

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

Fernando Sandro Velasco Hurtado

**FORMULAÇÃO TRIDIMENSIONAL DE VOLUMES FINITOS PARA  
SIMULAÇÃO DE RESERVATÓRIOS DE PETRÓLEO COM  
MALHAS NÃO-ESTRUTURADAS HÍBRIDAS**

Florianópolis  
2011

Fernando Sandro Velasco Hurtado

**FORMULAÇÃO TRIDIMENSIONAL DE VOLUMES FINITOS PARA  
SIMULAÇÃO DE RESERVATÓRIOS DE PETRÓLEO COM  
MALHAS NÃO-ESTRUTURADAS HÍBRIDAS**

Tese submetida ao Programa de Pós-Graduação  
em Engenharia Mecânica da Universidade  
Federal de Santa Catarina para a obtenção do  
grau de Doutor em Engenharia Mecânica.

Orientador: Clovis Raimundo Maliska, Ph.D

Florianópolis

2011

Catálogo na fonte pela Biblioteca Universitária  
da  
Universidade Federal de Santa Catarina

H967f Hurtado, Fernando Sandro Velasco

Formulação tridimensional de volumes finitos para simulação de reservatórios de petróleo com malhas não-estruturadas híbridas [tese] / Fernando Sandro Velasco Hurtado ; orientador, Clovis Raimundo Maliska. - Florianópolis, SC, 2011.

174 p.: il., grafs.

Tese (doutorado) - Universidade Federal de Santa Catarina, Centro Tecnológico. Programa de Pós-Graduação em Engenharia Mecânica.

Inclui referências

1. Engenharia mecânica. 2. Reservatórios - Métodos de simulação. 3. Método dos volumes finitos. I. Maliska, C. R. (Clovis Raimundo). II. Universidade Federal de Santa Catarina. Programa de Pós-Graduação em Engenharia Mecânica. III. Título.

CDU 621

Fernando Sandro Velasco Hurtado

**FORMULAÇÃO TRIDIMENSIONAL DE VOLUMES FINITOS PARA  
SIMULAÇÃO DE RESERVATÓRIOS DE PETRÓLEO COM  
MALHAS NÃO-ESTRUTURADAS HÍBRIDAS**

Esta tese foi julgada aprovada para a obtenção do título de "Doutor em Engenharia Mecânica", e aprovada em sua forma final pelo Curso de Pós-graduação em Engenharia Mecânica.

Florianópolis, 05 de abril de 2011

---

Prof. Eduardo Alberto Fancello, D. Sc.  
Coordenador

---

Prof. Clovis Raimundo Maliska, Ph. D.  
Orientador

**Banca examinadora:**

---

Prof. Clovis Raimundo Maliska, Ph. D.  
Presidente

---

Prof. Francisco Marcondes, Dr. Eng.  
Relator

---

Prof. Álvaro Luiz Gayoso de Azeredo Coutinho, Dr.

---

Prof. Eduardo Alberto Fancello, D. Sc.

---

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

A minha mãe Gueisa e  
a minha tia Arminda

# Agradecimentos

Ao professor Clovis R. Maliska, pela orientação, motivação e apoio constante. Expresso minha eterna gratidão pela oportunidade de trabalhar sob sua orientação no laboratório SINMEC.

Ao professor Fábio C. da Silva, pelos conselhos e as discussões que enriqueceram o conteúdo do trabalho.

Aos colegas e amigos Carlos N. Donatti, Gustavo G. Ribeiro e Aymar B. V. Pescador Jr. pela importante ajuda nos aspectos computacionais.

Ao pesquisador visitante Axel Dihlmann e a nossa secretária Tatiane C. Martins pelo auxílio e colaboração constantes em nossas atividades cotidianas no laboratório SINMEC.

Ao Programa de Pós-graduação em Engenharia Mecânica da Universidade Federal de Santa Catarina pela oportunidade de realizar o curso de doutorado.

Ao Programa de Recursos Humanos da Agência Nacional do Petróleo, Gás Natural e Biocombustíveis (PRH-ANP), pela bolsa de estudos.

À Rede Temática de Simulação e Gerenciamento de Reservatórios, patrocinada pela empresa Petrobras S. A., pelo incentivo às pesquisas que motivaram a realização do presente trabalho.

À empresa Engineering Simulation and Scientific Software (ESSS), pelo apoio técnico e por permitir a utilização do aplicativo Kraken para o pós-processamento e visualização de resultados.

A toda minha família, pelo carinho e apoio que recebo a pesar da distância.

# Sumário

<b>Lista de figuras</b>	<b>ii</b>
<b>Lista de símbolos</b>	<b>iii</b>
<b>Resumo</b>	<b>vii</b>
<b>Abstract</b>	<b>viii</b>
<b>1 Introdução</b>	<b>1</b>
1.1 Escopo e contribuições . . . . .	6
1.2 Organização do trabalho . . . . .	7
<b>2 Aspectos geométricos da discretização</b>	<b>9</b>
2.1 Malhas não-estruturadas híbridas . . . . .	9
2.2 Especificação de uma malha não-estruturada . . . . .	14
2.3 Topologia dos elementos . . . . .	17
2.3.1 Tetraedro . . . . .	18
2.3.2 Hexaedro . . . . .	19
2.3.3 Prisma . . . . .	20
2.3.4 Pirâmide . . . . .	21
2.4 Entidades duais . . . . .	23
2.4.1 Construção das faces . . . . .	25
2.4.2 Construção dos subelementos . . . . .	28
2.4.3 Entidades duais compostas . . . . .	29
2.5 Malhas de contorno . . . . .	34

<b>3</b>	<b>Aspectos numéricos básicos</b>	<b>37</b>
3.1	Características gerais de um método de volumes finitos baseado em elementos . . . . .	37
3.2	Convenções relativas à notação . . . . .	40
3.3	Transformação de coordenadas . . . . .	44
3.3.1	Matriz jacobiana . . . . .	45
3.3.2	Funções de forma . . . . .	46
3.4	Integração numérica . . . . .	50
3.4.1	Aproximação de integrais de volume . . . . .	50
3.4.2	Aproximação de integrais de superfície . . . . .	52
3.5	Aproximação do gradiente de uma variável . . . . .	56
3.6	Esquemas de interpolação espacial . . . . .	58
<b>4</b>	<b>Discretização de uma equação de conservação</b>	<b>61</b>
4.1	Equação de conservação genérica . . . . .	61
4.2	Discretização . . . . .	63
4.2.1	Termo de transporte advectivo . . . . .	63
4.2.2	Termo de transporte difusivo . . . . .	64
4.2.3	Integração temporal . . . . .	65
4.3	Montagem do sistema de equações . . . . .	68
4.4	Inclusão de condições de contorno . . . . .	72
4.4.1	Condição de fluxo prescrito . . . . .	72
4.4.2	Condição de Dirichlet . . . . .	73
<b>5</b>	<b>Aplicação a um modelo de escoamento em reservatórios</b>	<b>77</b>
5.1	Modelo de escoamento bifásico . . . . .	77
5.2	Discretização do modelo . . . . .	81
5.2.1	Equação da pressão . . . . .	82
5.2.2	Equação da saturação . . . . .	83
5.2.3	Esquemas de interpolação espacial . . . . .	85
5.3	Algoritmo de solução . . . . .	87
5.4	Representação discreta dos poços . . . . .	91
5.5	Modelo de poço . . . . .	97
<b>6</b>	<b>Exemplos de aplicação</b>	<b>105</b>
6.1	Problemas de difusão . . . . .	106
6.1.1	Problema 1-A . . . . .	108

6.1.2	Problema 1-B . . . . .	119
6.1.3	Problema 1-C . . . . .	122
6.2	Problema 2: advecção não-linear . . . . .	124
6.3	Verificação do modelo de poço . . . . .	131
6.3.1	Problema 3-A . . . . .	137
6.3.2	Problema 3-B . . . . .	139
6.3.3	Problema 3-C . . . . .	139
6.4	Problema 4: deslocamento bifásico . . . . .	142
<b>7</b>	<b>Conclusão</b>	<b>153</b>
	<b>Referências bibliográficas</b>	<b>157</b>
<b>A</b>	<b>Parâmetros geométricos</b>	<b>166</b>
A.1	Determinação do vetor área de face . . . . .	166
A.2	Baricentro das faces . . . . .	169
A.3	Cômputo do volume de um subelemento . . . . .	171

# Lista de figuras

1.1	Exemplo de um reservatório discretizado por uma malha <i>corner point</i> . . . . .	2
1.2	Exemplo de uma malha de Voronoi aplicada a discretização de um reservatório . . . . .	3
1.3	Malha híbrida com geometria radial ao redor dos poços . . . . .	4
1.4	Exemplo de uma malha não-estruturada de triângulos empregada no método de volumes finitos baseado em elementos . . . . .	5
1.5	Malha de prismas para a representação discreta de fraturas em um meio poroso . . . . .	6
2.1	Entidades básicas em uma malha tridimensional . . . . .	10
2.2	Exemplos de situações que não satisfazem as condições de conformidade . . . . .	13
2.3	Exemplos de transição conforme entre hexaedros e tetraedros . . . . .	14
2.4	Exemplo da especificação dos vértices de uma malha . . . . .	15
2.5	Exemplo da especificação dos elementos de uma malha . . . . .	17
2.6	Topologia do tetraedro . . . . .	18
2.7	Topologia do hexaedro . . . . .	20
2.8	Topologia do prisma . . . . .	21
2.9	Topologia da pirâmide . . . . .	22
2.10	Entidades primárias e entidades duais em nível de elemento . . . . .	24
2.11	Construção das faces no tetraedro, no hexaedro e no prisma . . . . .	26
2.12	Construção das faces no elemento piramidal . . . . .	27

2.13	Faces e subelementos no tetraedro . . . . .	28
2.14	Faces e subelementos no hexaedro . . . . .	29
2.15	Faces e subelementos no prisma . . . . .	30
2.16	Faces e subelementos na pirâmide . . . . .	30
2.17	Volume de controle em uma malha tridimensional mista . . . . .	31
2.18	Corte de um volume de controle . . . . .	32
2.19	Entidades primárias e entidades duais compostas . . . . .	33
2.20	Exemplo da especificação de uma malha de contorno . . . . .	34
2.21	Subdivisão dos elementos de contorno . . . . .	35
2.22	Volume de controle adjacente a um contorno . . . . .	36
3.1	Características fundamentais dos métodos de volumes finitos baseados em elementos . . . . .	39
3.2	Notação de entidades e conjuntos de entidades (parte 1). . . . .	41
3.3	Notação de entidades e conjuntos de entidades (parte 2). . . . .	42
3.4	Notação de entidades e conjuntos de entidades associadas à malhas de contorno. . . . .	43
3.5	Tetraedro no espaço transformado . . . . .	47
3.6	Hexaedro no espaço transformado . . . . .	48
3.7	Prisma no espaço transformado . . . . .	49
3.8	Pirâmide no espaço transformado . . . . .	50
3.9	Orientação absoluta do vetor área de face . . . . .	54
3.10	Orientação do vetor área de face, relativa aos volumes de controle . . . . .	55
3.11	Interpolação <i>upwind</i> de um ponto . . . . .	60
4.1	Volume de controle em um escoamento . . . . .	63
4.2	Equação discretizada para um volume de controle . . . . .	68
4.3	Contribuições de um elemento no sistema de equações discretizadas . . . . .	70
4.4	Contribuições de uma face no sistema de equações discretizadas . . . . .	71
4.5	Redução do sistema de equações pela imposição de uma condição de Dirichlet . . . . .	76
5.1	Variação típica das funções dependentes da saturação e suas derivadas . . . . .	87

5.2	Variante do algoritmo de solução IMPES . . . . .	89
5.3	Representação discreta de um poço . . . . .	92
5.4	Volume de controle associado a um nó no poço . . . . .	95
5.5	Grandezas envolvidas em um modelo de poço convencional	98
5.6	Problema auxiliar para a determinação do índice de poço em duas dimensões . . . . .	100
5.7	Problema auxiliar para a determinação do índice de poço em três dimensões . . . . .	104
6.1	Especificação do problema 1-A . . . . .	108
6.2	Malhas de $20 \times 20 \times 20$ hexaedros, apresentando diferente amplitude de distorção dos elementos . . . . .	110
6.3	Convergência da pressão no problema 1-A, para malhas de hexaedros com diferente amplitude de distorção . . . . .	111
6.4	Convergência do gradiente da pressão no problema 1-A, para malhas de hexaedros com diferente amplitude de dis- torção . . . . .	111
6.5	Convergência dos fluxos no problema 1-A, para malhas de hexaedros com diferente amplitude de distorção . . . . .	111
6.6	Índice de deformação dos elementos para diferentes am- plitudes de distorção . . . . .	113
6.7	Projeção de uma faceta arqueada sobre o plano médio . . .	114
6.8	Índice de arqueamento dos elementos para diferentes am- plitudes de distorção . . . . .	114
6.9	Divisão de um hexaedro em tetraedros, prismas ou pirâ- mides . . . . .	115
6.10	Convergência da pressão no problema 1-A, para malhas de tetraedros com diferente amplitude de distorção . . . . .	116
6.11	Convergência do gradiente da pressão no problema 1-A, para malhas de tetraedros com diferente amplitude de dis- torção . . . . .	116
6.12	Convergência dos fluxos no problema 1-A, para malhas de tetraedros com diferente amplitude de distorção . . . . .	116
6.13	Convergência da pressão no problema 1-A, para malhas de prismas com diferente amplitude de distorção . . . . .	117

6.14	Convergência do gradiente da pressão no problema 1-A, para malhas de prismas com diferente amplitude de distorção . . . . .	117
6.15	Convergência da pressão no problema 1-A, para malhas de pirâmides com diferente amplitude de distorção . . . . .	118
6.16	Convergência do gradiente da pressão no problema 1-A, para malhas de pirâmides com diferente amplitude de distorção . . . . .	118
6.17	Três malhas híbridas utilizadas nos testes de convergência	119
6.18	Comparação da convergência da pressão no problema 1-A em malhas hexaédricas, tetraédricas e híbridas . . . . .	120
6.19	Comparação da convergência do gradiente da pressão no problema 1-A em malhas hexaédricas, tetraédricas e híbridas . . . . .	120
6.20	Comparação da convergência dos fluxos no problema 1-A em malhas hexaédricas, tetraédricas e híbridas . . . . .	120
6.21	Especificação do problema 1-B . . . . .	121
6.22	Convergência da pressão no problema 1-B em malhas de diferente topologia . . . . .	123
6.23	Convergência do gradiente da pressão no problema 1-B em malhas de diferente topologia . . . . .	123
6.24	Convergência dos fluxos no problema 1-B em malhas de diferente topologia . . . . .	123
6.25	Especificação do problema 1-C . . . . .	124
6.26	Convergência da pressão no problema 1-C em malhas de diferentes topologias . . . . .	125
6.27	Convergência do gradiente da pressão no problema 1-C em malhas de diferentes topologias . . . . .	125
6.28	Convergência dos fluxos no problema 1-C em malhas de diferentes topologias . . . . .	125
6.29	Especificação do problema 2 . . . . .	126
6.30	Função fluxo fracionário e perfil de saturação analítico para o problema 2 . . . . .	127
6.31	Variação temporal da norma do erro da saturação no problema 2, para três malhas de hexaedros regulares . . . . .	129

6.32	Convergência do erro da saturação para malhas hexaédricas regulares . . . . .	130
6.33	Convergência do erro da saturação para malhas hexaédricas apresentando diferente amplitude de distorção . . . . .	131
6.34	Campos de saturação correspondentes à solução analítica e a soluções numéricas obtidas em malhas com diferentes amplitudes de distorção . . . . .	132
6.35	Convergência do erro da saturação para malhas regulares de diferente topologia . . . . .	133
6.36	Especificação da geometria do domínio e do poço . . . . .	134
6.37	Estrutura da malha M-1 . . . . .	135
6.38	Estrutura da malha M-2 . . . . .	135
6.39	Tensor permeabilidade para os problemas 3-A, 3-B e 3-C .	136
6.40	Comparação dos campos de pressão para o problema 3-A resolvido nas malhas M-1 e M-2 . . . . .	137
6.41	Comparação dos resultados de vazão no poço para o problema 3-A . . . . .	138
6.42	Comparação dos campos de pressão para o problema 3-B resolvido nas malhas M-1 e M-2 . . . . .	140
6.43	Comparação dos resultados de vazão no poço para o problema 3-B . . . . .	140
6.44	Comparação dos campos de pressão para o problema 3-C resolvido nas malhas M-1 e M-2 . . . . .	141
6.45	Comparação dos resultados de vazão no poço para o problema 3-C . . . . .	141
6.46	Malha não-estruturada para o problema 4 . . . . .	143
6.47	Propriedades físicas associadas às camadas do reservatório no problema 4 . . . . .	144
6.48	Geometria dos poços e condições de operação prescritas pra o problema 4 . . . . .	145
6.49	Campo de pressão em três instantes de tempo . . . . .	146
6.50	Campo de saturação em três instantes de tempo . . . . .	148
6.51	Campo de saturação em duas seções transversais do domínio, para três instantes de tempo . . . . .	149
6.52	Vazões ao longo dos poços produtores, em três níveis de tempo . . . . .	150

6.53	Varição temporal das vazões completas no poço P-1 . . . .	151
6.54	Varição temporal das vazões completas no poço P-2 . . . .	151
6.55	Corte de água nos dois poços produtores . . . . .	151
6.56	Volume de óleo produzido nos dois poços produtores . . . .	152
A.1	Transformação de coordenadas para o cômputo do vetor área de uma face quadrangular . . . . .	167
A.2	Coordenadas locais dos baricentros das faces do tetraedro	170
A.3	Coordenadas locais dos baricentros das faces do hexaedro	170
A.4	Coordenadas locais dos baricentros das faces do prisma . .	171
A.5	Coordenadas locais dos baricentros das faces da pirâmide	171
A.6	Coordenadas locais dos baricentros e volume dos subele- mentos do tetraedro . . . . .	172
A.7	Coordenadas locais dos baricentros e volume dos subele- mentos do hexaedro . . . . .	172
A.8	Coordenadas locais dos baricentros e volume dos subele- mentos do prisma . . . . .	173
A.9	Coordenadas locais dos baricentros e volume dos subele- mentos da pirâmide . . . . .	173

# Lista de símbolos

## Grandezas físicas

$C$	Condutância genérica	
$F$	Função fluxo fracionário	
$g$	Magnitude da aceleração da gravidade	$L T^{-2}$
$\mathbf{g}$	Vetor aceleração da gravidade	$L T^{-2}$
$G$	Função potencial associada à gravidade	$L^2 T^{-2}$
$\mathbf{K}$	Tensor permeabilidade absoluta	$L^2$
$k_r$	Permeabilidade relativa	
$\dot{m}$	Fluxo de massa	$M T^{-1}$
$M$	Massa	$M$
$P$	Pressão	$M L^{-1} T^{-2}$
$\mathbf{r}$	Vetor posição de um ponto	$L$
$r$	Coordenada radial	$L$
$q$	Vazão	$L^3 T^{-1}$
$s$	Saturação	
$\mathbf{S}$	Vetor área	$L^2$
$t$	Tempo	$T$
$u$	Coordenada na direção axial de um poço	$L$
$\mathbf{v}$	Vetor velocidade	$L T^{-1}$
$V$	Volume	$L^3$
WI	Índice de poço	$L^3$
$x, y, z$	Coordenadas cartesianas	$L$
$\Gamma$	Fluxo genérico através de uma fronteira	
$\lambda$	Mobilidade	$M^{-1} L T$

$\mu$	Viscosidade dinâmica	$ML^{-1}T^{-1}$
$\omega$	Fluxo parcial associado ao termo da gravidade	$L^5T^{-2}$
$\varpi$	Vazão entre poço e reservatório	$L^3T^{-1}$
$\varpi'$	Vazão por unidade de comprimento de poço	$L^2T^{-1}$
$\Pi$	Pressão na interface entre poço e reservatório	$ML^{-1}T^{-2}$
$\psi$	Termo fonte na equação genérica de conservação	
$\rho$	Densidade	$ML^{-3}$
$\varsigma$	Produto da mobilidade total e a densidade média	$L^{-2}T$
$\phi$	Porosidade	
$\theta$	Densidade de fluxo genérica	
$\Theta$	Grandeza escalar genérica	
$\tau$	Tempo adimensional	
$\Upsilon$	Função auxiliar associada ao termo da gravidade	$M^{-1}LT$
$\chi$	Coordenada na direção da gravidade	$L$
$\xi, \eta, \zeta$	Coordenadas locais	$L$

## Subíndices

adm	Admissível
aux	Auxiliar
$M$	Médio
max	Máximo
min	Mínimo
$o$	Fasea óleo
ref	Referido ao nível de referência
$w$	Fase água
$wo$	Dependente de ambas as fases, água e óleo
$T$	Total
$\gamma$	Fase genérica

## Entidades geométricas

$\mathcal{B}$	Malha superficial associada a um contorno
$e$	Elemento
$\mathcal{E}$	Conjunto de elementos

$f$	Face
$\hat{f}$	Baricentro de uma face
$\mathcal{F}$	Conjunto de faces
$\ell$	Nó (vértice) quando referido a um elemento
$\mathcal{M}$	Malha volumétrica
$n$	Nó (vértice)
$\mathcal{N}$	Conjunto de nós
$p$	Nó (vértice) quando associado a um volume de controle
$s$	Subelemento
$\hat{s}$	Baricentro de um subelemento
$S$	Superfície de controle
$\mathcal{V}$	Volume de controle
$\mathcal{W}$	Malha unidimensional associada a um poço
$b_e$	Elemento de contorno
$b_{\mathcal{E}}$	Conjunto de elementos de contorno
$b_f$	Face de contorno
$b_{\mathcal{F}}$	Conjunto de faces de contorno
$w_e$	Elemento de poço
$w_{\mathcal{E}}$	Conjunto de elementos de poço
$\Omega$	Domínio
$\partial\Omega$	Contorno

## Grandezas associadas à discretização

<b>A</b>	Matriz de coeficientes de um sistema de equações lineares
$A$	Coefficiente de uma equação linear. Amplitude da distorção de uma malha
<b>b</b>	Vetor de termos independentes de um sistema de equações lineares
$b$	Termo independente de uma equação linear
<b>D</b>	Matriz de derivadas parciais das funções de forma
$h$	Comprimento representativo dos elementos de uma malha
<b>I</b>	Tensor identidade
<b>J</b>	Matriz jacobiana da transformação de coordenadas
$nB(f)$	Nó (volume de controle) localizado atrás da face $f$ , de acordo com a orientação absoluta

$nC^{(bf)}$	Nó (volume de controle) associado à face de contorno $bf$
$nF(f)$	Nó (volume de controle) localizado a frente da face $f$ , de acordo com a orientação absoluta
$N$	Função de forma
$N_n^e$	Número de nós (vértices) do elemento $e$
$N_e^{\mathcal{M}}$	Número total de elementos da malha $\mathcal{M}$
$N_n^{\mathcal{M}}$	Número de nós (vértices) da malha $\mathcal{M}$
$N_t$	Número de níveis de tempo discretos
$\alpha$	Coefficiente associado a um esquema de interpolação local em um elemento
$\beta$	Operador associado à aproximação do fluxo difusivo através de uma face
$\beta$	Componente do operador associado à aproximação do fluxo difusivo através de uma face
$\Delta S$	Vetor área associado a uma entidade geométrica da malha
$\Delta t$	Intervalo de tempo
$\Delta V$	Volume de uma entidade geométrica da malha
$\epsilon$	Norma do erro associado a uma aproximação numérica
$\sigma$	Parâmetro auxiliar que fornece o sinal apropriado para o vetor área de face em relação a um volume de controle

## Outros símbolos

$\partial_\gamma \Theta$	Derivada parcial da variável $\Theta$ em relação à variável independente $\gamma$
$\nabla \Theta$	Gradiente da variável escalar $\Theta$
$\nabla \cdot \Theta$	Divergente da variável vetorial $\Theta$
$\bar{\Theta}$	Valor médio da variável $\Theta$
$\check{\Theta}$	Valor nodal da variável $\Theta$
$\check{\Theta}$	Vetor de valores nodais da variável $\Theta$
$\check{\Theta}^e$	Vetor de valores nodais da variável $\Theta$ no elemento $e$
$ \Theta ^m$	Valor da variável $\Theta$ no nível de tempo $m$
$\mathbf{A}^T$	Transposta da matriz $\mathbf{A}$
$\mathbf{A}^{-1}$	Inversa da matriz $\mathbf{A}$
$\mathbf{A}^{-T}$	Inversa da transposta da matriz $\mathbf{A}$

# Resumo

A simulação numérica é uma das ferramentas mais poderosas que auxiliam a tomada de decisões nos processos de produção de reservatórios de petróleo. Entretanto, atualmente há uma defasagem entre a qualidade da descrição física e geométrica dos reservatórios disponível e a capacidade dos métodos numéricos empregados para resolver os modelos de escoamento multifásico nos simuladores comerciais. O grande desafio é incorporar essa informação detalhada em modelos numéricos de modo a incrementar a precisão e a confiabilidade das simulações obtidas. Uma das alternativas para tanto, analisada neste trabalho, é a utilização de malhas não-estruturadas híbridas como base geométrica para a discretização das equações que modelam o escoamento nos reservatórios. As malhas tridimensionais consideradas podem estar formadas, no caso mais geral, por quatro tipos de elementos: tetraedros, hexaedros, prismas e pirâmides. Uma vez que cada um desses tipos de elementos se adapta melhor à discretização de determinados tipos de geometrias, a possibilidade de utilizá-los do modo unificado em uma mesma formulação confere a ela um alto grau de flexibilidade geométrica. O método de volumes finitos baseado em elementos é considerado para a discretização das equações diferenciais que descrevem o escoamento multifásico nos reservatórios. Uma das principais características do método, de importância fundamental na simulação de reservatórios, é a conservação estrita das grandezas físicas no nível discreto. Mediante experimentos numéricos empregando a formulação apresentada, diversas características da metodologia são avaliadas neste trabalho.

# Abstract

Numerical simulation is a powerful tool for predicting the production performance of petroleum reservoirs. However, it is evident an increasing gap between the quality of the geologic models currently available and the capacity of numerical models in reservoir simulators. The incorporation of such detailed geometrical and physical information in flow numerical models, in order to increase accuracy and reliability, is a big challenge today. An option for that, analyzed in this work, is the use of hybrid unstructured grids as geometrical basis for the discretization of differential equations. The three-dimensional grids considered are formed by tetrahedra, hexahedra, prisms, and pyramids, in the most general case. A numerical formulation treating those elements in a unified way achieves a high degree of flexibility for dealing with complex domains. In order to achieve that, the element-based finite volume method is considered for the discretization of the multiphase flow differential equations. The strict conservation of physical quantities at discrete level is one of the main features of the method, and a fundamental one for reservoir simulation. By means of numerical experiments, several properties of the described numerical formulation are evaluated in this work.

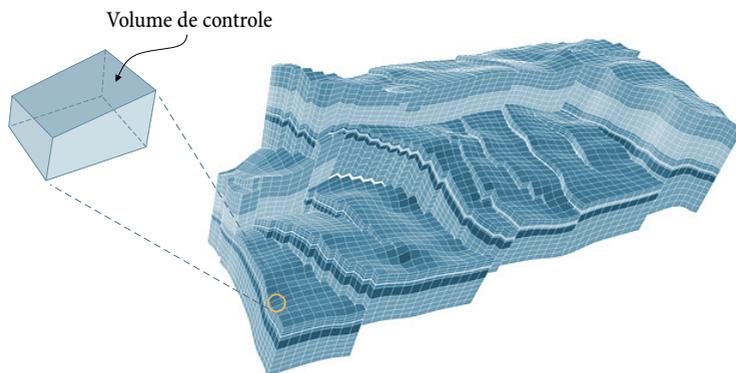
# Introdução

A simulação de reservatórios de petróleo tem como meta final a previsão da produção de hidrocarbonetos de um reservatório sob diferentes estratégias de operação. Para tanto, modelos matemáticos do escoamento de fluidos no reservatório devem ser aproximados numericamente e resolvidos com auxílio de equipamentos computacionais. Todo modelo numérico está baseado em aproximações numéricas das equações governantes, associadas a uma representação discreta do domínio de solução, a denominada malha computacional.

Nos primórdios da simulação de reservatórios consideravam-se malhas extremamente simples para representar a geometria de um reservatório. Isso, por uma parte, permitia simplificar o modelo numérico a ponto de permitir a solução das equações resultantes com os recursos computacionais disponíveis na época. Além do mais, o conhecimento da estrutura física dos reservatórios, que a tecnologia da época permitia determinar, era também bastante limitado. Contudo, essa situação tem mudado significativamente em anos recentes, em que modelos geológicos tridimensionais bastante detalhados podem ser obtidos, graças a avanços substanciais em disciplinas tais como a geofísica, a petrofísica e a geoestatística. Os modelos geológicos disponíveis atualmente contêm muita mais informação

sobre a estrutura física dos reservatórios da que pode ser utilizada na simulação dos escoamentos associados [29].

Na atualidade, a maioria dos simuladores comerciais empregam as denominadas malhas *corner point* [13, 19], para a representação geométrica dos reservatórios. Essas malhas são formadas por hexaedros, os quais estão organizados mantendo a mesma estrutura lógica das malhas cartesianas. No entanto, como nas malhas *corner point* é possível especificar as coordenadas dos vértices dos hexaedros, estas podem ser não-ortogonais. Graças a isso é possível conformar as faces dos volumes com algumas superfícies do modelo geológico, tais como os horizontes que separam camadas de diferente material rochoso ou falhas geológicas. Contudo, como a malha deve manter uma estrutura lógica rígida, a representação de algumas dessas características geométricas do reservatório pode ser bastante grosseira. A figura 1.1 mostra um exemplo de uma malha *corner point* representando a geometria de um reservatório.



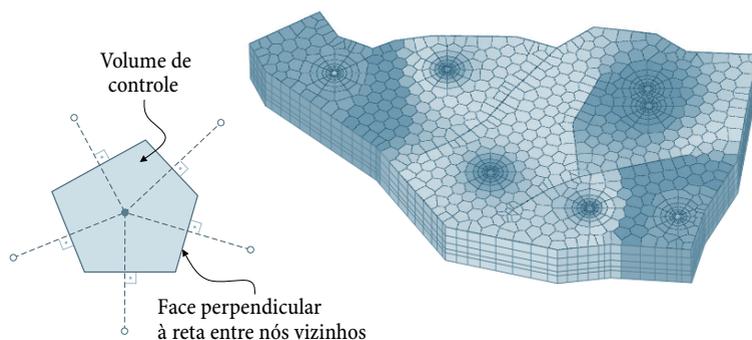
**Figura 1.1** – Exemplo de um reservatório discretizado por uma malha *corner point*.

Em certas aplicações pode ser necessária a representação mais acurada da geometria de componentes críticos do modelo físico de um reservatório, como falhas, fraturas ou poços. Uma alternativa, para tanto, é o uso de malhas não-estruturadas, as quais são amplamente utilizadas em outras disciplinas, por exemplo, CFD<sup>1</sup>, análise estrutural, eletromag-

<sup>1</sup> *Computational fluid dynamics*.

netismo e outras. Nesse tipo de malhas, o domínio de solução é dividido em entidades de geometria simples, as quais não precisam ser arranjadas de acordo a uma estrutura predeterminada. Graças a essa característica, as malhas não-estruturadas podem representar geometrias altamente complexas de modo preciso e eficiente. O presente trabalho está dedicado ao desenvolvimento de uma formulação numérica de volumes finitos, capaz de resolver problemas de escoamento multifásico em reservatórios discretizados por meio de malhas não-estruturadas tridimensionais.

Uma das primeiras tentativas de aplicação de malhas não-estruturadas à simulação de reservatórios tridimensionais deu-se no início da década de noventa, com as denominadas malhas de Voronoi<sup>2</sup> [29, 30, 48, 79]. Nessas malhas, as interfaces entre volumes de controle vizinhos são perpendiculares aos segmentos que unem os pontos em que as variáveis são aproximadas e, além disso, cortam esses segmentos no ponto médio. Graças a tal propriedade, ilustrada na figura 1.2, o fluxo em uma interface pode ser aproximado considerando apenas valores correspondentes aos dois pontos vizinhos à interface. Essa simplificação, contudo, somente é válida se o meio poroso representado for isotrópico.

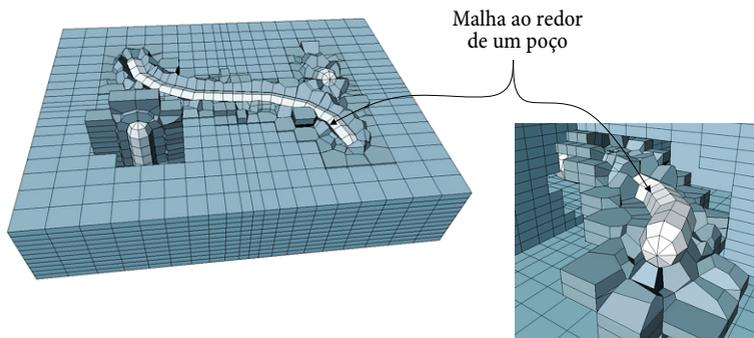


**Figura 1.2** – Exemplo de uma malha de Voronoi aplicada a discretização de um reservatório.

Apesar de ter sido desenvolvida uma extensão das malhas de Voronoi para casos anisotrópicos, as denominadas malhas kPEBI [29], sua apli-

<sup>2</sup> Mais conhecidas na área como malhas PEBI (*perpendicular bisection*).

cação era limitada a baixos níveis de anisotropia. Além disso, como no exemplo da figura 1.2, na maioria das discretizações aplicando malhas de Voronoi a malha era não-estruturada apenas no plano horizontal. Mais recentemente foram propostas técnicas para construção de malhas híbridas baseadas em uma generalização dos diagramas de Voronoi [5, 21, 55]. Nessas malhas híbridas, um exemplo das quais é mostrado na figura 1.3, a maior parte do reservatório é discretizado por uma malha estruturada *corner point*, a vizinhança dos poços por malhas cilíndricas adaptadas à trajetória dos poços e as regiões de transição por malhas com características semelhantes às malhas de Voronoi. O intuito desse tipo de discretização é a representação acurada da trajetória de poços direcionais. O modelo numérico para o escoamento mantém, entretanto, as mesmas limitações que nas malhas *corner point* e Voronoi quanto à representação de meios anisotrópicos.

