso mais geral, o valor interpolado em um ponto de integração inclui um valor nodal e um valor em um ponto de integração, localizados ambos a montante do ponto em questão. Assume-se que a corrente de fluido que atravessa uma face e que provém de uma face a montante carrega o valor do ponto de integração nesta face, enquanto que o restante fluido carrega o valor nodal adjacente. Assim acontece no caso ilustrado na figura 7.2(b), quando a razão de fluxos de massa encontra-se no intervalo $0 < \omega_1 < 1$ e, portanto como se observa nessa figura, a linha de corrente divisória entre ambas as correntes de fluido corta à face 1. Nesse caso, segundo a equação (7.4) o fator que pondera a influência daqueles dois valores a montante é a própria razão de fluxos de massa ($\Lambda_1 = \omega_1$). O motivo pelo qual este esquema se baseia no conhecimento dos valores dos fluxos de massa através das faces é porque estes valores contêm informação fundamental relativa à configuração do escoamento no interior dos elementos⁵. E conforme se discutiu anteriormente, é esta configuração que o esquema de interpolação deve respeitar para dar origem a uma aproximação realística do termo de transporte advectivo. Na literatura numérica [31], o esquema recém descrito é denominado esquema upwind ponderado pela massa (MWUS⁶).

⁵ De fato, com os valores dos fluxos de massa nas faces pode ser construída uma aproximação discreta da função de corrente, com a qual é possível esboçar a configuração das linhas de corrente no interior dos elementos.

⁶ Mass Weighted Upwind Scheme.

A definição do fator de interpolação compreende dois casos limites que estão ilustrados nas figuras 7.2(a) e 7.2(c), respectivamente. Quando a razão de fluxos de massa for maior que um, o qual implica que $(\Delta \dot{m}_E)_2 > (\Delta \dot{m}_E)_1$, todo o fluido que atravessa a face 1 provirá da face 2 e, portanto, neste caso o valor atribuído ao ponto de integração 1 deve ser o valor carregado por esse fluido, isto é, o valor no ponto de integração 2. Segundo a equação (7.3) nesse caso ter-se-á como valor limite $\Lambda_1 = 1$. A situação oposta acontece quando $\omega_1 < 0$, o qual significa que $(\Delta \dot{m}_E)_2 < 0$, ou seja o fluido está abandonando o sub-volume de controle também através da face 2. Nesse caso, todo o fluido que atravessa a face 1 provirá do interior do volume de controle que contém o nó 1 e, portanto, carregará o valor nodal correspondente a este nó. Para que esta situação esteja considerada no esquema de interpolação, a equação (7.3) estabelece o segundo valor limite $\Lambda_1 = 0$.



Figura 7.2 Três casos típicos na interpolação *upwind* ponderada pela massa, para o ponto de integração 1 no elemento padrão.

Uma dificuldade aparente do esquema de interpolação MWUS é que a expressão matemática para um dado ponto de integração envolve o valor em outro ponto de integração. Isto implica que para determinar os valores interpolados nos quatro pontos de integração de cada elemento deveria ser resolvido um sistema linear de 4 equações. Na prática é possível evitar resolver simultaneamente tal sistema, já que algumas equações, aquelas correspondentes aos pontos de integração onde se estabelecem os casos limites discutidos acima, podem ser desacopladas do resto. Desta forma sempre é possível determinar uma seqüência de solução que permita resolver cada equação de forma separada, evitando a solução simultânea do sistema, que poderia demandar maior tempo de computação.

Quando o esquema de interpolação MWUS é empregado para a simulação de processos de deslocamento bifásico, observa-se um efeito de orientação de malha contrário ao produzido pela aplicação do esquema *upwind* unidimensional, ou seja, em vez de favorecer o escoamento na direção paralela às linhas da malha, o esquema MWUS privilegia o escoamento na direção diagonal dos elementos. Resultados mostrando este comportamento serão mostrados na seção 8.5.

Em realidade, os esquemas upwind unidimensional e MWUS podem ser considerados como os casos limites de uma família de esquemas de interpolação que compartilham a característica comum de gerar moléculas computacionais com coeficientes positivos para a discretização do termo advectivo. A figura 7.3 mostra a representação gráfica no plano $\omega_i - \Lambda_i$ da equação (7.3) que define o fator de interpolação do esquema MWUS, junto com a reta $\Lambda_i = 0$ que representa o fator de interpolação que substituído na equação (7.2) reproduz o esquema upwind unidimensional. Estas duas linhas limitam uma região nesse plano, a qual foi denominada região de positividade, porque qualquer curva $\Lambda_i = \Lambda_i(\omega_i)$ localizada nessa região gera moléculas computacionais com coeficientes positivos7. Uma vez que os esquemas que correspondem às linhas que limitam a região de positividade produzem efeitos de orientação de malha opostos, esperava-se que curvas intermediarias nessa região gerassem esquemas de interpolação em que o efeito de orientação de malha fosse reduzido ou até anulado. De fato, conforme será mostrado no capítulo 8, foram determinadas heuristicamente algumas relações funcionais $\Lambda_i = \Lambda_i(\omega_i)$ específicas com as quais conseguiu-se tal objetivo, inclusive nas situações mais

⁷ Isto é mostrado no Apêndice B.

adversas. Os esquemas pertencentes a esta família serão denominados esquemas *upwind* de coeficientes positivos.



Figura 7.3 Região de positividade dos esquemas de interpolação.

Todos os esquemas de interpolação examinados nesta seção são aplicáveis apenas ao termo advectivo da equação da saturação. Para o termo difusivo desta equação, dada sua natureza elíptica, é possível empregar a interpolação bilinear. Da mesma forma, a interpolação das diferentes propriedades envolvidas nos coeficientes da equação da pressão pode ser realizada também mediante as funções de forma bilineares, já que tal equação é uma equação elíptica em relação às coordenadas espaciais. Nas formulações numéricas tradicionais, usualmente as mobilidades incluídas nos coeficientes da equação da pressão são interpoladas usando esquemas *upwind*. Contudo, conforme será mostrado no capitulo 6, essa prática só acentua o efeito de orientação de malha. Embora as mobilidades sejam funções da saturação, na equação da pressão elas apenas formam parte dos coeficientes de uma equação que tem comportamento elíptico no espaço e não hiperbólico como a equação da saturação, portanto, não é necessário empregar esquemas de interpolação *upwind*.

EXEMPLOS DE APLICAÇÃO

8.1 Introdução

Neste capítulo são apresentados diversos exemplos de aplicação obtidos empregando a formulação numérica descrita em capítulos anteriores. Os exemplos foram escolhidos de modo que diversos aspectos da formulação pudessem ser avaliados. Em primeiro lugar serão considerados problemas unidimensionais de deslocamento bifásico imiscível, os quais permitirão confrontar as soluções numéricas com a solução analítica de Buckley-Leverett. Em seguida, serão considerados problemas bidimensionais, incluindo características tais como heterogeneidade do meio, pressão capilar, compressibilidade e influência da gravidade. Entre estes problemas será considerada a simulação do processo de deslocamento em um reservatório de petróleo, na qual poderá ser apreciado o grande potencial que o uso de malhas não-estruturadas possui para a representação de domínios irregulares com falhas geológicas. Na seqüência será analisado o desempenho do algoritmo de solução empregado, estudando em especial à redução do tempo de computação conseguida pelo uso da variante acelerada do algoritmo seqüencial, descrita na seção 6.3. Na parte final do capítulo será estudada a influência das funções de interpolação na aproximação dos termos advectivos da equação da saturação no efeito de orientação de malha. Poder-se-á comprovar que com o uso das funções de interpolação descritas na seção 7.3, o efeito de orientação de malha se reduz expressivamente, inclusive nas situações mais adversas possíveis.

Todos os resultados apresentados neste capítulo foram obtidos mediante um código implementado em um ambiente de programação C++ [41], usando as classes da biblioteca COILib 3.0 [17], para manipulação de matrizes esparsas e resolução de sistemas lineares de equações. Para a solução destes sistemas foi empregado o método GMRES¹ [30, 37] com precondicionamento SSOR², estabelecendo como tolerância para os resíduos das equações o valor 10^{-7} .

8.2 Problemas unidimensionais

Nesta seção serão considerados problemas de deslocamento bifásico unidimensionais com o fim de comparar resultados obtidos empregando a formulação numérica proposta com a solução analítica. O único caso em que as equações do modelo de deslocamento bifásico imiscível admitem solução analítica exata é aquele em que o escoamento é unidirecional, as fases são incompressíveis, a pressão capilar e a gravidade são desconsideradas, o meio poroso é homogêneo e a distribuição inicial das fases no meio é uniforme. A solução analítica para esse caso é conhecida como solução de Buckley-Leverett [14].

8.2.1 Deslocamento unidimensional em uma amostra de rocha

Considere-se como exemplo o processo de deslocamento em uma amostra de rocha homogênea inicialmente embebida com óleo é na qual é injetada água a vazão



Figura 8.1 Deslocamento em uma amostra de rocha.

¹ Generalized Minimum Residual.

² Symmetric Succesive Over Relaxation.
constante através de uma de suas faces, tal como mostra a figura 8.1. Se a vazão de injeção de água for suficientemente alta, a influência da pressão capilar será pouco significativa e este problema poderá ser modelado como um processo de deslocamento unidimensional do tipo que admite solução analítica. É possível mostrar que as características essenciais da solução analítica para este tipo de problema estão determinadas apenas pela curva de fluxo fracionário, a qual está determinada por sua vez pelas curvas de permeabilidade relativa e pela razão de viscosidades dos fluidos. Para os exemplos apresentados nesta seção serão empregadas as curvas de permeabilidade relativa definidas por³

$$\begin{cases} k_{rI} = 0, 2\hat{s}^{1,5} \\ k_{rD} = 0, 8(1-\hat{s})^3 \end{cases}$$
(8.1)

onde \hat{s} é a saturação normalizada, definida como

$$\hat{s} = \frac{s_{I} - s_{I}^{inf}}{s_{I}^{sup} - s_{I}^{inf}}$$
(8.2)

O valor considerado para a razão de viscosidades é $\mu_D/\mu_I = 4$. As curvas de permeabilidade relativa, além da curva de fluxo fracionário correspondente a essas curvas e a essa razão de viscosidades, são mostradas na figura 8.2.



Figura 8.2 (a) Curvas de permeabilidade relativa e (b) curva de fluxo fracionário.

³ A forma funcional destas curvas corresponde à correlação de Corey. As curvas de permeabilidade relativa estimadas em laboratório apresentam usualmente formas mais complicadas. Decidiu-se empregar curvas simples como as de Corey apenas para simplificar sua representação matemática e facilitar a reprodutibilidade dos resultados numéricos.

A figura 8.3 apresenta uma comparação entre os perfis de saturação correspondentes à solução de Buckley-Leverett⁴ e os perfis obtidos com a formulação numérica, em três malhas unidimensionais, de 40, 80 e 160 elementos. Os três perfis mostrados correspondem a três instantes de tempo, 0,2, 0,4 e 0,6 VPI, onde VPI e o denominado *volume poroso injetado*, definido como

$$VPI = \frac{Volume \ de \ fluido \ injetado}{Volume \ poroso \ disponível} = \frac{\int_{o}^{t} (Q_{l})_{ent} \ dt}{\int_{V} \phi \ dV}$$
(8.3)

em que $(Q_I)_{ent}$ é a vazão injetada no meio poroso. O volume poroso injetado pode ser interpretado como tempo adimensional em um problema de deslocamento.



Figura 8.3 Perfis de saturação em problema de deslocamento unidimensional. Comparação com a solução analítica para três tempos: 0,2, 0,4 e 0,6 VPI.

As soluções numéricas apresentam o comportamento esperado, isto é, os perfis de saturação se aproximam progressivamente ao perfil correspondente à solução analítica a medida que a malha computacional é refinada. Contudo, é possível observar a presença de considerável difusão numérica, a qual é responsável pela suavização da descontinuidade nos perfis, até mesmo na malha mais refinada. Este é o preço que deve ser pago pela garantia de soluções completamente livres de

⁴ A solução de Buckley-Leverett foi obtida seguindo o procedimento descrito em [14].

oscilações e fisicamente coerentes. É possível afirmar que neste caso a difusão numérica é originada só na aproximação da equação da saturação, mais especificamente na interpolação de primeira ordem usada nos termos advectivos, pois para as condições do problema a velocidade total é constante tanto no espaço como no tempo, o que elimina completamente qualquer influência do campo de pressão sobre o campo de saturação.

Duas grandezas importantes na determinação de curvas de permeabilidade relativa a partir de dados coletados em um ensaio de deslocamento em uma amostra de rocha são a queda de pressão a longo da amostra e o volume de óleo produzido na face de saída. A figura 8.4 mostra as curvas de variação dessas grandezas em relação ao volume poroso injetado, correspondentes à solução analítica e às simulações numéricas referidas acima. A queda de pressão e o volume de óleo produzido foram adimensionalizados, respectivamente, empregando as relações seguintes

$$\Delta \hat{P} = \frac{(P_I)_{ent} - (P_D)_{sai}}{\left\lceil \frac{(Q_I)_{ent} \mu_D L}{AK} \right\rceil}$$
(8.4)

$$VPO = \frac{\int_{o}^{t} (Q_{D})_{sai} dt}{\int_{V} \phi \, dV}$$
(8.5)

Na equação (8.4), *L* e *A* são o comprimento e a área da seção transversal da amostra de rocha. O denominador desta equação representa a queda de pressão em t = 0, obtida a partir da solução analítica. Na equação (8.5), $(Q_D)_{sai}$ é a vazão da fase deslocada (óleo) que atravessa a fronteira de saída.

Observando as figuras 8.3 e 8.4, pode-se notar que a proximidade entre as soluções numéricas e a solução analítica é maior para grandezas globais como a queda de pressão e o volume produzido, que para os perfis de saturação instantâneos. Como a determinação das grandezas globais envolve operações de integração das aproximações discretas dos campos, é provável que nessas operações muitos dos erros associados à solução numérica se cancelem entre si, resultando deste modo grandezas globais com erro numérico reduzido.



Figura 8.4 Curvas de **(a)** queda de pressão e **(b)** volume de óleo produzido, para o problema de deslocamento unidimensional.