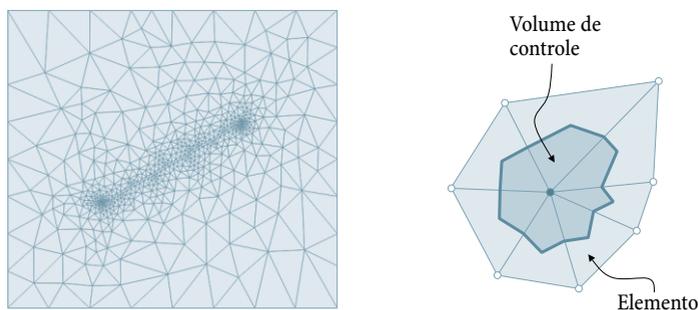


**Figura 1.3** – Malha híbrida com geometria radial ao redor dos poços (reproduzida da referência [21]).

Na literatura, a maioria das aplicações de malhas não-estruturadas mais gerais à simulação de reservatórios correspondem a formulações bidimensionais, em que o reservatório é representado por uma malha de triângulos [17, 22, 26, 28], de quadriláteros [38, 70] ou uma mistura de triângulos e quadriláteros [12, 24, 34]. Todas as publicações recém citadas empregam variantes do denominado *control-volume finite element method* (CVFEM), para a discretização das equações do modelo de escoamento. Nesse método, as variáveis são aproximadas nos vértices da malha e os vo-

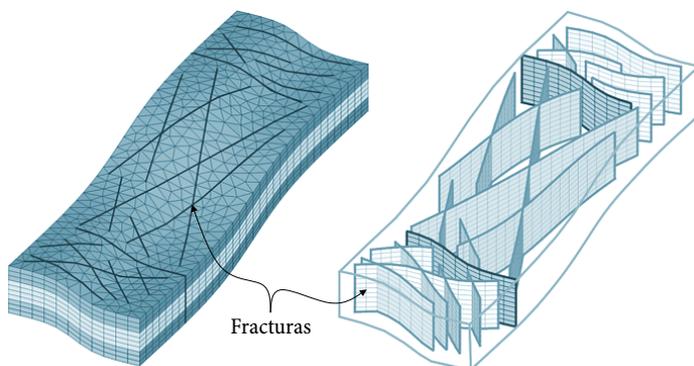
lumes de controle são construídos como entidades duais dos vértices, com contribuições de diferentes elementos. Não existe, como em formulações utilizadas com malhas de Voronoi, nenhum requisito de ortogonalidade para a construção dos volumes de controle. Um volume de controle típico do método é mostrado na figura 1.4, além de um exemplo de uma malha não-estruturada de triângulos.

A derivação das equações discretizadas segue as diretrizes do método de volumes finitos, em que cada equação representa o balanço de alguma grandeza física em um volume de controle. Nesses balanços, os fluxos nas interfaces entre volumes de controle podem ser determinados mediante aproximações numéricas restritas aos elementos da malha. Devido a essas características, neste trabalho prefere-se empregar para esse tipo de abordagem o nome de *método de volumes finitos baseado em elementos* [45]. A formulação numérica apresentada nos capítulos subsequentes segue esse enfoque básico e o estende a malhas tridimensionais híbridas, formadas por tetraedros, hexaedros, prismas e pirâmides.



**Figura 1.4** – Exemplo de uma malha não-estruturada de triângulos (reproduzida da referência [28]) e da construção de um volume de controle no método de volumes finitos baseado em elementos.

Algumas formulações empregando malhas não-estruturadas tridimensionais têm sido publicadas em anos recentes, a maioria delas voltadas à simulação de reservatórios fraturados [25, 33, 50, 53, 58, 68]. Nessas formulações, as fraturas são representadas de forma discreta, segundo ilustra a figura 1.5, aproveitando a flexibilidade geométrica das malhas não-estruturadas.



**Figura 1.5** – Malha de prismas para a representação discreta de fraturas em um meio poroso (reproduzida da referência [33]).

## 1.1 Escopo e contribuições

O objetivo principal deste trabalho é desenvolver uma extensão para três dimensões do método de volumes finitos baseado em elementos, apta para ser aplicada à simulação de reservatórios. De forma semelhante ao caso bidimensional, em que é possível tratar de forma unificada malhas não-estruturadas de triângulos e/ou quadriláteros, a formulação apresentada considera malhas que podem estar constituídas por elementos de formas diferentes. As malhas tridimensionais consideradas podem estar formadas por hexaedros, tetraedros, prismas, pirâmides ou uma mistura de todos esses elementos. É possível antever o grande potencial da aplicação de malhas híbridas, formadas por esses tipos de elementos, para a representação de detalhes geométricos importantes dos reservatórios de petróleo. A possibilidade de considerar diferentes elementos na discretização de um domínio físico confere um grau adicional de flexibilidade a uma formulação numérica para malhas não-estruturadas.

A descrição da formulação é realizada de forma sistemática, abordando inicialmente os aspectos puramente geométricos da metodologia, para depois apresentar as aproximações numéricas associadas, em ordem crescente de complexidade. Alguns aspectos importantes que nem sempre são descritos adequadamente na literatura, por exemplo, a especificação

de malhas não-estruturadas, são abordados com certo detalhe. Especial ênfase é dada a definição de uma notação completa e consistente para associar as aproximações numéricas a entidades geométricas das malhas computacionais.

Para a apresentação da formulação numérica adotou-se um enfoque que vai do geral ao particular de forma gradual. Inicialmente são descritas as aproximações numéricas básicas de modo geral, sem qualquer particularização específica aos modelos de escoamentos em reservatórios de petróleo. Por uma parte, isso facilita a apresentação, pois permite focar a descrição nos aspectos numéricos relevantes sem que detalhes específicos a um dado modelo tornem as equações mais complexas do necessário. Por outro lado, essa abordagem permitirá que o trabalho sirva de base para futuros trabalhos visando aplicar a metodologia apresentada a outro tipo de problemas físicos.

Após consolidadas as bases geométricas e numéricas da metodologia, ela é aplicada à discretização de um modelo de escoamento bifásico em reservatórios. Um dos componentes chave para uma formulação aplicada à simulação de reservatórios é a modelagem do escoamento entre os poços e o reservatório. Para a discretização na vizinhança dos poços é considerada uma abordagem similar à proposta em [5, 21], com malhas de geometria cilíndrica acompanhando a trajetória dos poços. Entretanto, diferentemente das malhas consideradas nas referências citadas, com a formulação de volumes finitos baseada em elementos não existe qualquer restrição de ortogonalidade para a discretização dos reservatórios. Complementando esse tipo de representação geométrica, é considerado um procedimento especial para determinar os denominados índices de poço, os quais são empregados para modelar o escoamento entre um poço e o reservatório.

## 1.2 Organização do trabalho

Este trabalho está dividido em 7 capítulos, incluindo a presente introdução e a conclusão. Os restantes capítulos são sintetizados a seguir.

O capítulo 2 apresenta os conceitos relativos à geometria da discretização em um método de volumes finitos baseado em elementos. Esses conceitos serão aplicados nos capítulos subsequentes na descrição sistematizada da formulação numérica. Especial atenção é dada aos aspectos

construtivos das entidades duais que determinam os volumes de controle, dada a importância dessas entidades na metodologia adotada.

No capítulo 3 são apresentados os ingredientes básicos de uma formulação numérica de volumes finitos baseada em elementos. As aproximações numéricas descritas neste capítulo possuem caráter geral, pois podem ser aplicadas à discretização de equações que modelam um amplo espectro de processos físicos, além daqueles encontrados na simulação de reservatórios. O esquema de notação proposto para a metodologia é descrito no início do capítulo.

No capítulo 4, os conceitos apresentados no capítulo 3 são aplicados à discretização de uma equação de conservação de uma grandeza escalar genérica. Essa equação é o protótipo das equações que compõem diversos modelos de escoamentos, não apenas no âmbito da simulação de reservatórios. Por esse motivo, o conteúdo desse capítulo, assim como o dos capítulos precedentes, pode ser utilizado em outras formulações numéricas aplicando a metodologia. A descrição da discretização da equação de conservação genérica é realizada passo a passo até a fase final do processo, que é a inclusão das condições de contorno do problema no sistema de equações discretizadas.

No capítulo 5, o procedimento de discretização descrito em capítulos precedentes é aplicado a um modelo de escoamento bifásico imiscível. Além de descrever adequadamente diversos processos de deslocamento em reservatórios, esse modelo é o suficientemente simples como para permitir uma descrição detalhada do processo de discretização das equações. Na parte final do capítulo é descrita a forma como o escoamento entre um poço e o reservatório é modelado na formulação.

Por fim, o capítulo 6 é dedicado a apresentar resultados de alguns exemplos de aplicação da formulação desenvolvida. No intuito de verificar a convergência das soluções numéricas, problemas simplificados são resolvidos em sequências de malhas com refinamento progressivo. Para tanto, domínios de geometria simples e malhas de estrutura topológica fixa são consideradas, a fim de manter sob controle a forma em que o refinamento das malhas é realizado. Considerando outro tipo de problemas, é realizada a verificação do modelo de poço proposto no capítulo 5. Na parte final do capítulo é apresentado um problema demonstrativo em um reservatório sintético tridimensional.

# Aspectos geométricos da discretização

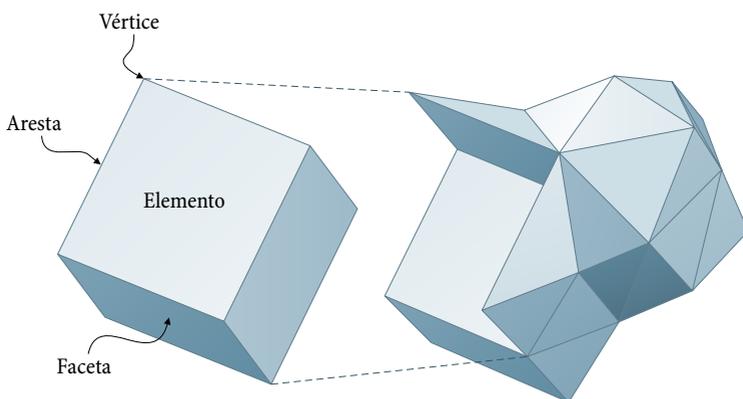
## 2.1 Malhas não-estruturadas híbridas

De uma forma geral, uma malha computacional é um conjunto de entidades geométricas que constituem a representação discreta de um domínio espacial. O propósito de uma malha é proporcionar o suporte geométrico ao processo de discretização das equações governantes de um problema físico definido nesse domínio. Assim, em um método numérico, a representação discreta das variáveis do problema sempre está associada a determinadas entidades da malha computacional.

Uma malha é composta, em geral, por entidades geométricas de diferente dimensão. Em uma malha definida em  $\mathbb{R}^n$  coexistem entidades de dimensão  $d = 0, \dots, n$ , com relações de interdependência entre elas. As entidades de dimensão  $n$  são as entidades principais da malha, pois são as porções finitas em que o domínio é dividido. Neste trabalho, como na maior parte da literatura, essas entidades são denominadas de *elementos*.

Em  $\mathbb{R}^3$ , os elementos são corpos poliédricos, geralmente de forma simples, sendo os mais comuns os tetraedros e os hexaedros.

Cada entidade de uma malha é limitada por entidades de dimensão menor. Assim, em malhas tridimensionais, os elementos encontram-se limitados por entidades de dimensão 2, as quais recebem o nome de *facetas*.<sup>1</sup> As facetas, por sua vez, são limitadas por entidades de dimensão 1, as *arestas*. Por fim, nas duas extremidades de uma aresta encontram-se os *vértices*, que são entidades de dimensão 0. A figura 2.1 ilustra todas as entidades mencionadas, em uma porção de malha tridimensional.



**Figura 2.1** – Entidades básicas em uma malha tridimensional.

A seguir são formalizadas algumas definições referidas à malha computacional.

**Definição 2.1.**  $\mathcal{M}$  é uma malha do domínio fechado  $\Omega$ , se satisfaz as seguintes condições [23]:

- C1: Todo elemento  $e$  de  $\mathcal{M}$  possui um interior não-vazio.
- C2: A interseção do interior de dois elementos em  $\mathcal{M}$  é o conjunto vazio.
- C3:  $\Omega = \bigcup_{e \in \mathcal{M}} e$ .

---

<sup>1</sup> Na literatura, o nome mais comum para essas entidades é face, porém, neste trabalho essa denominação é reservada para as entidades que limitam os volumes de controle, os quais serão definidos mais adiante.

**Definição 2.2.** A *conectividade* de uma malha é a definição das conexões entre seus vértices [23].

**Definição 2.3.** Uma malha *não-estruturada* é uma malha cuja conectividade é irregular e, portanto, deve ser definida explicitamente.

Diferentemente, a conectividade de uma malha estruturada pode estar definida de forma implícita, por exemplo, por um mapeamento entre seus vértices e os elementos de uma matriz. Entretanto, tal mapeamento requer uma organização rígida de elementos e vértices, o qual dificulta a geração desse tipo de malhas em domínios de geometria complexa. Ao contrário, as malhas não-estruturadas possuem uma extraordinária flexibilidade geométrica, uma vez que vértices e elementos podem estar distribuídos de modo quase arbitrário. Devido a isso, a melhor alternativa para a discretização espacial de domínios de geometria complexa são as malhas não-estruturadas. A conveniência deste tipo de malhas é ainda maior quando se requer soluções mais precisas em determinadas regiões do domínio, pela facilidade de realizar refino localizado nessas regiões.<sup>2</sup>

**Definição 2.4.** Uma malha *mista* ou *híbrida* é uma malha que possui elementos de diferente forma geométrica.<sup>3</sup>

As malhas híbridas proporcionam um grau de flexibilidade adicional em relação às malhas não-estruturadas de um único tipo de elemento. O objetivo da utilização de malhas híbridas é o melhor aproveitamento das características de cada tipo de elemento em diferentes regiões do domínio. Em aplicações de CFD em três dimensões, as malhas não-estruturadas mais comuns são as malhas de tetraedros, principalmente porque os algoritmos de geração desse tipo de malhas são mais robustos e sofisticados, permitindo discretizar virtualmente qualquer geometria de forma automática ou com pouca intervenção do usuário [8, 57]. Entretanto, os elementos hexaédricos produzem malhas mais compactas<sup>4</sup> e apresentam características geométricas mais favoráveis do ponto de vista numérico, especialmente quando é necessário utilizar elementos com razão de aspecto

---

<sup>2</sup> Isto é, reduzir o tamanho médio dos elementos nessas regiões do domínio.

<sup>3</sup> Em alguns textos, a denominação de malha híbrida é atribuída a malhas mistas que apresentam regiões estruturadas e não-estruturadas [23, 73]. Entretanto, neste trabalho não será considerada essa distinção e as duas denominações serão utilizadas como equivalentes.

<sup>4</sup> Mais compactas no sentido de possuir menos elementos para um dado número de vértices. Dependendo do tipo de implementação, isto pode gerar uma importante economia de recursos computacionais.

grande.<sup>5</sup> Porém, preencher um domínio tridimensional arbitrário considerando apenas elementos hexaédricos é uma tarefa que envolve um enorme grau de dificuldade. Nesse sentido, nenhum algoritmo desenvolvido para geração de malhas de hexaedros se equipara aos algoritmos existentes para geração de malhas tetraédricas [15, 52, 57].

A utilização conjunta de tetraedros e hexaedros em malhas híbridas é uma alternativa promissora para a discretização de domínios tridimensionais complexos. De uma forma geral, a ideia central para a construção dessas malhas é discretizar as regiões mais importantes do domínio com hexaedros, deixando os tetraedros para preencher as regiões de geometria mais intrincada ou de menor importância, ou, inclusive, as porções onde for necessário considerar refino localizado. Contudo, a transição entre hexaedros e tetraedros requer a introdução de elementos adicionais, tais como prismas e pirâmides, a fim de garantir a conformidade da malha. A conformidade é uma condição necessária para vários métodos numéricos, entre eles o método de volumes finitos baseado em elementos.

**Definição 2.5.** A malha  $\mathcal{M}$  é uma malha *conforme* se satisfaz as condições da definição 2.1, além da condição:

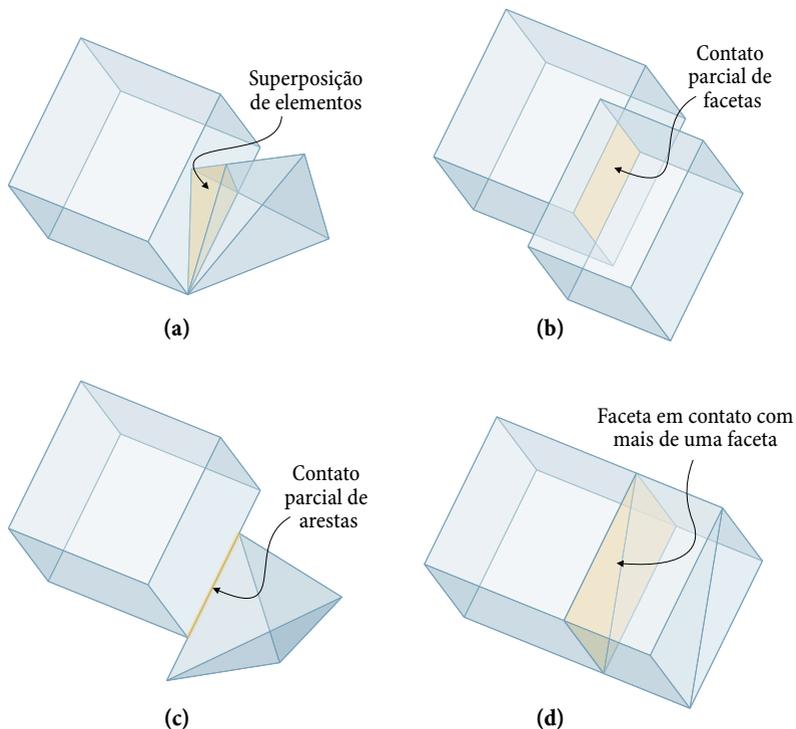
C4: A interseção de dois elementos em  $\mathcal{M}$  é o conjunto vazio, um vértice, uma aresta ou uma faceta [23].

A modo de ilustração, a figura 2.2 apresenta alguns casos típicos de não-conformidade, em que as condições da definição 2.5 não são satisfeitas. Em todos esses casos, o procedimento de construção dos volumes de controle em um método de volumes finitos baseado em elementos produz volumes anômalos, em que a superfície de controle não é fechada. Portanto, inclusive a ocorrência de apenas uma única situação de não-conformidade na malha utilizada pode tornar inconsistente o modelo numérico obtido com o método.

Como mencionado anteriormente, malhas híbridas que compreendem apenas tetraedros e hexaedros não satisfazem as condições de conformidade. A situação usual nesse caso é como a mostrada na figura 2.2(d), em que a faceta quadrangular de um hexaedro coincide com as facetas

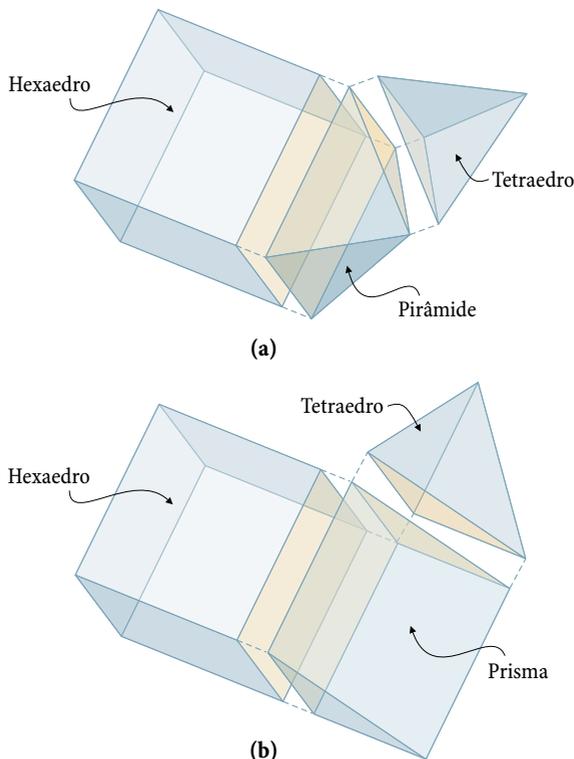
---

<sup>5</sup> Um exemplo típico é a discretização de reservatórios de petróleo, em que a dimensão vertical é geralmente muito menor que as outras dimensões. Essa situação obriga a utilizar elementos de razão de aspecto grande, a fim de manter reduzido o número global de elementos da malha.



**Figura 2.2** – Exemplos de situações que não satisfazem as condições de conformidade.

triangulares de dois tetraedros vizinhos. Em uma malha conforme, a faceta de um elemento deve coincidir exatamente com a faceta de um elemento vizinho. Para isso ser possível em uma malha misturando hexaedros e tetraedros, devem ser utilizados elementos de transição que possuam tanto facetas triangulares como quadrangulares. Os elementos mais simples com essa característica geométrica são a pirâmide de base quadrada e o prisma de base triangular. A fim de garantir a conformidade, uma faceta triangular desses elementos deve coincidir sempre com a faceta de um tetraedro, enquanto que uma faceta quadrangular deve fazê-lo com a faceta de um hexaedro. A figura 2.3 ilustra exemplos de transições conformes entre hexaedros e tetraedros.



**Figura 2.3** – Exemplos de transição conforme entre hexaedros e tetraedros.

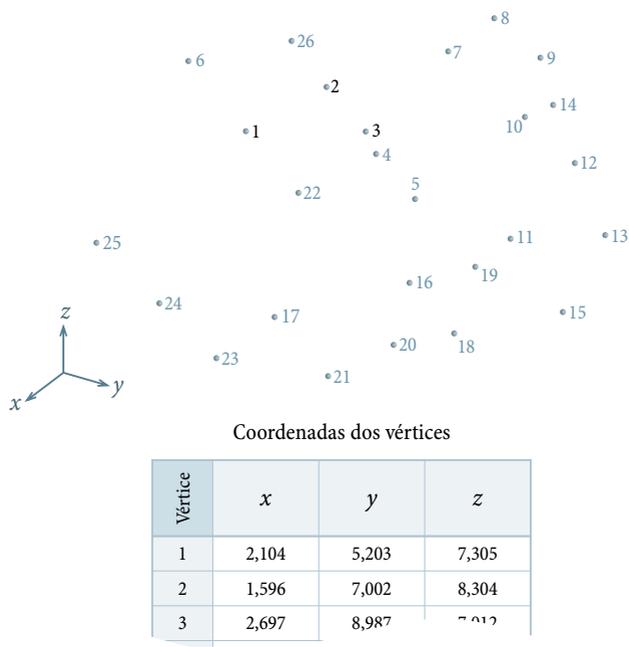
## 2.2 Especificação de uma malha não-estruturada

A construção de uma malha a partir da geometria de um domínio tridimensional é uma operação que envolve um alto nível de complexidade. Essa tarefa é realizada, em geral, por softwares especializados que executam algoritmos sofisticados a fim de garantir que as malhas geradas atendam os requerimentos de uma dada formulação numérica. Apesar de os procedimentos de geração de malha não serem abordados aqui, pois não é o objeto do presente trabalho<sup>6</sup>, é importante descrever, ainda que de ma-

<sup>6</sup> Diferentes métodos e algoritmos para geração de malhas não-estruturadas tridimensionais são descritos em detalhes, por exemplo, nas referências [23, 52, 57, 74, 75, 81]

neira sucinta, a forma de especificação das malhas não-estruturadas. Este conhecimento é necessário para poder interpretar em um código computacional as malhas vindas de um software de geração e também para estabelecer uma estrutura de dados adequada para manipulá-las no código.

Existem diversas alternativas para a especificação de uma malha não-estruturada. Na maioria delas, o ponto de partida é a especificação dos vértices da malha, estabelecendo a localização de todos eles em relação a um sistema de coordenadas, usualmente cartesiano. Para uma identificação unívoca, a cada vértice deve estar associado um índice único, estabelecendo-se dessa forma um esquema de numeração global para os vértices da malha, conforme ilustrado na figura 2.4 para um caso simples.



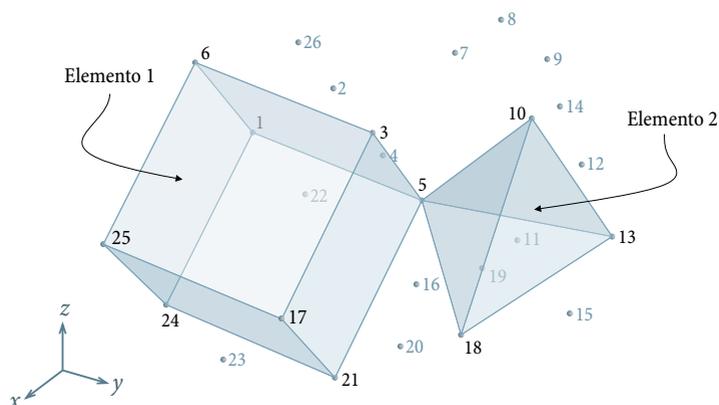
**Figura 2.4** – Exemplo da especificação dos vértices de uma malha.

As restantes entidades da malha podem ser definidas com base nos vértices já especificados. Neste ponto é possível considerar diferentes possibilidades. Por exemplo, pode ser empregada uma descrição hierárquica

[23] em que as arestas são especificadas com base nos vértices, as facetas são especificadas com base nas arestas e, por fim, os elementos são especificados com base nas facetas. Essa abordagem, na qual é definido um esquema de numeração global próprio para cada tipo de entidade da malha, é demasiado geral para a maioria dos métodos numéricos, em que não todas as entidades possuem a mesma importância. Em métodos em que a maioria das operações é realizada em nível de elemento, como no método clássico de elementos finitos e também no método de volumes finitos baseado em elementos, é suficiente a especificação da conectividade dos elementos para completar a definição de uma malha. Nessa abordagem, arestas e facetas ficam determinadas de forma implícita e podem ser acessadas localmente em cada elemento, se necessário.

A lista dos vértices associados a um dado elemento, ordenada segundo algum esquema convencional, é suficiente para definir a conectividade desse elemento. Nessa lista, os vértices devem ser identificados mediante os índices globais especificados no passo prévio. Conforme ilustra a figura 2.5, um índice próprio é atribuído também a cada elemento para poder identificá-lo posteriormente. Além disso, nas malhas híbridas pode ser necessário indicar explicitamente a forma geométrica de cada elemento, caso essa informação não possa ser inferida a partir do número de vértices especificado para o elemento. A ordenação convencional dos vértices para todos os tipos de elementos considerados neste trabalho é indicada na seção seguinte.

A lista de vértices especificada para definir a conectividade de um elemento determina de forma indireta um esquema numeração local para seus vértices. Assim, por exemplo, no elemento 1 da malha mostrada na figura 2.5, o vértice com índice global 3 pode ser identificado localmente como vértice 1, o vértice 5 como vértice local 2, o vértice 21 como vértice local 3, e assim por diante. A especificação da conectividade de um elemento pode ser vista também como a definição de um esquema de conversão global/local para a indexação dos vértices. Essa conversão possui um papel fundamental nos métodos numéricos baseados em elementos, pois o resultado de muitas operações que são realizadas em nível de elemento deve ser depois utilizado de forma global e vice-versa. Como será visto na próxima seção, com base na numeração local dos vértices é possível também fazer a descrição completa da topologia dos diferentes tipos de elementos.



Conectividade dos elementos

Elemento	1º vértice	2º vértice	3º vértice	4º vértice	5º vértice	6º vértice	7º vértice	8º vértice
1	3	5	21	17	6	1	24	25
2	13	10	5	18	-	-	-	-
3	5	3	17	21	-	-	-	-

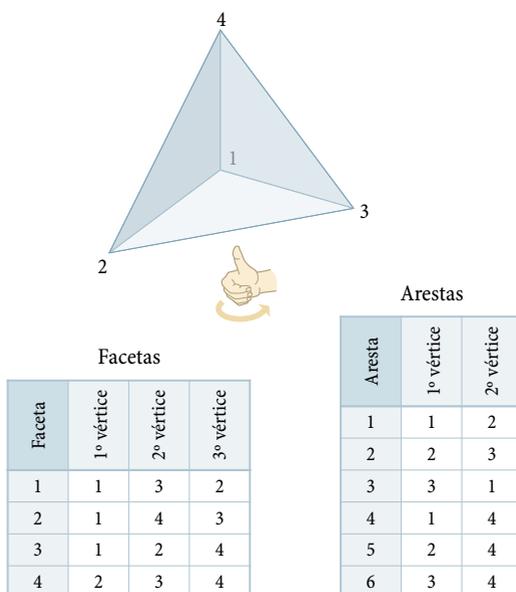
**Figura 2.5** – Exemplo da especificação dos elementos de uma malha.

## 2.3 Topologia dos elementos

A topologia de um elemento tridimensional pode ser completamente descrita em termos de suas facetas, arestas e vértices [23]. Por sua vez, as facetas e arestas podem ser definidas com base nos vértices do elemento, ordenados segundo algum esquema convencional. Conseqüentemente, a descrição completa da topologia de um elemento pode ser realizada em termos dos vértices, após ser estabelecida a referida convenção para a ordenação dessas entidades. Nesta seção é descrita a topologia dos quatro tipos de elemento considerados neste trabalho: tetraedros, hexaedros, prismas e pirâmides. A descrição da topologia é realizada com base na convenção usual para a ordenação de vértices em cada tipo de elemento.

### 2.3.1 Tetraedro

O tetraedro é um elemento de quatro facetas triangulares, seis arestas e quatro vértices. Os vértices do tetraedro são numerados convencionalmente utilizando a regra da mão direita [84]. O intuito é garantir que o volume do tetraedro, calculado mediante determinantes, seja sempre positivo. Para tanto, posiciona-se a mão direita em uma faceta qualquer do elemento com o polegar apontando para o vértice oposto. Numeram-se, então, os vértices da faceta escolhida no sentido indicado pelos quatro dedos restantes, conforme ilustrado na figura 2.6. O último vértice a numerar é o vértice oposto à faceta considerada.



**Figura 2.6** – Topologia do tetraedro.

Na figura 2.6 é indicada também a definição local de facetas e arestas, conforme a referência [23]. É importante notar que implícita nessa definição encontra-se uma dada orientação para essas entidades. Assim, as arestas podem ser consideradas como segmentos dirigidos, com orientação do primeiro ao segundo vértice. De modo semelhante, na definição

das facetas, a ordenação dos vértices determina um sentido de rotação que, pela regra da mão direita, induz uma orientação positiva apontando sempre para fora do elemento.

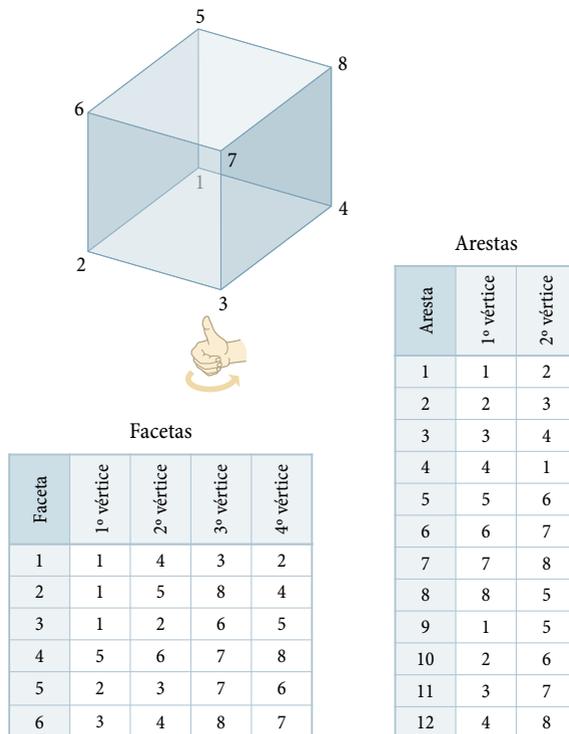
Como é lógico, quando a conectividade de um elemento tetraédrico for especificada, a ordenação dos vértices deverá respeitar a convenção anteriormente citada. Deve-se notar, no entanto, que um mesmo elemento pode ser especificado de múltiplas formas equivalentes. Assim, por exemplo, se a conectividade de um dado elemento for especificada pela lista de vértices  $(a, b, c, d)$ , o mesmo elemento poderá ser definido também pelas listas  $(b, c, a, d)$  e  $(c, a, b, d)$ , as quais cumprem do mesmo modo a regra da mão direita. De fato, existem em total doze permutações na lista de vértices de um tetraedro que satisfazem essa regra, todas sendo representações válidas da conectividade desse elemento.

### 2.3.2 Hexaedro

O hexaedro é um elemento que possui seis facetas quadrangulares, doze arestas e oito vértices. Ele é topologicamente equivalente a um cubo, apesar de que, em um caso geral, suas facetas podem não ser planas. A figura 2.7 ilustra a convenção para a numeração dos vértices de um hexaedro, assim como uma possível definição de suas facetas e arestas com base nos vértices.

A numeração dos vértices do hexaedro segue uma convenção semelhante à descrita para o tetraedro. Primeiro são numerados os vértices de uma faceta do elemento, seguindo o sentido de rotação positivo dado pela regra da mão direita. Para tanto, posiciona-se a mão direita sobre a faceta em questão, com o polegar apontando para a faceta oposta, como mostra a figura 2.7. Seguidamente são numerados os vértices da faceta oposta, começando pelo vértice oposto ao primeiro vértice da faceta já numerada e seguindo o mesmo sentido de rotação considerado nela.

A especificação da conectividade de um hexaedro deve levar em conta a convenção descrita acima para a ordenação dos vértices. Caso contrário, podem surgir ambiguidades, por exemplo, no cálculo das grandezas geométricas associadas ao elemento. Entretanto, igual que no caso do tetraedro, a especificação de um hexaedro não é única, sendo que diferentes listas de vértices satisfazem o critério de ordenação descrito e são, portanto, especificações válidas para o elemento.



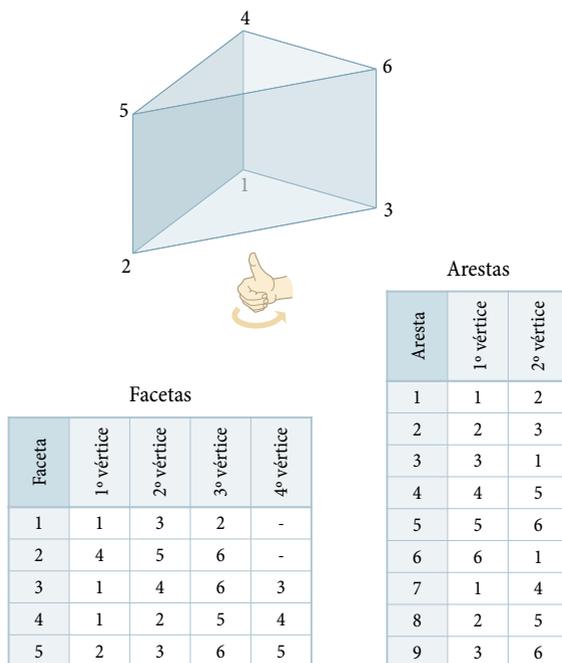
**Figura 2.7** – Topologia do hexaedro.

### 2.3.3 Prisma

O prisma triangular, ou simplesmente prisma, é um elemento que possui duas facetas triangulares opostas, separadas por três facetas de forma quadrangular. Além disso, o prisma possui nove arestas e seis vértices. Apesar de existirem facetas de forma diferente, a configuração topológica em todos os vértices do prisma é idêntica.<sup>7</sup> Isto é, em qualquer um dos seis vértices do prisma confluem três arestas e três facetas, das quais duas são sempre quadrangulares e uma triangular.

<sup>7</sup> No tetraedro e no hexaedro se produz também este tipo de simetria. Isso é mais evidente nesses elementos pelo fato de todas as facetas serem triângulos ou quadriláteros, respectivamente.

A figura 2.8 mostra a numeração convencional dos vértices do prisma, além da definição das arestas e facetas em função da numeração local dos vértices. Para tal numeração, consideram-se inicialmente os vértices de uma das facetas triangulares, os quais são numerados segundo o sentido positivo dado pela mão direita, com o polegar apontando para a faceta triangular oposta. Depois são numerados os vértices nessa faceta oposta, seguindo o mesmo sentido e começando no vértice oposto ao primeiro vértice numerado.



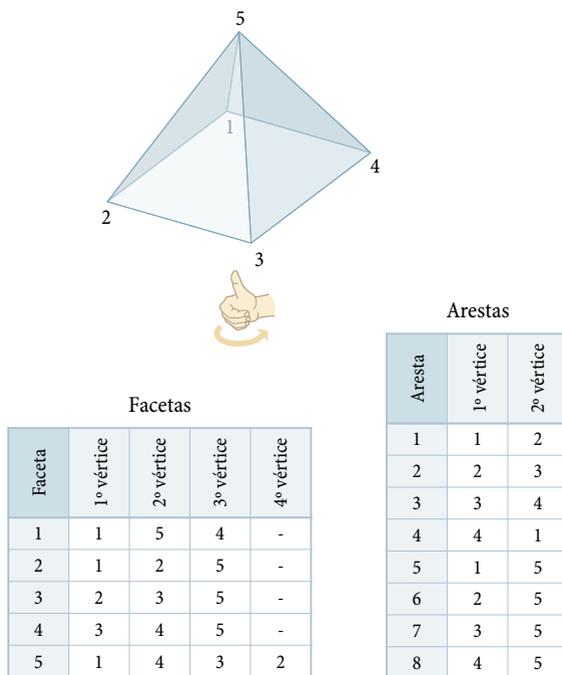
**Figura 2.8** – Topologia do prisma.

### 2.3.4 Pirâmide

O elemento piramidal considerado em malhas híbridas é uma pirâmide de base quadrangular. Ele possui, portanto, cinco facetas, das quais quatro são triangulares e uma quadrangular. O número de arestas é oito e o número de vértices cinco. Nos quatro vértices da base quadrangular

convergem três arestas e três facetas. O vértice oposto à base, porém, apresenta uma configuração topológica diferente, já que nele confluem quatro arestas e as quatro facetas triangulares da pirâmide. Esse vértice é comumente chamado de ápice.

O esquema de numeração considerado para os vértices da pirâmide é ilustrado na figura 2.9. Sempre são numerados primeiro os vértices da base quadrangular, seguindo o sentido positivo da mão direita com o polegar apontando para o ápice. O último vértice a numerar é, precisamente, o ápice. A figura 2.9 apresenta também a definição local das arestas e das facetas da pirâmide.



**Figura 2.9** – Topologia da pirâmide.

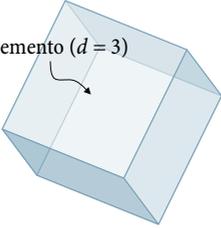
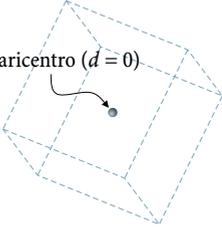
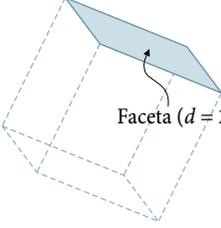
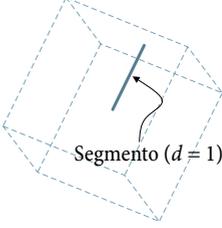
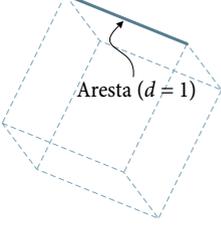
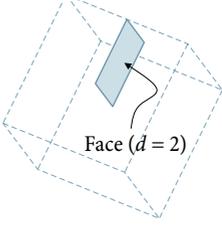
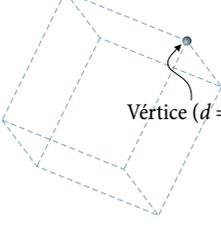
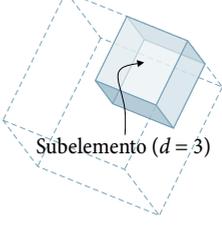
## 2.4 Entidades duais

As malhas e entidades descritas nas seções anteriores serão denominadas, neste trabalho, *malhas primárias* e *entidades primárias*, respectivamente. Elas determinam a representação discreta da região do espaço onde o problema físico a resolver está definido. É possível associar, entretanto, uma *entidade dual* a cada entidade primária. A união das entidades duais forma a que será denominada de *malha dual*, a qual pode ser considerada como uma partição alterna do domínio de solução. As entidades duais têm um papel fundamental em um método de volumes finitos baseado em elementos, pois os volumes de controle, com base nos quais são construídas as equações em nível discreto, são formadas por entidades duais, como se verá mais adiante.

A primeira entidade dual que pode ser definida é a entidade dual do elemento, que é um ponto interior a ele. Tal ponto é localizado convencionalmente no baricentro dos vértices do elemento. Embora se trate de uma escolha aparentemente arbitrária, essa localização possui várias vantagens, conforme será discutido posteriormente. Quanto às restantes entidades duais, elas podem ser definidas primeiro em nível de elemento e depois generalizadas mediante composição.

Uma entidade dual pode ser definida considerando entidades duais de menor dimensão, estabelecendo-se dessa forma uma estrutura hierárquica semelhante à das entidades primárias. Assim, em um elemento, a entidade dual de uma faceta é um segmento unindo a entidade dual do elemento com um ponto sobre a faceta. Por sua vez, a entidade dual de uma aresta é um polígono limitado pelas entidades duais das facetas adjacentes à aresta mais dois segmentos construídos sobre essas facetas. Neste trabalho, as entidades duais das arestas, definidas em nível de elemento, são denominadas de *faces*. Finalmente, a entidade dual de um vértice é um poliedro limitado por certo número de faces e polígonos construídos sobre as facetas adjacentes ao vértice. Essa entidade dual é denominada aqui de *subelemento*. A forma de construção das entidades duais será abordada com maiores detalhes nas subseções seguintes.

A figura 2.10 mostra de forma esquemática as estruturas hierárquicas das entidades primárias e duais em nível de elemento. Algumas características importantes devem ser ressaltadas. Em primeiro lugar, se  $d = k$  é a dimensão de uma dada entidade primária, a dimensão da entidade dual

Entidades primárias	Entidades duais
 <p>Elemento (<math>d = 3</math>)</p>	 <p>Baricentro (<math>d = 0</math>)</p>
 <p>Faceta (<math>d = 2</math>)</p>	 <p>Segmento (<math>d = 1</math>)</p>
 <p>Aresta (<math>d = 1</math>)</p>	 <p>Face (<math>d = 2</math>)</p>
 <p>Vértice (<math>d = 0</math>)</p>	 <p>Subelemento (<math>d = 3</math>)</p>

**Figura 2.10** – Entidades primárias e entidades duais em nível de elemento.

correspondente é  $d = 3 - k$ . Esta particularidade não é casual, já que deriva de uma propriedade dos complexos celulares estudados na topologia algébrica,<sup>8</sup> dos quais as malhas aqui consideradas são casos particulares [51, 76]. Outro aspecto a destacar é a correspondência de um para um entre uma entidade primária e uma entidade dual. Isto implica que, na prática, para identificar uma entidade dual pode ser utilizado o índice da entidade primária correspondente e vice-versa.

### 2.4.1 Construção das faces

O processo de construção geométrica das faces é idêntico em todos os elementos considerados, exceto na pirâmide, a qual possui algumas particularidades comentadas mais adiante. Como mostra a figura 2.11, no tetraedro, no hexaedro e no prisma as faces são quadriláteros, determinados por quatro pontos, denotados por M, R, C e L. Desses quatro pontos, o ponto C, único interior ao elemento, é comum a todas as faces. Esse ponto trata-se, em realidade, da anteriormente referida entidade dual do elemento que, convencionalmente, é localizada no baricentro dos seus vértices. A posição desse ponto, portanto, é dada pelo vetor<sup>9</sup>

$$\mathbf{r}_c = \frac{1}{N_v} \sum_{k=1}^{N_v} \check{\mathbf{r}}_k, \quad (2.1)$$

em que  $N_v$  é o número de vértices do elemento e  $\check{\mathbf{r}}_k$  ( $k = 1, \dots, N_v$ ) é o vetor posição de cada um desses vértices.

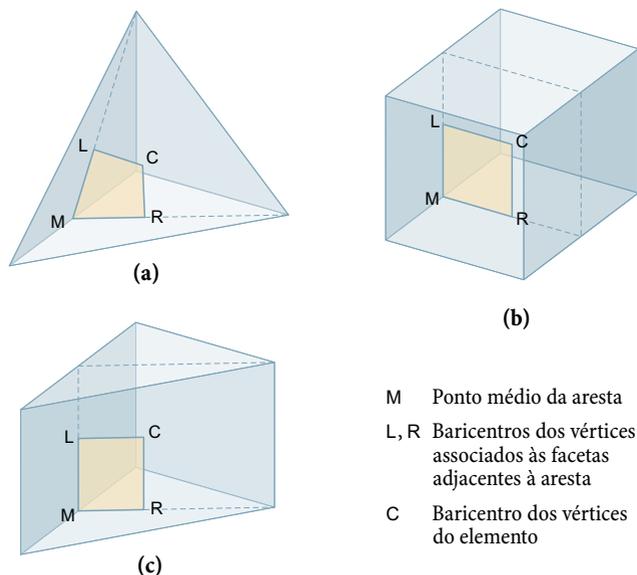
A equação (2.1) mostra a conveniência de localizar o ponto C no baricentro dos vértices do elemento. Como se pode observar, a posição desse ponto está influenciada exatamente da mesma forma pela posição de todos os vértices do elemento. Isto torna tal posição invariante em relação à numeração desses vértices. Lembre-se que, na especificação da conectividade de um elemento, diferentes permutações na lista de vértices determinam um mesmo elemento. Ora, se a posição do ponto C fosse dada por uma expressão em que a posição de cada vértice tivesse uma

---

<sup>8</sup> A topologia algébrica é uma parte da matemática que estuda as propriedades topológicas dos espaços associando-os com estruturas algébricas apropriadas [51]. Muitos conceitos e resultados desta disciplina podem ser aplicados para a sistematização do tratamento de malhas computacionais [7].

<sup>9</sup> Note-se que o ponto C é localizado no baricentro dos vértices do elemento e não no baricentro do próprio elemento. Apenas no tetraedro ambos os pontos coincidem sempre.

ponderação diferente, para cada permutação na lista de vértices ter-se-ria uma posição diferente para tal ponto. Esta situação seria altamente inconveniente, pois se tratando de um mesmo elemento, o ponto C deveria ter a mesma posição em todos os casos.



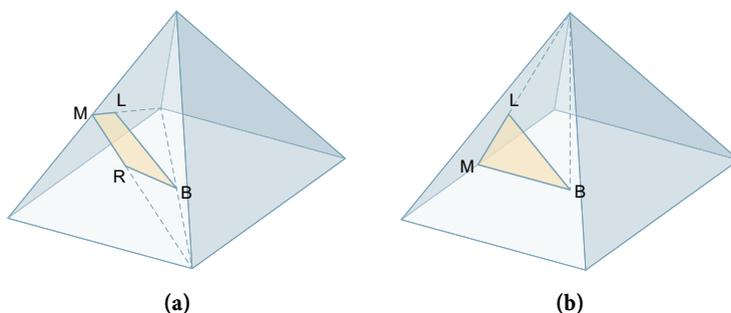
**Figura 2.11** – Construção das faces no tetraedro, no hexaedro e no prisma.

No mais, o ponto M é um ponto localizado sobre a aresta da qual a face em questão é a entidade dual. Além disso, os pontos R e L são pontos localizados sobre as facetas adjacentes a essa aresta. Pelos mesmos argumentos expostos no caso do ponto C, os pontos R e L são localizados convencionalmente nos baricentros das respectivas facetas. Mais precisamente, são localizados nos baricentros dos vértices associados a essas facetas, cuja posição é determinada por expressões análogas à equação (2.1). De forma equivalente, o ponto M é considerado coincidente com o ponto médio da aresta em questão.

A forma de construção geométrica descrita, denominada baricêntrica [77], garante que as faces resultantes serão quadriláteros planos, se todas as facetas quadrilaterais do elemento também forem planas. No tetraedro,

o qual possui somente facetas triangulares, as faces resultantes sempre são planas. Entretanto, se o mesmo esquema de construção fosse empregado também na pirâmide, algumas das faces resultantes não seriam planas, mesmo se a base do elemento fosse plana [58]. Ainda que tal situação não seja tão séria do ponto de vista numérico,<sup>10</sup> neste trabalho preferiu-se adotar um esquema de construção modificado.

Nesse esquema, o ponto comum a todas as faces é o ponto B, localizado no baricentro dos vértices da base da pirâmide. Com essa variação garante-se que todas as faces em uma pirâmide de base quadrada serão planas. Conforme será visto no capítulo 3, uma pirâmide qualquer pode ser mapeada em um pirâmide de base quadrada, mediante uma transformação de coordenadas adequada. A figura 2.12(a) ilustra a construção das faces adjacentes às arestas que convergem no ápice da pirâmide. Essas faces encontram-se determinadas pelos pontos M, R, B e L, os quais, com exceção do ponto B, estão definidos da forma já descrita para os outros elementos. As quatro faces restantes, aquelas adjacentes às arestas que limitam a base da pirâmide, resultam faces triangulares. Conforme mostrado na figura 2.12(b), cada uma dessas faces está determinada pelo ponto M, o ponto médio da aresta adjacente, o ponto B, o baricentro dos vértices da base, e o ponto L, que é o baricentro dos vértices da faceta triangular contígua.



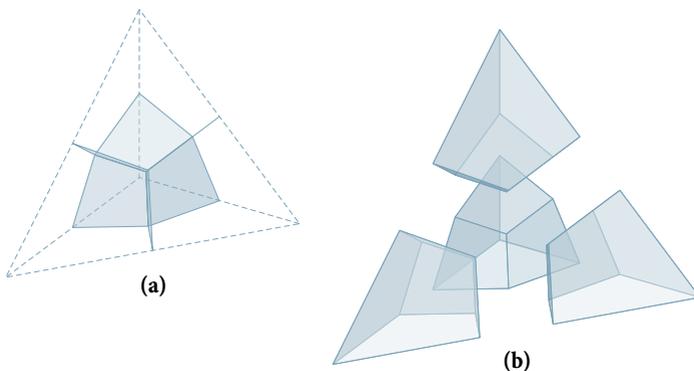
**Figura 2.12** – Construção das faces no elemento piramidal.

<sup>10</sup> Nas faces devem ser aproximadas integrais de superfície e mesmo em faces quadrangulares não-planas é possível realizar essa aproximação de forma consistente, conforme é mostrado no apêndice A.

## 2.4.2 Construção dos subelementos

O conjunto das faces em um elemento gera uma subdivisão deste em certo número de porções. Cada uma dessas porções é o que neste trabalho é chamado de subelemento.<sup>11</sup> Como mencionado anteriormente, os subelementos podem ser considerados entidades duais dos vértices do elemento. Existe, portanto, uma correspondência biunívoca entre vértices e subelementos, de forma equivalente à correspondência entre arestas e faces.

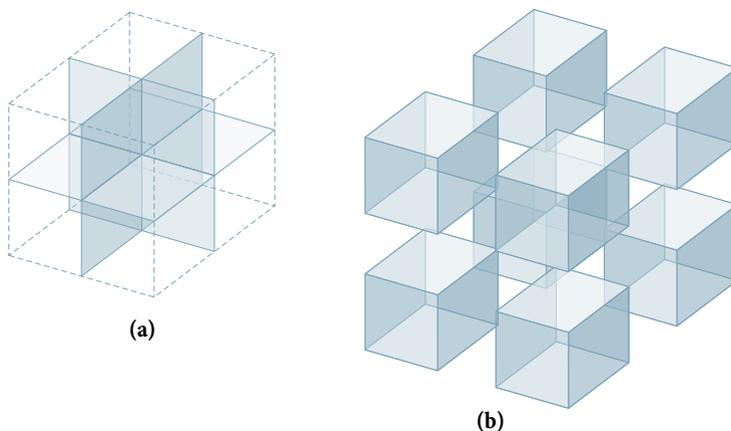
As figuras 2.13, 2.14, 2.15 e 2.16 ilustram a subdivisão do tetraedro, do hexaedro, do prisma e da pirâmide, respectivamente. Pode-se observar que as faces subdividem também as facetadas dos elementos em três ou quatro porções quadrilaterais. Se as facetadas dos elementos tridimensionais fossem interpretadas como elementos bidimensionais, essas porções seriam subelementos bidimensionais. Em relação à malha tridimensional, porém, esses subelementos podem ser interpretados como faces externas. Essas entidades são úteis na discretização dual do contorno dos domínios tridimensionais, conforme se verá na seção 2.5.



**Figura 2.13** – (a) As seis faces e (b) os quatro subelementos no tetraedro.

Todos os subelementos, exceto aquele associado ao ápice da pirâmide, encontram-se limitados por três faces e três das faces externas antes citadas. Tratam-se de corpos hexaédricos, que possuem, além disso, uma

<sup>11</sup> O nome subvolume de controle [45, 67] é também utilizado para essa entidade.



**Figura 2.14** – (a) As doze faces e (b) os oito subelementos no hexaedro.

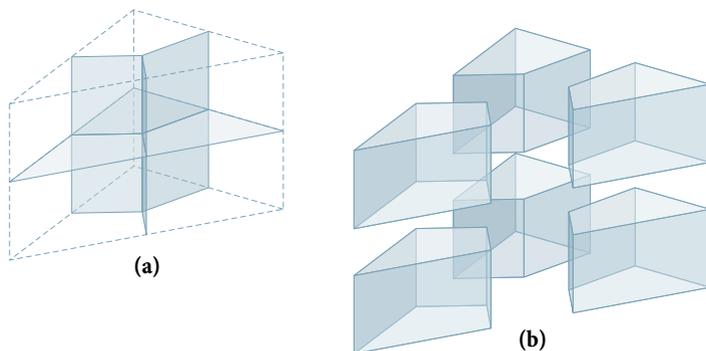
propriedade adicional. No espaço transformado associado a cada tipo de elemento,<sup>12</sup> os subelementos possuem o mesmo volume. Com a divisão baricêntrica gera-se, portanto, a distribuição mais equilibrada possível do volume de um elemento. A exceção novamente é a pirâmide, na qual o subelemento adjacente ao ápice, além de ser de forma octaédrica, possui um volume maior que os restantes subelementos no correspondente espaço transformado.

### 2.4.3 Entidades duais compostas

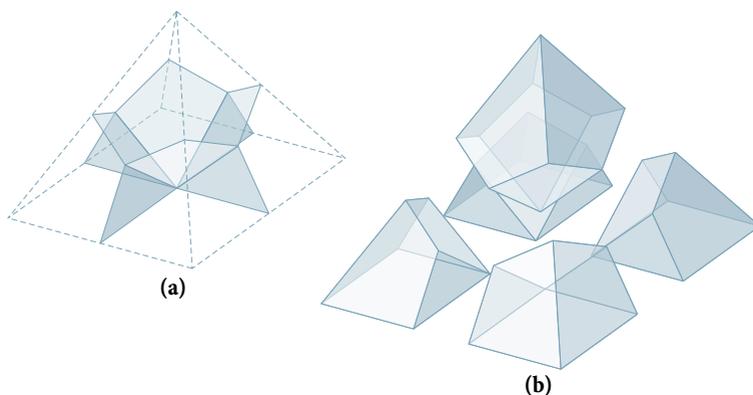
As entidades duais definidas em nível de elemento podem ser reunidas para formar entidades duais compostas. Assim, a entidade dual composta de um vértice da malha é a reunião dos subelementos associados ao vértice, em todos os elementos que o compartilham. Uma vez que, nos métodos de volumes finitos baseado em elementos, as equações de conservação são integradas nessas entidades compostas, elas são denominadas *volúmenes de controle*, seguindo a nomenclatura clássica do método de volumes finitos.

---

<sup>12</sup> Em cada tipo de elemento é considerada uma transformação local de coordenadas que auxilia em algumas aproximações numéricas. Essa transformação de coordenadas é descrita na seção 3.3.



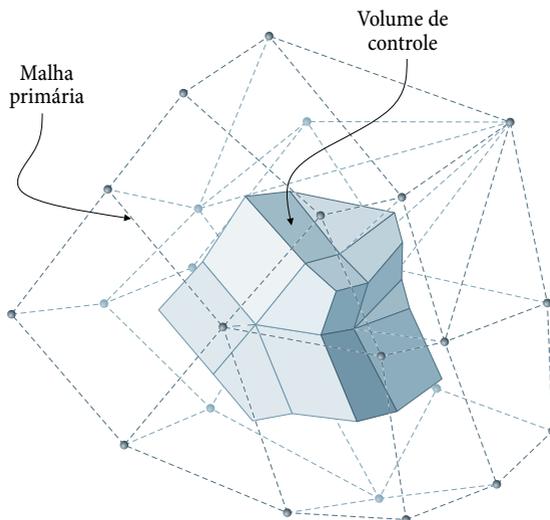
**Figura 2.15 – (a) As nove faces e (b) os seis subelementos no prisma.**



**Figura 2.16 – (a) As oito faces e (b) os cinco subelementos na pirâmide.**

Como ilustração, a figura 2.17 apresenta um volume de controle em uma malha mista. Nesse exemplo específico, elementos das quatro formas consideradas contribuem na formação do volume mostrado. O volume de controle resultante da união de subelementos é um corpo poliédrico, em geral, bastante irregular. Sua forma depende da configuração específica da malha primária em torno ao vértice interior. Quanto maior for o número de elementos que conflua nesse vértice, mais complexa será a forma do volume. Por construção, no interior de cada volume de controle existe um vértice da malha, conforme mostra a figura 2.18. O volume de controle é,

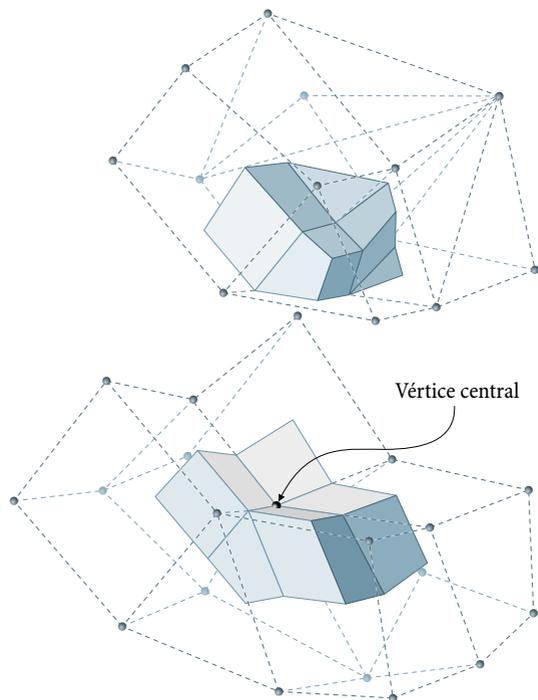
precisamente, a entidade dual composta do vértice interior. Tal característica permite que, em um método numérico que considere essas entidades, o volume de controle seja identificado pelo mesmo índice global do vértice interior.



**Figura 2.17** – Volume de controle em uma malha tridimensional mista.

Os esquemas de construção geométrica das entidades duais, descritos ao longo desta seção, dão origem a volumes de controle que preenchem o mesmo espaço tridimensional que a malha primária, sem se superpor ou deixar vazios. Em conjunto, os volumes de controle e as restantes entidades duais formam uma malha alternativa para o domínio discretizado pela malha primária. Trata-se de uma malha, em geral, de geometria mais complexa que a malha original, pelo fato dos volumes de controle serem corpos poliédricos usualmente mais irregulares que os elementos primários. Apesar dessa maior complexidade e das inúmeras formas que os volumes de controle podem adquirir, sua manipulação é facilitada pelo fato de estarem formados por componentes de geometria simples e bem determinada.

Essa é, precisamente, uma das características fundamentais de um método de volumes finitos baseado em elementos. Em vez de se lidar

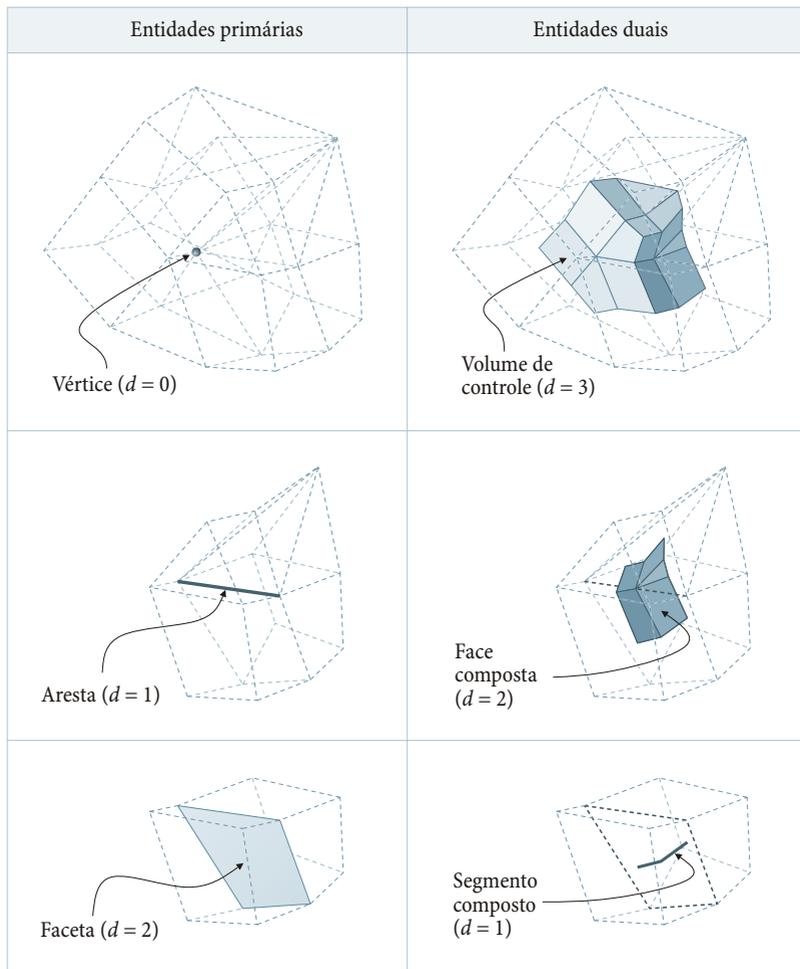


**Figura 2.18** – Corte de um volume de controle, mostrando o vértice central.

diretamente com os volumes e superfícies de controle, opera-se com suas entidades componentes em nível de elemento. Como se viu nas subseções prévias, o número de formas possíveis para essas entidades, os subelementos e as faces, é bastante reduzido. Isto torna sua manipulação em um código computacional extremamente simples. Equações e outros entes matemáticos associados aos volumes de controle são obtidos seguindo o mesmo processo de construção destes, isto é, mediante composição das contribuições associadas às entidades componentes em nível de elemento.

De resto, podem ser associadas também entidades duais compostas às arestas e facetas da malha primária. Assim, reunindo as faces associadas a uma aresta em todos os elementos que a compartilham, obtém-se uma face composta. Por outro lado, unindo os dois segmentos duais a uma faceta, correspondentes aos dois elementos adjacentes, obtém-se a entidade dual composta dessa faceta. A figura 2.19 ilustra esquematicamente essas

entidades compostas. Elas são mencionadas aqui por questões de completude, já que não cumprem um papel importante no método abordado neste trabalho. A superfície de controle, a qual limita um volume de controle, poderia ser considerada como a união de faces compostas. Porém, na maioria dos casos é mais conveniente considerar que tal superfície está formada diretamente por faces simples.

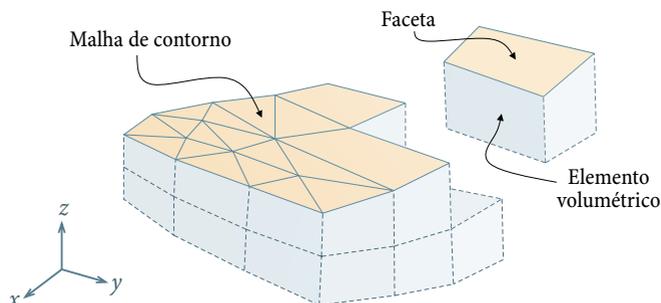


**Figura 2.19** – Entidades primárias e entidades duais compostas.

## 2.5 Malhas de contorno

A especificação completa de um problema deve incluir informação acerca da solução nas fronteiras do domínio de solução, mediante as condições de contorno. A fim de incluir essas condições no problema discretizado, pode ser necessária a existência de uma representação discreta dos contornos nos quais elas são especificadas. A forma mais direta para tal representação é aquela integrada pelas facetas coincidentes com os contornos. Pode-se considerar que essas facetas são elementos bidimensionais que formam uma malha superficial para cada contorno do domínio de solução. Tais elementos serão denominados aqui *elementos de contorno* e a malha que formam *malha de contorno*. Para o tipo de discretização considerado neste trabalho, os elementos de contorno são triângulos e/ou quadriláteros.

Uma vez que os elementos de contorno coincidem com as facetas da malha volumétrica, para especificar uma malha de contorno pode ser empregada uma forma compacta como a mostrada na figura 2.20. Nela, especificam-se em uma lista os elementos volumétricos adjacentes e as



Especificação da malha de contorno

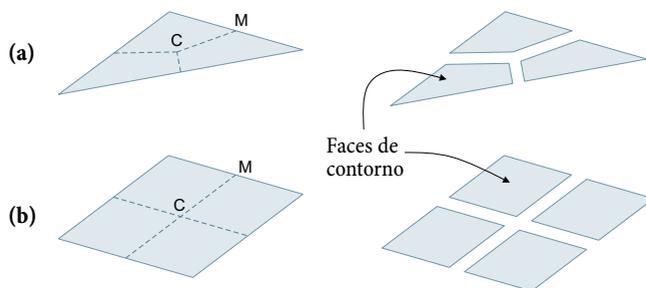
Elemento de contorno	Elemento volumétrico	Faceta
1	33	2
2	71	1
3	19	.