É interessante observar o comportamento das soluções numéricas em relação à magnitude do passo de tempo empregado. As soluções apresentadas acima foram obtidas empregando um passo de tempo determinado mediante o procedimento descrito no apêndice C, o qual é relativamente conservador para o caso simples considerado. Dado que para este problema é conhecida a solução analítica, a partir dela é possível determinar de forma exata a máxima velocidade de propagação⁵ para determinar o número de Courant e com ele calcular o máximo passo de tempo admissível a partir da condição de Courant-Friedrichs-Lewy. Procedendo assim foram obtidas novas simulações, mantendo inalterados todos os demais parâmetros do problema. Os novos perfis de saturação obtidos são mostrados na figura 8.5. Segundo pode-se observar todas as soluções numéricas são quase idênticas à solução analítica. Estes resultados concordam com a análise de Peaceman [34], que determinou uma expressão matemática para a difusão numérica associada à interpolação upwind, no contexto do método de diferenças finitas aplicado a um problema de advecção linear. Nessa expressão a difusão numérica se anula quando o número de Courant é exatamente igual a um, o que acontece quando o passo de

⁵ Esta velocidade corresponde à velocidade de avanço da descontinuidade. A solução de Buckley-Leverett prevê que esta velocidade será constante se a vazão de injeção também for constante.

tempo é determinado empregando a velocidade de propagação exata. Infelizmente, apenas em um caso simples como o considerado é possível determinar um passo de tempo ótimo que elimine a difusão numérica. Em qualquer outra situação, com geometrias ou características físicas mais complexas, a máxima velocidade de propagação será variável tanto no tempo quanto no espaço, e apenas será possível determinar estimativas grosseiras do número de Courant para calcular passos de tempo estáveis, como acontece por exemplo quando se empregam as equações (C.4) ou (C.5) do apêndice C. É importante mencionar que quando passos de tempo levemente maiores ao passo ótimo são usados, a solução numérica se torna muito instável e perfis de saturação não-físicos com oscilações são obtidos nas simulações.



Figura 8.5 Perfis de saturação em problema de deslocamento unidimensional. Soluções numéricas calculadas com passo de tempo ótimo.

Visando analisar o comportamento da formulação numérica quando a modelagem do deslocamento inclui a pressão capilar, foram obtidas simulações com os mesmos dados empregados no exemplo anterior, mas incluindo também a curva de pressão capilar adimensionalizada

$$\hat{P}_{\rm C} = 0.9 \left(1 - \hat{s}\right)^2 \tag{8.6}$$

na qual é considerada a seguinte adimensionalização

CAPÍTULO 8

$$\hat{P}_{C} = \frac{P_{C}}{\left[\frac{(Q_{I})_{ent} \,\mu_{D}L}{AK}\right]}$$
(8.7)

A figura 8.6 mostra os perfis de saturação obtidos para as mesmas malhas consideradas anteriormente. Infelizmente para este caso não existe solução analítica exata para comparação, contudo, como referência foram incluídos no gráfico os perfis da solução analítica sem pressão capilar, correspondentes aos mesmos tempos dos perfis numéricos. Analisando a figura 8.6 é possível destacar dois aspectos importantes. O primeiro é o efeito difusivo que a pressão capilar introduz, fazendo com que as descontinuidades que existiam nos perfis de saturação na solução sem pressão capilar sejam suavizados significativamente. Devido também a essa ação difusiva, o efeito de extremidade⁶ se estende a uma certa região na vizinhança da fronteira de saída. O segundo aspecto a destacar é a quase-independência da malha, apenas na região onde se produz o efeito de extremidade é possível perceber alguma diferença entre as soluções numéricas. É possível conjeturar que a maior contribuição ao erro de discretização nas soluções numéricas com a formulação empregada é de natureza dissipativa, o qual se manifesta conseqüentemente como difusão numérica.



Figura 8.6 Perfis de saturação em problema de deslocamento unidimensional incluindo pressão capilar. Tempos: 0,2, 0,4, 0,6 e 0,8 VPI.

⁶ Comentado na seção 5.3.

Deste modo, quando a equação diferencial de saturação inclui um termo de caráter difusivo de magnitude importante, a difusão numérica é encoberta pela difusão física é por isso as soluções numéricas não apresentam erro de discretização apreciável.

Finalmente, na figura 8.7 são mostradas as curvas de queda de pressão e volume de óleo produzido correspondentes ás simulações com pressão capilar. Para evidenciar a importante influência que a pressão capilar pode ter sobre estas grandezas, nos gráficos são incluídas as curvas correspondentes á solução analítica sem pressão capilar.



Figura 8.7 Curvas de **(a)** queda de pressão e **(b)** volume de óleo produzido, para o problema de deslocamento unidimensional com pressão capilar.

8.3 Problemas bidimensionais

8.3.1 Deslocamento em uma amostra de rocha heterogênea

Nesta seção será considerado um problema de deslocamento em uma amostra porosa semelhante ao considerado na seção anterior, mas agora incluindo na modelagem a variação espacial da porosidade e da permeabilidade absoluta. Embora tal tipo de heterogeneidade induza um escoamento tridimensional no interior da amostra, será resolvido apenas o escoamento na seção longitudinal vertical central como uma aproximação bidimensional ao escoamento real nessa seção. Os dados físicos relevantes do problema estão indicados na tabela 8.1. Ambas as fases serão consideradas incompressíveis. Além disso, serão consideradas neste problema as curvas de permeabilidade relativa definidas por

$$\begin{cases} k_{rI} = 0,24\,\hat{s}^4 \\ k_{rD} = 0,79\,(1-\hat{s}\,)^{1,8} \end{cases}$$
(8.8)

e uma curva de pressão capilar definida pela equação

$$P_{\rm C} = 8,0 \left(1 - \hat{s}\right)^3 \tag{8.9}$$

na qual a pressão capilar está dada em kPa.

As distribuições espaciais de permeabilidade absoluta e porosidade consideradas são mostradas na figura 8.8. Estas distribuições foram obtidas por Zuluaga et al. [48], mediante interpretação de imagens adquiridas por ressonância nuclear magnética⁷. Deve ser lembrado que para o cálculo dos coeficientes das equações discretizadas são requeridos valores da porosidade nos nós e da permeabilidade absoluta nos pontos de integração. A opção implementada para determinar o valor dessas grandezas nessas localizações foi a de sobrepor a malha de simulação aos mapas que definem as distribuições espaciais e para cada nó ou ponto de integração é considerado então o valor da célula do mapa correspondente sobre o qual o nó ou ponto de integração resulta localizado. No caso que o nó ou ponto de integração

Comprimento da amostra	т	0,013
Diâmetro da amostra	т	0,06
Viscosidade da fase injetada	$Pa \cdot s$	0,001
Viscosidade da fase deslocada	$Pa \cdot s$	0,01
Limite inferior do intervalo da saturação	-	0,12
Limite superior do intervalo da saturação	-	0,83
Saturação inicial (uniforme)	-	0,12
Vazão injetada	m^3/s	$8,333 \cdot 10^{-9}$

 Tabela 8.1
 Dados físicos do problema de deslocamento em uma amostra heterogênea.

⁷ As imagens digitalizadas das distribuições de propriedades publicadas em [48] foram aproximadas mediante os mapas de 45 x 20 células mostrados na figura 8.8 e utilizados nas simulações.



Figura 8.8 Mapas que definem a distribuição espacial de **(a)** permeabilidade absoluta e **(b)** porosidade, em uma seção longitudinal da amostra de rocha.

coincida com a linha divisória entre duas células do mapa é considerada média aritmética dos valores dessas células.

Em primeiro lugar foram obtidas simulações em malhas cartesianas uniformes com distinto número de elementos, para verificar a influência do refinamento de malha. A figura 8.9 apresenta os campos de saturação para três tempos e quatro malhas diferentes, sendo a mais grosseira de 22 x 10 elementos e a mais refinada de 180 x 80 elementos. Observa-se um comportamento semelhante ao já notado no caso unidimensional com pressão capilar, ou seja, pouco significativa variação da solução ao refinar a malha, exceto na região vizinha à fronteira de saída. Conforme se pode comprovar neste exemplo e no exemplo unidimensional, quando a influência da pressão capilar é significativa no deslocamento, soluções numéricas bastante precisas podem ser obtidas em malhas relativamente pouco refinadas.

As simulações anteriores foram repetidas desconsiderando a pressão capilar na modelagem. Os resultados para este caso são apresentados na figura 8.10, na qual são comparados os campos de saturação obtidos para cinco malhas diferentes. Diferentemente do caso com pressão capilar, agora nas malhas mais finas podem ser observados detalhes do escoamento que não conseguem ser capturados nas malhas grosseiras. É interessante observar que a solução na malha mais grosseira, a de 22 x 10 elementos, é similar às soluções que tinham sido obtidas com pressão capilar, logo, a difusão numérica nesta malha deve ser de uma magnitude semelhante



Figura 8.9 Campos de saturação para três tempos obtidos em malhas cartesianas de **(a)** 22×10 , **(b)** 45×20 , **(c)** 90×40 e **(d)** 180×80 elementos.

à difusão física que a pressão capilar produzia naquele caso. A figura 8.10 permite evidenciar qualitativamente que a difusão numérica é eliminada gradualmente ao refinar a malha. Certamente a simulação de processos de deslocamento sem pressão capilar, ou com influência mínima desta grandeza, é a situação mais desafiadora para uma formulação numérica, principalmente pela presença de descontinuidades ou quase-descontinuidades nas soluções. Por esta razão, de aqui em diante serão considerados preferencialmente exemplos de deslocamento nos quais a influência da pressão capilar é desconsiderada, a fim da avaliar o desempenho da formulação nas situações mais adversas.

Apesar de que o tipo de malha mais apropriado para um domínio retangular seja o cartesiano, como uma primeira tentativa de avaliar a qualidade das soluções



Figura 8.10 Campos de saturação para problema de deslocamento sem pressão capilar, obtidos em malhas de (a) 22×10 , (b) 45×20 , (c) 90×40 , (d) 180×80 e (e) 270×120 elementos.

fornecidas pela formulação quando malhas irregulares são empregadas, o problema anterior foi resolvido considerando malhas não-estruturadas de quadriláteros. Para certificar que nas comparações entre soluções em malhas cartesianas e em malhas não-estruturadas o grau de refinamento fosse similar, foram consideradas malhas não-estruturadas com aproximadamente a mesma quantidade de elementos e nós que as malhas cartesianas anteriormente usadas. A figura 8.11(a) mostra uma das malhas não-estruturadas consideradas e junto a ela, na figura 8.11(b), a malha cartesiana com grau de refinamento similar.



Figura 8.11 (a) Malha não-estruturada de 888 elementos (949 nós) e **(b)** malha cartesiana de 45 x 20 elementos (966 nós).

Nas figuras 8.12(a) e 8.12(b) são apresentados os campos de saturação obtidos nas malhas mostradas na figura 8.11. Além desses resultados, nas figuras 8.12(c) e 8.12(d) são apresentados campos correspondentes a duas malhas mais refinadas, uma não-estruturada de 8079 elementos (e 8261 nós) e uma cartesiana de 135 x 60 elementos (e 8296 nós). Para que as comparações entre resultados fossem pertinentes, cuidou-se que a quantidade de nós fosse similar entre os pares de malhas comparadas, para garantir a existência de um grau de refinamento equiparável. Como se pode observar, o grau de proximidade entre as soluções com mesmo grau de refinamento é notável. Apenas levemente maior difusão numérica pode-se notar nas soluções correspondentes às malhas não-estruturadas, entretanto, o formato e a posição da frente de fluido injetado é basicamente a mesma nos dois tipos de malha. É importante mencionar que em todos os casos foi empregado o esquema de interpolação *upwind* de coeficientes positivos descrito na seção 7.3, para aproximar o termo advectivo da equação da saturação. Para esse esquema foi utilizada a seguinte relação entre o fator de interpolação e a razão de fluxos de massa⁸

$$\Lambda_i = \frac{\omega_i}{1 + \omega_i} \tag{8.10}$$

É ilustrativo repetir a comparação das soluções obtidas em malhas cartesianas e em malha não-estruturadas, mas agora empregando o esquema de interpolação

⁸ Esta escolha será justificada na seção 8.5, quando for estudada a influência do esquema de interpolação dos termos advectivos no efeito de orientação de malha.



Figura 8.12 Comparação dos campos de saturação obtidos em malhas cartesianas de (a)
45 x 20 elementos e (c) 135 x 60 elementos, e em malhas não-estruturadas de
(b) 880 elementos e (d) 8079 elementos.

upwind unidimensional⁹ para aproximar as grandezas dependentes da saturação nos pontos de integração, tanto na equação da pressão quanto na equação da saturação. Como se verá neste exemplo e posteriores, este enfoque, empregado na maioria das formulações numéricas convencionais, introduz uma dependência anômala da orientação das linhas da malha nas soluções numéricas obtidas. Na figura 8.13 são comparadas as soluções obtidas considerando esse enfoque, nas mesmas malhas anteriormente empregadas. Apesar de que a discrepância entre os campos de saturação não é excessiva, pode-se observar que nas malhas cartesianas a frente de fluido avança mais rapidamente na direção axial, enquanto que nas malhas não-

⁹ Definido na seção 7.2.

estruturadas existe maior avanço na direção transversal. Uma vez que a interpolação *upwind* unidimensional é realizada sempre com os nós sobre um determinado lado de um elemento, quando a direção local do escoamento coincide com tal lado o avanço da frente nessa direção é favorecido pelo esquema de interpolação. Assim, como na malha cartesiana todos os elementos possuem lados alinhados com a direção axial e o escoamento em muitas regiões do domínio também é axial, o avanço da frente nessa direção é maior. Já nas malhas não-estruturadas existem elementos com lados oblíquos que favorecem o avanço da frente na direção transversal. Este fenômeno será estudado de forma mais detalhada na seção 8.5.



Figura 8.13 Comparação dos campos de saturação obtidos com interpolação *upwind* unidimensional, em malhas cartesianas de **(a)** 45×20 elementos e **(c)** 135×60 elementos, e em malhas não-estruturadas de **(b)** 880 elementos e **(d)** 8079 elementos.

8.3.2 Deslocamento gás-óleo em uma amostra de rocha

Com o intuito de avaliar algumas características da modelagem não consideradas em exemplos anteriores, considerar-se-á agora um problema de deslocamento gás-óleo em uma amostra, em que a fase gás é modelada como uma fase compressível. Além disso, serão especificadas condições de pressão prescrita tanto na face de entrada quanto na face de saída. Isto implica que a queda de pressão ao longo da amostra manter-se-á com um valor fixo e, conseqüentemente, a quantidade de gás injetada será a grandeza que varia com o tempo. Os dados físicos considerados para o problema estão resumidos na tabela 8.2. Empregou-se uma diferença de pressão entre a entrada e a saída de magnitude reduzida a fim de tornar o valor da componente axial da velocidade equiparável ao valor da componente da velocidade originada na ação da gravidade e dessa forma observar a influência desta sobre os campos de saturação. Para tanto, foi considerado como domínio de solução o plano vertical médio de uma amostra de rocha, no qual a permeabilidade absoluta varia de acordo com o mapa mostrado na figura 8.14(a). A variação espacial da porosidade foi desprezada e, conseqüentemente, foi usado um valor médio constante para toda a amostra. Uma curva fictícia da variação da densidade em relação à pressão foi considerada, a qual é mostrada na figura 8.14(b).