**Figura 2.20** – Exemplo da especificação de uma malha de contorno.

facetas nesses elementos que coincidem com o contorno. Para tanto pode-se empregar a numeração global dos elementos, definida na especificação da conectividade da malha volumétrica, junto com a numeração local das facetas em cada elemento.

Com ajuda da conectividade dos elementos da malha volumétrica é possível determinar de forma indireta toda a informação relativa a uma malha de contorno associada. Assim, por exemplo, é possível estabelecer quais são os vértices localizados sobre o contorno e também todas as relações de vizinhança entre entidades de contorno e volumétricas. Entretanto, em algumas situações particulares, para implementar uma condição de contorno pode-se precisar apenas uma lista dos vértices pertencentes ao contorno. Nesse caso pode-se dispensar a especificação completa de uma malha de contorno e especificar apenas tal lista.

Conforme visto na seção 2.4.2, a subdivisão de um elemento volumétrico em subelementos estabelece simultaneamente uma partição das facetas do elemento. Isso implica também uma partição dos elementos de contorno, já que coincidem com as facetas da malha volumétrica. Como mostra a figura 2.21, essa partição é realizada por segmentos que unem o baricentro dos vértices do elemento (C) com os pontos médios das suas arestas (M).<sup>13</sup> Produto da subdivisão, resultam três polígonos no triângulo e quatro polígonos no quadrilátero. Esses polígonos são chamados aqui

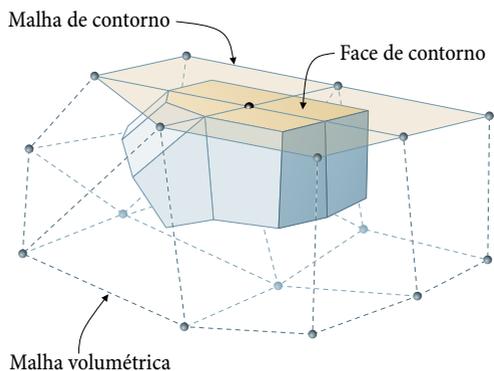


**Figura 2.21** – Subdivisão dos elementos de contorno.

<sup>13</sup> Trata-se de uma subdivisão baricêntrica para elementos bidimensionais, equivalente à descrita na seção 2.4.2 para elementos tridimensionais.

*faces de contorno* e podem ser interpretados como as entidades duais dos vértices em nível de elementos de contorno.

As faces de contorno fecham as superfícies de controle dos volumes adjacentes aos contornos, como ilustra a figura 2.22. Conforme se observa nessa figura, uma característica adicional desses volumes de controle é que o vértice associado encontra-se situado sobre o contorno. Diferentemente, nos volumes internos o vértice associado sempre é localizado no interior dos volumes.



**Figura 2.22** – Volume de controle adjacente a um contorno.

# Aspectos numéricos básicos

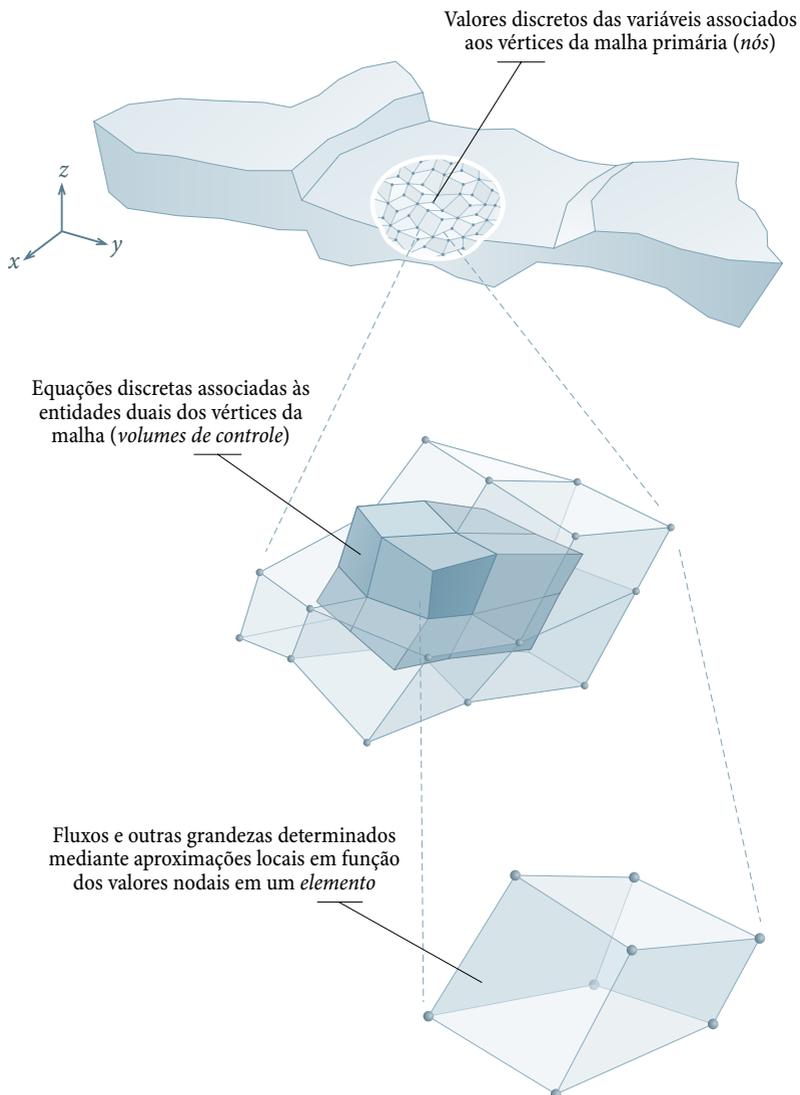
## 3.1 Características gerais de um método de volumes finitos baseado em elementos

Um método de volumes finitos se caracteriza pela aplicação de equações integrais de conservação a volumes de controle discretos. Em um método de volumes finitos baseado em elementos, os volumes de controle são as entidades duais dos vértices da malha primária de elementos. Como visto no capítulo anterior, essas entidades preenchem completamente o domínio de solução determinado pela malha primária, sem deixar espaços vazios ou se superpor. Além de satisfazer esse requisito básico dos métodos de volumes finitos [20], por construção, as interfaces entre volumes de controle são polígonos localizados no interior dos elementos da malha primária. Isto permite que os fluxos que atravessam essas interfaces sejam determinados mediante aproximações locais da variação da variáveis em cada elemento. De fato, praticamente todas as operações necessárias no processo de construção das equações discretas pode ser realizado em nível de elemento. Depois, mediante um procedimento de montagem semelhante ao empregado ordinariamente no método de elementos finitos, obtêm-se as equações de balanço referidas aos volumes de controle.

Em um método de volumes finitos baseado em elementos, a representação discreta de uma variável em um dado nível de tempo é um conjunto de valores, cada um dos quais encontra-se associado a um vértice da malha primária. Seguindo a nomenclatura tradicional, os pontos onde valores das variáveis são aproximados são denominados *nós*. No tipo de método descrito neste trabalho, portanto, os nós estão localizados nos vértices da malha de elementos. Devido à dualidade entre vértices e volumes de controle, o número de nós e o número de volumes de controle em uma malha conforme sempre será o mesmo. Uma vez que as equações discretas são referidas aos volumes de controle e os valores discretos de uma variável são referidos aos nós, o produto da discretização de uma equação diferencial em uma variável é sempre um sistema fechado de equações algébricas. Isto é, um sistema no qual o número de equações é igual ao número de incógnitas. Modelos de várias equações diferenciais em várias variáveis normalmente conduzem também a sistemas fechados de equações.

As características básicas de um método de volumes finitos baseado em elementos, citadas acima, encontram-se ilustradas esquematicamente na figura 3.1. Quanto à aproximação local das variáveis em função dos valores nodais em um elemento, diversas alternativas podem ser consideradas. Em princípio, não existe impedimento para a utilização de diferentes tipos de aproximações na discretização dos diferentes termos de uma equação de conservação. Assim, por exemplo, nos temos de transporte advectivo é possível utilizar aproximações do tipo *upwind*, que representam de forma adequada esse tipo de transporte.

Em geral, a aproximação numérica do gradiente de uma variável, necessária na discretização dos termos de transporte difusivo, é uma das operações mais laboriosas em um método numérico. A escolha mais óbvia em um método de volumes finitos baseado em elementos é a diferenciação de expressões analíticas que aproximem a variação das variáveis nos elementos. Para tanto, utilizam-se as funções polinomiais empregadas habitualmente no método de elementos finitos. Nesse caso, a noção de elemento transcende o papel puramente geométrico, ao serem associadas a cada tipo de elemento funções polinomiais compatíveis com sua forma, as quais são utilizadas para a interpolação das variáveis. Essas funções são comumente denominadas *funções de forma*. Apesar de existirem outras alternativas para a aproximação numérica dos termos de transporte difusivo, neste trabalho são utilizadas funções de forma. Nas restantes seções



**Figura 3.1** – Características fundamentais dos métodos de volumes finitos baseados em elementos.

deste capítulo são apresentados os ingredientes básicos do método de volumes baseado em elementos, aplicado no presente trabalho à simulação de reservatórios.

## 3.2 Convenções relativas à notação

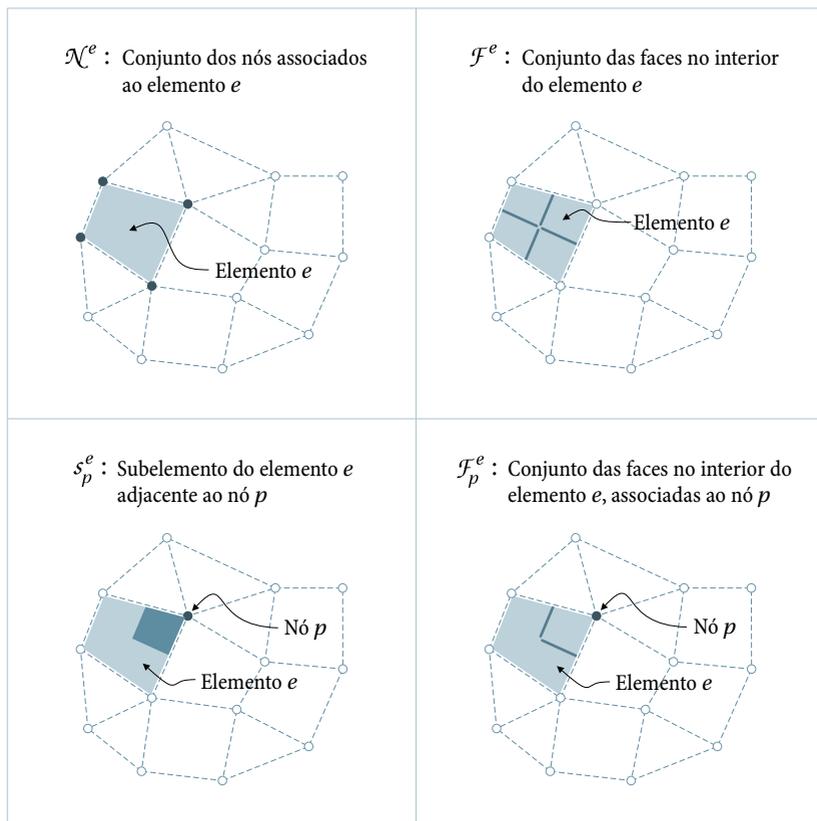
Conforme visto no capítulo 2, na especificação da malha primária são estabelecidos implicitamente esquemas de indexação global para vértices e elementos. Dado que tais esquemas permitem identificar univocamente essas entidades, as restantes entidades envolvidas no processo de discretização são normalmente referidas a elementos ou vértices relacionados com elas. Contudo, já que no método considerado nós e vértices coincidem na mesma localização geométrica, em vez de se referir aos vértices, a notação fará referência aos nós. Isto porque a noção de nó tem uma conotação mais ampla que a de vértice, no contexto do método numérico.

Seja  $\Theta$  uma dada grandeza envolvida na descrição do problema considerado. Para denotar o valor dessa grandeza associada ao nó  $p$ , escrever-se-á  $\check{\Theta}_p$ . Quando se fizer referência ao valor nodal em um nó  $\ell$  localizado no elemento  $e$ , escrever-se-á  $\check{\Theta}_\ell^e$ . Nesse contexto,  $\ell$  pode ser interpretado como o índice local que identifica o nó no elemento, isto é,  $\ell \in \{1, 2, \dots, N_n^e\}$ , onde  $N_n^e$  é o número de nós associados ao elemento em questão.

A notação para a associação com outras entidades segue uma convenção similar. Assim, por exemplo,  $\Theta_f^e$  indica que a grandeza  $\Theta$  está associada à face  $f$ , localizada no elemento  $e$ . Por outro lado,  $\Theta_s^e$  indica que a grandeza está associada ao subelemento  $s$  do elemento  $e$ . Em geral, faces e subelementos são indexados apenas localmente nos elementos. Portanto, nas grandezas associadas a essas entidades o sobrescrito  $e$  frequentemente será omitido, a fim de simplificar a notação. Note-se, por outro lado, que apenas as grandezas associadas aos nós, por sua relevância nas equações discretizadas, levam o sinal diacrítico ( $\check{\phantom{x}}$ ).

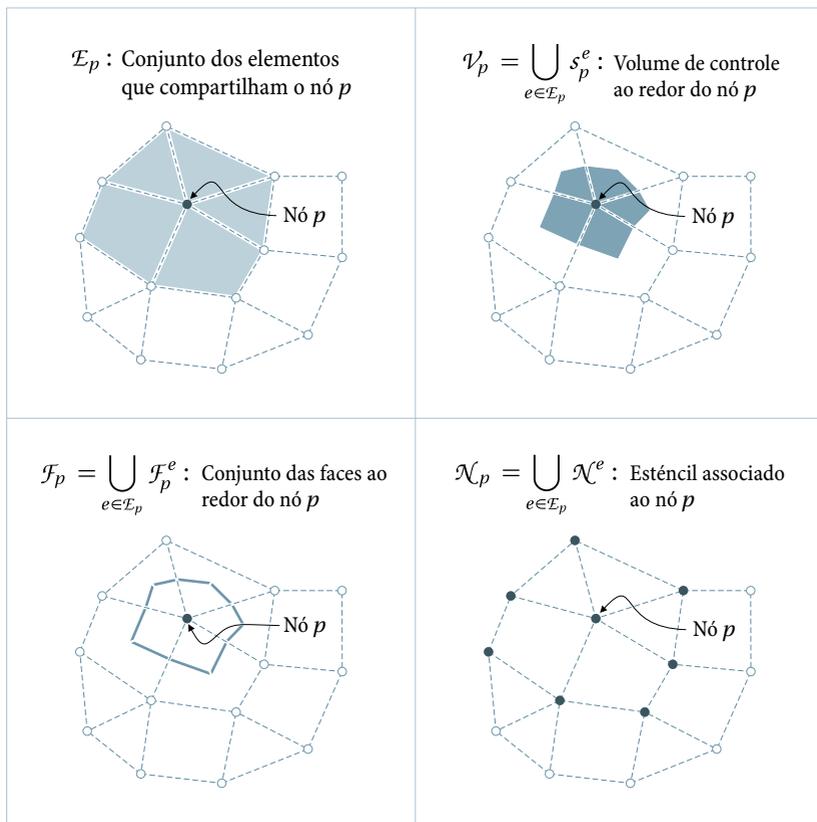
Muitas das operações relativas à discretização das equações envolvem diversos conjuntos de entidades. Por exemplo, todas as equações de conservação discretas estão referidas aos volumes de controle e às superfícies que os limitam, os quais, como indicado no capítulo 2, são formados por subelementos e faces, respectivamente. Logo, um volume de controle pode ser definido como um conjunto de subelementos e sua superfície de controle como a união de um conjunto de faces e um conjunto de faces

de contorno. A fim de facilitar a escrita das equações discretizadas, neste trabalho é utilizada uma notação especial para esses e outros conjuntos de entidades. A definição desses conjuntos, assim como a notação empregada para eles, encontra-se indicada com exemplos nas figuras 3.2 e 3.3, para entidades da malha volumétrica, e na figura 3.4, para entidades das malhas de contorno. Os esquemas que ilustram cada definição correspondem a malhas bidimensionais, para permitir uma visualização mais clara das entidades envolvidas.<sup>1</sup>



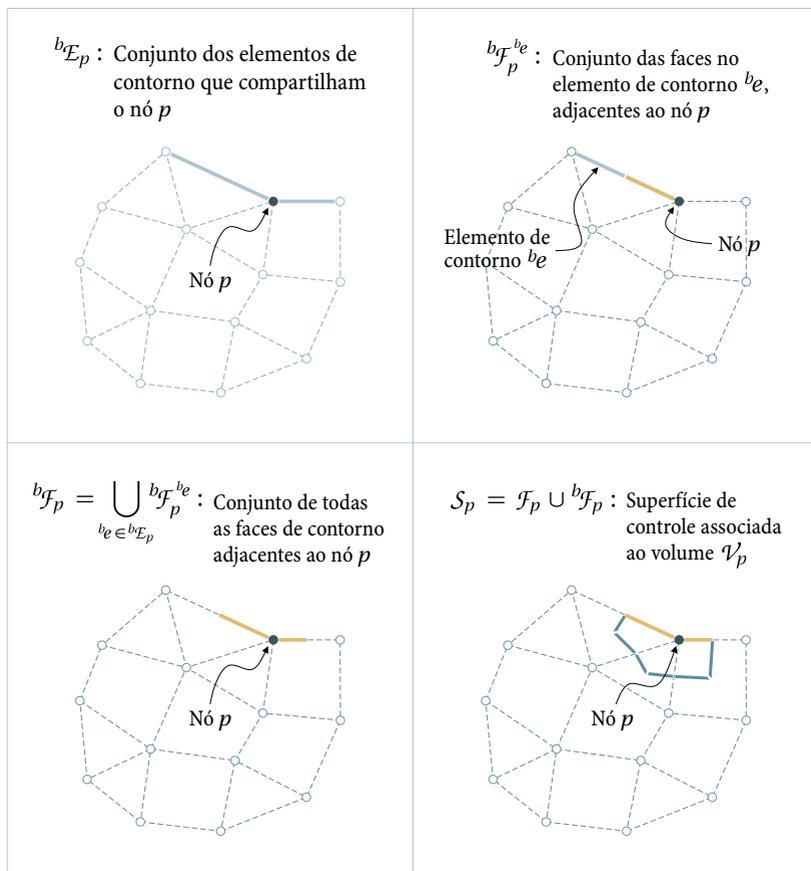
**Figura 3.2** – Notação de entidades e conjuntos de entidades (parte 1).

<sup>1</sup> As porções de malha mostradas nos esquemas podem ser interpretadas também como cortes transversais de uma malha tridimensional.



**Figura 3.3** – Notação de entidades e conjuntos de entidades (parte 2).

Na notação empregada, as entidades e conjuntos de entidades referidas às malhas de contorno se distinguem daquelas da malha volumétrica pela anteposição do índice  $b$ . Assim, por exemplo, um elemento de contorno é denotado por  ${}^b e$  e uma face de contorno por  ${}^b f$ . Outros exemplos dessa notação são apresentados na figura 3.4. Note-se que nessa figura, uma superfície de controle foi definida como a união do conjunto das faces internas à malha associadas a um volume de controle,  $\mathcal{F}_p$ , e do conjunto das suas faces de contorno,  ${}^b \mathcal{F}_p$ . Para um volume de controle interno, isto é, não adjacente a um contorno,  ${}^b \mathcal{F}_p$  é um conjunto vazio e, portanto, sua superfície de controle é simplesmente  $\mathcal{F}_p$ .



**Figura 3.4** – Notação de entidades e conjuntos de entidades associadas à malhas de contorno.

Dado que a formulação apresentada está destinada maiormente a problemas em regime transiente, para a discretização considerar-se-á uma partição finita do intervalo de tempo,  $t_0 < t_1 < t_2 < \dots < t_m < \dots < t_{N_t}$ . Cada um desses níveis de tempo discretos pode ser interpretado como um nó em uma malha unidimensional na linha do tempo. Nessa malha,  $\Delta t_m$  denota um intervalo de tempo particular, definido por  $\Delta t_m \equiv t_m - t_{m-1}$ .

Para denotar o valor de uma grandeza  $\Theta$ , dependente do tempo, no nível  $t = t_m$ , escrever-se-á  $[\Theta]^m$ . Sempre que for possível, o índice  $m$  será

omitido a fim de simplificar a notação das expressões discretizadas. Nesse caso, ficará implícito que qualquer grandeza dependente do tempo estará associada ao nível de tempo  $t = t_m$ . Apenas quando tal prática possa gerar expressões ambíguas serão utilizados os índices apropriados relativos ao tempo.

### 3.3 Transformação de coordenadas

A estratégia comumente adotada para se lidar com a distorção geométrica dos elementos em uma malha não-estruturada é o denominado *mapeamento* [35, 84]. Trata-se de uma correspondência biunívoca entre os pontos de um elemento no espaço físico e os pontos de um elemento regular com a mesma topologia, no denominado espaço transformado. Tal mapeamento implica a existência de equações de transformação entre o sistema de coordenadas global, no qual está definida a malha no espaço físico, e um sistema de coordenadas local em cada elemento. A vantagem desta transformação é que várias das operações necessárias para a discretização das equações podem ser expressas de forma genérica, e geralmente mais simples, no sistema local de coordenadas.

A maneira mais conveniente de expressar a transformação de coordenadas em um elemento é mediante funções de forma. As funções de forma para elementos tridimensionais são funções contínuas e deriváveis das coordenadas locais  $\xi$ ,  $\eta$  e  $\zeta$ , que possuem algumas propriedades especiais, citadas mais adiante. Com ajuda dessas funções, as equações de transformação das coordenadas locais às coordenadas cartesianas globais, para um ponto no interior ou no contorno de um elemento, podem ser escritas como [84]

$$\begin{cases} x = \sum_{\ell \in \mathcal{N}^e} N_\ell(\xi, \eta, \zeta) \check{x}_\ell^e, \\ y = \sum_{\ell \in \mathcal{N}^e} N_\ell(\xi, \eta, \zeta) \check{y}_\ell^e, \\ z = \sum_{\ell \in \mathcal{N}^e} N_\ell(\xi, \eta, \zeta) \check{z}_\ell^e. \end{cases} \quad (3.1)$$

Nestas equações,  $N_\ell(\xi, \eta, \zeta)$ , para  $\ell \in \mathcal{N}^e = \{1, 2, \dots, N_n^e\}$ , são funções de forma adaptadas à topologia do elemento em questão, enquanto que  $\check{x}_\ell^e$ ,  $\check{y}_\ell^e$  e  $\check{z}_\ell^e$  são as coordenadas globais dos nós associados a ele.

O número de funções de forma diferentes que podem ser definidas em um elemento é igual ao número de nós associados a ele. Para todos os elementos considerados neste trabalho, as expressões matemáticas das funções de forma utilizadas são apresentadas na subseção 3.3.2. Todas essas funções satisfazem algumas propriedades básicas. Assim, por exemplo, elas variam sempre no intervalo  $[0, 1]$ , no interior e sobre o contorno de um elemento. No ponto coincidente com o nó de índice local  $a$ , a função de forma  $N_a$  adquire o valor 1, enquanto todas as restantes funções se anulam. Além disso, os valores das funções de forma em um ponto qualquer do elemento constituem uma *partição da unidade* [84], isto é, satisfazem a relação

$$\sum_{\ell \in \mathcal{N}^e} N_\ell(\xi, \eta, \zeta) = 1. \quad (3.2)$$

### 3.3.1 Matriz jacobiana

Várias expressões matemáticas relativas a discretização, quando expressas em coordenadas locais, incluem a denominada matriz jacobiana. Para uma transformação como a dada pelas equações (3.1), essa matriz é definida por [82]

$$\mathbf{J}(\xi, \eta, \zeta) \equiv \begin{pmatrix} \partial_\xi x & \partial_\eta x & \partial_\zeta x \\ \partial_\xi y & \partial_\eta y & \partial_\zeta y \\ \partial_\xi z & \partial_\eta z & \partial_\zeta z \end{pmatrix}, \quad (3.3)$$

Nesta expressão,  $\partial_\xi x$ , por exemplo, é uma notação reduzida para a derivada parcial  $\partial x / \partial \xi$ . Todas as derivadas parciais incluídas na matriz jacobiana podem ser obtidas explicitamente diferenciando as equações (3.1). Assim, por exemplo, para a derivada parcial  $\partial_\xi x$ , tem-se

$$\partial_\xi x = \sum_{\ell \in \mathcal{N}^e} \partial_\xi N_\ell \cdot \check{x}_\ell^e. \quad (3.4)$$

Substituindo expressões equivalentes para todas as derivadas parciais na definição da matriz jacobiana, obtém-se

$$\mathbf{J} = \begin{pmatrix} \sum \partial_\xi N_\ell \cdot \check{x}_\ell^e & \sum \partial_\eta N_\ell \cdot \check{x}_\ell^e & \sum \partial_\zeta N_\ell \cdot \check{x}_\ell^e \\ \sum \partial_\xi N_\ell \cdot \check{y}_\ell^e & \sum \partial_\eta N_\ell \cdot \check{y}_\ell^e & \sum \partial_\zeta N_\ell \cdot \check{y}_\ell^e \\ \sum \partial_\xi N_\ell \cdot \check{z}_\ell^e & \sum \partial_\eta N_\ell \cdot \check{z}_\ell^e & \sum \partial_\zeta N_\ell \cdot \check{z}_\ell^e \end{pmatrix}. \quad (3.5)$$

Esta expressão pode ser reescrita de um modo mais conveniente para o cômputo da matriz jacobiana, como

$$\mathbf{J} = \begin{pmatrix} \tilde{x}_1^e & \tilde{x}_2^e & \cdots & \tilde{x}_{N_n}^e \\ \tilde{y}_1^e & \tilde{y}_2^e & \cdots & \tilde{y}_{N_n}^e \\ \tilde{z}_1^e & \tilde{z}_2^e & \cdots & \tilde{z}_{N_n}^e \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \partial_\xi N_1 & \partial_\eta N_1 & \partial_\zeta N_1 \\ \partial_\xi N_2 & \partial_\eta N_2 & \partial_\zeta N_2 \\ \vdots & \vdots & \vdots \\ \partial_\xi N_{N_n} & \partial_\eta N_{N_n} & \partial_\zeta N_{N_n} \end{pmatrix}. \quad (3.6)$$

Para uso nesta expressão, as derivadas parciais das funções de forma em relação às coordenadas locais podem ser obtidas explicitamente mediante diferenciação das equações que as definem em cada tipo de elemento. A matriz que contém essas derivadas participa também em outras expressões, motivo pelo qual será definida formalmente como

$$\mathbf{D}(\xi, \eta, \zeta) \equiv \begin{pmatrix} \partial_\xi N_1 & \partial_\eta N_1 & \partial_\zeta N_1 \\ \partial_\xi N_2 & \partial_\eta N_2 & \partial_\zeta N_2 \\ \vdots & \vdots & \vdots \\ \partial_\xi N_{N_n} & \partial_\eta N_{N_n} & \partial_\zeta N_{N_n} \end{pmatrix}. \quad (3.7)$$

### 3.3.2 Funções de forma

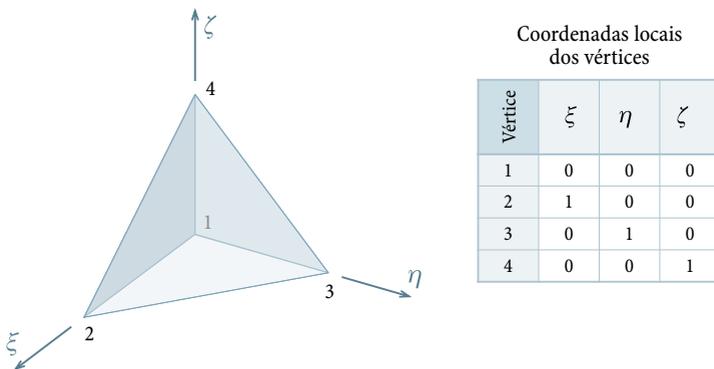
A seguir são detalhadas as funções de forma consideradas neste trabalho. Elas são compatíveis com as geometrias dos elementos e com a localização definida para os nós. É fácil comprovar que satisfazem todas as restrições indicadas anteriormente para as funções de forma.

As funções de forma para o tetraedro são funções lineares nas coordenadas locais, definidas por

$$\begin{cases} N_1(\xi, \eta, \zeta) = 1 - \xi - \eta - \zeta, \\ N_2(\xi, \eta, \zeta) = \xi, \\ N_3(\xi, \eta, \zeta) = \eta, \\ N_4(\xi, \eta, \zeta) = \zeta. \end{cases} \quad (3.8)$$

A figura 3.5 mostra o elemento tetraédrico no espaço transformado, junto com as coordenadas locais dos seus vértices. Qualquer tetraedro em uma malha, sem importar quão deformado se encontrar, se aplicará no

tetraedro regular da figura 3.5, quando for considerada a transformação dada pelas equações (3.1), com as funções de forma dadas pelas equações (3.8). No tetraedro transformado, as coordenadas locais variam nos intervalos  $0 \leq \xi \leq 1 - \eta - \zeta$ ,  $0 \leq \eta \leq 1 - \xi - \zeta$  e  $0 \leq \zeta \leq 1 - \xi - \eta$ .



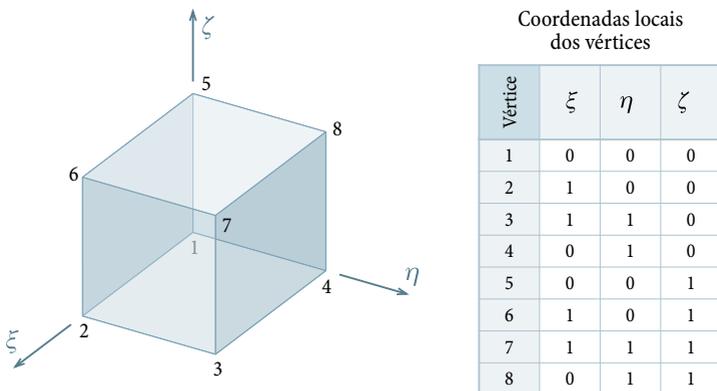
**Figura 3.5** – Tetraedro no espaço transformado.

As funções de forma para o elemento hexaédrico são as oito funções trilineares

$$\left\{ \begin{array}{l} N_1(\xi, \eta, \zeta) = (1 - \xi)(1 - \eta)(1 - \zeta), \\ N_2(\xi, \eta, \zeta) = \xi(1 - \eta)(1 - \zeta), \\ N_3(\xi, \eta, \zeta) = \xi\eta(1 - \zeta), \\ N_4(\xi, \eta, \zeta) = (1 - \xi)\eta(1 - \zeta), \\ N_5(\xi, \eta, \zeta) = (1 - \xi)(1 - \eta)\zeta, \\ N_6(\xi, \eta, \zeta) = \xi(1 - \eta)\zeta, \\ N_7(\xi, \eta, \zeta) = \xi\eta\zeta, \\ N_8(\xi, \eta, \zeta) = (1 - \xi)\eta\zeta. \end{array} \right. \quad (3.9)$$

Com uma transformação de coordenadas empregando essas funções de forma, um hexaedro qualquer é mapeado em um cubo de dimensões unitárias, segundo mostra a figura 3.6. Nesse elemento hexaédrico transformado, os intervalos de variação das coordenadas locais são  $0 \leq \xi \leq 1$ ,  $0 \leq \eta \leq 1$  e  $0 \leq \zeta \leq 1$ , respectivamente. Qualquer uma das funções de forma do hexaedro se reduz a uma função linear sobre as três arestas que

confluem no vértice cujo índice local coincide com o da função, anulando-se nas restantes arestas. Além disso, nas facetas adjacentes ao vértice, a função de forma se reduz a uma função bilinear, idêntica à considerada em um elemento quadrilátero bidimensional.



**Figura 3.6** – Hexaedro no espaço transformado.

As funções de forma consideradas para o prisma são as seguintes

$$\left\{ \begin{array}{l} N_1(\xi, \eta, \zeta) = (1 - \xi - \eta)(1 - \zeta), \\ N_2(\xi, \eta, \zeta) = \xi(1 - \zeta), \\ N_3(\xi, \eta, \zeta) = \eta(1 - \zeta), \\ N_4(\xi, \eta, \zeta) = (1 - \xi - \eta)\zeta, \\ N_5(\xi, \eta, \zeta) = \xi\zeta, \\ N_6(\xi, \eta, \zeta) = \eta\zeta. \end{array} \right. \quad (3.10)$$

O prisma no espaço transformado é mostrado na figura 3.7. Nele, os intervalos de variação das coordenadas locais são  $0 \leq \xi \leq 1 - \eta$ ,  $0 \leq \eta \leq 1 - \xi$  e  $0 \leq \zeta \leq 1$ . De modo semelhante ao caso do hexaedro, as funções de forma do prisma se reduzem a funções lineares em três arestas e se anulam nas restantes. Nas facetas triangulares, as funções tornam-se lineares, enquanto que nas facetas quadrangulares se reduzem a funções bilineares em duas coordenadas. Isto garante a compatibilidade das funções de forma do prisma com as do tetraedro e as do hexaedro. Ou seja, em

uma faceta triangular comum a um tetraedro e a um prisma, a variação das funções de forma é idêntica para ambos os elementos. Uma situação equivalente acontece em uma faceta quadrangular compartilhada por um hexaedro e um prisma.

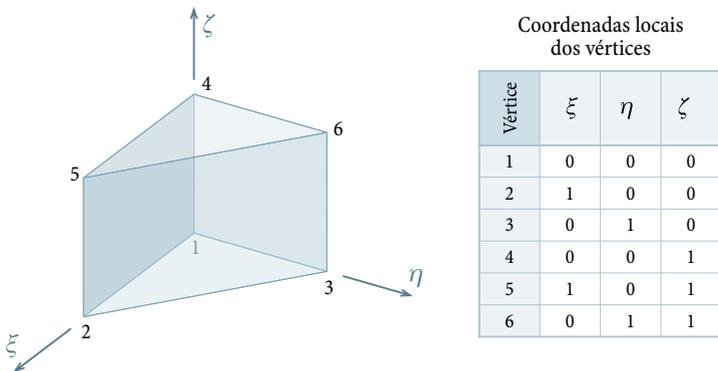


Figura 3.7 – Prisma no espaço transformado.

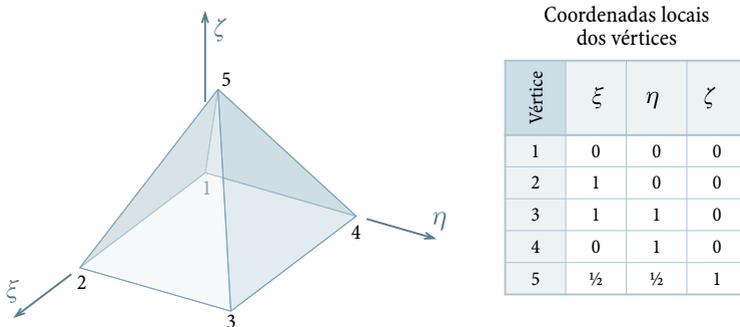
Finalmente, as funções de forma consideradas para a pirâmide são

$$\left\{ \begin{array}{l} N_1(\xi, \eta, \zeta) = (1 - \xi)(1 - \eta) - \frac{1}{4}\zeta + (\xi - \frac{1}{2})(\eta - \frac{1}{2})\zeta/(1 - \zeta), \\ N_2(\xi, \eta, \zeta) = \xi(1 - \eta) - \frac{1}{4}\zeta - (\xi - \frac{1}{2})(\eta - \frac{1}{2})\zeta/(1 - \zeta), \\ N_3(\xi, \eta, \zeta) = \xi\eta - \frac{1}{4}\zeta + (\xi - \frac{1}{2})(\eta - \frac{1}{2})\zeta/(1 - \zeta), \\ N_4(\xi, \eta, \zeta) = (1 - \xi)\eta - \frac{1}{4}\zeta - (\xi - \frac{1}{2})(\eta - \frac{1}{2})\zeta/(1 - \zeta), \\ N_5(\xi, \eta, \zeta) = \zeta. \end{array} \right. \quad (3.11)$$

Estas funções de forma diferem das dos outros elementos na presença de um termo racional em quatro delas. Conforme [83], esse termo é necessário para garantir a compatibilidade com as funções de tetraedros e hexaedros e para evitar a singularidade da matriz jacobiana.<sup>2</sup> De fato, é possível comprovar que as funções da equação (3.11) se reduzem a funções lineares sobre as facetas triangulares e a funções bilineares sobre a base quadrangular, como requerido para a transição com os outros elementos.

<sup>2</sup> As funções da equação (3.11), no entanto, diferem das apresentadas em [83] nos intervalos de variação das coordenadas locais. Variou-se esses intervalos a fim de compatibilizá-los com os considerados nas funções de forma dos outros elementos, sempre entre 0 e 1.

O elemento piramidal no espaço transformado encontra-se representado na figura 3.8. Os intervalos de variação admissíveis para as coordenadas locais são  $\frac{\zeta}{2} \leq \xi \leq 1 - \frac{\zeta}{2}$ ,  $\frac{\zeta}{2} \leq \eta \leq 1 - \frac{\zeta}{2}$  e  $0 \leq \zeta \leq 1$ .



**Figura 3.8** – Pirâmide no espaço transformado.

## 3.4 Integração numérica

Em geral, um método de volumes finitos é baseado na aproximação numérica da forma integral das equações de conservação. Portanto, uma das operações mais importantes do método é a aproximação de integrais. Ordinariamente, dois tipos de integrais precisam ser aproximadas em uma equação de conservação: integrais de volume, cujo domínio são os volumes de controle, e integrais de superfície, cujo domínio são as superfícies de controle que limitam esses volumes.

### 3.4.1 Aproximação de integrais de volume

A forma mais simples de aproximação de uma integral de volume é o produto do valor médio do integrando no domínio de integração pelo volume desse domínio. No contexto do método de volumes finitos, o valor médio do integrando pode ser aproximado pelo seu valor nodal, correspondente ao nó interior do volume de controle. Pode-se, portanto, escrever para essa aproximação

$$\int_{V_p} \psi \, dV \approx \check{\psi}_p \Delta V_p, \quad (3.12)$$

em que  $\check{\psi}_p$  é o valor nodal do integrando e  $\Delta V_p$  é o volume do volume de controle, ambos associados ao nó  $p$ .

Quando o nó  $p$  estiver localizado no baricentro do volume de controle  $\mathcal{V}_p$ , como aconteceria em uma malha cartesiana regular, a aproximação (3.12) terá precisão de segunda ordem [20]. Nos volumes de controle poliédricos construídos sobre uma malha não-estruturada irregular, entretanto, raramente o nó interior estará localizado no baricentro do volume. Nesses casos, a precisão da aproximação (3.12) se reduz a primeira ordem. Apesar disso, em um método de volumes finitos é comum utilizar esse tipo de aproximação, especialmente no termo transiente de uma equação de conservação.

No contexto de um método de volumes finitos baseado em elementos, a aproximação de uma integral de volume pode ser feita também em nível de subelementos. Uma vez que um volume de controle encontra-se formado por certo número de subelementos, é possível escrever

$$\int_{\mathcal{V}_p} \psi \, dV = \sum_{e \in \mathcal{E}_p} \int_{s_p^e} \psi \, dV. \quad (3.13)$$

Cada uma das integrais definidas sobre os subelementos pode ser então aproximada, resultando a expressão

$$\int_{\mathcal{V}_p} \psi \, dV \approx \sum_{e \in \mathcal{E}_p} \psi_{s_p^e}^e \Delta V_{s_p^e}^e, \quad (3.14)$$

onde  $\psi_{s_p^e}^e$  é o valor do integrando, avaliado no baricentro do subelemento  $s_p^e$ , enquanto que  $\Delta V_{s_p^e}^e$  é o volume de tal subelemento. No caso de não existir uma expressão explícita para o integrando em função de coordenadas espaciais, pode ser necessário o uso de esquemas de interpolação para relacionar o valor de  $\psi_{s_p^e}^e$  com valores nodais.

Como no espaço transformado os subelementos possuem uma forma mais regular, seu volume pode ser determinado mais facilmente mediante integração nesse espaço. O fator de escala entre o volume de um elemento diferencial no espaço físico e o correspondente volume no espaço transformado é dado pelo determinante da matriz jacobiana  $|\mathbf{J}|$  da transformação [84]. Portanto, para determinar o volume de um subelemento, pode ser utilizada a expressão integral

$$\Delta V_{s_p}^e = \int_{s_p^e} |\mathbf{J}| dV^{\xi\eta\zeta}, \quad (3.15)$$

na qual,  $dV^{\xi\eta\zeta}$  é o elemento diferencial de volume no espaço transformado. Isso implica que a integração é realizada nesse espaço. Os detalhes das técnicas de integração empregadas neste trabalho para o cálculo da integral na equação (3.15) são apresentados no apêndice A.

Encontrando-se disponíveis os volumes dos subelementos, o volume de um volume de controle completo, necessário na equação (3.12), pode ser obtido mediante a soma

$$\Delta V_p = \sum_{e \in \mathcal{E}_p} \Delta V_{s_p}^e. \quad (3.16)$$

### 3.4.2 Aproximação de integrais de superfície

As integrais de superfície em uma equação de conservação representam os fluxos advectivos e/ou difusivos atravessando a superfície de controle. O fluxo total através de uma superfície de controle pode ser expresso por uma integral da forma  $\int_{s_p} \boldsymbol{\vartheta} \cdot d\mathbf{S}$ , onde  $\boldsymbol{\vartheta}$  é a densidade de fluxo e  $d\mathbf{S}$  um elemento diferencial de área, sendo ambas as grandezas vetoriais. O vetor  $d\mathbf{S}$  é normal à superfície de controle em qualquer ponto, com orientação apontando para o exterior do volume de controle.

Uma vez que uma superfície de controle encontra-se formada, em geral, por um conjunto de faces internas à malha e um conjunto de faces de contorno, pode-se então escrever

$$\int_{s_p} \boldsymbol{\vartheta} \cdot d\mathbf{S} = \int_{\mathcal{F}_p} \boldsymbol{\vartheta} \cdot d\mathbf{S} + \int_{b\mathcal{F}_p} \boldsymbol{\vartheta} \cdot d\mathbf{S}. \quad (3.17)$$

Considerando inicialmente a integral sobre  $\mathcal{F}_p$ , ela será igual à soma das integrais definidas sobre as faces individuais  $f$  que pertençam a  $\mathcal{F}_p$ . Ou seja,

$$\int_{\mathcal{F}_p} \boldsymbol{\vartheta} \cdot d\mathbf{S} = \sum_{f \in \mathcal{F}_p} \int_f \boldsymbol{\vartheta} \cdot d\mathbf{S}. \quad (3.18)$$

Ainda, dado que essas faces encontram-se distribuídas nos elementos que contribuem na formação do volume de controle, a última equação pode ser reescrita de forma equivalente como

$$\int_{\mathcal{F}_p} \boldsymbol{\vartheta} \cdot d\mathbf{S} = \sum_{e \in \mathcal{E}_p} \sum_{f \in \mathcal{F}_p^e} \int_f \boldsymbol{\vartheta} \cdot d\mathbf{S}. \quad (3.19)$$

Cada face  $f$  é um quadrilátero ou um triângulo localizado no interior de um elemento  $e$ . A integral em uma dessas faces pode ser aproximada pela regra do ponto médio [20], isto é, pelo produto escalar do integrando, avaliado no baricentro da face, e o vetor área da face em questão.<sup>3</sup> Introduzindo essa aproximação na equação (3.19), obtém-se, finalmente,

$$\int_{\mathcal{F}_p} \boldsymbol{\vartheta} \cdot d\mathbf{S} \approx \sum_{e \in \mathcal{E}_p} \sum_{f \in \mathcal{F}_p^e} \boldsymbol{\vartheta}_{\hat{f}} \cdot \Delta \mathbf{S}_{f,p}. \quad (3.20)$$

Nesta expressão,  $\boldsymbol{\vartheta}_{\hat{f}}$  é o valor da densidade de fluxo no baricentro da face  $f$ , enquanto que  $\Delta \mathbf{S}_{f,p}$  é o vetor área da referida face, com orientação positiva relativa ao volume de controle  $\mathcal{V}_p$ .

O vetor área é o produto da área de uma face pelo vetor unitário na sua direção normal.<sup>4</sup> Quanto à orientação desse vetor, pode-se definir uma orientação absoluta e uma orientação relativa aos volumes de controle que a face separa.

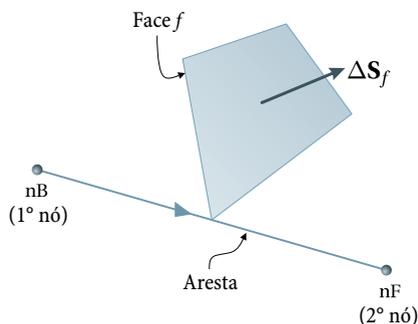
**Definição 3.1.** A orientação absoluta do vetor área de uma face é idêntica à orientação da aresta associada à face.

Na seção 2.3, quando foi descrita a topologia dos elementos, definiu-se a orientação das arestas em função da ordenação em que são especificados os vértices.<sup>5</sup> Convencionalmente, a definição 3.1 estabelece que uma face e uma aresta, que são entidades duais em nível de elemento, possuem a mesma orientação. Isso é mostrado esquematicamente na figura 3.9. Nessa figura é indicada também uma notação para os dois nós nas extremidades de uma aresta, a qual esta relacionada com a orientação da face.

<sup>3</sup> Essa aproximação é equivalente ao emprego de uma quadratura de Gauss [35, 84] com um único ponto de integração sobre a face.

<sup>4</sup> O cômputo do vetor área é descrito no apêndice A, considerando inclusive o caso da face ser um quadrilátero não plano.

<sup>5</sup> Conforme se definiu na seção 2.3, a orientação positiva de uma aresta é aquela que vai do primeiro ao segundo vértice especificado.



**Figura 3.9** – Orientação absoluta do vetor área de face.

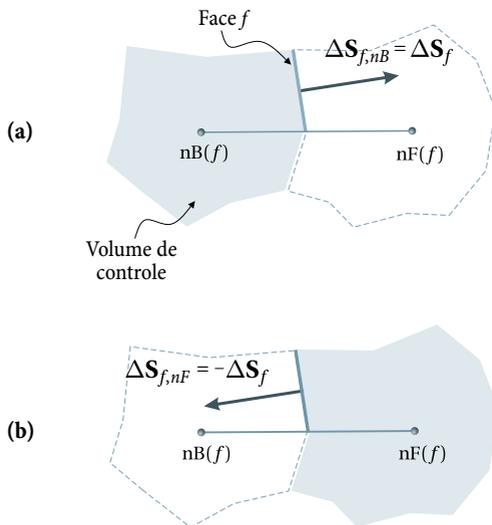
Entretanto, as expressões aproximadas para os fluxos nas faces, como a da equação (3.20), devem ser escritas considerando a orientação das faces relativa aos volumes de controle adjacentes.

**Definição 3.2.** O vetor área de uma face possui orientação positiva em relação a um volume de controle adjacente se aponta para o exterior do volume.

Neste trabalho, o vetor área associado à face  $f$ , quando considerado com orientação absoluta, é denotado como  $\Delta S_f$ . No entanto, quando for necessário especificar a orientação relativa a um volume de controle adjacente, o vetor será denotado como  $\Delta S_{f,p}$ , sendo  $p$  o nó interior ao volume referido. Conforme ilustra a figura 3.10(a),  $\Delta S_{f,p}$  coincide com  $\Delta S_f$  quando  $p$  é o nó localizado no lado oposto ao apontado por  $\Delta S_f$ . No caso contrário, o mostrado na figura 3.10(b), tem-se que  $\Delta S_{f,p} = -\Delta S_f$ .

Do ponto de vista da implementação computacional é mais vantajoso expressar os fluxos nas faces considerando a orientação absoluta do vetor área. Dessa forma, um fluxo é calculado uma única vez em uma dada face. Quando tal fluxo deva ser adicionado nas equações de conservação dos volumes de controle adjacentes, ele terá sinal positivo para um volume e negativo para o outro.<sup>6</sup> A diferença no sinal é originada pela diferente orientação relativa do vetor área da face em relação aos dois volumes.

<sup>6</sup> Isto é, o fluxo que abandona um volume de controle por uma dada face é o mesmo fluxo que ingressa no volume vizinho, por essa face. Essa é uma das características fundamentais de um método de volumes finitos, a consistência dos fluxos nas interfaces entre volumes de controle [45, 59].



**Figura 3.10** – Orientação do vetor área de face, relativa aos volumes de controle.

Uma forma prática de expressar a aproximação de uma integral de superfície em função de  $\Delta \mathbf{S}_f$  é mediante a definição do parâmetro

$$\sigma_{f,p} = \begin{cases} 1 & \text{se } p = nB(f), \\ -1 & \text{se } p = nF(f), \end{cases} \quad (3.21)$$

onde  $nB(f)$  e  $nF(f)$  são os nós localizados atrás e a frente da face  $f$ , respectivamente, segundo a notação indicada nas figuras 3.9 e 3.10. Com esse parâmetro, tem-se que  $\Delta \mathbf{S}_{f,p} = \sigma_{f,p} \Delta \mathbf{S}_f$ , com o qual a equação (3.20) pode ser reescrita na forma final

$$\int_{\mathcal{F}_p} \boldsymbol{\vartheta} \cdot d\mathbf{S} \approx \sum_{e \in \mathcal{E}_p} \sum_{f \in \mathcal{F}_p^e} \sigma_{f,p} \boldsymbol{\vartheta}_f \cdot \Delta \mathbf{S}_f. \quad (3.22)$$

Voltando novamente à aproximação das integrais em uma superfície de controle, na equação (3.17) resta aproximar a integral definida sobre  ${}^b\mathcal{F}_p$ , para os volumes adjacentes a contornos. A aproximação dessa integral pode ser escrita de forma análoga à aproximação da integral sobre  $\mathcal{F}_p$ . Tem-se então,

$$\int_{b\mathcal{F}_p} \boldsymbol{\vartheta} \cdot d\mathbf{S} \approx \sum_{b\mathcal{E}_p} \sum_{b\mathcal{F}_p^{b_e}} \boldsymbol{\vartheta}_{b_f} \cdot \Delta\mathbf{S}_{b_f}, \quad (3.23)$$

onde  $\boldsymbol{\vartheta}_{b_f}$  é o valor da densidade de fluxo no baricentro da face de contorno, enquanto que  $\Delta\mathbf{S}_{b_f}$  é o vetor área correspondente a essa face. Os vetores  $\Delta\mathbf{S}_{b_f}$  são construídos de modo que sempre apontem para o exterior do domínio. Em consequência, neste caso não há necessidade de distinguir entre orientação absoluta e relativa aos volumes de controle, como no caso das faces internas, porque ambas as orientações sempre coincidem.

### 3.5 Aproximação do gradiente de uma variável

O transporte difusivo de uma grandeza física é dependente do gradiente dessa grandeza. Logo, toda vez que for necessário aproximar numericamente o termo de transporte difusivo em uma equação de conservação, será necessário aproximar gradientes ou componentes desses gradientes em determinadas direções.

Na formulação de volumes finitos baseada em elementos apresentada neste trabalho, considerar-se-á a abordagem tradicional, determinando os gradientes mediante diferenciação de aproximações baseadas nas funções de forma. Isto é, para efeito do cômputo do gradiente, a variação de uma grandeza  $\Theta$  em um elemento será aproximada pela expressão

$$\Theta(\xi, \eta, \zeta) \approx \sum_{\ell \in \mathcal{N}^e} N_\ell(\xi, \eta, \zeta) \check{\Theta}_\ell^e, \quad (3.24)$$

na qual,  $N_\ell(\xi, \eta, \zeta)$  são as mesmas funções de forma consideradas no mapeamento dos elementos<sup>7</sup> e  $\check{\Theta}_\ell^e$  são os valores nodais da grandeza.

A aplicação da aproximação (3.24) à definição do gradiente de uma função dependente das coordenadas cartesianas,

$$\nabla\Theta \equiv \begin{pmatrix} \partial_x\Theta \\ \partial_y\Theta \\ \partial_z\Theta \end{pmatrix}, \quad (3.25)$$

<sup>7</sup> Esta é uma característica, na nomenclatura do método de elementos finitos, dos elementos *isoparamétricos* [35, 84].

dá origem à expressão

$$\nabla\Theta \approx \sum_{\ell \in \mathcal{N}^e} \begin{pmatrix} \partial_x N_\ell \\ \partial_y N_\ell \\ \partial_z N_\ell \end{pmatrix} \check{\Theta}_\ell^e. \quad (3.26)$$

No entanto, uma vez que as funções de forma são definidas em relação às coordenadas locais, as derivadas parciais na equação (3.26) não podem ser obtidas diretamente. Para obtê-las, deve-se fazer uso da regra da cadeia para derivação de funções compostas. Dessa forma, por exemplo, para a derivada  $\partial_\xi N_\ell$  pode ser obtida a expressão

$$\partial_\xi N_\ell = \partial_{\xi x} \cdot \partial_x N_\ell + \partial_{\xi y} \cdot \partial_y N_\ell + \partial_{\xi z} \cdot \partial_z N_\ell. \quad (3.27)$$

Relações equivalentes podem também ser obtidas para as derivadas parciais  $\partial_\eta N_\ell$  e  $\partial_\zeta N_\ell$ . As três expressões podem ser reunidas para formar a equação matricial

$$\begin{pmatrix} \partial_\xi N_\ell \\ \partial_\eta N_\ell \\ \partial_\zeta N_\ell \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \partial_{\xi x} & \partial_{\xi y} & \partial_{\xi z} \\ \partial_{\eta x} & \partial_{\eta y} & \partial_{\eta z} \\ \partial_{\zeta x} & \partial_{\zeta y} & \partial_{\zeta z} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \partial_x N_\ell \\ \partial_y N_\ell \\ \partial_z N_\ell \end{pmatrix}. \quad (3.28)$$

A matriz presente no lado direito desta última equação é a transposta da matriz jacobiana, conforme se pode comprovar observando a definição dessa matriz, na equação (3.3). Logo, a equação (3.28) pode ser reescrita como

$$\begin{pmatrix} \partial_\xi N_\ell \\ \partial_\eta N_\ell \\ \partial_\zeta N_\ell \end{pmatrix} = \mathbf{J}^T \begin{pmatrix} \partial_x N_\ell \\ \partial_y N_\ell \\ \partial_z N_\ell \end{pmatrix}, \quad (3.29)$$

da qual se deduz

$$\begin{pmatrix} \partial_x N_\ell \\ \partial_y N_\ell \\ \partial_z N_\ell \end{pmatrix} = \mathbf{J}^{-T} \begin{pmatrix} \partial_\xi N_\ell \\ \partial_\eta N_\ell \\ \partial_\zeta N_\ell \end{pmatrix}, \quad (3.30)$$

em que  $\mathbf{J}^{-T}$  é uma notação reduzida para a inversa da transposta da matriz jacobiana.

A equação (3.30) pode agora ser substituída na equação (3.25), obtendo-se então a expressão

$$\nabla\Theta = \mathbf{J}^{-\text{T}} \sum_{\ell \in \mathcal{N}^e} \begin{pmatrix} \partial_{\xi} N_{\ell} \\ \partial_{\eta} N_{\ell} \\ \partial_{\zeta} N_{\ell} \end{pmatrix} \check{\Theta}_{\ell}^e, \quad (3.31)$$

a qual pode ser reescrita na forma matricial equivalente

$$\nabla\Theta = \mathbf{J}^{-\text{T}} \begin{pmatrix} \partial_{\xi} N_1 & \partial_{\xi} N_2 & \cdots & \partial_{\xi} N_{N_n} \\ \partial_{\eta} N_1 & \partial_{\eta} N_2 & \cdots & \partial_{\eta} N_{N_n} \\ \partial_{\zeta} N_1 & \partial_{\zeta} N_2 & \cdots & \partial_{\zeta} N_{N_n} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \check{\Theta}_1^e \\ \check{\Theta}_2^e \\ \vdots \\ \check{\Theta}_{N_n}^e \end{pmatrix}. \quad (3.32)$$

Na segunda matriz do lado direito desta equação é possível reconhecer a transposta da matriz  $\mathbf{D}$ , definida anteriormente na equação (3.7). Definindo, ainda, o vetor de valores nodais da variável  $\Theta$  como

$$\check{\Theta}^e \equiv \begin{pmatrix} \check{\Theta}_1^e \\ \check{\Theta}_2^e \\ \vdots \\ \check{\Theta}_{N_n}^e \end{pmatrix}, \quad (3.33)$$

é possível escrever a expressão final, mais compacta, para a aproximação do gradiente em um ponto qualquer de um elemento

$$\nabla\Theta(\xi, \eta, \zeta) = \mathbf{J}^{-\text{T}} \mathbf{D}^{\text{T}} \check{\Theta}^e. \quad (3.34)$$

### 3.6 Esquemas de interpolação espacial

Na discretização de uma equação de conservação é necessário também aproximar valores de uma variável em locais diferentes aos dos nós. Uma vez que a forma fechada das equações discretizadas apenas pode conter valores nodais das variáveis, torna-se necessário o emprego de esquemas de interpolação, para relacionar valores em pontos específicos dos elementos, geralmente localizados sobre as faces, com os valores nodais.

O caso mais importante surge na aproximação do fluxo advectivo em uma equação de conservação. O fluxo advectivo na superfície de um volume de controle é representado matematicamente por uma integral de superfície como a considerada na seção 3.4.2. Nessa integral, a densidade de fluxo é usualmente dada por  $\boldsymbol{\vartheta} = \rho \mathbf{v}\Theta$ , onde  $\rho$  e  $\mathbf{v}$  são a densidade do fluido e a velocidade do escoamento que transporta a grandeza intensiva

$\Theta$ , respectivamente. Quando a essa integral é aplicada a aproximação dada pela equação (3.22), torna-se evidente a necessidade de aproximar valores de variável nos baricentros das faces, isto é, valores de  $\Theta_{\hat{f}}$ .

Em um método de volumes baseado em elementos, um esquema de interpolação é geralmente restrito aos valores nodais associados a um elemento. Assim, a expressão mais geral para um esquema de interpolação para o valor de uma variável no baricentro de uma face é

$$\Theta_{\hat{f}} \approx \sum_{\ell \in \mathcal{N}^e} \alpha_{f,\ell}^e \check{\Theta}_{\ell}^e, \quad (3.35)$$

em que  $\alpha_{f,\ell}^e$  são coeficientes escalares que ponderam a influência de cada valor nodal sobre o valor interpolado na face. O número de coeficientes necessários para esta interpolação é igual ao número de nós associados ao elemento  $e$  onde a face se encontra. Por exemplo, em um esquema de interpolação equivalente à aproximação empregada para o cômputo do gradiente, os valores dos coeficientes de interpolação seriam iguais aos valores das funções de forma nos baricentros das faces, isto é,

$$\left( \alpha_{f,\ell}^e \right)_{\text{forma}} = N_{\ell}(\xi_{\hat{f}}, \eta_{\hat{f}}, \zeta_{\hat{f}}), \quad (3.36)$$

em que  $\xi_{\hat{f}}$ ,  $\eta_{\hat{f}}$  e  $\zeta_{\hat{f}}$  são as coordenadas locais do baricentro da face  $f$ .

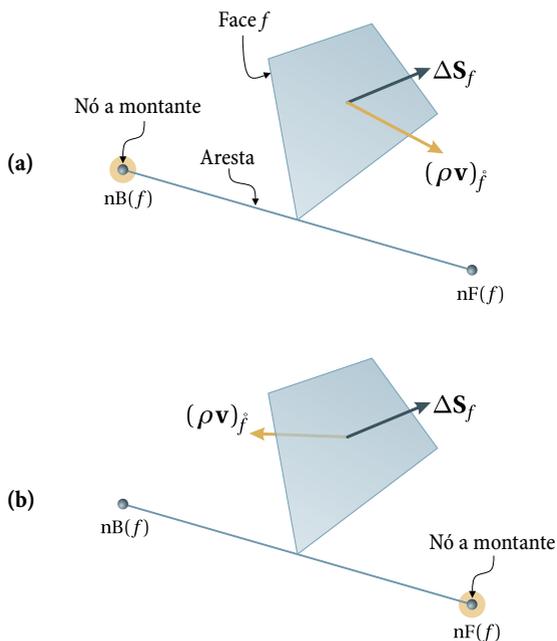
Embora seja possível empregar este tipo de interpolação na aproximação do termo advectivo, sua utilização não é aconselhável. Essa prática é equivalente ao uso de esquemas de diferenças centrais em formulações convencionais de volumes finitos, portanto, usualmente dá origem a coeficientes negativos na forma final das equações discretizadas [67]. Conforme é relatado extensamente na literatura [42, 44, 45, 59, 60], problemas de monotonicidade e de oscilações espúrias são comumente consequência direta da presença desses coeficientes.

O esquema de interpolação mais empregado para os termos advectivos, na simulação de reservatórios, é o esquema *upwind* de um ponto [3] ou esquema *donor cell* [44]. Nesse esquema, o valor nodal localizado a montante de uma interface, levando em conta o sentido do escoamento que a atravessa, é atribuído integralmente como valor interpolado nessa interface. Essa aproximação possui precisão de primeira ordem e preserva a monotonicidade de soluções discretas inicialmente monotônicas [78]. Portanto, produz soluções fisicamente coerentes, embora apresentando forte difusão numérica [45].

No contexto de um método de volumes finitos baseado em elementos, o esquema *upwind* de um ponto, denotado daqui em diante com a sigla SPU,<sup>8</sup> pode ser definido matematicamente pela expressão

$$\left(\Theta_f\right)_{\text{SPU}} = \begin{cases} \check{\Theta}_{\text{nB}(f)} & \text{se } (\rho\mathbf{v})_f \cdot \Delta\mathbf{S}_f > 0, \\ \check{\Theta}_{\text{nF}(f)} & \text{se } (\rho\mathbf{v})_f \cdot \Delta\mathbf{S}_f < 0, \end{cases} \quad (3.37)$$

na qual, igual que na equação (3.21),  $\text{nB}(f)$  e  $\text{nF}(f)$  é uma notação para os nós localizados detrás e a frente da face  $f$ , de acordo com a orientação absoluta da face. Além disso,  $(\rho\mathbf{v})_f \cdot \Delta\mathbf{S}_f$  é a vazão que atravessa a face, da qual somente é considerado seu sinal. Os dois casos considerados na equação (3.37) encontram-se ilustrados esquematicamente na figura 3.11. Todos os coeficientes  $\alpha_{f,\ell}^e$  associados ao esquema SPU são nulos, exceto aquele associado ao nó a montante, o qual adquire um valor unitário.



**Figura 3.11** – Os dois casos na interpolação *upwind* de um ponto (SPU).

<sup>8</sup> Do inglês *Single Point Upwind*.

# Discretização de uma equação de conservação

## 4.1 Equação de conservação genérica

A fim de mostrar de forma objetiva a aplicação das aproximações numéricas apresentadas no capítulo anterior, neste capítulo será descrita, passo a passo, a discretização de uma equação de conservação genérica. A equação de conservação de uma grandeza escalar é considerada aqui um protótipo das equações que formam parte dos diferentes modelos de escoamento em reservatórios de petróleo. Após ser descrita a obtenção da forma discretizada dessa equação, será abordado o procedimento de montagem do sistema linear de equações resultante da discretização em todos os volumes de controle de uma malha. A descrição detalhada desses procedimentos, aplicados a uma equação simples como a equação de conservação de uma grandeza escalar, servirá como fundamento para a posterior aplicação a um modelo de escoamento multifásico em reservatórios de petróleo.

A forma diferencial da equação de conservação de uma grandeza escalar  $\Theta$ , associada ao escoamento de um fluido e expressa por unidade de massa, pode ser escrita de forma genérica como [20]

$$\frac{\partial(\rho\Theta)}{\partial t} + \nabla \cdot (\rho\Theta\mathbf{v}) = \nabla \cdot (\mathbf{K}\nabla\Theta) + \psi. \quad (4.1)$$

Nesta equação,  $\rho$  é a densidade do fluido,  $\mathbf{v}$  é a sua velocidade e  $\mathbf{K}$  o coeficiente de difusividade da grandeza  $\Theta$ , expressa como um tensor de segunda ordem.<sup>1</sup> A equação 4.1 representa um balanço da grandeza  $\Theta$  em um volume de controle infinitesimal. O primeiro termo do lado esquerdo representa a variação temporal da grandeza genérica no volume. O segundo termo representa o transporte advectivo através da superfície do volume infinitesimal. O primeiro termo no lado direito representa o transporte difusivo através da mesma superfície. Por fim, o termo  $\psi$  é o termo fonte da equação, o qual leva em conta qualquer mecanismo de geração, conversão ou transporte da grandeza  $\Theta$  não considerado explicitamente nos outros termos da equação.

O ponto de partida para a aplicação de um método de volumes finitos é geralmente a forma integral de uma equação de conservação. Para a equação (4.1), a forma integral equivalente é [20]

$$\frac{\partial}{\partial t} \int_{\mathcal{V}} \rho\Theta dV + \int_S \rho\Theta\mathbf{v} \cdot d\mathbf{S} = \int_S \mathbf{K}\nabla\Theta \cdot d\mathbf{S} + \int_{\mathcal{V}} \psi dV. \quad (4.2)$$

Esta equação corresponde ao balanço em um volume de controle  $\mathcal{V}$ , limitado por uma superfície fechada  $S$ , fixo em uma região do espaço pela qual escoam um fluido [8]. Tal como ilustra a figura 4.1,  $d\mathbf{S}$  é um vetor diferencial de área sobre a superfície  $S$ , dirigido na direção normal a ela e apontando para o exterior do volume.

Existe uma correspondência termo a termo entre as equações (4.1) e (4.2). Entretanto, a forma diferencial é mais restritiva no sentido de não admitir soluções apresentando descontinuidades, tais como ondas de choque ou interfaces entre fluidos imiscíveis [8, 44]. Uma vez que a forma integral não possui restrições em relação a descontinuidades, ela é preferida como base da maioria das formulações numéricas [8].

---

<sup>1</sup> Em uma equação de conservação associada à descrição de um escoamento em um reservatório,  $\mathbf{K}$  representaria a permeabilidade do meio.

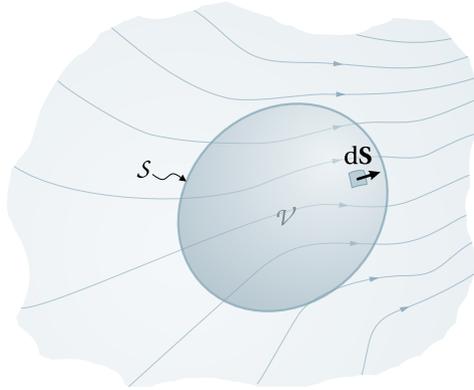


Figura 4.1 – Volume de controle em um escoamento.