Comprimento da amostra	т	0,012
Diâmetro da amostra	т	0,04
Porosidade (uniforme)	-	0,179
Viscosidade da fase injetada (gás)	$Pa \cdot s$	$1,77 \cdot 10^{-5}$
Viscosidade da fase deslocada (óleo)	$Pa \cdot s$	0,00135
Densidade da fase deslocada (óleo)	kg/m^3	850
Limite inferior do intervalo da saturação	-	0
Limite superior do intervalo da saturação	-	0,71
Saturação inicial	-	0
Pressão inicial	kPa	101
Pressão na face de entrada	kPa	116
Pressão na face de saída	kPa	101

Tabela 8.2 Dados físicos do problema de deslocamento gás-óleo.



Figura 8.14 (a) Mapa de permeabilidade absoluta e (b) curva de densidade do gás.

As curvas de permeabilidade relativa e a curva de pressão capilar utilizadas para a simulação estão definidas, respectivamente, pelas relações

$$\begin{cases} k_{rI} = 0,47 \,\hat{s}^{3,5} \\ k_{rD} = (1-\hat{s})^4 \end{cases}$$
(8.11)

$$P_{\rm C} = (1 - \hat{s})^4 \tag{8.12}$$

onde a pressão capilar está dada em kPa.

Na figura 8.15 são mostrados alguns campos de saturação obtidos para três malhas cartesianas uniformes com distinto grau de refinamento: de 30 x 10, de 60 x 20 e de 120 x 40 elementos. Quanto à influência de tal refinamento nas soluções, neste caso não existe significativa variação no formato da frente de fluido injetado ao refinar a malha, contudo, notoriamente existe um adiantamento desta frente a medida que a malha é refinada. Contudo, este comportamento influencia pouco significativamente as curvas de variação temporal da vazão de gás injetado e do volume de óleo produzido, mostradas nas figuras 8.16(a) e 8.16(b), respectivamente. Como se pode observar, as curvas correspondentes a diferentes malhas encontram-se muito próximas entre si.

Provavelmente a característica de mais destaque neste problema seja a possibilidade de observar a forma em que a gravidade pode influenciar a distribuição de fases no interior da amostra. Conforme se pode notar nos campos de saturação da



Figura 8.15 Comparação dos campos de saturação obtidos para deslocamento gás-óleo em malhas cartesianas de (a) 30 x 10 elementos, (b) 60 x 20 elementos e (c) 120 x 40 elementos.

figura 8.15, existe uma tendência da fase de menor densidade, a fase gás, de fluir pela parte superior do domínio, enquanto que a fase mais densa, a fase óleo, de ficar na parte inferior. Este fenômeno é causado pela ação da gravidade, a qual gera uma



Figura 8.16 Curvas de **(a)** vazão de gás injetada versus tempo e **(b)** volume de óleo produzido versus tempo, para o problema de deslocamento gás-óleo.

113

componente de velocidade na direção vertical¹⁰ que ocasiona uma migração gradual da fase menos densa à parte superior do domínio. Essa é a causa da inclinação gradual da frente, observada nos campos de saturação.

8.3.3 Deslocamento em um reservatório de petróleo

Até agora foram apresentados exemplos de aplicação com geometrias extremamente simples, nos quais não foi possível avaliar um dos maiores potenciais da formulação numérica desenvolvida, isto é, a flexibilidade geométrica que confere o uso de malhas não-estruturadas. Nesta seção será apresentado um exemplo de simulação de um processo de recuperação secundária em um reservatório de petróleo. A malha considerada no exemplo, a qual corresponde à discretização da geometria de um reservatório fictício, está representada na figura 8.17. Esta malha, formada por 2882 elementos e 2740 nós, foi gerada em um aplicativo comercial. Um poço injetor pelo qual injeta-se água, além de dois poços produtores por onde o óleo do reservatório é recuperado, são considerados no domínio de solução, além de uma



Figura 8.17 Malha não-estruturada com refinamento localizado, empregada para simular um processo de deslocamento em um reservatório.

¹⁰ Veja-se a equação (4.27)

falha geológica foi considerado refinamento localizado na vizinhança dos poços, a fim de resolver melhor o escoamento nessas regiões, as quais são geralmente as de maior interesse para análises posteriores. A falha geológica foi representada no modelo numérico mediante duas fronteiras internas impermeáveis coincidentes. Foi assumido um meio poroso homogêneo, com propriedades uniformes em toda a extensão do reservatório, assim como fases água e óleo incompressíveis. A pressão capilar foi desconsiderada na simulação. Os valores considerados para as propriedades do meio e os fluidos, assim como outras condições do problema, encontram-se detalhados na tabela 8.3.

Porosidade	-	0,15
Permeabilidade absoluta	m^2	$4,93 \cdot 10^{-12}$
Viscosidade da fase injetada (água)	$Pa \cdot s$	0,001
Viscosidade da fase deslocada (óleo)	$Pa \cdot s$	0,01
Limite inferior do intervalo da saturação	-	0,09
Limite superior do intervalo da saturação	-	0,76
Saturação inicial	-	0,09
Vazão de água no poço injetor	m^3/s	$1,16 \cdot 10^{-3}$

Tabela 8.3 Dados físicos do problema de simulação de reservatório.

A evolução do campo de saturação de água ao longo do tempo, obtida na simulação do processo de deslocamento do óleo pela água, pode ser observada na figura 8.18. Embora a malha empregada possua uma quantidade relativamente reduzida de elementos, o fato de ter-se concentrado elementos de menor tamanho na vizinhança dos poços permitiu obter campos com alta resolução nessas regiões. Uma solução equivalente em uma malha com esse grau de refinamento em toda a extensão do domínio certamente teria demandado um tempo de computação expressivamente maior, pelo fato que o número de nós dessa malha seria muito maior, e conseqüentemente, os sistemas de equações a serem resolvidos serem também maiores. Como se verá na seção seguinte, o tempo de computação aumenta proporcionalmente a uma certa potência do número de nós da malha, razão pela qual um aumento



importante na quantidade de nós pode acarretar um aumento inadmissível no tempo computacional requerido para obter uma simulação.

Figura 8.18 Evolução no tempo dos campos de saturação na simulação de reservatório.

Usualmente gradientes de pressão significativamente pronunciados se produzem na vizinhança dos poços em um reservatório. Essa característica foi adequadamente capturada pela simulação, conforme se pode observar na figura 8.19, a qual mostra o campo de pressão em um instante inicial do processo de deslocamento. Além disso, a solução numérica apresenta uma descontinuidade nitidamente resolvida coincidente com a posição da falha geológica. Isto foi possível graças à estratégia de representação da falha mediante fronteiras internas impermeáveis sobrepostas. Devido a isso, a malha possuía nós praticamente coincidentes sobre a falha, uns armazenando valores do campo de um lado da descontinuidade e outros armazenando valores do outro lado. Como é obvio, estratégias deste tipo apenas podem ser implementadas eficientemente com malhas não-estruturadas.



Figura 8.19 Campo de pressão, para o tempo 0,05 VPI.

8.4 Desempenho do algoritmo de solução

O objetivo desta seção é estudar o desempenho do algoritmo de solução, em relação ao tempo de computação ao aumentar o nível de refinamento da malha computacional. Na literatura menciona-se que os algoritmos seqüenciais, e o algoritmo IMPES em particular, tornam-se pouco competentes para simular processos de deslocamento em malhas refinadas [8, 32], pela restrição de estabilidade que obriga a reduzir o passo de tempo proporcionalmente à redução do tamanho característico dos elementos. Isto pode ser evidenciado observando a figura 8.20, que mostra o tempo de computação empregado para obter as simulações do processo de deslocamento em uma amostra heterogênea, apresentadas anteriormente na figura 8.10¹¹. Nesse caso foi empregado o algoritmo convencional descrito na seção 6.2, na qual um bloco de solução envolve a solução seqüencial do sistema linear da pressão e do sistema linear da saturação.

¹¹ Os tempos de computação correspondem a simulações obtidas para o intervalo de tempo de 0 até 1,75 VPI.



Figura 8.20 Tempos de computação para as simulações do deslocamento em uma amostra heterogênea (correspondentes às soluções da figura 8.10).

Observando a figura 8.20, resulta evidente que o esforço computacional cresce em forma proporcional a uma potência do número de nós da malha (aproximadamente proporcional ao quadrado do número de nós, como será mostrado mas adiante). Em realidade o considerável aumento no tempo computacional ao refinar a malha tem duas causas. Por uma parte está a diminuição do passo de tempo estável já comentada, a qual obriga a determinar soluções numéricas em um maior número de níveis de tempo, aumentando proporcionalmente a quantidade de cálculos requeridos para simular o escoamento até um determinado nível de tempo. Mas também tem importante influência o maior esforço computacional requerido para resolver os sistemas lineares, pelo maior número de incógnitas. Isto pode chegar a ser crítico no caso do sistema linear para a pressão, uma vez que este sistema provém da discretização de uma equação elíptica. Assim por exemplo, para a obtenção da simulação correspondente à malha mais refinada no exemplo acima mencionado, aproximadamente 95% do tempo de computação foi consumido em resolver sucessivamente o sistema linear da pressão e apenas 5% nas restantes operações. Tendo isso em consideração, foi proposta na seção 6.3 uma estratégia de aceleração do algoritmo de solução, cuja motivação principal é a diminuição do número de vezes que o sistema linear da pressão deve ser resolvido ao longo de uma simulação. Segundo descrito anteriormente, tal estratégia consiste em resolver o sistema linear da saturação um certo número de vezes mantendo fixo o campo de velocidade efetiva determinado após resolver o sistema linear da pressão em um dado nível de tempo.

Para avaliar a melhoria no desempenho do algoritmo de solução quando essa estratégia é empregada, foram obtidas simulações variando a razão entre o passo de tempo para equação da pressão e o passo de tempo para equação da saturação. Essa razão determina o número de vezes que o sistema linear da saturação é resolvido após resolver o sistema linear da pressão. Foi considerado o problema do deslocamento em uma amostra heterogênea descrito na seção 8.3.1, empregando uma malha regular de 135 x 60 elementos. A figura 8.21 mostra a redução do tempo de computação ao aumentar a razão de passos de tempo. Nessa figura os tempos de computação estão representados como uma porcentagem do tempo de computação registrado empregando o algoritmo convencional¹². Segundo pode-se observar, reduções de tempo de computação expressivas podem ser obtidas empregando a estratégia de aceleração. Embora este exemplo corresponda a um caso sem pressão capilar, o comportamento da redução do tempo de computação mostrado na figura 8.21 é representativo, pois reduções semelhantes têm sido obtidas em outros casos incluindo pressão capilar e em malhas não-estruturadas.



Figura 8.21 Porcentagem de redução do tempo de computação em função da razão de passos de tempo, para uma malha de 135 x 60 elementos.

¹² Note-se que o algoritmo convencional é recuperado quando a razão de passos de tempo é igual a um.

É importante determinar, mesmo que de forma qualitativa, se a redução na freqüência de atualização do campo de velocidade efetiva acarreta uma deterioração significativa das soluções numéricas. A figura 8.22 é ilustrativa a esse respeito, pois permite comparar os campos de saturação correspondentes a soluções obtidas com diferentes valores da razão de passos de tempo¹³. Conforme se pode observar, não existe diferença apreciável entre os campos de saturação ao aumentar a razão de passos de tempo, exceto talvez para os valores mais elevados. Os campos de saturação para os valores 20 e 40 mostram uma leve distorção na forma da frente, bem como um maior nível de difusão numérica, pois alguns detalhes da solução aparecem notoriamente suavizados. Contudo, a diferença entre a solução de referência, isto é, a solução com razão de passos de tempo igual a um, e a solução para uma razão igual a 40 é menor que a diferença entre as soluções em duas malhas com diferente grau de refinamento. Para evidenciar isso basta comparar a figura 8.22 com a figura 8.10. Esse fato sugere que o erro numérico introduzido pela estratégia de aceleração do algoritmo de solução é menor que o erro de discretização associado às aproximações espaciais consideradas na formulação.

Com base nos resultados apresentados nas figuras 8.21 e 8.22 é possível concluir que o melhor compromisso entre redução do tempo de computação e preservação da qualidade da solução é obtido, para esse exemplo específico, com uma razão de passos de tempo em torno de 15. Para tal valor, a redução no tempo de computação alcança aproximadamente 91%. Para valores maiores da razão de passos de tempo, a redução adicional no tempo de computação é pouco significativa, enquanto que a diminuição na qualidade da solução torna-se mais evidente. Infelizmente, o equilíbrio entre esses dois efeitos não é mantido quando o mesmo valor da razão de passos de tempo é empregado em malhas com diferente grau de refinamento. Em simulações adicionais não apresentadas aqui, verificou-se que para malhas mais refinadas à redução no tempo de computação não é tão significativa, enquanto que para malhas mais grosseiras a diminuição na qualidade da solução numérica é muito mais notória.

¹³ Cada conjunto de gráficos na figura 8.22 corresponde a um ponto no gráfico de tempos de computação na figura 8.21.



Figura 8.22 Campos de saturação obtidos em uma malha de 135 x 60 elementos e valores da razão de passos de tempo de **(a)** 1, **(b)** 5, **(c)** 10, **(d)** 15, **(e)** 20 e **(f)** 40.

Mediante experimentos numéricos foi determinada uma forma prática para obter um bom desempenho independentemente do nível de refinamento da malha. Isso pode ser conseguido mantendo fixo o valor do passo de tempo usado para a equação da pressão ao invés do valor da razão de passos de tempo. Uma nova seqüência de soluções em malhas com diferente grau de refinamento foi obtida

empregando esta vez a estratégia de aceleração e mantendo fixo o valor do passo de tempo da equação da pressão em 0,01 VPI. Este valor corresponde ao valor ótimo da razão de passos de tempo determinado anteriormente para a solução na malha de 135 x 60 elementos. Os campos de saturação correspondentes a essa nova seqüência de soluções são mostrados na figura 8.23. Se esta figura for comparada com a figura 8.10, virtualmente não serão encontradas diferenças significativas entre soluções para malhas correspondentes. Mais notável ainda é a comparação entre os tempos de



Figura 8.23 Campos de saturação obtidos com o mesmo passo de tempo de 0,01 VPI para a equação da pressão, em malhas de **(a)** 22×10 , **(b)** 45×20 , **(c)** 90×40 , **(d)** 180×80 e **(e)** 270×120 elementos.

computação das novas soluções e os tempos de computação correspondentes às soluções com o algoritmo convencional. Esta comparação é realizada na figura 8.24, em um gráfico em escala logarítmica. Embora nesta escala as diferenças não pareçam significativas a primeira vista, para a solução na malha mais refinada o tempo de computação diminuiu de 27850 segundos para 1115 segundos, o qual significa uma redução de aproximadamente 96%.