## 4.2 Discretização

A equação (4.2) pode ser aplicada diretamente a um volume de controle poliédrico como os obtidos com os procedimentos descritos na seção 2.4. Neste caso, conforme a notação apresentada na seção 3.2, considerar-se-á um volume de controle  $\mathcal{V}_p$ , limitado pela superfície  $S_p$ . Nas subseções seguintes será descrita a discretização dos diferentes termos da equação integral de conservação, aplicando as aproximações apresentadas anteriormente no capítulo 3.

### 4.2.1 Termo de transporte advectivo

Para a aproximação numérica dos termos de transporte, inicialmente será considerado um volume de controle localizado no interior do domínio, ou seja, um volume que não possui faces de contorno ( ${}^b\mathcal{F}_p = \emptyset$ ). A contribuição das faces de contorno será considerada posteriormente como parte das condições de contorno do problema.

A aplicação da equação (3.22), com  $\boldsymbol{\vartheta} = \rho\mathbf{\Theta}$ , da origem à seguinte aproximação para o termo advectivo na forma integral da equação de conservação

$$\int_{S_p} \rho\boldsymbol{\Theta}\mathbf{v} \cdot d\mathbf{S} \approx \sum_{e \in \mathcal{E}_p} \sum_{f \in \mathcal{F}_p^e} \sigma_{f,p} (\rho\boldsymbol{\Theta}\mathbf{v})_f \cdot \Delta\mathbf{S}_f. \quad (4.3)$$

Ainda, após definir o fluxo de massa pela face como  $\dot{m}_f \equiv (\rho \mathbf{v})_{\hat{f}} \cdot \Delta \mathbf{S}_f$ , a aproximação pode ser escrita na forma mais compacta

$$\int_{S_p} \rho \Theta \mathbf{v} \cdot d\mathbf{S} \approx \sum_{e \in \mathcal{E}_p} \sum_{f \in \mathcal{F}_p^e} \sigma_{f,p} \dot{m}_f \Theta_{\hat{f}}. \quad (4.4)$$

A forma final da aproximação do termo advectivo é obtida substituindo a expressão utilizada para interpolar os valores da variável nas faces, em função de valores nodais. Aqui será empregada a expressão geral dada pela equação (3.35), com a qual obtém-se

$$\int_{S_p} \rho \Theta \mathbf{v} \cdot d\mathbf{S} \approx \sum_{e \in \mathcal{E}_p} \sum_{f \in \mathcal{F}_p^e} \sum_{\ell \in \mathcal{N}^e} \sigma_{f,p} \dot{m}_f \alpha_{f,\ell}^e \check{\Theta}_{\ell}^e. \quad (4.5)$$

## 4.2.2 Termo de transporte difusivo

Aplicando desta vez a equação (3.22) com  $\boldsymbol{\vartheta} = \mathbf{K} \nabla \Theta$ , obtém-se a seguinte expressão aproximada para o termo difusivo da equação de conservação

$$\int_{S_p} \mathbf{K} \nabla \Theta \cdot d\mathbf{S} \approx \sum_{e \in \mathcal{E}_p} \sum_{f \in \mathcal{F}_p^e} \sigma_{f,p} (\mathbf{K} \nabla \Theta)_{\hat{f}} \cdot \Delta \mathbf{S}_f. \quad (4.6)$$

A fim de aproximar o fluxo difusivo em cada face da superfície de controle, pode-se agora substituir a expressão aproximada para o gradiente, dada na equação (3.34). Além disso, para facilitar a posterior manipulação algébrica, o produto escalar que determina o fluxo pode ser escrito utilizando a representação alternativa  $\mathbf{a} \cdot \mathbf{b} = \mathbf{a}^T \mathbf{b}$ , obtendo-se a relação aproximada

$$(\mathbf{K} \nabla \Theta)_{\hat{f}} \cdot \Delta \mathbf{S}_f \approx \left( \mathbf{K}_{\hat{f}} \mathbf{J}_{\hat{f}}^{-T} \mathbf{D}_{\hat{f}}^T \check{\boldsymbol{\Theta}}^e \right)^T \Delta \mathbf{S}_f. \quad (4.7)$$

Uma vez que a aproximação da integral de superfície na face requer que o gradiente seja avaliado no baricentro da face, tanto a matriz jacobiana  $\mathbf{J}$  como a matriz  $\mathbf{D}$  são avaliadas nesse ponto. Além disso,  $\mathbf{K}_{\hat{f}}$  é o coeficiente de difusividade no mesmo ponto.<sup>2</sup>

<sup>2</sup> Na simulação de reservatórios,  $\mathbf{K}$  representa a permeabilidade absoluta, uma propriedade do meio poroso no qual acontece o escoamento. Na representação discreta da variação espacial dessa grandeza, é conveniente associar a cada elemento um valor único de permeabilidade, a fim de evitar descontinuidades nas faces.

Já que o produto escalar de dois vetores é comutativo, isto é,  $\mathbf{a}^\top \mathbf{b} = \mathbf{b}^\top \mathbf{a}$ , a equação (4.7) pode ser reescrita como

$$(\mathbf{K}\nabla\Theta)_{\hat{f}} \cdot \Delta \mathbf{S}_f \approx \Delta \mathbf{S}_f^\top \mathbf{K}_{\hat{f}} \mathbf{J}_{\hat{f}}^{-\top} \mathbf{D}_{\hat{f}}^\top \check{\Theta}^e. \quad (4.8)$$

Esta forma da aproximação do fluxo difusivo em uma face permite definir o operador

$$\left(\beta_f^e\right)^\top \equiv \Delta \mathbf{S}_f^\top \mathbf{K}_{\hat{f}} \mathbf{J}_{\hat{f}}^{-\top} \mathbf{D}_{\hat{f}}^\top, \quad (4.9)$$

com o qual o fluxo em uma face pode ser escrito como

$$(\mathbf{K}\nabla\Theta)_{\hat{f}} \cdot \Delta \mathbf{S}_f \approx \left(\beta_f^e\right)^\top \check{\Theta}^e = \sum_{\ell \in \mathcal{N}^e} \beta_{f,\ell}^e \check{\Theta}_\ell^e, \quad (4.10)$$

onde  $\beta_{f,\ell}^e$  são as componentes do operador  $\left(\beta_f^e\right)^\top$ , o qual é um vetor de dimensão igual ao número de nós do elemento ao qual a face em questão pertence. Introduzindo essa aproximação na equação (4.6), resulta a expressão final para a aproximação do termo difusivo

$$\int_{S_p} \mathbf{K}\nabla\Theta \cdot d\mathbf{S} \approx \sum_{e \in \mathcal{E}_p} \sum_{f \in \mathcal{F}_p^e} \sum_{\ell \in \mathcal{N}^e} \sigma_{f,p} \beta_{f,\ell}^e \check{\Theta}_\ell^e. \quad (4.11)$$

### 4.2.3 Integração temporal

Para completar a discretização da equação integral (4.2), resta aproximar os termos representados por integrais de volume. Após aplicar a aproximação dada na equação (3.12) para ambas as integrais e substituir, além disso, as aproximações dos termos de transporte advectivo e difusivo, obtém-se a equação

$$\begin{aligned} \frac{\partial}{\partial t} (M_p \check{\Theta}_p) + \sum_{e \in \mathcal{E}_p} \sum_{f \in \mathcal{F}_p^e} \sum_{\ell \in \mathcal{N}^e} \sigma_{f,p} \dot{m}_f \alpha_{f,\ell}^e \check{\Theta}_\ell^e = \\ \sum_{e \in \mathcal{E}_p} \sum_{f \in \mathcal{F}_p^e} \sum_{\ell \in \mathcal{N}^e} \sigma_{f,p} \beta_{f,\ell}^e \check{\Theta}_\ell^e + \check{\psi}_p \Delta V_p, \end{aligned} \quad (4.12)$$

na qual tem-se introduzido o parâmetro  $M_p \equiv \rho_p \Delta V_p$ , o qual representa a massa de fluido contida no volume de controle.

A equação (4.12) deve ser ainda integrada no tempo para poder ser obtida a versão final da equação em nível discreto. Após levar o termo de fluxo advectivo para o lado direito da equação e integrar todos os termos entre nos níveis discretos de tempo  $t_{m-1}$  e  $t_m$ , chega-se a

$$M_p \check{\Theta}_p \Big|_{t_{m-1}}^{t_m} = \int_{t_{m-1}}^{t_m} \left[ \sum_{e \in \mathcal{E}_p} \sum_{f \in \mathcal{F}_p^e} \sum_{\ell \in \mathcal{N}^e} \sigma_{f,p} \left( \beta_{f,\ell}^e - \dot{m}_f \alpha_{f,\ell}^e \right) \check{\Theta}_\ell^e + \check{\psi}_p \Delta V_p \right] dt. \quad (4.13)$$

A integral do lado direito deve agora ser aproximada numericamente em função de valores nos níveis de tempo  $t_m$  e/ou  $t_{m-1}$ . Nesta operação qualquer uma das abordagens empregadas ordinariamente em métodos convencionais de volumes finitos pode ser considerada [8, 20, 45]. Como exemplo, a seguir será considerada a abordagem totalmente implícita [45], na qual a integral é aproximada avaliando o integrando no nível de tempo  $t_m$  e multiplicando-o pelo intervalo  $\Delta t_m \equiv t_m - t_{m-1}$ . Ou seja

$$[M_p]^m [\check{\Theta}_p]^m - [M_p]^{m-1} [\check{\Theta}_p]^{m-1} = \left[ \sum_{e \in \mathcal{E}_p} \sum_{f \in \mathcal{F}_p^e} \sum_{\ell \in \mathcal{N}^e} \sigma_{f,p} \left( \beta_{f,\ell}^e - [\dot{m}_f \alpha_{f,\ell}^e]^m \right) [\check{\Theta}_\ell^e]^m + [\check{\psi}_p]^m \Delta V_p \right] \Delta t_m. \quad (4.14)$$

Esta equação pode ser rearranjada convenientemente, levando todos os termos associados a valores nodais da variável no nível de tempo  $t_m$  ao lado esquerdo e todos os restantes termos ao lado direito. Isto é

$$[M_p]^m [\check{\Theta}_p]^m - \Delta t_m \sum_{e \in \mathcal{E}_p} \sum_{f \in \mathcal{F}_p^e} \sum_{\ell \in \mathcal{N}^e} \sigma_{f,p} \left( \beta_{f,\ell}^e - [\dot{m}_f \alpha_{f,\ell}^e]^m \right) [\check{\Theta}_\ell^e]^m = [M_p]^{m-1} [\check{\Theta}_p]^{m-1} + [\check{\psi}_p]^m \Delta V_p \Delta t_m. \quad (4.15)$$

Assumiu-se que o termo fonte da equação de conservação independe da variável  $\Theta$ . Caso exista essa dependência mediante uma relação não-linear, pode ser necessário realizar uma linearização do termo fonte, conforme explicado em [45, 59].

A equação (4.15) é a forma fechada da equação discretizada de conservação, uma vez que apenas contém valores nodais da variável incógnita. Os nós que participam desta equação são somente aqueles associados aos

elementos que contribuem na formação do volume de controle. Esses nós formam o denominado *estêncil* ou *molécula computacional* [8, 20]  $\mathcal{N}_p$  da equação, na qual apenas os coeficientes associados a incógnitas nesses nós apresentarão valores não-nulos. A equação (4.15) pode ser escrita também na forma mais usual em um método de volumes finitos,

$$A_p[\check{\Theta}_p]^m + \sum_{\substack{n \in \mathcal{N}_p \\ n \neq p}} A_n[\check{\Theta}_n]^m = b_p, \quad (4.16)$$

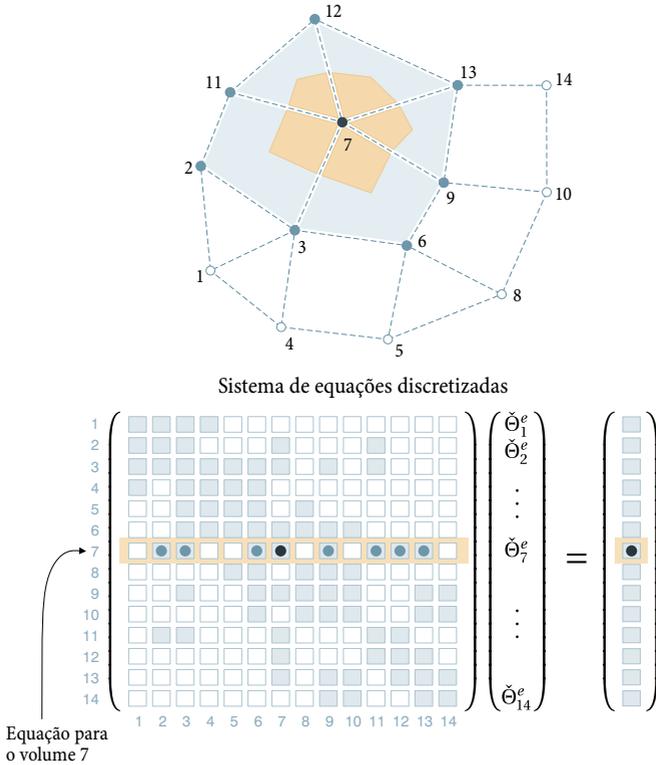
na qual,  $A_p$  é o coeficiente central da equação, associado ao nó localizado no interior do volume de controle, o qual reúne contribuições de todos os elementos ao redor. Além disso,  $A_n$  são os coeficientes associados aos restantes nós no estêncil da equação, que envolvem contribuições dos termos de fluxo. Finalmente,  $b_p$  é o termo independente que, para a equação (4.16), inclui as duas parcelas do lado direito.

A figura 4.2 ilustra a estrutura da equação (4.16), mediante um exemplo em uma malha bidimensional simples. As equações em malhas tridimensionais apresentam exatamente a mesma estrutura, porém, geralmente com estênceis envolvendo maior quantidade de nós. Quando reunidas as equações de todos os volumes de controle em uma malha, obtém-se um sistema de equações, o qual pode ser expresso de forma geral como

$$\mathbf{A}[\check{\Theta}]^m = \mathbf{b}, \quad (4.17)$$

onde  $\mathbf{A}$  é a matriz de coeficientes,  $\mathbf{b}$  é o vetor de termos independentes e  $[\check{\Theta}]^m$  o vetor de valores nodais da variável para o nível de tempo  $t_m$ . Conforme mostra a figura 4.2, as componentes da matriz e dos vetores no sistema de equações estão organizados segundo os índices globais que identificam aos nós e volumes de controle na malha. Após incluir a representação discreta das condições de contorno do problema sendo resolvido, o sistema de equações permite determinar uma aproximação do campo associado à variável  $\Theta$  no nível de tempo  $t_m$ .

A solução transiente da equação (4.2) pode ser obtida resolvendo uma sequência de sistemas de equações, cada sistema associado a um nível de tempo discreto, mediante um procedimento de marcha [45]. Caso existam não-linearidades e/ou acoplamento com outras equações, poderá ser necessário considerar um nível iterativo adicional em cada nível de tempo, conforme explicado em [20, 45].



**Figura 4.2** – Estrutura da equação discretizada para um volume de controle em uma malha simples.

### 4.3 Montagem do sistema de equações

A montagem dos sistemas de equações discretizadas pode ser sistematizado a fim de tornar mais eficiente sua implementação computacional. A seguir é descrito um dos procedimentos possíveis, com base na equação (4.15). O procedimento envolve duas etapas, uma relativa às contribuições dos termos de fluxo e outra relacionada aos restantes termos.

Quanto aos termos de fluxo, sua representação na equação (4.15) sugere um procedimento de montagem em que, para cada volume de controle  $p$ , devem ser visitados os elementos  $e \in \mathcal{E}_p$ , as faces  $f \in \mathcal{F}_p^e$  e os nós locais  $\ell \in \mathcal{N}^e$ . Entretanto, isto implica que um mesmo elemento deva ser

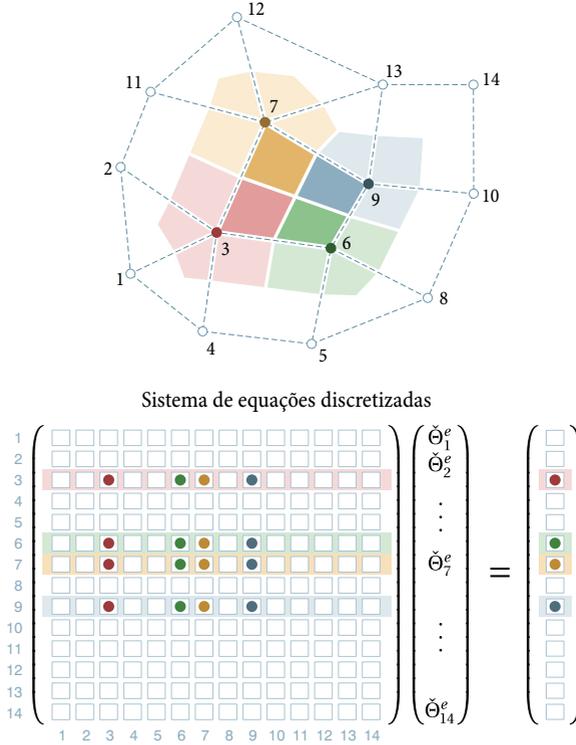
visitado várias vezes, dado que contribuirá na formação de vários volumes de controle, possivelmente repetindo-se vários cálculos de forma desnecessária. Para a implementação computacional da montagem do sistema de equações é mais vantajoso um procedimento em que, cada vez que um elemento é visitado, todas as contribuições associadas a ele sejam calculadas e adicionadas em posições adequadas da matriz de coeficientes.

A figura 4.3 ilustra, de modo esquemático, a contribuição de um elemento quadrilátero nos coeficientes das equações discretizadas associadas aos quatro volumes de controle dos quais forma parte.<sup>3</sup> De acordo à numeração global considerada no exemplo, o elemento contribui às equações dos volumes ao redor dos nós 3, 6, 7 e 9, cujos coeficientes devem estar localizados, respectivamente, nas linhas 3, 6, 7 e 9 da matriz de coeficientes. Em cada uma dessas equações existirão coeficientes associados aos valores nodais da variável no elemento em questão. Isto quer dizer que haverá contribuições nos coeficientes localizados nas colunas 3, 6, 7 e 9, uma vez que os coeficientes nessas colunas multiplicam, respectivamente, os valores nodais  $\check{\Theta}_3^e$ ,  $\check{\Theta}_6^e$ ,  $\check{\Theta}_7^e$  e  $\check{\Theta}_9^e$ .

É importante notar, no entanto, que as contribuições de um elemento aos termos de fluxo provêm, em realidade, de contribuições das faces no interior do elemento. Conforme a figura 4.4 mostra esquematicamente, uma face contribui nas equações dos dois volumes adjacentes. Essa situação acontece tanto em elementos bidimensionais quanto tridimensionais, pois uma face sempre separa dois volumes. Um algoritmo que percorra as faces de um elemento para fazer a montagem dos coeficientes da matriz  $A$  pode aproveitar essa característica e atribuir diretamente o sinal correto às contribuições. Esse sinal, que na equação (4.15) está dado pelo parâmetro  $\sigma_{f,p}$ , será sempre positivo para um dos volumes adjacentes a uma face e negativo para o outro. Um algoritmo dessa natureza é esboçado a seguir:

- 1: **para todos os** elementos  $e \in \mathcal{M}$
- 2:     **para todas as** faces  $f \in \mathcal{F}^e$
- 3:         **para todos os** nós  $\ell \in \mathcal{N}^e$
- 4:              $c \leftarrow (\beta_{f,\ell}^e - \lfloor \dot{m}_f \alpha_{f,\ell}^e \rfloor^m) \Delta t_m$
- 5:              $A_{nB(f),g(\ell)} \leftarrow A_{nB(f),g(\ell)} + c$
- 6:              $A_{nF(f),g(\ell)} \leftarrow A_{nF(f),g(\ell)} - c$

<sup>3</sup> A situação é completamente equivalente para um elemento tridimensional, apenas com maior número de volumes de controle e nós envolvidos.



**Figura 4.3** – Contribuições de um elemento no sistema de equações discretizadas.

Neste algoritmo, assume-se que os valores dos fluxos de massa e dos operadores  $\alpha_{f,\ell}^e$  e  $\beta_{f,\ell}^e$  encontram-se disponíveis e com eles é calculada a contribuição  $c$  de uma face. Essa contribuição é adicionada no coeficiente  $A_{nB(f),g(\ell)}$ , correspondente ao nó localizado atrás da face, e subtraída do coeficiente  $A_{nF(f),g(\ell)}$ , correspondente ao nó localizado à frente da face. No contexto do algoritmo anterior,  $nB(f)$  e  $nF(f)$  são funções que fornecem os índices globais dos nós (ou volumes de controle) atrás e à frente da face  $f$ , considerando sua orientação absoluta, conforme discutido na seção 3.4.2. Esses índices indicam a linha da matriz onde as contribuições devem ser acrescidas ou subtraídas. Já a localização da coluna na matriz é dada pelo índice global do nó considerado no ciclo sobre os nós locais do elemento. Na notação empregada, esse índice é dado pela função  $g(\ell)$ , que

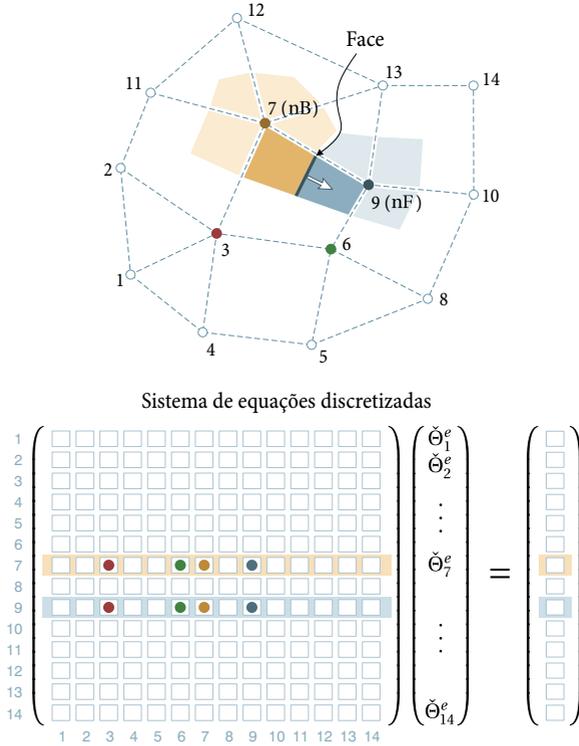


Figura 4.4 – Contribuições de uma face na matriz de coeficientes.

deve extrair essa informação da definição da conectividade dos elementos da malha.

Para concluir a montagem do sistema de equações discretizadas, resta ainda acrescentar as contribuições do termo fonte e do termo temporal. Para tanto é necessário realizar um ciclo percorrendo todos os nós da malha, uma vez que essas contribuições dependem apenas de grandezas relativas aos nós ou aos volumes de controle associados, como mostra a equação (4.15). O ciclo pode ser implementado como esboçado a seguir:

- 1: **para todos os** nós  $p \in \mathcal{M}$
- 2:  $A_{g(p),g(p)} \leftarrow A_{g(p),g(p)} + [M_p]^m$
- 3:  $b_{g(p)} \leftarrow b_{g(p)} + [M_p]^{m-1}[\check{\Theta}_p]^{m-1} + [\check{\psi}_p]^m \Delta V_p \Delta t_m$

## 4.4 Inclusão de condições de contorno

A fim de completar a especificação da formulação numérica para um problema físico, a condição inicial e as condições de contorno devem ser incluídas no sistema de equações discretizadas. A condição inicial para um problema transiente descrito por uma equação como a (4.1) consiste na distribuição espacial da variável em  $t_0$ , a qual é utilizada no primeiro intervalo de tempo para aproximar a derivada temporal em cada volume de controle. Na imposição das condições de contorno, a seguir serão descritos sucintamente os procedimentos adotados em duas situações possíveis.

### 4.4.1 Condição de fluxo prescrito

A situação em que o valor do fluxo que atravessa uma fronteira é conhecido, ou pode ser determinado em função de valores conhecidos, é a mais simples do ponto de vista operacional. A equação semidiscretizada correspondente a um volume de controle adjacente a uma fronteira desse tipo adquire a forma

$$\begin{aligned} \frac{\partial}{\partial t} (M_p \check{\Theta}_p) + \sum_{e \in \mathcal{E}_p} \sum_{f \in \mathcal{F}_p^e} \sum_{\ell \in \mathcal{N}^e} \sigma_{f,p} \dot{m}_f \alpha_{f,\ell}^e \check{\Theta}_\ell^e + \sum_{b_e \in b_{\mathcal{E}_p}} \sum_{b_f \in b_{\mathcal{F}_p}^{b_e}} \Gamma_{b_f} = \\ \sum_{e \in \mathcal{E}_p} \sum_{f \in \mathcal{F}_p^e} \sum_{\ell \in \mathcal{N}^e} \sigma_{f,p} \beta_{f,\ell}^e \check{\Theta}_\ell^e + \check{\psi}_p \Delta V_p, \end{aligned} \quad (4.18)$$

que é a mesma equação correspondente a um volume interno,<sup>4</sup> exceto pela inclusão do termo correspondente ao fluxo na porção da superfície de controle coincidente com a fronteira. Nesse termo,  $\Gamma_{b_f}$  é o fluxo total, isto é, o fluxo envolvendo advecção e difusão, através de uma face de contorno  $b_f$ . Em concordância com a convenção anteriormente estabelecida,  $\Gamma_{b_f}$  é positivo quando abandona o volume de controle. A inclusão de fluxos dessa natureza no sistema de equações discretizadas, pode ser realizado com o seguinte procedimento simples:

- 1: **para todos os** elementos de contorno  $b_e \in \mathcal{B}^{\text{fluxo}}$
- 2:     **para todas as** faces de contorno  $b_f \in b_e$
- 3:              $b_{\text{nC}}(b_f) \leftarrow b_{\text{nC}}(b_f) - \Gamma_{b_f}$

<sup>4</sup> Compare-se, por exemplo, com a equação (4.12).

No procedimento esboçado, percorrem-se todos os elementos de contorno sobre a fronteira em questão ( $\mathcal{B}^{\text{fluxo}}$ ), visitando-se em cada um deles todas faces de contorno incluídas. Como se considera que o fluxo prescrito  $\Gamma_{bf}$  independe das incógnitas, ele é acrescido no termo independente da equação correspondente, com sinal negativo.<sup>5</sup> O índice do volume de controle associado à face de contorno é dado pela função  $nC^{(bf)}$ , que deve extrair essa informação a partir da conectividade da malha de contorno.

Em certas situações, o termo de fluxo através da fronteira na equação (4.18) pode ser modelado como sendo proporcional à diferença entre o valor nodal da variável e um valor de referência conhecido. Ou seja,<sup>6</sup>

$$\sum_{b_e \in b_{E_p}} \sum_{bf \in b_{F_p}^{b_e}} \Gamma_{bf} = \bar{C}_p (\check{\Theta}_p - \Theta_{ref}), \quad (4.19)$$

em que  $\bar{C}_p$  seria a condutância da porção de fronteira associada ao volume. Esse tipo de condição pode ser facilmente implementada por um procedimento da forma seguinte:

- 1: **para todos os** nós  $p \in \mathcal{B}^{\text{conv}}$
- 2:  $A_{g(p),g(p)} \leftarrow A_{g(p),g(p)} + \bar{C}_p$
- 3:  $b_{g(p)} \leftarrow b_{g(p)} + \bar{C}_p \Theta_{ref}$

Desta vez apenas é necessário percorrer os nós sobre a fronteira em questão ( $\mathcal{B}^{\text{conv}}$ ), uma vez que todos os parâmetros necessários são referentes aos nós ou aos volumes de controle associados.

#### 4.4.2 Condição de Dirichlet

Existem descritas na literatura diversas técnicas para impor condições de Dirichlet em formulações numéricas com nós localizados nos vértices da malha. Uma particularidade deste tipo de malha é a existência de nós sobre as fronteiras do domínio, como ilustra a figura 2.22. Uma vez que em uma condição de Dirichlet valores da variável da equação são conhecidos em uma fronteira, os valores nodais em nós localizados sobre essa fronteira deixam de ser incógnitas do problema discreto.

<sup>5</sup> O sinal negativo provém da transposição do termo de fluxo na fronteira ao lado direito da equação.

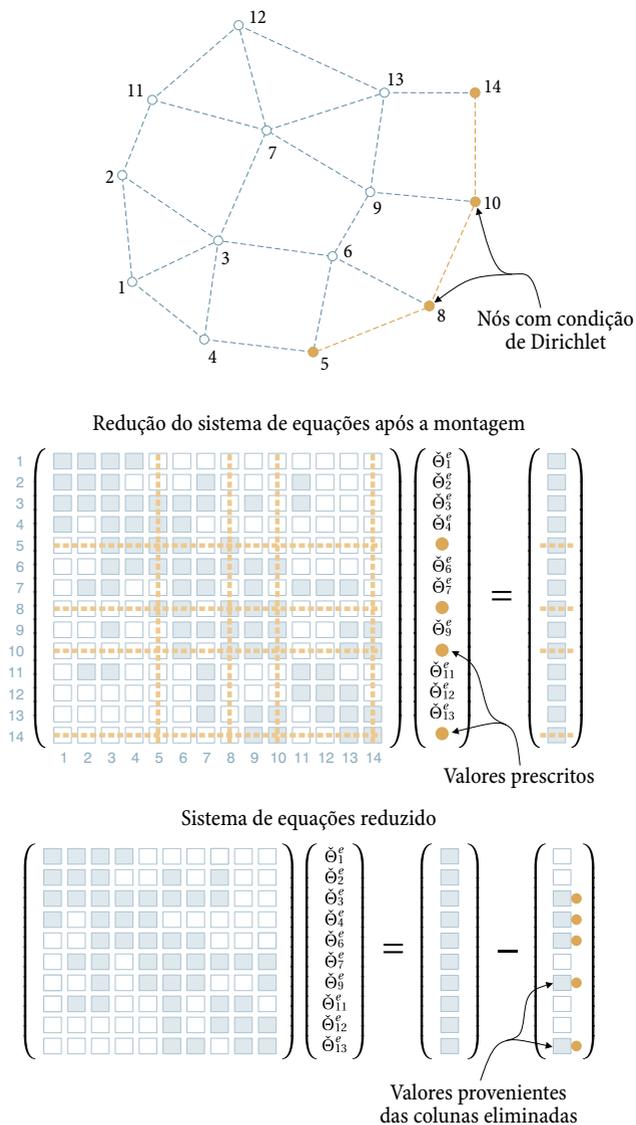
<sup>6</sup> O fluxo proveniente de poços, em reservatórios de petróleo, é normalmente modelado por uma expressão desse tipo.

Uma das formas usuais para incluir uma condição de Dirichlet no sistema de equações é o denominado método da penalidade [84], o qual visa evitar a alteração da estrutura do sistema de equações resultante da montagem previamente descrita. Operacionalmente, esse método equivale a impor uma condição de fluxo da forma dada na equação (4.19) com um valor da condutância várias ordens de grandeza maior que os restantes coeficientes da equação e um valor de referência igual ao valor prescrito. Como efeito dessa operação, o valor nodal depois de resolvido o sistema de equações se aproxima do valor estipulado na condição de Dirichlet. Outra técnica comum é a substituição das equações discretizadas dos volumes adjacentes às fronteiras com condição de Dirichlet por equações da forma  $\Theta_p = \Theta_{\text{Dirichlet}}$ , em que o valor nodal correspondente é diretamente igualado ao valor prescrito na condição. Para tanto é necessário alterar todos os coeficientes e o termo independente das equações associadas a esses volumes.

Uma técnica alternativa, utilizada nas implementações computacionais realizadas neste trabalho,<sup>7</sup> é a eliminação das equações discretizadas correspondentes aos volumes adjacentes a uma fronteira com condição de Dirichlet. O procedimento está ilustrado mediante um exemplo na figura 4.5. Nele, os coeficientes das linhas e colunas cujos índices coincidem com os índices dos nós com condição de Dirichlet são eliminados da matriz. De forma similar, no vetor de incógnitas e no vetor de termos independentes são retiradas as componentes com os mesmos índices. Dessa forma, as equações completas dos volumes associados a esses nós estão sendo eliminadas do sistema de equações. Os coeficientes eliminados nas colunas da matriz, que no sistema original multiplicavam os valores nodais nos nós com condição de Dirichlet, devem ser multiplicados pelos respectivos valores prescritos e subtraídos dos termos independentes, a fim de não alterar as equações discretizadas remanescentes. Como resultado desse processo, obtém-se um sistema de equações reduzido, cujas incógnitas são apenas valores nodais de nós internos e de nós localizados em fronteiras com outro tipo de condição, como mostra a figura 4.5.

---

<sup>7</sup> A escolha dessa técnica está relacionada com a utilização do método *multigrid* de correções aditivas [39], considerada neste trabalho para resolver os sistemas de equações resultantes da discretização. Observou-se que as alterações na matriz de coeficientes realizadas com as outras técnicas deterioraram o desempenho desse método.



**Figura 4.5** – Redução do sistema de equações pela imposição de uma condição de Dirichlet.

Uma das principais vantagens dessa prática é que o sistema de equações a ser resolvido é menor que o original. Entretanto, dado que geralmente deve ser utilizado algum esquema de armazenamento compacto para matrizes esparsas [71], alterações na estrutura da matriz de coeficientes podem ser muito complexas e demandar um tempo de computação adicional considerável. A fim de evitar essas dificuldades, na implementação realizada neste trabalho efetua-se já de início a montagem da matriz de coeficientes reduzida, introduzindo algumas modificações no algoritmo de montagem esboçado na seção 4.3.