Na figura 8.24 pode-se observar que as representações da relação entre o tempo de computação e a quantidade de nós da malha, para os dois casos considerados, correspondem aproximadamente a duas retas com diferentes inclinações no gráfico em escala logarítmica. É possível mostrar que quando duas variáveis estão relacionadas mediante uma lei de potência o gráfico da relação funcional em escala logarítmica corresponde precisamente a uma reta, cuja inclinação corresponde ao expoente da relação funcional. Para o problema de deslocamento estudado, determinou-se que uma reta com inclinação 2,05:1 representa aproximadamente a relação funcional entre o tempo de computação e o número de nós, para o caso em que não é empregada a estratégia de aceleração. Logo, para esse caso o tempo de



Figura 8.24 Comparação dos tempos de computação correspondentes ao algoritmo convencional e ao algoritmo com aceleração.

computação seria proporcional ao número de nós elevado ao expoente 2,05. Já para o caso em que foi empregado o esquema de aceleração, uma reta com inclinação 1,60:1 representa aproximadamente a relação entre tempo de computação e número de nós, conforme pode ser observado na figura 8.24. Isto significa que a relação entre o esforço computacional e o tamanho da malha diminuiu desde uma potência de ordem 2,05 até uma potência de ordem 1,60, graças ao emprego da estratégia de aceleração. Em outros problemas resolvidos com condições de modelagem e malhas diferentes foi observado um comportamento similar.

Mesmo que a estratégia de redução da freqüência de resolução do sistema linear para a pressão diminua significativamente o tempo de computação para malhas refinadas, a solução desse sistema de equações continua sendo a operação que consome maior tempo dentre todas as operações realizadas no algoritmo de solução. Assim por exemplo, na malha mais refinada considerada no caso estudado, ainda 85% do tempo total de computação correspondeu à solução do sistema linear da pressão. Isto indica que uma redução ainda mais expressiva no tempo de computação poderia ser obtida para malhas refinadas se um método *multigrid* fosse empregado na solução dos sistemas lineares de equações. Para esse tipo de métodos o esforço computacional aumenta em forma aproximadamente linear com o tamanho dos sistemas de equações [16]. Logo, se um método dessa natureza fosse empregado, o expoente da relação entre tempo de computação e o número de nós da malha

8.5 Efeito de orientação de malha

Conforme já explicado anteriormente, o efeito de orientação de malha é uma das características mais indesejáveis das formulações numéricas para simulação de processos de deslocamento em meios porosos. Todas essas formulações manifestam em maior o menor grau este fenômeno e diversas estratégias têm sido propostas na literatura para reduzi-lo ou eliminá-lo [7, 45, 46]. Contudo, conforme também é relatado na literatura, em situações adversas como as que surgem quando a mobilidade da fase injetada é muito maior que a mobilidade da fase deslocada e os campos de saturação apresentam fortes descontinuidades, nenhuma das estratégias

tem sucesso na redução do efeito de orientação de malha, especialmente quando malhas relativamente refinadas são empregadas [1, 6].

O problema padrão para o estudo do efeito de orientação de malha é o denominado problema *five-spot*. Neste problema considera-se um arranjo repetitivo de poços injetores e produtores em um reservatório de petróleo. Neste arranjo, todo poço injetor encontra-se rodeado simetricamente por quatro poços produtores e vice-versa. Na figura 8.25 está ilustrado esquematicamente este arranjo junto com duas malhas comumente consideradas para estudar o efeito de orientação de malha. Devido à simetria e à periodicidade do arranjo de poços, para simular o processo de deslocamento do óleo pela água pode-se considerar como domínio de solução apenas a porção quadrada correspondente à quarta parte da configuração *five-spot*. Este domínio pode ser discretizado mediante uma malha cartesiana, a qual é denominada comumente malha *diagonal*, pelo fato do escoamento entre o poço injetor o poço produtor estar alinhado com uma das diagonais do domínio. Também pode ser considerado como domínio a porção quadrada com quatro poços nos vértices, situada a 45° do domínio da malha diagonal. A malha cartesiana usada para discretizar este domínio é denominada malha *paralela* porque o escoamento desde



Figura 8.25 Arranjo de poços *five-spot* e malhas cartesianas utilizadas para simular o processo de deslocamento.

um poço injetor até um poço produtor é sempre paralelo às linhas desta malha. Idealmente as simulações obtidas em ambas as malhas deveriam ser idênticas na porção comum, contudo freqüentemente esta situação está longe de acontecer precisamente pela influência do efeito de orientação de malha.

Nesta seção será estudado o efeito de orientação de malha na formulação desenvolvida, especialmente em relação à influência do esquema de interpolação usado para aproximar os termos advectivos na equação da saturação. Para tanto será considerado o problema *five-spot* acima descrito, nas situações mais adversas possíveis. Tais situações correspondem ao deslocamento denominado *tipo pistão* com valores altos da razão da mobilidade da fase injetada à mobilidade da fase deslocada. No deslocamento tipo pistão a descontinuidade engloba todo o intervalo da saturação, resultando uma configuração em que a frente de água avança deslocando o óleo como se fosse um pistão. Embora não seja uma configuração realística do deslocamento em um reservatório de petróleo, vários autores têm apontado que a simulação deste tipo de deslocamento é altamente sensível ao efeito de orientação de malha.

Uma curva de fluxo fracionário que dá lugar ao deslocamento tipo pistão [46] é a curva definida pela expressão

$$F_I = \hat{s}_I^2 \tag{8.13}$$

em função da qual, sob certas condições, as curvas de permeabilidade relativa estão dadas pelas relações

$$\begin{cases} k_{rI} = \frac{F_{I}}{M \cdot (1 - F_{I}) + F_{I}} \\ k_{rD} = 1 - k_{rI} \end{cases}$$
(8.14)

onde *M* é definida como a razão de viscosidades

$$M = \frac{\mu_D}{\mu_I} \tag{8.15}$$

A maioria das simulações apresentadas nesta seção corresponde a deslocamentos tipo-pistão, com curvas de permeabilidade relativa dadas pelas equações (8.13) e (8.14), as quais estão ilustradas na figura 8.26. Uma vez que o objetivo aqui é considerar as situações mais adversas possíveis, a influência da pressão capilar será

desconsiderada no modelo de deslocamento. A fim de facilitar a comparação das soluções numéricas em diferentes malhas e poder evidenciar a existência ou não do efeito de orientação de malha nas simulações, gráficos de isolinhas do campo de saturação correspondentes a diferentes soluções serão superpostos e apresentados em um mesmo gráfico. A forma de construção dos gráficos de isolinhas superpostos que serão apresentados nesta seção é ilustrada esquematicamente na figura 8.27. Para cada solução serão representadas dez isolinhas, correspondentes a dez valores igualmente espaçados no intervalo de definição da saturação.



Figura 8.26 (a) Curva de fluxo fracionário para deslocamento tipo pistão e(b) curvas de permeabilidade relativa para M = 10.

Em primeiro lugar será avaliado o efeito de orientação de malha associado ao uso do esquema de interpolação *upwind* unidimensional. Como mencionado na seção 7.2, este esquema é equivalente ao usado nas metodologias convencionais de diferenças finitas e volumes finitos. Da mesma forma que nesses métodos, moléculas computacionais envolvendo apenas cinco nós são obtidas no EbFVM quando malhas estruturadas são empregadas. A figura 8.28 mostra comparações entre isolinhas do campo de saturação para quatro tempos e quatros graus de refinamento nas malhas. Essas soluções correspondem a um valor da razão de viscosidades M = 10. A quantidade de elementos em cada malha foi escolhida de modo que o tamanho dos elementos nas malhas diagonal e paralela fosse aproximadamente o mesmo, a fim de



Figura 8.27 Esquema da construção dos gráficos para a comparação das soluções obtidas nas malhas diagonal e paralela.

conseguir que o erro de discretização tenha magnitude semelhante nas soluções para ambas as malhas. Neste caso o esquema *upwind* unidimensional foi usado para aproximar valores nos pontos de integração tanto das mobilidades para a equação da pressão quanto do fluxo fracionário para o termo advectivo na equação da saturação.

As soluções nas duas malhas mais grosseiras manifestam o típico efeito de orientação de malha, isto é, a descontinuidade avança preferencialmente naquelas regiões onde a direção do escoamento coincide com a direção das linhas da malha. Isto acontece porque a interpolação *upwind* unidimensional sempre é realizada na direção paralela aos lados dos elementos, os quais formam as linhas da malha. A malha paralela possui uma linha que une os poços injetor e produtor e por isso a frente avança mais rapidamente nessa direção e chega muito antes ao poço produtor em relação à solução na malha diagonal. As soluções numéricas mostradas na figura 8.28 confirmam um fato apontado por diversos autores [1, 6], que o efeito de orientação de malha é um fenômeno que se acentua a medida que as malhas são refinadas. Como se pode observar, nas simulações nas malhas mais refinadas a descontinuidade desenvolve formas completamente não-realísticas. Aparentemente,

a difusão numérica presente nas soluções em malhas grosseiras atenua parcialmente o efeito de orientação de malha. A medida que a difusão numérica é removida mediante o refinamento das malhas, algum tipo de instabilidade do esquema numérico se manifesta cada vez mais intensamente, dando lugar a soluções com formatos cada vez mais estranhos, tais como os mostrados nas figuras 8.28(c) e 8.28(d).



Figura 8.28 Comparação das isolinhas do campo de saturação em malhas diagonal (D) e paralela (P) de **(a)** 10×10 (D) e 14×14 (P), **(b)** 20×20 (D) e 28×28 (P), **(c)** 40×40 (D) e 56×56 (P) e **(d)** 80×80 (D) e 112×112 (P) elementos. Soluções utilizando interpolação *upwind* unidimensional.

No final da seção 7.2 foi mencionada a possibilidade de não empregar a interpolação upwind para aproximar as mobilidades nos pontos de integração para os coeficientes da equação da pressão, como é realizado nas formulações convencionais. A conexão desta prática com o efeito de orientação de malha foi estudada, confrontando as soluções obtidas dessa forma com as soluções obtidas empregando interpolação bilinear na aproximação das mobilidades para a equação da pressão. Uma comparação das soluções obtidas com essas duas práticas é mostrada na figura 8.29, para malhas diagonal e paralela relativamente grosseiras. Conforme se pode observar, a discrepância entre as soluções na malha diagonal e a malha paralela é significativamente menor com a segunda prática, ou seja, empregando interpolação bilinear na equação da pressão. É importante mencionar que nenhum efeito colateral adverso resulta desta forma de aproximar as mobilidades na equação da pressão, pois em nenhum caso foi notada a presença de oscilações nos campos de saturação e pressão ou valores de saturação fora do intervalo de definição desta variável. Por esta razão tal prática foi adotada como procedimento padrão para a obtenção de todos os demais resultados apresentados neste trabalho.



Figura 8.29 Comparação das isolinhas do campo de saturação nas malhas diagonal (20 x 20 elementos) e paralela (28 x 28 elementos), empregando interpolação *upwind* unidimensional
(a) nas equações de pressão e saturação e (b) apenas na equação da saturação.

O passo seguinte no estudo do efeito de orientação de malha será analisar a influência do tipo de interpolação *upwind* utilizado para aproximar o fluxo fracionário nos termos advectivos da equação da saturação. Conforme se viu na seção 7.3, pode-se definir uma família de esquemas de interpolação *upwind* que geram moléculas computacionais com coeficientes positivos e, portanto, originam soluções numéricas livres de oscilações espúrias. Cada função de interpolação nesta família é definida por uma relação funcional $\Lambda_i = \Lambda_i(\omega_i)$, onde Λ_i é o fator de interpolação do esquema, definido na equação (7.3), e ω_i é a razão entre o fluxo de massa na face à qual pertence o ponto de integração *i* e o fluxo de massa na face a montante. Além da relação funcional do esquema MWUS, que corresponde a um dos casos limites da família de esquemas *upwind* de coeficientes positivos, serão consideradas as seguintes relações funcionais

$$\Lambda_i = \frac{\omega_i}{1 + \omega_i} \tag{8.16}$$

$$\Lambda_i = \frac{\omega_i^2}{1 + \omega_i^2} \tag{8.17}$$

$$\Lambda_i = \frac{2}{\pi} \arctan \omega_i \tag{8.18}$$

Conforme se pode comprovar na figura 8.30, as curvas definidas pelas expressões anteriores encontram-se localizadas na região que foi denominada região de positividade, a qual está limitada pela reta $\Lambda_i = 0$, que representa ao esquema *upwind* unidimensional, e pelas retas definidas pela equação (7.4), as quais caracterizam o esquema MWUS.

A figura 8.31 apresenta as soluções obtidas empregando as relações funcionais da figura 8.30 na aproximação dos termos advectivos da equação da saturação. Novamente foi considerado um deslocamento com uma razão de viscosidades M = 10 e malhas relativamente grosseiras, inicialmente. As soluções mostradas na figura 8.31 permitem evidenciar quão importante é a influência do esquema de interpolação empregado no efeito de orientação de malha. Enquanto que as soluções correspondentes ao esquema *upwind* unidimensional mostram a frente na malha



Figura 8.30 Curvas $\Lambda_i = \Lambda_i(\omega_i)$ consideradas para o esquema *upwind* de coeficientes positivos.

paralela adiantada em relação à frente na malha diagonal, nas soluções empregando o esquema MWUS observa-se o fenômeno contrário, ou seja, a frente na malha diagonal adiantada em relação à frente na malha paralela. Isto evidencia que com o uso deste esquema a descontinuidade avança mais rapidamente nas regiões onde a direção local do escoamento coincide com alguma das diagonais dos elementos da malha, o qual é um efeito contrário ao observado com o uso do esquema unidimensional. Contudo, é destacável que com o esquema MWUS, embora exista um adiantamento da frente em uma malha em relação à frente na outra, a discrepância entre as soluções é notoriamente menor que com o esquema unidimensional.

Melhorias ainda mais significativas foram obtidas mediante o uso de curvas $\Lambda_i = \Lambda_i(\omega_i)$ para o fator de interpolação, conforme mostram as figuras 8.31(c), 8.31(d) e 8.31(e), correspondentes às soluções obtidas utilizando as curvas da figura 8.30. Aparentemente curvas com esse formato produzem uma adequada ponderação da influência dos valores nodais sobre o valor do fluxo fracionário em um ponto de integração, de acordo com a direção local do escoamento. Isto impede que exista uma direção preferencial para o avanço da frente que seja influenciada espuriamente pela orientação das linhas da malha, pelo menos para malhas com nível de refinamento
semelhante às das malhas empregadas no exemplo. Embora o grau de concordância entre soluções nas malhas diagonal e paralela seja semelhante para as curvas



Figura 8.31 Comparação das isolinhas do campo de saturação nas malhas diagonal (20 x 20 elementos) e paralela (28 x 28 elementos). Soluções empregando **(a)** interpolação *upwind* unidimensional, **(b)** esquema MWUS, e o esquema *upwind* de coeficientes positivos com **(c)** $\Lambda_i = \omega_i^2 / (\omega_i^2 + 1)$, **(d)** $\Lambda_i = 2 \cdot \arctan(\omega_i) / \pi e$ **(e)** $\Lambda_i = \omega_i / (\omega_i + 1)$.

 $\Lambda_i = 2 \cdot \arctan(\omega_i) / \pi$ e $\Lambda_i = \omega_i / (\omega_i + 1)$ no exemplo mostrado, na maioria dos testes realizados considerando outras curvas de fluxo fracionário e outros valores da razão de viscosidades, a concordância foi em geral melhor com a relação $\Lambda_i = \omega_i / (\omega_i + 1)$. Por esta razão esta relação funcional foi usada no resto dos exemplos desta seção e em todos os exemplos apresentados nas seções 8.3 e 8.4.

Não obstante os resultados da figura poderiam sugerir que com as funções de interpolação *upwind* utilizadas o problema do efeito de orientação de malha estaria completamente resolvido, a situação não é tão simples assim. Infelizmente excelentes resultados como os da figura 8.31(e) são obtidos apenas em malhas relativamente grosseiras, especialmente para o tipo de deslocamento em situações adversas analisado nesta seção. A figura 8.32 mostra o comportamento das soluções a medida que as malhas são refinadas, para o mesmo caso considerado na figura 8.31(e). Nas soluções para as malhas de 40 x 40 elementos (diagonal) e de 56 x 56 elementos (paralela), pode-se evidenciar uma notória distorção na forma da descontinuidade, embora não exista um adiantamento manifesto da frente em uma malha em relação à frente na outra malha. Já nas malhas mais refinadas, na figura 8.32(d) a situação é quase tão desastrosa como a mostrada na figura 8.28(d), a qual tinha sido obtida com a interpolação *upwind* unidimensional.

Brand et al. [6] atribuem este comportamento a uma instabilidade intrínseca das equações discretizadas do modelo de deslocamento, para situações adversas como a considerada. Esta instabilidade não seria mais que uma manifestação da instabilidade física no processo de deslocamento originada em condições em que a mobilidade da fase invasora é muito maior que a mobilidade da fase deslocada, situação que acontece quando o valor da razão de viscosidades *M* é alto. Tal instabilidade física favorece a formação de *fingers*¹⁴ em escalas muito menores que a escala da malha computacional. Obviamente, as soluções numéricas não poderiam captar esses *fingers*, mas a instabilidade física poderia se manifestar como *fingers* espúrios em escalas da mesma ordem de grandeza que o espaçamento de malha. Segundo os

¹⁴ Na literatura é dada a denominação de *fingers* viscosos às formações irregulares ramificadas que a frente da fase invasora desenvolve quando seu avanço se torna instável pela maior mobilidade da fase invasora em relação à fase residente no meio poroso.

EXEMPLOS DE APLICAÇÃO

referidos autores, em malhas grosseiras esse fenômeno é amortecido pela difusão numérica associada aos esquemas de interpolação *upwind* de primeira ordem, mas torna-se evidente quando a difusão é reduzida mediante o refinamento das malhas. Como se pode deduzir, a aparição de *fingers* espúrios é um fenômeno que não tem conexão apenas com o efeito de orientação de malha, requerendo em conseqüência um enfoque diferente para ser eliminado das soluções numéricas.



Figura 8.32 Comparação das isolinhas do campo de saturação em malhas diagonal (D) e paralela (P) de **(a)** 10 x 10 (D) e 14 x 14 (P), **(b)** 20 x 20 (D) e 28 x 28 (P), **(c)** 40 x 40 (D) e 56 x 56 (P) e **(d)** 80 x 80 (D) e 112 x 112 (P) elementos. Soluções utilizando esquema *upwind* de coeficientes positivos com $\Lambda_i = \omega_i / (\omega_i + 1)$.

EXEMPLOS DE APLICAÇÃO

Todas as soluções numéricas apresentadas até agora nesta seção foram obtidas utilizando a forma convencional do algoritmo seqüencial, na qual a equação da pressão é resolvida sempre após resolver a equação da saturação para atualizar o campo de velocidade total. Como a pressão capilar não está sendo considerada, essa forma do algoritmo é equivalente ao algoritmo IMPES. Uma forma prática para eliminar a instabilidade numérica que origina os *fingers* espúrios nas soluções em malhas mais refinadas, foi determinada reduzindo a freqüência de atualização do campo de velocidade total, no algoritmo de solução seqüencial. Esta estratégia já tinha sido considerada e analisada em conexão com a melhoria do desempenho deste algoritmo de solução na seção 8.4. Após numerosos testes foi determinado um valor ótimo para a atualização do campo de velocidade total a cada 0.04 VPI, o qual elimina totalmente as instabilidades numéricas e permite obter soluções quase sem nenhum efeito de orientação de malha. Esse valor é independente do nível de refinamento da malha e de sua orientação, e tem dado ótimos resultados também para diferentes valores da razão de viscosidades.

A figura 8.33 mostra os resultados obtidos para o mesmo caso e as mesmas malhas consideradas anteriormente, empregando agora a estratégia delineada acima e utilizando o valor ótimo para a freqüência de atualização do campo de velocidade total. É notável a concordância entre as soluções para todos os níveis de refinamento das malhas. Além disso, observa-se o comportamento esperado em qualquer simulação numérica quando a malha é refinada, isto é, a convergência a uma mesma solução independente da malha. É evidente que o formato e a posição da frente são praticamente os mesmos em todas as malhas, ao refiná-las apenas a difusão numérica é eliminada, obtendo-se cada vez melhores aproximações numéricas da descontinuidade. No entanto, comparando a figura 8.33(b) com a figura 8.32(b) nota-se que na nova solução existe um leve retardo no tempo de chegada da frente ao poço produtor, em relação às soluções obtidas anteriormente com o algoritmo de solução convencional. É possível que a estratégia de estabilização considerada no algoritmo de solução introduza um certo erro numérico que causa o atraso da frente. Ao final, ao reduzir a freqüência de atualização da velocidade total está-se resolvendo mais pobremente uma não-linearidade da equação da saturação: a dependência do campo EXEMPLOS DE APLICAÇÃO

de velocidade total em relação ao campo de saturação. Seria desejável possuir uma solução de referência para avaliar em forma precisa a influência real desse erro, mas infelizmente não foi encontrada na literatura nenhuma solução analítica para este problema, tampouco uma solução numérica confiável. Apenas o que pode afirmar-se categoricamente é que foram determinadas uma função de interpolação e uma estratégia de estabilização com as quais foram obtidas soluções praticamente livres



Figura 8.33 Comparação das isolinhas do campo de saturação em malhas diagonal (D) e paralela (P) de (a) 10 x 10 (D) e 14 x 14 (P), (b) 20 x 20 (D) e 28 x 28 (P), (c) 40 x 40 (D) e 56 x 56 (P) e (d) 80 x 80 (D) e 112 x 112 (P) elementos. Soluções utilizando esquema *upwind* de coeficientes positivos com $\Lambda_i = \omega_i / (\omega_i + 1)$ e atualização do campo de velocidade total a cada 0,04 VPI.

do efeito de orientação de malha para o problema *five-spot,* em malhas com qualquer nível de refinamento.

Visando determinar se os procedimentos empregados para eliminar o efeito de orientação de malha produzem resultados ótimos também em outras condições, foram obtidas soluções para diferentes valores da razão de viscosidades e diferentes curvas de fluxo fracionário. Assim, a figura 8.34 permite evidenciar a evolução do formato das frentes de fluido ao variar a razão de viscosidades *M* entre 0,01 e 100. Todas as soluções foram obtidas nas malhas mais refinadas consideradas até agora, de 80 x 80 elementos (diagonal) e 112 x 112 elementos (paralela), e considerando os mesmos parâmetros numéricos empregados para obter as soluções anteriormente apresentadas na figura 8.33. Como se pode apreciar, nenhum efeito de orientação de malha apreciável é evidente nessas soluções. Por outra parte, a variação da geometria da frente ao aumentar a razão de viscosidades é fisicamente coerente, notando-se uma tendência progressivamente maior da fase injetada abrir-se caminho através da fase residente, ao invés de deslocá-la, e chegar mais prematuramente no poço produtor.

Os últimos resultados mostram um excelente desempenho em malhas cartesianas das estratégias numéricas empregadas para redução do efeito de orientação de malha. Com o intuito de verificar se estas estratégias conduzem a resultados semelhantes empregando malhas irregulares, alguns dos testes anteriores foram repetidos com este tipo de malhas. Para tanto foram consideradas malhas nãoestruturadas com um número de nós aproximadamente igual às das malhas cartesianas utilizadas nos exemplos anteriores, a fim de alcançar um grau de refinamento semelhante. A figura 8.35 mostra duas das malhas empregadas, as quais possuem aproximadamente o mesmo grau de refinamento que as malhas diagonal de 20 x 20 elementos e paralela de 28 x 28 elementos. Na figura 8.36(a) são comparadas as soluções obtidas nessas malhas, empregando um procedimento de superposição das isolinhas do campo de saturação semelhante ao utilizado anteriormente com as malhas cartesianas. Para obter essas simulações foram empregados exatamente os mesmos dados e parâmetros que tinham sido empregados nas soluções numéricas mostradas na figura 8.33. De fato, pode-se comprovar um alto grau de semelhança



Figura 8.34 Comparação das isolinhas do campo de saturação nas malhas diagonal (80 x 80 elementos) e paralela (112 x 112 elementos) para (a) M = 0,01, (b) M = 0,1, (c) M = 1, (d) M = 10 e (e) M = 100. Soluções utilizando esquema *upwind* de coeficientes positivos com $\Lambda_i = \omega_i / (\omega_i + 1)$ e passo de tempo para a equação da pressão de 0,04 VPI.

entre as isolinhas da figura 8.36(a) com as da figura 8.33(b), o qual é lógico já que as malhas para essas dois soluções possuem um nível de refinamento semelhante. Isto



Figura 8.35 Malhas não-estruturadas de (a) 440 elementos (481 nós) e (b) 790 elementos (843 nós).

mostra que a pesar da diferente topologia das malhas consideradas, a formulação numérica produziu resultados análogos praticamente sem traços do efeito de orientação de malha. A figura 8.36(b) mostra as soluções obtidas usando outro par de malhas não-estruturadas mais refinadas. Tais malhas têm aproximadamente



Figura 8.36 Comparação das isolinhas do campo de saturação em malhas nãoestruturadas de **(a)** 440 e 790 elementos e de **(b)** 1590 e 3148 elementos.

o mesmo nível de refinamento que as malhas cartesianas de 40 x 40 e 56 x 56 elementos, portanto, os resultados são comparáveis aos da figura 8.33(c). Novamente a concordância é excelente entre as soluções em malhas cartesianas e não estruturadas. Além de leves distorções na forma da frente, atribuíveis à irregularidade das malhas não-estruturadas, nenhuma outra diferença significativa é evidente nas soluções nessas malhas em relação às soluções em malhas cartesianas.

Considerando novamente malhas cartesianas, foram obtidas também soluções empregando curvas de fluxo fracionário e permeabilidades relativas diferentes. A figura 8.37 apresenta as soluções obtidas para o deslocamento tipo pistão correspondente à curva de fluxo fracionário dada por $F_I = s_I$ e a razão de viscosidades M = 10. Foram consideradas apenas duas malhas, as mais grosseiras e as mais refinadas empregadas em exemplos anteriores. Embora neste caso a descontinuidade esteja mais difundida que no caso para $F_I = s_I^2$, as isolinhas do campo de saturação nas duas malhas são extremamente próximas, exceto talvez na vizinhança do poço produtor, nas soluções correspondentes às malhas mais grosseiras. Mais que uma



Figura 8.37 Comparação das isolinhas do campo de saturação em deslocamento tipo pistão com $F_1 = s_1$ e M = 10, em malhas diagonal (D) e paralela (P) de **(a)** 10 x 10 (D) e 14 x 14 (P) e **(b)** 80 x 80 (D) e 112 x 112 (P) elementos.

manifestação do efeito de orientação de malha, essa discrepância parece ser uma manifestação da incapacidade da malha diagonal, por ser muito grosseira, de representar acuradamente a solução na região vizinha ao poço produtor.

Finalmente, na figura 8.36 é realizada a comparação das isolinhas do campo de saturação para um deslocamento determinado pelas curvas de permeabilidade relativa definidas na equação (8.1) e a razão de viscosidades M = 10. Neste caso o deslocamento não um deslocamento tipo pistão, senão que a saturação varia suavemente na região detrás da frente avançando na direção do poço produtor. Como se pode evidenciar na figura 8.36, as isolinhas de saturação são virtualmente indistinguíveis, tanto entre as soluções nas malhas grosseiras quanto nas malhas finas. Similares resultados foram obtidos com deslocamentos correspondentes a outras curvas de permeabilidade relativa e outros valores da razão de viscosidades.



Figura 8.38 Comparação das isolinhas do campo de saturação em deslocamento tipo pistão com $k_{rI} = 0, 2 s^{1.5}, k_{rD} = 0, 8 (1-s)^3$ e M = 10, em malhas diagonal (D) e paralela (P) de **(a)** 10 x 10 (D) e 14 x 14 (P) e **(b)** 80 x 80 (D) e 112 x 112 (P) elementos.

CAPÍTULO

CONCLUSÃO

9.1 Sumário

A presente dissertação apresentou uma formulação numérica desenvolvida para simular processos de deslocamento bifásico imiscível, aplicando uma metodologia de volumes finitos baseada em elementos. Para o desenvolvimento da formulação foram consideradas as equações diferenciais que descrevem, no nível macroscópico, o deslocamento de fluidos imiscíveis em um meio poroso consolidado, heterogêneo e isotrópico, incluindo a influência da pressão capilar, da compressibilidade dos fluidos e da gravidade.

Uma vez que as principais diferenças entre o método de volumes finitos baseado em elementos e o método de volumes finitos convencional estão relacionadas a questões geométricas, inicialmente foram estabelecidas bases sistemáticas para a representação das entidades geométricas consideradas na formulação numérica. Como base para a discretização dos domínios de solução foram consideradas malhas não-estruturadas de elementos quadriláteros. O processo de discretização das equações diferenciais do modelo foi realizado seguindo a filosofia do método convencional de volumes finitos, isto é, a construção de equações discretizadas satisfazendo a conservação das grandezas físicas em nível de volumes de controle. Para lidar com a complexidade decorrente do uso de malhas não-estruturadas, os termos das equações discretizadas foram escritos de forma que pudessem ser

142

CONCLUSÃO

calculados em nível de elementos, sem ser requerida para tanto nenhuma consideração em relação à conectividade da malha. Neste enfoque, a forma final das equações discretizadas é com um processo de montagem, no qual todas as contribuições calculadas elemento por elemento são somadas para definir a matriz de coeficientes e o vetor de termos independentes do conjunto completo de equações.