É importante notar que embora sejam eliminadas do sistema de equações, as equações de conservação dos volumes adjacentes a fronteiras com condição de Dirichlet continuam sendo válidas. Essas equações podem ser empregadas para determinar os fluxos totais que atravessam essas fronteiras, após ser resolvido o sistema de equações e estarem disponíveis todos os valores nodais da variável incógnita. Nessa situação, o termo  $\sum_{b_e} \sum_{b_f} \Gamma_{b_f}$  torna-se a incógnita da equação (4.18) associada a todos os volumes contíguos a fronteiras com condição de Dirichlet. Consequentemente, essa equação pode ser utilizada para determinar o valor dessa incógnita *a posteriori*. Dessa forma, a conservação da grandeza  $\Theta$  é satisfeita mesmo nos volumes de controle cujas equações foram eliminadas do sistema de equações.

# Aplicação a um modelo de escoamento em reservatórios

## 5.1 Modelo de escoamento bifásico

Para aplicação da formulação numérica desenvolvida à simulação tridimensional de reservatórios de petróleo, optou-se por um modelo de escoamento bifásico imiscível. Este modelo permite desacoplar de forma simples as equações discretizadas, facilitando desse modo a sua solução por meio de um método segregado. Quanto ao tratamento dos aspectos geométricos da discretização, que é o foco da formulação apresentada neste trabalho, modelos de escoamento mais sofisticados requererão, em geral, uma abordagem idêntica à mostrada aqui para o modelo bifásico. Entretanto, aspectos intrínsecos à modelagem física introduzem acoplamentos e não-linearidades adicionais, os quais tornam a descrição da discretização mais complexa, porém, sem agregar aspectos novos, pelo menos do ponto de vista geométrico. É importante notar, contudo, que o método de discretização apresentado é totalmente apto para ser aplicado a modelos de escoamento mais complexos.

Uma das equações fundamentais em qualquer modelo macroscópico de escoamento em reservatórios é a expressão matemática da lei de Darcy. A forma comumente adotada para escoamento multifásico é [3]

$$\mathbf{v}_\gamma = -\lambda_\gamma \mathbf{K}(\nabla P - \rho_\gamma \mathbf{g}), \quad \gamma = w, o. \quad (5.1)$$

Nesta expressão,  $\mathbf{v}_\gamma$ ,  $\lambda_\gamma$  e  $\rho_\gamma$  são, respectivamente, a velocidade média ou velocidade de Darcy, a mobilidade e a densidade, associadas à fase genérica  $\gamma$ . No modelo considerado, as duas fases são identificadas como água ( $w$ ) e óleo ( $o$ ). Ainda na equação (5.1),  $\nabla P$  é o gradiente da pressão e  $\mathbf{g}$  é a aceleração devida à gravidade. Considera-se uma pressão única pois assume-se que a influência da pressão capilar na escala considerada nas simulações é pouco significativa. Por fim,  $\mathbf{K}$  é o tensor permeabilidade. A metodologia adotada neste trabalho é apta para lidar de forma consistente com tensores simétricos completos, isto é,

$$\mathbf{K} = \begin{pmatrix} K_{xx} & K_{xy} & K_{xz} \\ K_{xy} & K_{yy} & K_{yz} \\ K_{xz} & K_{yz} & K_{zz} \end{pmatrix}, \quad (5.2)$$

em que todas as componentes podem ser não-nulas.

Do ponto de vista da discretização, é vantajoso expressar a aceleração da gravidade como o gradiente de um potencial escalar  $G$ , dado por

$$G \equiv g_x x + g_y y + g_z z, \quad (5.3)$$

em que  $g_x$ ,  $g_y$  e  $g_z$  são as componentes cartesianas do vetor  $\mathbf{g}$ , enquanto que, como é habitual,  $x$ ,  $y$  e  $z$  são as coordenadas cartesianas de um dado ponto. A partir da definição em (5.3) é trivial mostrar que  $\mathbf{g} = \nabla G$ , com o qual, a equação (5.1) transforma-se em

$$\mathbf{v}_\gamma = -\lambda_\gamma \mathbf{K}(\nabla P - \rho_\gamma \nabla G), \quad \gamma = w, o. \quad (5.4)$$

A mobilidade que figura nas equações (5.1) e (5.4) é definida por

$$\lambda_\gamma \equiv \frac{k_{r\gamma}}{\mu_\gamma}, \quad \gamma = w, o. \quad (5.5)$$

onde  $k_{r\gamma}$  e  $\mu_\gamma$  são, respectivamente, a permeabilidade relativa e a viscosidade da fase. A permeabilidade relativa é usualmente dada na forma de

uma curva, que descreve sua dependência em relação à saturação de uma das fases. Note-se que a definição da mobilidade na equação (5.5) difere da usual [3, 60] por não incluir a permeabilidade absoluta, a qual, ao ser considerada aqui um tensor completo, é escrita de forma independente da mobilidade.

A outra equação essencial em um modelo de escoamento multifásico é a equação de balanço de massa. Assume-se aqui que cada fase é incompressível e está formada por um único componente, logo a equação de conservação pode ser escrita, para cada fase, na forma [60]

$$\frac{\partial(\phi s_\gamma)}{\partial t} + \nabla \cdot \mathbf{v}_\gamma = 0, \quad \gamma = w, o. \quad (5.6)$$

Nesta equação,  $s_\gamma$  é a saturação da fase, isto é, a fração do volume poroso ocupada pela referida fase. Além do mais,  $\phi$  é a porosidade do meio, ou seja, a fração do um volume representativo do meio poroso não ocupada pela matriz sólida.<sup>1</sup>

O modelo é completado pela denominada equação de restrição volumétrica

$$s_w + s_o = 1, \quad (5.7)$$

a qual é consequência da hipótese que as duas fases consideradas ocupam todo o espaço poroso disponível.

As equações diferenciais do modelo de escoamento bifásico, escritas acima, podem ser combinadas algebricamente para dar origem a um conjunto de equações equivalente. Para o caso considerado, em que as fases possuem densidade constante, essas equações alternativas adquirem uma forma simples que facilita, em alguma medida, o processo de discretização. Assim, por exemplo, a combinação das equações (5.6) e (5.7) dá origem à equação de balanço global

$$\nabla \cdot \mathbf{v}_T = 0, \quad (5.8)$$

na qual,  $\mathbf{v}_T$  é a denominada velocidade total [60], a qual é definida como a soma das velocidades das duas fases consideradas, isto é,

$$\mathbf{v}_T \equiv \mathbf{v}_w + \mathbf{v}_o. \quad (5.9)$$

---

<sup>1</sup> Posteriormente, o escoamento entre o reservatório e os poços nele contidos será introduzido como condições de contorno para a equação (5.6).

Uma expressão relacionando a velocidade total com o gradiente de pressão pode ser obtida somando-se as duas instâncias da equação (5.4), correspondentes às duas fases consideradas no modelo. Dessa forma chega-se à relação

$$\mathbf{v}_T = -\lambda_T \mathbf{K} (\nabla P - \rho_M \nabla G), \quad (5.10)$$

Nesta expressão foram introduzidas duas novas propriedades. A primeira é denominada mobilidade total, definida por

$$\lambda_T \equiv \lambda_w + \lambda_o. \quad (5.11)$$

A outra propriedade é a densidade média ponderada pela mobilidade, definida pela expressão

$$\rho_M \equiv \frac{\lambda_w \rho_w + \lambda_o \rho_o}{\lambda_w + \lambda_o}. \quad (5.12)$$

A substituição da equação (5.10) no balanço global, dado na equação (5.8), origina a equação diferencial da pressão,

$$-\nabla \cdot (\lambda_T \mathbf{K} \nabla P) + \nabla \cdot (\rho_M \lambda_T \mathbf{K} \nabla G) = 0. \quad (5.13)$$

A fim de completar a forma alternativa do modelo de escoamento bifásico é usual considerar a equação de conservação da fase água, expressa em função da velocidade total anteriormente definida. Essa forma específica, conhecida como forma de Buckley-Leverett da equação da saturação [60], pode ser obtida combinando as equações (5.4) e (5.6), expressas para a fase água, com a equação (5.10). Seguindo esse procedimento, chega-se à equação

$$\frac{\partial(\phi s)}{\partial t} + \nabla \cdot (F_w \mathbf{v}_T) + \nabla \cdot (\Upsilon_{wo} \Delta \rho_{wo} \mathbf{K} \nabla G) = 0. \quad (5.14)$$

Por conveniência, nesta equação a saturação da fase água denotou-se simplesmente como  $s$ . Por outro lado,  $F_w$  é a denominada função fluxo fracionário [60] para a fase água, definida pela razão de mobilidades

$$F_w \equiv \frac{\lambda_w}{\lambda_T}. \quad (5.15)$$

De forma similar,  $\Upsilon_{wo}$  é uma função também dependente das mobilidades das fases, dada por

$$\Upsilon_{wo} \equiv \lambda_o F_w = \frac{\lambda_o \lambda_w}{\lambda_T}. \quad (5.16)$$

No modelo bifásico considerado, as mobilidades são funções apenas da saturação de uma das fases, via as permeabilidades relativas. Consequentemente,  $F_w$  e  $\Upsilon_{wo}$  são também funções apenas da saturação, uma vez que são dadas por combinações das mobilidades.

Por fim, na equação (5.14),  $\Delta\rho_{wo}$  simboliza a diferença entre as densidades das duas fases, isto é,

$$\Delta\rho_{wo} = \rho_w - \rho_o. \quad (5.17)$$

Para fins do processo de discretização posterior, é conveniente expressar as equações de conservação apresentadas na sua forma integral equivalente. Para a equação da pressão, tem-se

$$- \int_S \lambda_T \mathbf{K} \nabla P \cdot d\mathbf{S} + \int_S \zeta_T \mathbf{K} \nabla G \cdot d\mathbf{S} = 0, \quad (5.18)$$

onde, a fim de simplificar a expressão, foi introduzido o coeficiente  $\zeta_T$ , dado por

$$\zeta_T \equiv \rho_M \lambda_T = \rho_w \lambda_w + \rho_o \lambda_o. \quad (5.19)$$

Finalmente, a forma integral da equação da saturação considerada é

$$\frac{\partial}{\partial t} \int_V \phi s \, dV + \int_S F_w \mathbf{v}_T \cdot d\mathbf{S} + \int_S \Upsilon_{wo} \Delta\rho_{wo} \mathbf{K} \nabla G \cdot d\mathbf{S} = 0. \quad (5.20)$$

## 5.2 Discretização do modelo

Nesta seção é descrita a discretização das equações do modelo matemático para escoamento bifásico, aplicando os conceitos e procedimentos apresentados nos capítulos precedentes. Considera-se que o domínio de solução é um reservatório tridimensional, discretizado por uma malha não-estruturada formada, no caso mais geral, pelos quatro tipos de elementos descritos no capítulo 2.

As duas variáveis fundamentais do modelo bifásico considerado são a pressão e a saturação. Embora ambas as variáveis estejam presentes nas duas equações de conservação, na forma apresentada na seção anterior,

cada equação possui uma variável dominante. Graças a essa característica, na discretização dessas equações, é possível desacoplá-las mediante uma escolha apropriada do nível de tempo em que cada equação é aproximada. Dessa forma, torna-se possível a utilização de um esquema de solução segregado para a obtenção da evolução temporal das variáveis no problema em questão, que é o objetivo da simulação.

### 5.2.1 Equação da pressão

A aproximação numérica das integrais na equação da pressão, na forma dada pela equação (5.18), dá origem à expressão discreta

$$- \sum_{f \in \mathcal{F}_p} \sigma_{f,p} (\lambda_T \mathbf{K} \nabla P)_{\hat{f}} \cdot \Delta \mathbf{S}_f + \sum_{f \in \mathcal{F}_p} \sigma_{f,p} (\zeta_T \mathbf{K} \nabla G)_{\hat{f}} \cdot \Delta \mathbf{S}_f = 0. \quad (5.21)$$

A forma fechada da equação é obtida após introduzir a aproximação dos fluxos difusivos em função dos valores nodais das variáveis, dada de forma genérica pela equação (4.10). Fica evidente agora a conveniência de representar a aceleração da gravidade como o gradiente do potencial  $G$ , pois ambos os termos da equação (5.21) podem ser aproximados empregando os mesmos operadores.

A fim de facilitar a escrita das equações, e também simplificar sua implementação, é conveniente definir os fluxos parciais

$$\omega_f \equiv (\mathbf{K} \nabla G)_{\hat{f}} \cdot \Delta \mathbf{S}_f \approx \sum_{\ell \in \mathcal{N}^e} \beta_{f,\ell}^e \check{G}_\ell^e, \quad (5.22)$$

que independem do tempo e, portanto, podem ser calculados uma única vez no início do processo. Após introduzir essa definição na equação (5.21), além de aproximações locais dos fluxos dependentes do gradiente de pressão, chega-se a

$$- \sum_{e \in \mathcal{E}_p} \sum_{f \in \mathcal{F}_p^e} \sum_{\ell \in \mathcal{N}^e} \sigma_{f,p} (\lambda_T)_{\hat{f}} \beta_{f,\ell}^e \check{P}_\ell^e + \sum_{e \in \mathcal{E}_p} \sum_{f \in \mathcal{F}_p^e} \sigma_{f,p} (\zeta_T)_{\hat{f}} \omega_f = 0. \quad (5.23)$$

Embora a equação da pressão não possua um termo temporal como a equação da saturação, certamente os coeficientes  $(\lambda_T)_{\hat{f}}$  e  $(\zeta_T)_{\hat{f}}$  variam com o tempo, pois eles dependem da saturação. Conseqüentemente, para

completar a aproximação numérica, a equação (5.22) deve ser associada a um nível discreto de tempo, como feito a seguir

$$\begin{aligned}
 - \sum_{e \in \mathcal{E}_p} \sum_{f \in \mathcal{F}_p^e} \sum_{\ell \in \mathcal{N}^e} \sigma_{f,p} \left[ (\lambda_T)_{\hat{f}} \right]^m \beta_{f,\ell}^e |\check{P}_\ell^e|^m + \\
 \sum_{e \in \mathcal{E}_p} \sum_{f \in \mathcal{F}_p^e} \sigma_{f,p} \left[ (\zeta_T)_{\hat{f}} \right]^m \omega_f = 0.
 \end{aligned} \tag{5.24}$$

Supondo que no nível de tempo  $t_m$  estiver disponível uma aproximação do campo de saturação, valores de  $(\lambda_T)_{\hat{f}}$  e  $(\zeta_T)_{\hat{f}}$  poderão ser calculados nesse nível de tempo e, portanto, as únicas incógnitas restantes na equação (5.24) serão os valores nodais da pressão. Essa é, precisamente, a abordagem considerada em um algoritmo de solução sequencial para a obtenção da evolução temporal do escoamento. Nessa situação, o procedimento de montagem do sistema de equações apresentado na seção 4.3 pode ser empregado sem qualquer alteração, dando lugar ao sistema

$$\mathbf{A}[\check{P}]^m = \mathbf{b}, \tag{5.25}$$

cujas soluções devem fornecer uma aproximação discreta do campo de pressão no nível de tempo  $t_m$ .

## 5.2.2 Equação da saturação

Na equação integral da saturação podem ser empregadas aproximações numéricas semelhantes às consideradas na discretização da equação da pressão. Entretanto, como essa equação possui uma derivada temporal, é necessário considerar também uma integração no tempo, como mostrado na expressão a seguir, obtida a partir da equação (5.20)

$$\begin{aligned}
 \phi_p \Delta V_p \check{s}_p \Big|_{t_m}^{t_{m+1}} + \int_{t_m}^{t_{m+1}} \left[ \sum_{f \in \mathcal{F}_p} \sigma_{f,p} (F_w \mathbf{v}_T)_{\hat{f}} \cdot \Delta \mathbf{S}_f \right] dt \\
 + \int_{t_m}^{t_{m+1}} \left[ \sum_{f \in \mathcal{F}_p} \sigma_{f,p} (\Upsilon_{wo} \Delta \rho_{wo} \mathbf{K} \nabla G)_{\hat{f}} \cdot \Delta \mathbf{S}_f \right] dt = 0.
 \end{aligned} \tag{5.26}$$

Diferentemente do exemplo considerado na seção 4.2.3, desta vez os fluxos serão aproximados no nível de tempo inicial do intervalo,  $t_m$ . Isto

caracteriza uma aproximação explícita [20, 45], cuja estabilidade é condicional, conforme se verá mais adiante. Procedendo da forma indicada, obtém-se

$$\begin{aligned} \phi_p \Delta V_p [\check{s}_p]^{m+1} - \phi_p \Delta V_p [\check{s}_p]^m + \Delta t_{m+1} \sum_{f \in \mathcal{F}_p} \sigma_{f,p} \left[ (F_w \mathbf{v}_T)_{\check{f}} \right]^m \cdot \Delta \mathbf{S}_f \\ + \Delta t_{m+1} \sum_{f \in \mathcal{F}_p} \sigma_{f,p} \left[ (\Upsilon_{wo} \Delta \rho_{wo} \mathbf{K} \nabla G)_{\check{f}} \right]^m \cdot \Delta \mathbf{S}_f = 0. \end{aligned} \quad (5.27)$$

Neste ponto é conveniente definir a vazão volumétrica total em uma face, originada na velocidade total  $\mathbf{v}_T$ . Isto é,

$$q_f \equiv (\mathbf{v}_T)_{\check{f}} \cdot \Delta \mathbf{S}_f. \quad (5.28)$$

Os valores das vazões totais no nível de tempo  $t_m$  podem ser determinados, após resolver o sistema de equações da pressão, mediante a expressão

$$[q_f]^m = - \left[ (\lambda_T)_{\check{f}} \right]^m \sum_{\ell \in \mathcal{N}^e} \beta_{f,\ell}^e [\check{P}_\ell^e]^m + \left[ (\zeta_T)_{\check{f}} \right]^m \omega_f. \quad (5.29)$$

Esta última expressão é obtida substituindo a equação (5.10) na definição dada em (5.28) e depois aplicando as mesmas aproximações numéricas consideradas na discretização da equação da pressão.<sup>2</sup>

Introduzindo na equação (5.27) as vazões definidas nas equações (5.22) e (5.28), obtém-se

$$\begin{aligned} \phi_p \Delta V_p [\check{s}_p]^{m+1} - \phi_p \Delta V_p [\check{s}_p]^m + \Delta t_{m+1} \sum_{f \in \mathcal{F}_p} \sigma_{f,p} \left[ q_f (F_w)_{\check{f}} \right]^m \\ + \Delta t_{m+1} \sum_{f \in \mathcal{F}_p} \sigma_{f,p} \left[ (\Upsilon_{wo})_{\check{f}} \right]^m \Delta \rho_{wo} \omega_f = 0. \end{aligned} \quad (5.30)$$

A rigor, a única incógnita nesta última equação é o valor nodal  $[\check{s}_p]^{m+1}$ , pois, dado que foi considerada uma aproximação explícita, os valores de todos os restantes termos devem encontrar-se disponíveis ou podem ser determinados mediante esquemas de interpolação espacial apropriados. Logo, a equação (5.30) pode ser empregada como equação evolutiva para

<sup>2</sup> A forma discretizada da equação da pressão pode ser escrita alternativamente como  $\sum_{f \in \mathcal{F}_p} \sigma_{f,p} q_f = 0$ , a qual é uma aproximação discreta da equação (5.8), que é precisamente a equação que deu origem à equação diferencial da pressão.

a saturação, pois permite determinar os valores nodais dessa variável em um novo instante de tempo sem ser necessário resolver um sistema simultâneo de equações. Para tanto, pode ser conveniente rearranjar a equação na forma

$$[\check{s}_p]^{m+1} = [\check{s}_p]^m - \frac{\Delta t_{m+1}}{\phi_p \Delta V_p} \left\{ \sum_{e \in \mathcal{E}_p} \sum_{f \in \mathcal{F}_p^e} \sigma_{f,p} \left( [q_f(F_w)]_{\check{f}}^m + [(\Upsilon_{wo})_{\check{f}}]^m \Delta \rho_{wo} \omega_f \right) \right\} \quad (5.31)$$

### 5.2.3 Esquemas de interpolação espacial

Para que a discretização das equações do modelo de escoamento esteja completa, devem ser especificados ainda esquemas de interpolação a ser empregados para determinar valores de grandezas nas faces dos volumes de controle.

Na equação (5.24) são necessários valores de  $\lambda_T$  e  $\zeta_T$ , ambas as propriedades dependentes da saturação. Em geral, a escolha do esquema de interpolação para essas propriedades não tem consequências negativas sobre a estabilidade do método, dada a natureza elíptica da equação da pressão [66, 80]. Conforme sugerido em [80], um esquema de segunda ordem é uma escolha adequada nesse caso, pois reduz em alguma medida o efeito de orientação de malha [37]. No contexto de um método de volumes finitos baseado em elementos isso é conseguido realizando a interpolação via funções de forma, ou seja,

$$(\lambda_T)_{\check{f}} \approx \sum_{\ell \in \mathcal{N}^e} N_{\ell, \check{f}} (\check{\lambda}_T)_{\ell}^e, \quad (5.32)$$

$$(\zeta_T)_{\check{f}} \approx \sum_{\ell \in \mathcal{N}^e} N_{\ell, \check{f}} (\check{\zeta}_T)_{\ell}^e, \quad (5.33)$$

onde  $N_{\ell, \check{f}}$  é uma notação reduzida para  $N_{\ell}(\xi_{\check{f}}, \eta_{\check{f}}, \zeta_{\check{f}})$ , isto é, os valores das funções de forma avaliadas nos baricentros das faces.

A interpolação das propriedades para a equação da saturação requer um maior cuidado. Uma vez que se trata de uma equação hiperbólica [60], se os coeficientes oriundos da discretização não satisfizerem critérios de positividade, valores não físicos e/ou oscilações poderão surgir nas soluções numéricas obtidas [69]. O esquema mais simples que atende esses critérios é o esquema *upwind* de um ponto (SPU) [41], cuja forma

adaptada às malhas não-estruturadas foi descrita na seção 3.6. Para a função fluxo fracionário, a forma correspondente a esse esquema é

$$(F_w)_f = \begin{cases} (\check{F}_w)_{\text{nB}(f)} & \text{se } q_f > 0, \\ (\check{F}_w)_{\text{nF}(f)} & \text{se } q_f < 0, \end{cases} \quad (5.34)$$

na qual o valor nodal a montante é determinado analisando o sinal da vazão total na face,  $q_f$ . Dado que  $F_w$  é uma função não-linear da variável da equação, a rigor, na equação (5.34) deveria ser analisado o sinal do produto da derivada  $dF_w/ds$  pela vazão  $q_f$ .<sup>3</sup> Contudo, como essa derivada é positiva em todo o intervalo de variação da saturação, ela não altera o critério considerado para selecionar o valor nodal a montante.

A função  $\Upsilon_{wo}$ , entretanto, é uma função não-monotônica, como ilustra a figura 5.1 para um caso típico. A derivada  $d\Upsilon_{wo}/ds$  apresenta, portanto, uma mudança de sinal no intervalo de variação da saturação. Isto indica que é imprescindível a consideração do sinal dessa derivada na determinação do nó a montante para a interpolação de  $\Upsilon_{wo}$ . Para tanto, uma aproximação numérica do valor da derivada na face é suficiente, como mostrado nas expressões seguintes

$$(\Upsilon_{wo})_f = \begin{cases} (\check{\Upsilon}_{wo})_{\text{nB}(f)} & \text{se } \Lambda_f \omega_f > 0, \\ (\check{\Upsilon}_{wo})_{\text{nF}(f)} & \text{se } \Lambda_f \omega_f < 0, \end{cases} \quad (5.35)$$

onde

$$\Lambda_f \equiv \text{sgn } \Delta\rho_{wo} \cdot \text{sgn} \left( \frac{(\check{\Upsilon}_{wo})_{\text{nB}(f)} - (\check{\Upsilon}_{wo})_{\text{nF}(f)}}{\check{s}_{\text{nB}(f)} - \check{s}_{\text{nF}(f)}} \right), \quad (5.36)$$

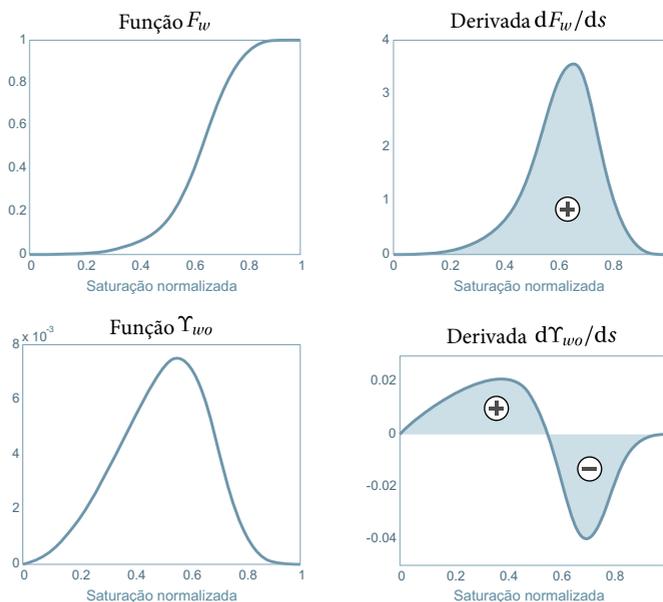
em que a função sinal está definida por

$$\text{sgn } x \equiv \begin{cases} 1 & \text{se } x > 0, \\ 0 & \text{se } x = 0, \\ -1 & \text{se } x < 0. \end{cases} \quad (5.37)$$

---

<sup>3</sup> Segundo a teoria das equações hiperbólicas não-lineares [44], a solução da equação da saturação, em ausência do termo da gravidade, pode ser considerada como uma superposição de ondas se deslocando com velocidade  $(dF_w/ds)\mathbf{v}_T$ . Na situação oposta, se o termo  $\nabla \cdot (F_w \mathbf{v}_T)$  fosse nulo na equação (5.14), a velocidade de propagação seria dada por  $(d\Upsilon_{wo}/ds)\Delta\rho_{wo}\mathbf{K}\nabla G$ . A fim de garantir a positividade dos coeficientes, essas duas situações extremas são consideradas na interpolação *upwind* nos respectivos termos da equação da saturação.

Por questão de generalidade, o sinal de  $\Delta\rho_{wo}$  foi também incluído porque, dependendo dos valores das densidades das fases, essa diferença pode ser positiva ou negativa.



**Figura 5.1** – Variação típica das funções dependentes da saturação e suas derivadas.

### 5.3 Algoritmo de solução

A abordagem considerada na seção 5.2 para a aproximação temporal é normalmente empregada a fim de desacoplar parcialmente as equações discretizadas e poder utilizar o algoritmo IMPES<sup>4</sup> [3, 49]. Neste algoritmo são resolvidas de forma sucessiva as equações da pressão e da saturação para avançar no tempo essas duas variáveis de modo segregado. Trata-se de um dos algoritmos mais simples para o tipo de modelo considerado, contudo, sua estabilidade é condicionada ao uso de passos de tempo que satisfaçam o denominado critério CFL [11].

<sup>4</sup> *Implicit pressure–explicit saturation.*

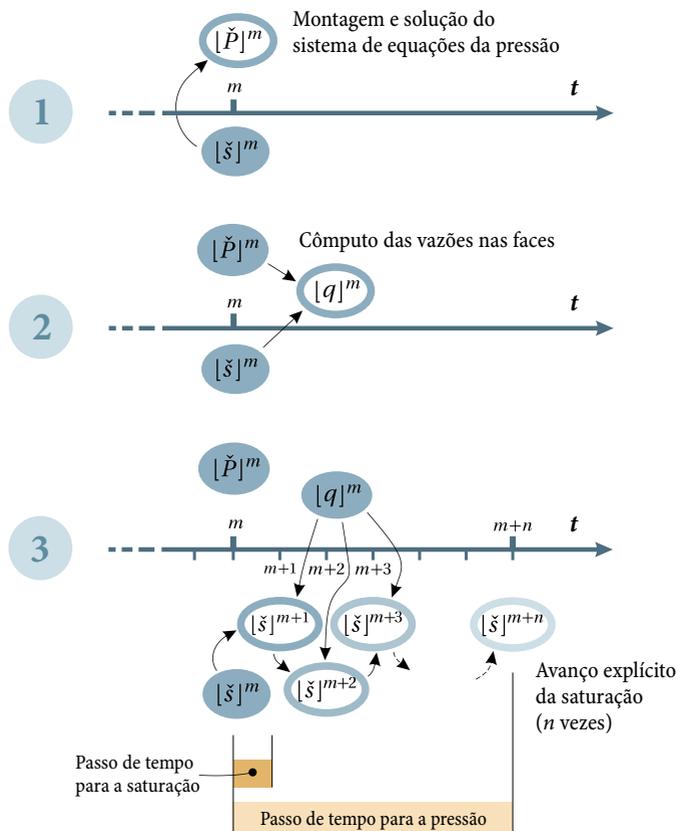
O critério de estabilidade para o algoritmo IMPES é geralmente muito restritivo, e na prática isso provoca que os tempos de computação cresçam de forma exagerada, especialmente quando se consideram malhas com algum tipo de refino. Uma das alternativas para remediar esse problema seria considerar uma aproximação implícita dos fluxos, o qual daria lugar a um sistema de equações não-lineares em que pressão e saturação estariam fortemente acopladas. Nessa situação o passo de tempo estaria condicionado apenas pelas não-linearidades e pela precisão, no entanto, seria necessária a utilização de métodos de solução de sistemas de equações não-lineares, como o método de Newton-Raphson, por exemplo.

A fim de reduzir os tempos de computação utilizando o algoritmo IMPES, neste trabalho foi considerada uma variante em que uma estratégia de passos de tempo diferenciados é empregada a fim de acelerar a execução dos processos de solução transiente. A variante considerada foi estudada previamente [9, 36], concluindo-se que reduções significativas no tempo de computação podem ser obtidas com essa estratégia, sem introduzir um erro numérico adicional importante. Os passos principais do algoritmo são descritos a seguir.

De forma prévia ao início de processo de avanço no tempo, os valores dos parâmetros que independem do tempo são computados. Entre esses parâmetros encontram-se, por exemplo, os operadores  $\beta_f^e$ , definidos na equação (4.9), e os fluxos relativos à gravidade,  $\omega_f$ , definidos na equação (5.22). Para iniciar o processo iterativo, os valores nodais da saturação são inicializados com valores correspondentes à condição inicial prescrita para o problema.

Na figura 5.2 estão representadas de forma esquemática as operações fundamentais do algoritmo, em um dado nível de tempo durante o processo de avanço no tempo. No nível de tempo  $m$ , valores nodais do campo de saturação devem estar disponíveis, provenientes do nível de tempo anterior ou da condição inicial do problema. Com esses valores de saturação, valores nodais de  $\lambda_T$  e  $\zeta_T$  são computados em todos os nós da malha, a partir das propriedades especificadas para os fluidos e das curvas de permeabilidade relativa. Em seguida, utilizando o esquema de interpolação escolhido, são determinados valores de  $\lambda_T$  e  $\zeta_T$  nas faces dos volumes de controle, necessários para construir as equações discretizadas da pressão. Após realizada a montagem do sistema de equações da pressão e incluídas

as condições de contorno e as condições de operação dos poços,<sup>5</sup> uma aproximação discreta do campo é obtida no nível de tempo  $m$ , resolvendo para tanto o referido sistema de equações. Esse é o passo 1 representado esquematicamente na figura 5.2.



**Figura 5.2** – Variante do algoritmo IMPES, com escalas de tempo diferentes para pressão e saturação.

Os valores nodais da pressão obtidos, junto com os valores de  $\lambda_T$  e  $\zeta_T$  interpolados nas faces, permitem determinar as vazões totais  $q_f$  para todas

<sup>5</sup> A representação dos poços nas equações discretizadas é descrita na seção seguinte.

as faces internas da malha, utilizando para tanto a equação (5.29). Esse é o passo 2 na figura 5.2.

Após calcular as vazões nas faces, os valores nodais da saturação no próximo nível de tempo podem ser calculados mediante a equação (5.31). Na forma convencional do algoritmo IMPES, seguidamente se retornaria ao passo 1, para determinar um novo campo de pressão. Entretanto, na variante apresentada aqui, repete-se o avanço temporal da saturação certo número de vezes, com os mesmos valores das vazões  $q_f$ , antes de atualizar o campo de pressão novamente. Essa prática, ilustrada no passo 3 da figura 5.2, implica que a evolução temporal da pressão e da saturação é determinada com escalas de tempo diferentes. O passo de tempo para a saturação é sempre menor, porque deve satisfazer a restrição imposta pelo critério CFL, a fim de garantir a estabilidade. Por outro lado, o intervalo de atualização do campo de pressão é incrementado o mais possível com o intuito de reduzir o tempo de computação, pois a montagem e a solução do sistema de equações da pressão são as operações mais custosas de todo o processo.

Para completar a descrição do algoritmo de solução, resta especificar um esquema automático para gerenciar o passo de tempo para a atualização da pressão e, conseqüentemente, das vazões nas faces. Um esquema adequado deve estipular passos de tempo em que a variação das vazões seja uniforme ao longo da simulação. Isto é, estipular passos de tempo maiores quando as vazões variarem pouco em todo o domínio e passos progressivamente menores quando as vazões começarem a variar fortemente em alguma região. A razão para associar o tamanho do passo de tempo à variação das vazões nas faces é óbvia pois, no algoritmo descrito, os valores dessas vazões são mantidos constantes em cada um desses intervalos de tempo.