As equações discretizadas foram adaptadas para o emprego de um algoritmo de solução seqüencial, no qual devem ser resolvidos sucessivamente sistemas lineares de equações para as duas variáveis primárias do modelo matemático, a pressão e para saturação. Para tanto, consideraram-se esquemas de discretização temporal diferentes a fim de desacoplar parcialmente os campos de pressão e saturação nas equações discretizadas, dando-se origem a uma equação implícita para a pressão e uma equação parcialmente explícita para a saturação. Para a discretização da equação da saturação foi preferida a forma de Buckley-Leverett dessa equação, na qual a velocidade total aparece como nexo de acoplamento com a equação da pressão. Em relação ao algoritmo de solução seqüencial, foi proposta uma estratégia de aceleração, a fim de reduzir o tempo de computação necessário para obter simulações de processos de deslocamento em situações práticas. Tal estratégia consiste na utilização de escalas de tempo maiores para o avanço do campo de pressão que para o avanço do campo de saturação, com o objetivo de diminuir o número total de vezes que o sistema linear da pressão deve ser resolvido ao longo de uma simulação.

O fato de que a maioria das contribuições para as equações discretizadas é determinada em nível de elementos torna bastante simples o uso de esquemas de interpolação bidimensionais em cada elemento. Assim, para a aproximação dos termos advectivos da equação da saturação foram considerados esquemas de interpolação *upwind* de caráter bidimensional, os quais levam em conta a direção local do escoamento nos pontos de integração. Foi definida uma família de esquemas que compartilham essa característica, além de manter a positividade dos coeficientes provenientes da discretização dos termos advectivos. Mostrou-se com numerosos exemplos que o uso deste tipo de esquemas de interpolação reduz significativamente o efeito de orientação de malha.

9.2 Conclusões

A formulação numérica desenvolvida tem se mostrado eficiente em todos os aspectos que foram estabelecidos como objetivos do presente trabalho. Os variados exemplos apresentados, aplicando a formulação à simulação de processos de deslocamento em diversas situações físicas, evidenciam sua aptidão para resolver problemas práticos nas duas áreas de aplicação inicialmente previstas, isto é, a simulação de deslocamentos em amostras porosas e a simulação de processos de recuperação secundária de reservatórios de petróleo.

Evidentemente a área onde as vantagens da formulação apresentada poderão ser mais plenamente aproveitadas é na simulação de reservatórios, uma vez que geometrias complexas com detalhes intrincados como os que apresentam os reservatórios reais, podem ser representadas de forma precisa mediante malhas nãoestruturadas com refinamento localizado. Além disso, o desenvolvimento de uma metodologia numérica para simulação de reservatórios essencialmente sem efeito de orientação de malha, inclusive nas situações mais adversas, era um objetivo longamente almejado pelos pesquisadores da área, conforme testemunham as numerosas publicações existentes na literatura. Como demonstram os resultados apresentados neste trabalho, as técnicas numéricas consideradas na formulação para lidar com o efeito de orientação de malha estão no caminho certo para eliminar completamente esta anomalia das simulações de processos de deslocamento em meios porosos. Como é óbvio, essas técnicas devem ser estendidas e /ou adaptadas para serem aplicáveis a situações mais gerais, envolvendo possivelmente geometrias tridimensionais e algoritmos de solução totalmente implícitos, por exemplo.

Embora apenas tenha sido possível validar os resultados obtidos para problemas unidimensionais, na maioria dos restantes casos foram obtidas soluções numéricas em malhas com distinto nível de refinamento, a fim de verificar a convergência a soluções independentes da malha. Mediante esse tipo de estudos foi possível evidenciar que em malhas grosseiras o nível de difusão numérica nos campos de saturação pode ser bastante pronunciado. Isso pode ser explicado pelo fato de que, embora os esquemas de interpolação *upwind* considerados neste trabalho

CONCLUSÃO

sejam mais consistentes com o caráter bidimensional do escoamento, eles mantêm a precisão de primeira ordem dos esquemas *upwind* unidimensionais.

Quanto às técnicas empregadas para acelerar o algoritmo de solução seqüencial, elas têm mostrado desempenho satisfatório. A necessidade de uma formulação numérica capaz de fornecer simulações em tempos de computação razoáveis motivou a consideração de tais técnicas, uma vez que se comprovou que o algoritmo seqüencial torna-se muito ineficiente quando o nível de refinamento da malha aumenta. Graças às duas estratégias consideradas, a de avaliar em forma explícita o termo de pressão capilar na equação da saturação e a de considerar passos de tempo maiores para a equação da pressão, foi conseguida uma economia de tempo de computação considerável em relação ao tradicional algoritmo IMPES. No entanto, o desempenho do algoritmo de solução poderia ser ainda melhorado se os sistemas lineares de equações fossem resolvidos empregando um método *multigrid*, para o qual o esforço computacional aumenta de forma aproximadamente linear com o tamanho do sistema de equações.

Os bons resultados obtidos com a formulação numérica desenvolvida devem motivar a realização de pesquisas adicionais visando a extensão da formulação a problemas mais gerais. Assim por exemplo, a extensão natural da formulação seria a consideração de geometrias tridimensionais empregando malhas de elementos tetraédricos e/ou hexaédricos. Para abranger um conjunto maior de problemas, seria possível considerar uma formulação matemática mais geral para a descrição do deslocamento, baseada por exemplo no modelo black-oil que é o modelo padrão para a simulação de reservatórios. Finalmente, para conferir maior robustez ao processo de resolução das equações discretizadas seria desejável o emprego de um algoritmo totalmente implícito, junto com técnicas multigrid para a resolução do sistema de equações resultante. Certamente após ser desenvolvida uma formulação incluindo todas essas características, ela será superior em quase todos os aspectos às formulações numéricas atualmente empregadas na simulação de reservatórios de petróleo. Nessa perspectiva, o presente trabalho deve ser visto como o primeiro passo no longo caminho de pesquisa objetivando o desenvolvimento de uma formulação com esse nível de generalidade, precisão e robustez.

REFERÊNCIAS BIBLIOGRÁFICAS

- BAJOR, O; CORMACK, D. E. A new method for characterizing the grid orientation phenomenon. Paper SPE 19353. (1989).
- [2] BALIGA, B. R.; PATANKAR, S.V. A control-volume finite-element method for two-dimensional fluid flow and heat transfer. *Numerical Heat Transfer*. Vol. 6, pp. 245-261. (1983).
- [3] BALIGA, B. R.; PATANKAR, S.V. A new finite-element formulation for convection-diffusion problems. *Numerical Heat Transfer*. Vol. 3, pp. 393-409. (1980).
- [4] BATYCKY, J. P.; MCCAFFERY, F. G.; N HODGINS, P. K.; FISHER, D. B. Interpreting relative permeability and wettability from unsteady-state displacement measurements. SPE Journal. Vol. June 1981, pp. 296-308. (1981).
- [5] BEDRIKOVETSKY, P.; RODRIGUES J. R. P.; BRITTO, P. R. F. Analytical model for the waterflood honouring capillary pressure (with applications to laboratory studies). Paper SPE 36130. SPE Latin America / Caribbean Petroleum Engineering Conference, 23-26 April, Port-of-Spain, Trinidad. (1996).
- [6] BRAND, C. W.; HEINEMANN, J. E.; AZIZ, K. The grid orientation effect in reservoir simulation. Paper SPE 21228. SPE Symposium on Reservoir Simulation, 17-20 February, Anaheim, USA. (1991).

- [7] CHEN, W. H.; DURLOFSKY, L. J.; ENQUIST, B.; OSHER, S. Minimization of grid orientation effect through use of higher-order finite difference methods. SPE Applied Technology Series. Vol. July 1991, pp. 43-52. (1991).
- [8] CHEN, Z.; HUAN, G.; LI, B. An improved IMPES method for two-phase flow in porous media. *Transport in Porous Media*. Vol. 54, pp. 361-376. (2004).
- [9] COATS, K. H. IMPES stability: The CFL limit. Paper SPE 66345. SPE Reservoir Simulation Symposium, 11-14 February, Houston, USA. (2001).
- [10] COATS, K. H. IMPES stability: The stable step. Paper SPE 69225. SPE Reservoir Simulation Symposium, 11-14 February, Houston, USA. (2001).
- [11] CORDAZZO, J.; MALISKA, C. R.; SILVA, A. F. C.; HURTADO, F. S. V. The negative transmissibility issue when using CVFEM in petroleum reservoir simulation – 1. Theory. Proceedings of 10th Brazilian Congress of Thermal Sciences and Engineering, 30 Nov. - 3 Dec., Rio de Janeiro, Brazil. (2004).
- [12] CORDAZZO, J.; MALISKA, C. R.; SILVA, A. F. C.; HURTADO, F. S. V. The negative transmissibility issue when using CVFEM in petroleum reservoir simulation – 2. Results. Proceedings of 10th Brazilian Congress of Thermal Sciences and Engineering, 30 Nov. - 3 Dec., Rio de Janeiro, Brazil. (2004).
- [13] CUNHA, A. R. Uma metodologia para simulação numérica tridimensional de reservatórios de petróleo utilizando modelo black-oil e formulação em frações mássicas. Dissertação de mestrado, Departamento de Engenharia Mecânica, Universidade Federal de Santa Catarina, Florianópolis, Brasil. (1996).
- [14] DULLIEN, F. A. L. Porous media. Fluid transport and pore structure. Academic Press. (1979).
- [15] EDWARDS, M. G. Unstructured, control-volume distributed, full-tensor, finite-volume schemes with flow based grids. *Computational Geosciences*. Vol. 6, pp. 433-452. (2002).
- [16] ELIAS, S. R. Enhancements to additive correction multigrid. M.Sc. Thesis, University of Waterloo, Canada. (1993).

- [17] ENGINEERING SIMULATION & SCIENTIFIC SOFTWARE. COILib 3.0.Biblioteca C++ de módulos científicos e de engenharia. <u>www.esss.com.br</u>.
- [18] FERZIGER, J. H.; PERIC, M. Computational methods for fluid dynamics. Second edition. Springer-Verlag. (1999).
- [19] FORSYTH, P. A. A control-volume, finite element method for local mesh refinement in thermal reservoir simulation. SPE Reservoir Engineering. Vol. November 1990, pp. 561-566. (1990).
- [20] FUNG, L. S.; BUCHANAN, W. L.; SHARMA, R. Hybrid-CVFEM method for flexible grid reservoir simulation. SPE Reservoir Engineering. Vol. August 1994, pp. 188-194. (1994).
- [21] FUNG, L. S.; HIEBERT, A. D.; NGHIEM L. Reservoir simulation with a control-volume finite-element method. SPE Reservoir Engineering. Vol. August 1992, pp. 349-357. (1992).
- [22] GOTTARDI, G.; DALL'OLIO, D. A control-volume finite-element model for simulating oil-water reservoirs. *Journal of Petroleum Science and Engineering*. Vol. 8, pp. 29-41. (1992).
- [23] HEAVISIDE, J.; BLACK, C. J.; BERRY, J. F. Fundamentals of relative permeability: experimental and theoretical considerations. Paper SPE 12173. SPE Annual Technical Conference and Exhibition, 5-8 October, San Francisco, USA. (1983).
- [24] HIRSCH, C. Numerical computation of internal and external flows. Volume 1: Fundamentals of numerical discretization. John Wiley & Sons. (1988).
- [25] HUBER, R.; HELMIG, R. Node-centered finite volume for the numerical simulation of multiphase flow in heterogeneous media. Computational Geosciences. Vol. 4, pp. 141-164. (2000).
- [26] JUANES, R. Displacement theory and multiscale numerical modeling of three-phase flow in porous media. Ph.D. Thesis. University of California, Berkeley. (2003).

- [27] KAVIANY, M. Principles of heat transfer in porous media. Second edition. Springer-Verlag. (1995).
- [28] KREYSZIG, E. Advanced engineering mathematics. Seventh edition. John Wiley & Sons, Inc. (1993).
- [29] KULKARNI, R.; WATSON, T.; NORDTVEDT, J. E.; SYLTE, A. Two-phase flow in porous media: Property identification and model validation. *AIChE Journal*. Vol. 44, pp. 2337-2350. (1998).
- [30] LUCIANETTI, R. M. Métodos de Krylov-Newton aplicados à simulação numérica de reservatórios de petróleo. Dissertação de mestrado, Departamento de Engenharia Mecânica, Universidade Federal de Santa Catarina, Florianópolis, Brasil. (2000).
- [31] MALISKA, C. R. Transferência de calor e mecânica dos fluidos computacional. Segunda edição. Livros Técnicos e Científicos Editora S. A., Rio de Janeiro. (2004).
- [32] MATTAX, C. C.; DALTON, R. L. Reservoir simulation. SPE Monograph Series, Vol. 13. Society of Petroleum Engineers. (1990).
- [33] PATANKAR, S. V. Numerical and heat transfer and fluid flow. Hemisphere Publishing Corporation. (1980).
- [34] PEACEMAN, D. W. Fundamentals of numerical reservoir simulation. Elsevier Scientific Publishing Company. (1977).
- [35] RAW, M. A new control-volume based finite element procedure for the numerical solution of the fluid flow and scalar transport equations. Ph.D. Thesis, University of Waterloo, Canada. (1985).
- [36] ROZON, B. J. A generalized finite volume discretization method for reservoir simulation. Paper SPE 18414. SPE Symposium on Reservoir Simulation, 6-8 February, Houston, USA. (1989).
- [37] SAAD, Y. Iterative methods for sparse linear systems. PWS Publishing. (1996).

- [38] SCHNEIDER, G. E.; RAW, M. J. A skewed, positive influence coefficient upwinding procedure for control-volume-based finite-element convectiondiffusion computation. *Numerical Heat Transfer*. Vol. 9, pp. 1-26. (1986).
- [39] SONIER, F.; EYMARD, R. Mathematical and numerical properties of control volume finite-element scheme for reservoir simulation. SPE Reservoir Engineering. Vol. November 1993, pp. 283-289. (1993).
- [40] SPILLETTE, A. G.; HILLESTAD, J. G.; STONE, H. L. A high stability sequential solution approach to reservoir simulation. Paper SPE 4542. *Fall Meeting of the Society of Petroleum Engineers of AIME*, 30 Sept. - 3 Oct., Las Vegas, USA. (1973).
- [41] STROUSTRUP B. The C++ programming language. Third edition. Addison Wesley Professional. (2000).
- [42] THIELE, M. R. Streamline simulation. Proceedings of the 6th International Forum on Reservoir Simulation. September 3-7, Schloss Fuschl, Austria. (2001).
- [43] WATSON, A. T.; CHANG, C. T. P. Characterizing porous media with NMR methods. Progress in Nuclear Magnetic Resonance Spectrometry. Vol. 31, pp. 343-386. (1997).
- [44] WATSON, A. T.; WADE, J. G.; EWING, R. E. Parameter and system identification for fluid flow in underground reservoirs. Em Inverse Problems and Optimal Design in Industry, H. W. Engl e J. MacLaughlin editores, Teubner Verlag, Stuttgart. (1994).
- [45] WOLCOTT, D. S.; KAZEMI, H.; DEAN, R. H. A practical method for minimizing the grid orientation effect in reservoir simulation. Paper SPE 36723. SPE Annual Technical Conference and Exhibition, 6-9 October, Denver, USA. (1996).
- [46] YANOSIK, J. L.; MCCRACKEN, T. A. A nine-point, finite difference reservoir simulator for realistic prediction of adverse mobility ratio displacements. SPE Journal. Vol. August 1979, pp. 253-262. (1979).

- [47] YOUNG, L. C. A study of spatial approximations for simulating fluid displacements in petroleum reservoirs. Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering. Vol. 47, pp. 3-46. (1984).
- [48] ZULUAGA, E.; MAJORS, P. D.; PETERS, E. J. A simulation approach to validate petrophysical data from NMR imaging. Society of Petroleum Engineers Journal. March 2002, pp. 35-39. (2002).

APÊNDICE

DEDUÇÃO DA FORMA ALTERNATIVA DAS EQUAÇÕES DIFERENCIAIS

A.1 Equação diferencial da pressão

A equação diferencial da pressão resulta da combinação de várias equações do modelo de deslocamento. Para sua dedução partir-se-á da equação diferencial de conservação de massa, equação (2.5). Empregando a identidade para o produto de duas funções, e considerando também que para os casos de interesse a porosidade independe do tempo, a equação (2.5) pode ser rescrita como

$$\phi \frac{\partial s_F}{\partial t} + \phi \frac{s_F}{\rho_F} \frac{\partial \rho_F}{\partial t} + \frac{\nabla \cdot \rho_F \vec{\mathbf{v}}_F}{\rho_F} = 0$$
(A.1)

Considerando ainda a definição de compressibilidade, dada pela equação (2.14), a derivada da densidade em relação ao tempo pode ser relacionada com a derivada da pressão. É possível escrever então,

$$\phi \frac{\partial s_F}{\partial t} + \phi s_F c_F \frac{\partial P_F}{\partial t} + \frac{\nabla \cdot \rho_F \vec{\mathbf{v}}_F}{\rho_F} = 0$$
(A.2)

Lembre-se que esta equação é valida tanto para a fase injetada quanto para a fase deslocada. Somando as duas equações correspondentes a essas fases, obtém-se

$$\phi\left(\frac{\partial s_{I}}{\partial t} + \frac{\partial s_{D}}{\partial t}\right) + \phi\left(s_{I}c_{I}\frac{\partial P_{I}}{\partial t} + s_{D}c_{D}\frac{\partial P_{D}}{\partial t}\right) + \frac{\vec{\nabla}\cdot\rho_{I}\vec{\mathbf{v}}_{I}}{\rho_{I}} + \frac{\vec{\nabla}\cdot\rho_{D}\vec{\mathbf{v}}_{D}}{\rho_{D}} = 0$$
(A.3)

A partir da diferenciação em relação ao tempo da equação de restrição volumétrica, equação (2.7), e da equação que define a pressão capilar, equação (2.8), pode-se concluir que

$$\frac{\partial s_I}{\partial t} + \frac{\partial s_D}{\partial t} = 0 \tag{A.4}$$

$$\frac{\partial P_I}{\partial t} = \frac{\partial P_D}{\partial t} - \frac{\partial P_C}{\partial t}$$
(A.5)

Além disso, empregando a definição de mobilidade de uma fase, equação (2.13), e novamente a definição da pressão capilar, as expressões matemáticas da lei de Darcy generalizada para as duas fases podem se escritas como

$$\vec{\mathbf{v}}_I = -\lambda_I (\vec{\nabla} P_D - \vec{\nabla} P_C - \rho_I \vec{\mathbf{g}})$$
(A.6)

$$\vec{\mathbf{v}}_{D} = -\lambda_{D} \left(\overline{\nabla} P_{D} - \rho_{D} \, \vec{\mathbf{g}} \right) \tag{A.7}$$

Substituindo as equações (A.4) a (A.7) na equação (A.3) e reorganizando convenientemente os termos da equação resultante, obtém-se a forma diferencial da equação da pressão que foi considerada na seção 2.4,

$$\phi(s_{I}c_{I}+s_{D}c_{D})\frac{\partial P_{D}}{\partial t} = \left(\frac{\vec{\nabla}\cdot\rho_{I}\lambda_{I}\vec{\nabla}P_{D}}{\rho_{I}} + \frac{\vec{\nabla}\cdot\rho_{D}\lambda_{D}\vec{\nabla}P_{D}}{\rho_{D}}\right) + \phi s_{I}c_{I}\frac{\partial P_{C}}{\partial t} - \frac{\vec{\nabla}\cdot\rho_{I}\lambda_{I}\vec{\nabla}P_{C}}{\rho_{I}} - \left(\frac{\vec{\nabla}\cdot\rho_{I}^{2}\lambda_{I}\vec{\mathbf{g}}}{\rho_{I}} + \frac{\vec{\nabla}\cdot\rho_{D}^{2}\lambda_{D}\vec{\mathbf{g}}}{\rho_{D}}\right)$$
(A.8)

A.2 Equação diferencial da saturação

A forma de Buckley-Leverett da equação da saturação é a própria equação de conservação de massa da fase injetada, a qual adquire uma forma diferente por causa da introdução da velocidade total como variável de acoplamento com a equação da pressão. Lembre-se que a velocidade total foi definida na equação (2.17) como a soma das velocidades das duas fases.

Expressando a velocidade total em função da pressão da fase deslocada e a pressão capilar, mediante a substituição das equações (A.6) e (A.7) na equação (2.7), obtém-se

$$\vec{\mathbf{v}}_T = -(\lambda_I + \lambda_D)\vec{\nabla}P_D + \lambda_I\vec{\nabla}P_C + (\rho_I\lambda_I + \rho_D\lambda_D)\vec{\mathbf{g}}$$
(A.9)

A partir desta equação pode-se obter a relação

$$\vec{\nabla}P_D = \frac{1}{\lambda_I + \lambda_D} \left[-\vec{\mathbf{v}}_T + \lambda_I \vec{\nabla}P_C + (\rho_I \lambda_I + \rho_D \lambda_D) \vec{\mathbf{g}} \right]$$
(A.10)

a qual, após ser substituída na equação (A.6), permite expressar a velocidade da fase injetada como uma função da velocidade total, mediante a equação

$$\vec{\mathbf{v}}_{I} = \frac{\lambda_{I}}{\lambda_{I} + \lambda_{D}} \vec{\mathbf{v}}_{T} + \frac{\lambda_{I} \lambda_{D}}{\lambda_{I} + \lambda_{D}} \vec{\nabla} P_{C} + \frac{\lambda_{I} \lambda_{D}}{\lambda_{I} + \lambda_{D}} \left(\rho_{I} - \rho_{D} \right) \vec{\mathbf{g}}$$
(A.11)

Esta relação pode ser reescrita em forma condensada considerando as definições da função fluxo fracionário e da função Ψ ,

$$\vec{\mathbf{v}}_{I} = F_{I}\vec{\mathbf{v}}_{T} + \Psi\bar{\nabla}P_{C} + \Psi(\rho_{I} - \rho_{D})\vec{\mathbf{g}}$$
(A.12)

A substituição desta expressão para a velocidade da fase na equação diferencial de conservação de massa para a fase injetada, dá lugar à equação

$$\phi \frac{\partial(\rho_{I}s_{I})}{\partial t} + \vec{\nabla} \cdot \rho_{I}F_{I}\vec{\mathbf{v}}_{T} + \vec{\nabla} \cdot \rho_{I}\Psi\vec{\nabla}P_{C} + \vec{\nabla} \cdot \rho_{I}(\rho_{I}-\rho_{D})\Psi\vec{\mathbf{g}} = 0$$
(A.13)

Finalmente, dado que o termo advectivo e o termo relativo à gravidade possuem características semelhantes, eles podem ser agrupados dando lugar à forma da equação diferencial da saturação apresentada na seção 2.4,

$$\phi \frac{\partial (\rho_I s_I)}{\partial t} + \vec{\nabla} \cdot \rho_I F_I \left[\vec{\mathbf{v}}_T + \lambda_D (\rho_I - \rho_D) \vec{\mathbf{g}} \right] + \vec{\nabla} \cdot \rho_I \Psi \vec{\nabla} P_C = 0$$
(A.14)

APÊNDICE

POSITIVIDADE DOS COEFICIENTES GERADOS PELOS ESQUEMAS DE INTERPOLAÇÃO UPWIND

A seguir será mostrado que os esquemas de interpolação *upwind* denominados de coeficientes positivos efetivamente geram moléculas computacionais de coeficientes positivos. Deve ser lembrado que foram denominados com esse nome os esquemas para os quais a relação funcional entre o fator de interpolação Λ_i e a razão de fluxos de massa ω_i encontra-se limitada à região do plano $\omega_i - \Lambda_i$ mostrada na figura 7.3.

Para mostrar essa característica dos esquemas considerados é suficiente analisar os coeficientes da molécula computacional gerada pela discretização do termo advectivo da equação da saturação, uma vez que é nesse termo que o esquema *upwind* é empregado. Conforme descrito na seção 4.5, a integração do termo advectivo em um volume de controle conduz à expressão aproximada

$$\int_{\Delta V} \left(\vec{\nabla} \cdot \rho_I F_I \vec{\mathbf{v}}_E \right) dV \approx \sum_i (F_I)_i (\rho_I)_i (\vec{\mathbf{v}}_E)_i \cdot \Delta \vec{\mathbf{S}}_i = \sum_i (F_I)_i (\Delta \dot{m}_E)_i$$
(B.1)

onde $(\Delta \dot{m}_E)_i$ é o fluxo de massa que foi denominado fluxo de massa efetivo, o qual atravessa as faces do volume de controle. A função de interpolação *upwind* é empregada para aproximar os valores do fluxo fracionário nos pontos de integração. Conforme foi visto no capítulo 4, as contribuições para os somatórios envolvendo grandezas relativas aos pontos de integração são calculadas separadamente para cada elemento e depois somadas no processo de montagem. Considere-se por exemplo o volume de controle mostrado na figura B.1, junto com os nós que formam a molécula computacional das equações discretizadas para tal volume. De acordo com o procedimento descrito na seção 4.4, a contribuição do elemento *e* no somatório da equação (B.1) pode ser escrita como

$$\left[\sum_{i} (F_{I})_{i} (\Delta \dot{m}_{E})_{i}\right]_{e} = (\Delta \dot{m}_{E})_{1} (F_{I})_{i=1} - (\Delta \dot{m}_{E})_{2} (F_{I})_{i=2}$$
(B.2)

onde os sinais das parcelas no lado direito da equação estão de acordo com a convenção de sinais para os vetores normais às faces, definida na seção 3.6. Para maior simplicidade, na figura B.1 a numeração local dos nós no elemento *e* coincide com a numeração global.



Figura B.1 Volume de controle e elemento analisados.

De acordo com o sentido dos fluxos de massa mostrados na figura B.1, os valores do fluxo fracionário calculados com o esquema de interpolação *upwind* de coeficientes positivos para os pontos de integração 1 e 2 estarão dados por

$$(F_I)_{i=1} = (1 - \Lambda_1)(F_I)_{p=1} + \Lambda_1 \cdot (F_I)_{i=2}$$
(B.3)

$$(F_{I})_{i=2} = (1 - \Lambda_{2})(F_{I})_{p=2} + \Lambda_{2} \cdot (F_{I})_{i=3}$$
(B.4)

Substituindo estas expressões na equação (B.2) obtém-se

$$\left[\sum_{i} (F_{I})_{i} (\Delta \dot{m}_{E})_{i}\right]_{e} = (\Delta \dot{m}_{E})_{1} (1 - \Lambda_{1}) (F_{I})_{p=1} + (1 - \Lambda_{2}) [(\Delta \dot{m}_{E})_{1} \Lambda_{1} - (\Delta \dot{m}_{E})_{2}] (F_{I})_{p=2} + \Lambda_{2} [(\Delta \dot{m}_{E})_{1} \Lambda_{1} - (\Delta \dot{m}_{E})_{2}] (F_{I})_{i=3}$$
(B.5)

O valor $(F_i)_{i=3}$ será por sua vez uma combinação linear de valores nodais, uma vez que expressões equivalentes às equações (B.3) e (B.4) existem para todos os pontos de integração. Em realidade, conforme foi explicado na seção 7.3, na prática é formado um sistema de quatro equações com quatro incógnitas para determinar simultaneamente os valores de F_i em todos os pontos de integração em função dos valores nodais desse parâmetro. Mas, neste caso pretende-se determinar as condições para as quais o esquema de interpolação definido por expressões do tipo das equações (B.3) e (B.4) geram aproximações numéricas do termo advectivo com coeficientes positivos. Para tanto é necessário considerar que expressões do tipo da equação (B.5), correspondentes a todos os elementos em torno ao nó 1, devem ser somadas para gerar a aproximação completa do termo advectivo no volume de controle considerado. Após a montagem dessas contribuições, para o volume de controle em torno ao nó 1, ter-se-á

$$\sum_{i} (F_{I})_{i} (\Delta \dot{m}_{E})_{i} = \sum_{p} a_{p} \cdot (F_{I})_{p}$$
(B.6)

onde a_p são certos coeficientes, os quais serão não nulos apenas para os nós vizinhos do volume de controle onde se encontra o nó 1. Por tal razão, a equação (B.6) pode ser escrita em forma alternativa como

$$\sum_{i} (F_{I})_{i} (\Delta \dot{m}_{E})_{i} = a_{p=1} \cdot (F_{I})_{p=1} + \sum_{k=n \text{ os vizinhos}} a_{p=k} \cdot (F_{I})_{p=k}$$
(B.7)

Note-se que, comparando as equações (B.5) e (B.7), pode-se concluir que após a montagem o coeficiente $(\Delta \dot{m}_E)_1(1 - \Lambda_1)$ irá formar parte do coeficiente $a_{p=1}$, o coeficiente $(1 - \Lambda_2)[(\Delta \dot{m}_E)_1\Lambda_1 - (\Delta \dot{m}_E)_2]$ formará parte do coeficiente $a_{p=2}$, e o coeficiente $\Lambda_2[(\Delta \dot{m}_E)_1\Lambda_1 - (\Delta \dot{m}_E)_2]$, multiplicado ainda por outros fatores provenientes da aproximação de $(F_I)_{i=3}$, contribuirá para os coeficientes associados a outros nós vizinhos.

Se a aproximação do termo advectivo dada pela equação (B.7) fosse substituída na equação da saturação e todos os restantes termos nessa equação fossem temporariamente considerados como parte do termo fonte¹, poder-se-ia escrever

$$a_{p=1} \cdot (F_l)_{p=1} = -\sum_{k=n \circ s \text{ vizinhos}} a_{p=k} \cdot (F_l)_{p=k} + b$$
(B.8)

Conforme é explicado em [33], a positividade de todos os coeficientes de uma equação discretizada na forma da equação (B.8) é a condição necessária para garantir que sua solução seja monótona e não sejam gerados extremos espúrios, os quais podem dar lugar a oscilações ou comportamentos não-realísticos. Para os coeficientes da equação (B.8), esta condição implica que

$$a_{p=1} \ge 0 \tag{B.9}$$

$$-a_{p=k} \ge 0 \quad \forall \ k=n \delta \ vizinho$$
 (B.10)

Uma condição suficiente para que as desigualdades (B.9) e (B.10) sejam satisfeitas é que todas as contribuições dos elementos que são somadas para determinar os coeficientes a_p satisfaçam desigualdades equivalentes. Logo, para as contribuições relativas ao elemento e, considerado acima como exemplo representativo, podem ser estabelecidas as condições seguintes

$$(\Delta \dot{m}_E)_1 (1 - \Lambda_1) \ge 0 \tag{B.11}$$

$$-(1-\Lambda_2)[(\Delta \dot{m}_E)_1\Lambda_1 - (\Delta \dot{m}_E)_2] \ge 0$$
(B.12)

$$-\Lambda_2 \left[\left(\Delta \dot{m}_E \right)_1 \Lambda_1 - \left(\Delta \dot{m}_E \right)_2 \right] \ge 0 \tag{B.13}$$

Uma vez que por hipótese o fluxo de massa $(\Delta \dot{m}_E)_1$ é positivo², a desigualdade (B.11) só será satisfeita se

$$\Lambda_1 \le 1 \tag{B.14}$$

¹ Considere-se que apenas está-se pretendendo analisar o comportamento dos coeficientes provenientes da discretização do termo advectivo.

² Se não for, a equação que define a interpolação envolveria outro valor nodal e outro ponto de integração, conforme estabelece a equação (7.3).

Na desigualdade (B.12), o fator $(1 - \Lambda_2)$ deverá ser sempre positivo, já que a condição (B.14) é válida para qualquer ponto de integração. Portanto, a desigualdade (B.12) será satisfeita se o fator de interpolação satisfizer a desigualdade

$$\Lambda_1 \le \frac{(\Delta \dot{m}_E)_1}{(\Delta \dot{m}_E)_2} \tag{B.15}$$

Note-se que a equação (7.5) define o parâmetro ω_1 como a razão de fluxos de massa $(\Delta \dot{m}_E)_1 / (\Delta \dot{m}_E)_2$ para o caso em que $(\Delta \dot{m}_E)_1$ é positivo. Logo, a desigualdade (B.16) pode-se escrever também como

$$\Lambda_1 \le \omega_1 \tag{B.16}$$

Finalmente, na desigualdade (B.13), sabe-se que o fator $[(\Delta \dot{m}_E)_1 \Lambda_1 - (\Delta \dot{m}_E)_2]$ será sempre negativo, por causa da condição (B.15). Conseqüentemente, para satisfazer tal desigualdade deve-se cumprir que

$$\Lambda_2 \ge 0 \tag{B.17}$$

Embora as anteriores condições de positividade dos coeficientes foram obtidas considerando um ponto de integração específico e uma certa configuração de fluxos de massa, examinando outras configurações são obtidas mesmas conclusões, podendo-se generalizar essas condições a todos os pontos de integração em um elemento. Ou seja, é possível escrever

$$\begin{cases}
\Lambda_i \leq 1 \\
\Lambda_i \leq \omega_i \\
\Lambda_i \geq 0
\end{cases}$$
(B.18)

É fácil comprovar que estas desigualdades definem a região de positividade mostrada na figura 5.6.

APÊNDICE PASSO DE TEMPO ESTÁVEL

Quando uma equação diferencial modelando um processo transiente é resolvida empregando um esquema numérico explícito, a estabilidade do método está condicionada ao uso de passos de tempo satisfazendo certas restrições [24, 31]. Na formulação considerada neste trabalho, o termo advectivo da equação da saturação é aproximado de forma explícita, conseqüentemente existirá uma restrição na magnitude do passo de tempo que poderá ser utilizado na sua resolução.

Para analisar esse aspecto é conveniente examinar a equação linear de advecção em uma dimensão

$$\frac{\partial s}{\partial t} + a \frac{\partial s}{\partial x} = 0 \tag{C.1}$$

na qual *a* é a velocidade de advecção. É possível mostrar [24] que para um esquema numérico explícito empregado para resolver essa equação ser estável, deve ser satisfeita a condição de Courant-Friedrichs-Lewy (CFL)

$$\frac{a\Delta t}{\Delta x} \le 1 \tag{C.2}$$

onde Δx é o espaçamento de malha e Δt é o passo de tempo. Esta condição expressa simplesmente que a distância percorrida por perturbações se propagando com uma velocidade *a*, deve ser menor ou igual que a mínima distância entre nós em uma malha [24]. O parâmetro $a \Delta t / \Delta x$ é denominado na literatura como *número de Courant*.

Embora a equação diferencial da saturação seja uma equação não-linear e a formulação numérica considerada seja bidimensional, é possível estabelecer uma condição de estabilidade seguindo os mesmos princípios da análise de estabilidade linear considerados para derivar a condição (C.2). Assim, seguindo os lineamentos expostos em [10], foi deduzido o seguinte critério de estabilidade para o esquema empregado

$$\frac{\Delta t_{n+1}}{\phi_p(\rho_l)_p^{n-1}\Delta V_p} \sum_{i(\text{saida})} \left(\frac{\partial F_l}{\partial s_l}\right)_i^n (\rho_l)_i^{n-1} (\vec{\mathbf{v}}_E)_i^n \cdot \Delta \vec{\mathbf{S}}_i \leq 1$$
(C.3)

Nesta expressão, o somatório abarca apenas os pontos de integração pelos quais existe saída de fluido, ou seja, $(\vec{\mathbf{v}}_E)_i^n \cdot \Delta \vec{\mathbf{S}}_i > 0$. Esta condição deve ser satisfeita para todos os volumes de controle da malha, portanto, passos de tempo diferentes podem ser obtidos aplicando a condição (C.3) a diferentes volumes. Uma forma de determinar um passo de tempo apto para todos os volumes de uma malha em um dado nível de tempo é mediante a expressão

$$\Delta t_{n+1} = \min_{p} \left[\frac{\phi_{p} \left(\rho_{l} \right)_{p}^{n-1} \Delta V_{p}}{\sum_{i (saida)} \left(\frac{\partial F_{l}}{\partial s_{l}} \right)_{i}^{n} \left(\rho_{l} \right)_{i}^{n-1} \left(\vec{\mathbf{v}}_{E} \right)_{i}^{n} \cdot \Delta \vec{\mathbf{S}}_{i}} \right]$$
(C.4)

Ou seja, o passo de tempo estável estará dado pelo menor valor da expressão entre colchetes, calculada para todos volumes de controle na malha. No entanto, em experimentos numéricos realizados, observou-se um comportamento oscilatório irregular do passo de tempo calculado com este procedimento, o qual em certas situações chegava a interferir na estabilidade do processo de cálculo. Por tal razão optou-se por uma prática alternativa, na qual um passo de tempo é determinado no início da simulação e mantido fixo¹ até produzir-se a chegada da frente de fluido injetado à superfície de saída ou aos poços produtores, se for um problema de simulação de reservatórios. Para tanto, o passo de tempo inicial é determinado com a seguinte expressão derivada da equação (C.4)

¹ A menos que a quantidade de fluido injetado varie com o tempo, em cujo caso o valor do passo de tempo deve ser recalculado a cada mudança do valor do fluxo de massa injetado.

APÊNDICE C

PASSO DE TEMPO ESTÁVEL

$$\Delta t_0 = \min_{p \in ent} \left[\frac{\phi_p(\rho_I)_p \Delta V_p}{\left(\frac{\partial F_I}{\partial s_I}\right)_{máx} (\Delta \dot{m}_I)_{ent}} \right]$$
(C.5)

Para garantir que este passo de tempo satisfará a equação (C.4) durante todo o processo de simulação, o somatório no denominador da expressão entre colchetes é substituído pelo máximo valor possível, o qual é dado pelo produto do máximo valor da derivada da função fluxo fracionário com o valor do fluxo de massa injetado pela face dos volumes coincidentes com a fronteira de entrada ou pelos poços injetores², segundo seja o caso. Por conseguinte, a procura do mínimo valor do passo de tempo se restringe neste caso apenas aos volumes contíguos às fronteiras de entrada ou onde existam poços injetores. Em todos os exemplos de aplicação apresentados no capítulo 8 o passo de tempo foi determinado empregando este procedimento.

² Se não existirem fontes de massa, pela conservação da massa a quantidade de fluido que abandona um volume de controle pode ser no máximo igual à quantidade que ingressa. Além disso, em situações normais, a máxima quantidade de fluido que poderá ingressar a um volume de controle será a quantidade de fluido injetado através da superfície de entrada adjacente ao volume ou através de um poço injetor localizado no seu interior.

APÊNDICE

REDUÇÃO DO PASSO DE TEMPO ESTÁVEL PELO TRATAMENTO EXPLÍCITO DO TERMO DE PRESSÃO CAPILAR

Em um algoritmo de solução seqüencial todas as grandezas dependentes da saturação podem ser tratadas em forma explícita, tal como é realizado ordinariamente no algoritmo IMPES. Mas também algumas delas podem ser tratadas em forma parcialmente implícita, como foi considerado neste trabalho, a fim de reduzir a restrição no passo de tempo necessária para garantir estabilidade. A aproximação semi-implícita do termo de pressão capilar evita que este termo influencie na estabilidade do algoritmo e, portanto, seja necessário reduzir a magnitude do passo de tempo além do valor que garante estabilidade para a equação diferencial sem pressão capilar. A vantagem desta prática em relação à economia do tempo de computação será mostrada a seguir mediante um exemplo.

Será considerado um caso de deslocamento unidimensional com vazão de injeção constante em uma amostra porosa homogênea, caso para o qual é possível deduzir uma expressão analítica relativamente simples para o passo de tempo que garante estabilidade. Esta expressão, deduzida a partir de uma expressão mais geral dada em [9], é a seguinte

$$\Delta t \leq \frac{\phi \Delta x}{\frac{2K\Psi}{\Delta x} \frac{\partial P_{c}}{\partial s_{I}} + \frac{Q}{A} \frac{\partial F_{I}}{\partial s_{I}}}$$
(D.1)

em que Δx é o espaçamento de malha, A é a área transversal da amostra e Q é a vazão injetada. Esta expressão corresponde ao caso em que todas as grandezas que

dependem da saturação são avaliadas explicitamente. Pode-se notar que se no denominador a parcela dependente da pressão capilar for de ordem de grandeza maior que a parcela dependente do fluxo fracionário, o passo de tempo estável variará em forma aproximadamente proporcional a $(\Delta x)^2$. Isso significaria por exemplo que se o espaçamento de malha for reduzido à metade, o passo de tempo teria que ser reduzido a um quarto. Por outro lado, se a influência da avaliação explícita da pressão capilar fosse retirada, o passo de tempo estável estaria dado por

$$\Delta t \le \frac{\phi \Delta x}{\frac{Q}{A} \frac{\partial F_I}{\partial s_I}} \tag{D.2}$$

Esta expressão mostra claramente que o passo de tempo estável é para esta situação diretamente proporcional ao espaçamento de malha Δx . Obviamente este comportamento do passo de tempo é muito menos restritivo, uma vez que se o espaçamento de malha for reduzido à metade, o passo de tempo teria que ser reduzido também só à metade . Isto pode ser evidenciado mais claramente com um exemplo numérico. Para este exemplo serão considerados todos os dados do problema unidimensional apresentado na seção 8.2.1.

A tabela D.1 mostra como variam os passos de tempo estáveis máximos satisfazendo as condições (D.1) e (D.2) quando o espaçamento de malha diminui progressivamente. Os passos de tempo foram normalizados mediante a expressão

$$\Delta \hat{t} = \frac{Q \Delta t}{\phi A L} \tag{D.3}$$

assim como também o espaçamento de malha mediante a expressão

$$\Delta \hat{x} = \frac{\Delta x}{L} = \frac{1}{N_e} \tag{D.4}$$

onde N_e é o número de elementos na malha unidimensional regular.

A tabela D.1 evidencia o comportamento previsto, ou seja, ao reduzir o espaçamento de malha o passo de tempo com a restrição provocada pela pressão capilar explícita diminui muito mais rapidamente que o passo de tempo sem essa restrição. APÊNDICE D

A medida que a malha é refinada a diferença entre os passos de tempo torna-se tão grande que, por exemplo, para uma malha com 320 elementos o passo de tempo com restrição é apenas 5,5% do passo de tempo sem a restrição provocada pela pressão capilar. Isso significa que para essa malha seriam necessárias quase 20 vezes mais operações para completar uma simulação (e, portanto, aproximadamente 20 vezes maior tempo de computação) quando a pressão capilar fosse aproximada explicitamente em relação ao caso em que não existisse nenhuma restrição associada à pressão capilar. Obviamente um comportamento desta natureza dependerá da importância relativa da pressão capilar em um problema de deslocamento dado. Contudo, este exemplo mostra que a estratégia de aproximar em forma semi-implícita o termo de pressão capilar na equação da saturação pode significar uma importante economia de tempo de computação para um algoritmo seqüencial.

N _e	$\Delta \hat{x}$	$(\Delta \hat{t})_{com P_C}$	$(\Delta \hat{t})_{semP_C}$	$rac{(\Delta \hat{t})_{com P_C}}{(\Delta \hat{t})_{sem P_C}}$
10	0,1	0,02956	0,04549	0,650
20	0,05	0,01095	0,02275	0,481
40	0,025	0,00360	0,01137	0,317
80	0,0125	0,00107	0,00569	0,188
160	0,00625	0,00030	0,00284	0,104
320	0,003125	0,00008	0,00142	0,055

Tabela D.1 Comparação da variação do passo de tempo estável.