Na implementação realizada, o passo de tempo para a pressão é determinado pela expressão

$$\Delta t_p^{m+n} = \Delta t_p^m \frac{\Delta \widehat{Q}_{adm}}{[\Delta \widehat{Q}_{max}]^m}, \quad (5.38)$$

em que  $\Delta t_p^{m+n}$  é o novo passo de tempo, equivalente a  $n$  passos de tempo da saturação, determinado com base no passo anterior,  $\Delta t_p^m$ . Além disso,  $[\Delta \widehat{Q}_{max}]^m$  é um parâmetro normalizado, indicador da máxima variação das vazões em toda a malha durante o intervalo de tempo  $\Delta t_p^m$ . Por fim,

$\Delta\widehat{Q}_{\text{adm}}$  é o valor estipulado para essa variação, isto é, o valor alvo que o esquema deve manter aproximadamente uniforme durante a simulação.

O parâmetro associado à variação máxima das vazões no intervalo  $\Delta t_p^m$  é computado com base nos volumes de controle, mediante a relação

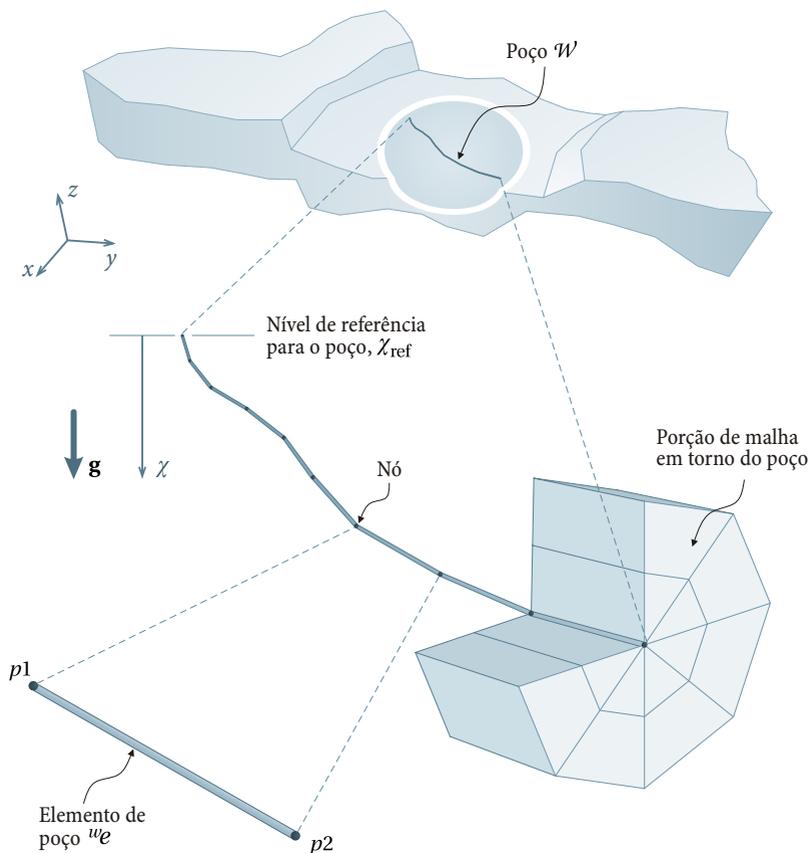
$$|\Delta Q_{\text{max}}|^m \equiv \max_{p \in \mathcal{M}} \left( \frac{\sum_{f \in \mathcal{F}_p} |q_f|^m - |q_f|^{m-l}}{\phi_p \Delta V_p} \right), \quad (5.39)$$

na qual, como indicado, é necessário percorrer todos os volumes de controle da malha  $\mathcal{M}$  a fim de determinar o valor máximo da expressão entre parênteses. Nessa expressão,  $|q_f|^{m-l}$  é o valor de uma vazão no nível de tempo imediatamente anterior a  $t_m$ , na escala de tempo da pressão. É importante notar que na equação (5.38),  $|\Delta\widehat{Q}_{\text{max}}|^m$  é um valor normalizado do parâmetro definido na equação (5.39). O fator de normalização é o valor do próprio parâmetro no primeiro intervalo de tempo do processo de solução, assumindo-se que em  $t = 0$  todas as vazões são nulas. Experimentos numéricos indicam que valores de  $\Delta\widehat{Q}_{\text{adm}}$  na ordem de  $10^{-2}$  conduzem a soluções transientes sem apreciável erro que possa ser atribuído à variante no algoritmo e com significativamente menor tempo de computação que usando o algoritmo IMPES convencional.

## 5.4 Representação discreta dos poços

Dado que, em geral, o maior interesse em uma simulação numérica está focalizado no escoamento na vizinhança dos poços, é de fundamental importância considerar uma representação acurada da trajetória dos poços. Diferentemente de outras características geométricas do reservatório, das quais geralmente só existem descrições aproximadas, as trajetórias dos poços são conhecidas com suficiente precisão e podem incluídas de forma detalhada em um modelo numérico. É precisamente na representação discreta dos poços que mais se pode aproveitar a flexibilidade geométrica das malhas não-estruturadas, especialmente quando os poços são direcionais ou multilaterais.

A figura 5.3 ilustra, de modo esquemático, a abordagem considerada neste trabalho para a representação dos poços no modelo numérico. Nela, o poço está constituído por uma sequência de elementos unidimensionais, os quais devem coincidir com arestas da malha volumétrica que representa



**Figura 5.3** – Representação discreta de um poço.

o reservatório. Dessa forma garante-se que nós da malha, onde serão determinados valores das variáveis relevantes do problema, estejam localizados sobre a trajetória do poço. Note-se, entretanto, que na representação discreta não é considerado o raio real do poço, pois o poço é reduzido a uma linha. A informação do raio é considerada no chamado modelo de poço, introduzido para aproximar a relação entre a vazão que atravessa a superfície de uma porção do poço e os valores nodais de pressão de poço e reservatório.<sup>6</sup> A malha volumétrica na vizinhança do poço pode ser gerada

<sup>6</sup> O modelo de poço empregado é descrito na seção 5.5.

com geometria cilíndrica, a qual pode capturar com mais fidelidade a estrutura predominantemente radial do escoamento nessa região [21]. Essa abordagem é uma extensão tridimensional das malhas polares em torno dos poços, utilizadas em alguns modelos areais de reservatórios [27, 65].

Duas condições de operação dos poços são as mais comuns em problemas de reservatórios, em relação às grandezas estipuladas como dados de entrada [3]. Em uma delas é conhecida a pressão em alguma seção de referência no interior do poço, enquanto que na outra é estipulada a vazão total que escoo do reservatório para o poço ou vice-versa. A inclusão das condições de operação dos poços na formulação requer, em geral, algum tipo de modelagem do escoamento no interior do poço, a fim de determinar a variação da pressão na interface entre poço e reservatório. A modo de exemplo, a seguir é descrito o procedimento considerando que a pressão no interior do poço tem variação hidrostática. Logicamente, poderiam ser considerados modelos de escoamento mais completos, como os apresentados em [56], incluindo variações de pressão causadas por atrito, entrada de massa, interação entre fases etc.

Seja  $\Pi$  a pressão média em uma seção do poço e  $\chi$  a direção vertical, em que atua a gravidade. A variação dessa pressão, considerando apenas a influência da gravidade, é dada por

$$-\frac{d\Pi}{d\chi} + \bar{\rho}g = 0, \quad (5.40)$$

onde  $\bar{\rho}$  é a densidade média da mistura de fluidos escoando pelo poço e  $g$  a magnitude da aceleração devida à gravidade.

Integrando a equação (5.40) entre um nível de referência, aqui considerado como o nível do primeiro nó do poço, e o nível de um nó qualquer  $p$  na trajetória do poço, tem-se

$$-(\Pi_p - \Pi_{\text{ref}}) + \int_{\chi_{\text{ref}}}^{\chi_p} \bar{\rho}g \, d\chi = 0. \quad (5.41)$$

A integral nesta equação pode ser aproximada em cada elemento de poço, pela regra do ponto médio [20], após o qual pode ser obtida a seguinte expressão para a pressão no interior do poço, no nível do nó  $p$

$$\Pi_p \approx \Pi_{\text{ref}} + \sum_{w_\varrho \in w_{E,p-\text{ref}}} \bar{\rho}_{w_\varrho} g \Delta\chi_{w_\varrho}, \quad (5.42)$$

em que  ${}^wE_{p\text{-ref}}$  é o conjunto de elementos de poço entre os níveis de referência e o do nó  $p$ . Além disso,  $\Delta\chi_{w_e} = \chi_{p2} - \chi_{p1}$  é o comprimento da projeção do elemento de poço na direção vertical e  $\bar{\rho}_{w_e} = \frac{1}{2}(\bar{\rho}_{p1} + \bar{\rho}_{p2})$  é a densidade média da mistura nesse elemento. Como mostrado na figura 5.3,  $p1$  e  $p2$  são os nós nas duas extremidades do elemento de poço em questão,  $w_e$ . Por sua vez, a densidade da mistura em cada nó, pode ser aproximada como uma média ponderada das densidades das fases, levando em conta a quantidade de cada fase na porção do poço associada.

A figura 5.4 mostra um volume de controle da malha do reservatório que contém um nó de poço. Conforme se observa, um desses volumes envolve a metade de dois elementos de poço adjacentes.<sup>7</sup> Como é lógico, a vazão entre o volume de controle e essas porções de elementos de poço deve ser levada em conta nas suas equações de balanço. Assim, por exemplo, na equação da pressão, que provém de um balanço global das duas fases, ter-se-ia

$$- \sum_{e \in E_p} \sum_{f \in \mathcal{F}_p^e} \sum_{\ell \in \mathcal{N}^e} \sigma_{f,p}(\lambda_T)_f \beta_{f,\ell}^e \check{P}_\ell^e + \sum_{e \in E_p} \sum_{f \in \mathcal{F}_p^e} \sigma_{f,p}(\zeta_T)_f \omega_f + \varpi_p = 0, \quad (5.43)$$

em que o termo adicional  $\varpi_p$  é a vazão total entre poço e volume de controle, positiva se abandona o volume e negativa no caso contrário.<sup>8</sup> Seguindo a prática normal em simulação de reservatórios, essa vazão é relacionada com a diferença entre a pressão nodal  $P_p$  e a pressão no interior do poço  $\Pi_p$ , por meio de uma expressão da forma

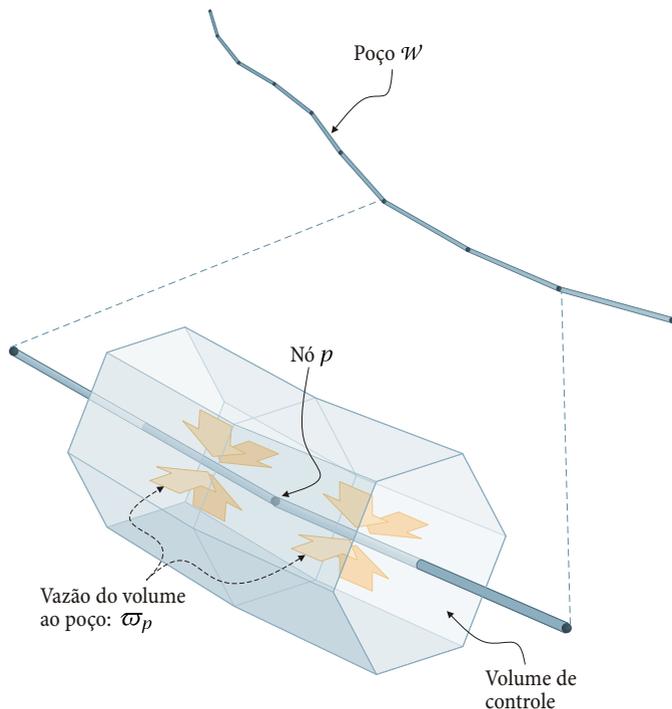
$$\varpi_p = (\lambda_T)_p WI_p (\check{P}_p - \Pi_p). \quad (5.44)$$

Nesta relação,  $WI_p$  é o denominado índice de produtividade do poço ou, simplesmente, índice de poço [10, 61], para a porção de poço em contato com o volume considerado. A determinação de valores de  $WI_p$  apropriados à discretização considerada neste trabalho é descrita na seção 5.5.

A fim de se obter uma expressão final para a equação da pressão para volumes em contato com poços, a equação (5.42) pode ser substituída em (5.44) e o resultado substituído ainda em (5.43), chegando-se então a

<sup>7</sup> No entanto, se o nó em questão estiver localizado em uma extremidade do poço, o volume de controle estará em contato apenas com a metade de um elemento de poço.

<sup>8</sup>A equação (5.43) provém da equação (5.24). Os índices correspondentes ao nível de tempo foram omitidos a fim de simplificar a notação.



**Figura 5.4** – Volume de controle associado a um nó sobre o poço.

$$\begin{aligned}
 & - \sum_{e \in \mathcal{E}_p} \sum_{f \in \mathcal{F}_p^e} \sum_{\ell \in \mathcal{N}^e} \sigma_{f,p}(\lambda_T)_{\hat{f}} \beta_{f,\ell}^e \check{P}_\ell^e + \sum_{e \in \mathcal{E}_p} \sum_{f \in \mathcal{F}_p^e} \sigma_{f,p}(\zeta_T)_{\hat{f}} \omega_f + \\
 & (\lambda_T)_p \text{WI}_p (\check{P}_p - \Pi_{\text{ref}} - \Delta \Pi_{p\text{-ref}}) = 0,
 \end{aligned} \tag{5.45}$$

em que  $\Delta \Pi_{p\text{-ref}}$  é uma notação compacta para o somatório da equação (5.42), ou seja

$$\Delta \Pi_{p\text{-ref}} \equiv \sum_{w_e \in {}^w \mathcal{E}_{p\text{-ref}}} \bar{\rho}^{w_e} g \Delta \chi^{w_e}. \tag{5.46}$$

A equação (5.45) é válida para todos os volumes de controle associados a nós a longo da trajetória de um poço produtor ou injetor. No caso em que o valor da pressão de referência  $\Pi_{\text{ref}}$  for estipulado como condição de operação do poço, nenhuma incógnita adicional será acrescentada na

equação da pressão pela inclusão do termo associado à vazão para o poço. Isto porque valores de  $\Delta\Pi_{p\text{-ref}}$  podem ser avaliados diretamente com a equação (5.46).<sup>9</sup>

Quando o valor estipulado for a vazão total que ingressa ou abandona o poço,  $\Pi_{\text{ref}}$  é uma incógnita adicional nas equações da pressão de todos os volumes de controle em contato com o poço. Logo, precisa-se de uma equação adicional para que o sistema de equações da pressão possa ser resolvido. Essa equação provém do balanço global para o poço completo, o qual pode ser escrito como

$$\varpi_{\mathcal{W}} - \sum_{p \in \mathcal{W}} \varpi_p = 0, \tag{5.47}$$

onde  $\varpi_{\mathcal{W}}$  é o valor estipulado para a vazão total que ingressa ou abandona o poço, segundo se trate de um poço injetor ou produtor. O sinal de  $\varpi_{\mathcal{W}}$  é positivo no primeiro caso e negativo no segundo. Substituindo a expressão para as vazões individuais em cada volume de controle, dada na equação (5.44), obtém-se

$$\varpi_{\mathcal{W}} - \sum_{p \in \mathcal{W}} (\lambda_T)_p \text{WI}_p (\check{P}_p - \Pi_{\text{ref}} - \Delta\Pi_{p\text{-ref}}) = 0. \tag{5.48}$$

Esta equação possui como incógnitas todos os valores nodais da pressão ao longo do poço, além do valor da pressão do poço no nível de referência. Uma equação desse tipo deve ser acrescentada no sistema de equações da pressão, para cada poço em que um valor da vazão total seja estipulado.

Por outro lado, a equação da saturação correspondente aos volumes em contato com um poço deve incluir também um termo adicional. Uma vez que essa equação representa um balanço da fase água, o termo adicional é dado por  $(F_w)_p \varpi_p$ , que é fração da vazão entre volume de controle e poço que corresponde à fase água. Independentemente de qual for a condição de operação estipulada para o poço, a vazão  $\varpi_p$  pode ser computada com a equação (5.44), após resolver o sistema de equações da pressão. Dado que no nível de tempo  $t_m$ , ao qual correspondem todos os termos analisados, encontram-se disponíveis valores nodais da saturação, o valor de  $(F_w)_p$  pode ser facilmente computado também.

---

<sup>9</sup> Entretanto, modelos mais detalhados do escoamento no interior do poço podem introduzir não-linearidades e acoplamentos adicionais que requeiram um tratamento especial no processo de solução.

## 5.5 Modelo de poço

Uma das principais características do escoamento na vizinhança de um poço é a forte variação da pressão e, conseqüentemente, da velocidade nessa região. Mesmo representando de maneira precisa a trajetória do poço na malha, como descrito na seção anterior, para captar de forma adequada os fortes gradientes de pressão seria necessário também refinar extremamente a malha adjacente ao poço na direção radial. Uma vez que o diâmetro típico de um poço e várias ordens de grandeza menor que as dimensões normais de um reservatório, um refino dessa natureza é geralmente impraticável, pois aumentaria excessivamente o número de incógnitas do modelo numérico. A dificuldade torna-se mais crítica porque a vazão entre o reservatório e um poço deveria ser normalmente computada com os gradientes de pressão na sua vizinhança. Logo, se com a malha utilizada não fosse possível captar adequadamente esses gradientes, um erro de magnitude inaceitável seria introduzido na solução numérica, devido à importância transcendental da vazão desde ou para os poços.

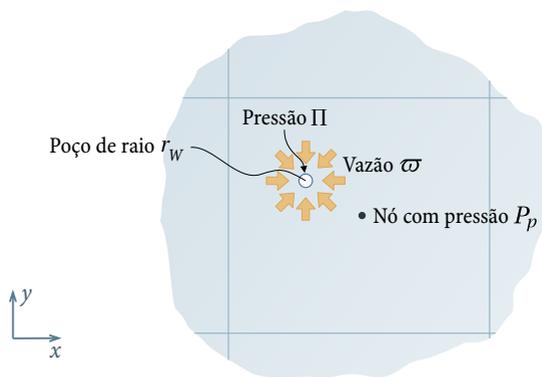
Para contornar esse tipo de dificuldades, desde os primórdios da simulação de reservatórios são empregados os denominados modelos de poço [10, 61]. O intuito desses modelos é desvincular o cômputo da vazão da aproximação numérica do gradiente de pressão adjacente aos poços. Isto geralmente é conseguido introduzindo hipóteses adicionais quanto à natureza do escoamento na vizinhança imediata aos poços.

Para um escoamento monofásico, o modelo de poço é normalmente dado pela expressão

$$\varpi = \frac{WI}{\mu} (P_p - \Pi), \quad (5.49)$$

onde, como ilustrado na figura 5.5 para um caso bidimensional,  $\varpi$  é a vazão entre o reservatório e o poço,  $P_p$  é a pressão nodal associada ao volume onde o poço se encontra e  $\Pi$  é a pressão na superfície do poço. A equação (5.49) pode ser considerada a definição do índice de poço  $WI$ , o qual é um parâmetro que depende apenas da permeabilidade e das geometrias do poço e da malha na região adjacente ao poço. De fato, a questão chave de um modelo de poço é a determinação do valor de  $WI$  adequado para uma dada configuração geométrica do poço em relação à malha circundante.

A extensão da equação (5.49) para escoamentos multifásicos é direta, sendo necessário apenas introduzir a permeabilidade relativa, do mesmo



**Figura 5.5** – Grandezas envolvidas em um modelo de poço convencional.

modo que é realizado para aplicar a lei de Darcy a várias fases. Essa forma do modelo de poço pode ser escrita de modo compacto como

$$\varpi_{\gamma} = \lambda_{\gamma} WI (P_p - \Pi), \quad (5.50)$$

em que  $\varpi_{\gamma}$  e  $\lambda_{\gamma}$  são, respectivamente, a vazão e a mobilidade<sup>10</sup> da fase genérica  $\gamma$ . Admite-se que o valor do índice de poço WI na equação (5.50) é o mesmo que o da equação (5.49) para escoamento monofásico. Por tal razão, os valores dos índices de poço são determinados usualmente considerando escoamentos monofásicos, mesmo que sua aplicação final seja em problemas multifásicos [10].

A primeira derivação de uma expressão analítica para calcular o índice de poço foi feita por Peaceman [61], para modelos numéricos baseados em malhas cartesianas regulares. Diversas extensões e generalizações foram realizadas posteriormente na correlação de Peaceman [14, 62–64], as quais são amplamente utilizadas em simuladores comerciais. Infelizmente, esquemas analíticos desse tipo não podem ser aplicados diretamente a uma formulação em malhas não-estruturadas, devido ao forte enraizamento desses esquemas na configuração geométrica simples das malhas estruturadas.

<sup>10</sup> Conforme mostra a equação (5.5), a permeabilidade relativa está envolvida na definição da mobilidade.

Neste trabalho é considerada uma abordagem diferente à convencional, baseada na metodologia proposta por Aavastmark e Klausen em [1].<sup>11</sup> Essa metodologia é suficientemente geral como para ser aplicada com malhas tanto estruturadas como não-estruturadas e em duas ou três dimensões. O delineamento geral do método pode ser mais facilmente descrito considerando inicialmente uma situação bidimensional, e depois ser estendido a casos tridimensionais, como feito a seguir.

Considere-se o problema esboçado na figura 5.6(a), em que um poço produtor de raio  $r_W$  encontra-se localizado na origem de um domínio bidimensional infinito. No regime estacionário, um escoamento monofásico incompressível dirigido na direção do poço pode ser descrito pelas equações

$$\nabla \cdot \mathbf{v} = 0, \tag{5.51}$$

$$\mathbf{v} = -\frac{\mathbf{K}}{\mu} \nabla P, \tag{5.52}$$

sujeitas às seguintes restrições na interface entre poço e reservatório

$$P|_{r=r_W} = \Pi, \tag{5.53}$$

$$\int_{r=r_W} \mathbf{v} \cdot d\mathbf{S} = \varpi. \tag{5.54}$$

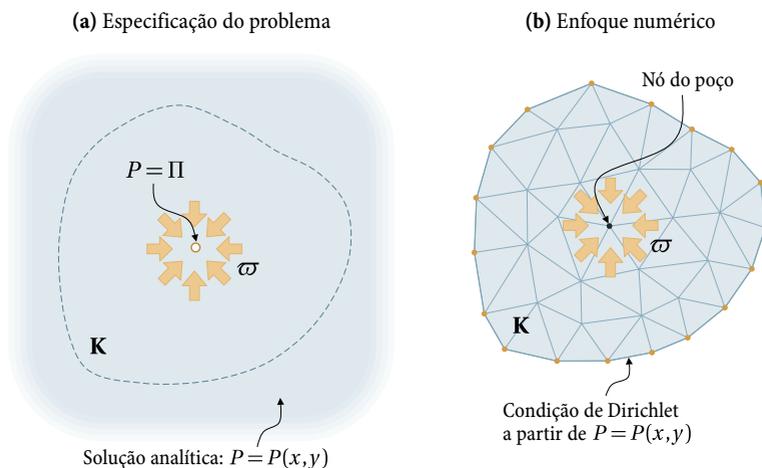
Neste modelo simples, o meio é considerado homogêneo, porém, com possibilidade de ser anisotrópico. A solução do problema descrito acima pode ser determinada analiticamente e é dada por uma função contínua  $P(x, y)$ , para qualquer ponto exterior ao poço.<sup>12</sup> Nessa solução analítica, a pressão varia de forma logarítmica e as isolinhas são elipses com semi-eixos nas direções principais do tensor permeabilidade. À medida que se afastam do poço, porém, as isolinhas tendem a tornar-se circulares.

Na metodologia considerada, para determinar um índice de poço associado a uma dada malha, o problema monofásico descrito deve ser resolvido numericamente. Para tanto, deve ser considerada uma porção da malha que inclua o poço e um número adequado de elementos. No problema

---

<sup>11</sup> Apesar de não ser citada em [1], uma metodologia semelhante tinha sido esboçada previamente por Morita et al. [54].

<sup>12</sup> A obtenção da solução  $P(x, y)$  é descrita em detalhes no apêndice C da referência [62], para o caso em que  $\mathbf{K}$  é dado por um tensor diagonal. A solução para um tensor  $\mathbf{K}$  completo requer a diagonalização do tensor como passo prévio.



**Figura 5.6** – Problema auxiliar para a determinação do índice de poço em duas dimensões.

numérico auxiliar, conforme ilustra a figura 5.6(b), a fronteira externa do domínio é sujeita a condições de Dirichlet, com valores determinados a partir da solução analítica  $P(x, y)$ . Para tanto, são considerados valores arbitrários da vazão  $\varpi$ , da pressão do poço  $\Pi$  e da viscosidade  $\mu$ . A permeabilidade  $\mathbf{K}$  deve ser considerada com o valor tensorial especificado no problema original para os elementos no subdomínio auxiliar. Existe a restrição, entretanto, que esse valor deve ser único para todos esses elementos, a fim de respeitar a hipótese de meio homogêneo considerada na solução analítica. Por fim, para completar a especificação do problema auxiliar, no volume de controle que inclui o poço é considerada a vazão  $\varpi$ , com o mesmo valor considerado na solução analítica. Apesar de não ser estritamente necessário, no esquema considerado neste trabalho um nó sempre coincide com a localização do poço. Como é lógico, para resolver o problema numérico auxiliar deve ser considerada a mesma discretização que irá ser utilizada depois no modelo numérico para o reservatório completo.

Idealmente, a solução numérica do problema auxiliar deveria ser próxima à solução analítica, pois em ambos os casos o problema resolvido é o mesmo. No entanto, em geral, com as malhas utilizadas normalmente não

é possível capturar a forte variação da pressão na região adjacente ao poço, por não serem refinadas o suficiente. Na fronteira do subdomínio auxiliar ambas as soluções coincidirão, pela imposição das condições de Dirichlet a partir da solução analítica. Porém, à medida que os pontos se aproximarem do poço, a discrepância entre ambas as soluções aumentará, em geral, de forma acentuada. Desse modo, a discrepância se torna máxima no nó da malha coincidente com o poço.<sup>13</sup> A diferença entre a pressão  $P_p$  nesse nó e a pressão  $\Pi$  pode ser considerada como uma medida da insuficiência da formulação numérica para capturar a variação exata da pressão na vizinhança do poço. O papel do modelo de poço é, precisamente, compensar essa insuficiência relacionando o valor exato da vazão com essa diferença de pressões. Como mostra a equação (5.49), o índice de poço é definido como fator de proporcionalidade entre essas duas grandezas.

No procedimento descrito, após ser resolvido o problema numérico auxiliar, o valor correspondente ao índice de poço pode ser determinado pela expressão seguinte, derivada da equação (5.49),

$$WI = \left( \frac{\mu \varpi}{P_p - \Pi} \right)_{\text{aux}}. \quad (5.55)$$

O valor do índice de poço assim computado pode ser aplicado depois à solução de problemas na malha completa do reservatório. Uma vez que a influência das condições em outros poços ou nos contornos sobre o escoamento na vizinhança imediata de um poço é mínima [1, 54], assume-se que o valor do índice de poço não estará influenciado de forma significativa por essas condições. Além disso, dada linearidade da relação entre velocidade e gradiente de pressão na lei de Darcy, o valor do índice de poço deverá manter-se inalterado quando forem utilizados valores de vazão ou pressão diferentes aos considerados no problema auxiliar descrito.

Por outro lado, da mesma forma que nas correlações de Peaceman, o valor do índice de poço obtido pela equação (5.55) carrega informação geométrica da malha circundante ao poço, além da permeabilidade nessa região. Entretanto, no procedimento descrito acima essa informação é introduzida de modo indireto, na discretização do problema auxiliar. É por tal razão, que resulta imprescindível que essa discretização inclua o

---

<sup>13</sup> Nessa análise é desconsiderado o raio do poço, cujo valor é, em geral, insignificante quando comparado com o tamanho dos elementos da malha.

mesmo tipo de aproximações para os fluxos difusivos que a discretização do problema completo.

O mesmo enfoque descrito pode ser utilizado em situações tridimensionais, fazendo-se algumas considerações adicionais. A diferença mais importante é que em três dimensões existem vários nós ao longo de um poço. Em consequência, a cada um desses nós deve ser associado um índice de poço que permita calcular a vazão para o volume de controle correspondente. A fim de determinar os valores desses índices de poço, cada elemento de poço deve ser considerado de forma separada. Em três dimensões, soluções analíticas simples somente podem ser determinadas considerando um poço reto de comprimento infinito em um meio homogêneo infinito.<sup>14</sup> Logo, para cada elemento de poço é associado um problema auxiliar equivalente ao descrito para o caso bidimensional, considerando que o poço se estende indefinidamente na direção do elemento em questão.

A situação descrita encontra-se ilustrada de modo esquemático na figura 5.7. Para resolver numericamente o problema auxiliar é considerada uma porção da malha com certo número de elementos ao redor do segmento de poço. Experimentos numéricos mostram que duas ou três camadas de elementos ao redor do segmento são adequados para obter resultados suficientemente precisos para o índice de poço. No contorno externo da submalha auxiliar é prescrita a condição de Dirichlet, com valores determinados por meio da solução analítica. As outras duas fronteiras são consideradas impermeáveis e pelo segmento de poço considera-se que atravessa uma vazão uniforme  $\varpi$ .

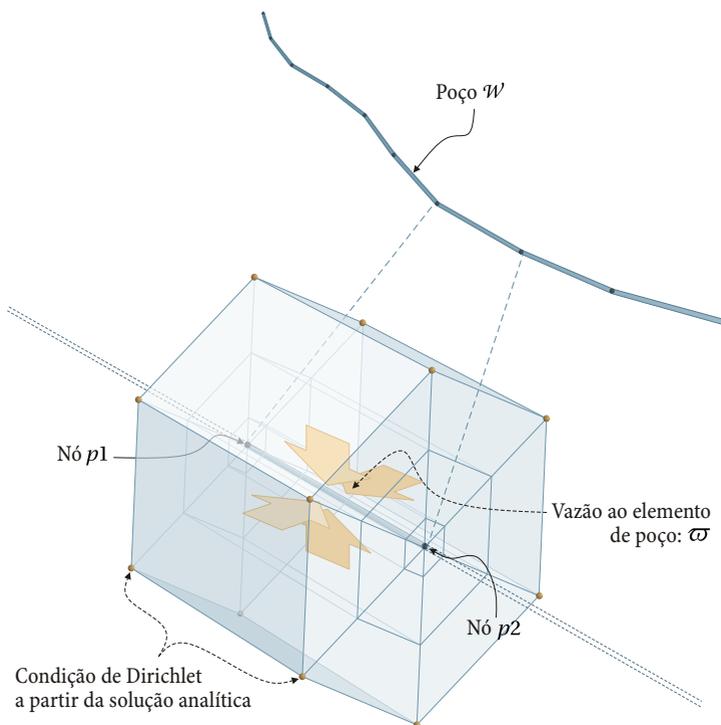
Depois de resolver o problema auxiliar, valores nodais da pressão estarão disponíveis para os nós  $p_1$  e  $p_2$ , localizados nas extremidades do elemento de poço. A cada um desses nós deve ser associado um valor de índice de poço proveniente do problema auxiliar. Na discretização desse problema, a vazão  $\varpi$  é repartida em partes iguais entre os dois volumes de controle associados aos nós  $p_1$  e  $p_2$ . Logo, para cada um desses nós é possível escrever expressões análogas à equação (5.55), porém, considerando a vazão  $\varpi/2$ . Isto é,

$$WI_{p_1}^{w_e} = \frac{1}{2} \left( \frac{\mu \varpi}{P_{p_1} - \Pi} \right), \quad (5.56)$$

---

<sup>14</sup> A solução analítica considerada neste trabalho é a derivada por Aavatsmark e Klausen em [1].

$$WI_{p2}^{we} = \frac{1}{2} \left( \frac{\mu \varpi}{P_{p2} - \Pi} \right)_{aux} \tag{5.57}$$



**Figura 5.7** – Submalha no problema auxiliar para a determinação do índice de poço em três dimensões.

Os índices de poço nas equações (5.56) e (5.57) carregam o índice  $we$  porque são valores parciais referidos apenas ao elemento de poço considerado no problema auxiliar. Segundo mostra a figura 5.4, todo volume de controle em contato com um poço, exceto os dois nas duas extremidades, envolve as metades de dois elementos de poço. O valor do índice de poço dado pela equação (5.56) ou pela equação (5.57) corresponde a uma dessas metades. Para todos os nós de poço, menos os das extremidades, o valor a ser utilizado para o volume de controle completo deve ser a soma dos valores parciais correspondentes às duas metades associadas ao nó. De

forma simbólica, pode-se escrever

$$WI_p = \sum_{w_e \in {}^wE_p} WI_p^{w_e}, \quad (5.58)$$

onde  ${}^wE_p$  é o conjunto de elementos de poço associados ao nó  $p$ . Esse conjunto terá dois elementos para todos os nós de um poço, exceto os das extremidades, que somente terá um.

## Exemplos de aplicação

Neste capítulo são apresentados diversos problemas resolvidos aplicando a formulação numérica descrita nos capítulos precedentes. Os problemas apresentados foram escolhidos de modo que fosse possível testar diferentes aspectos das soluções numéricas. Na maioria dos casos, tratam-se de situações físicas descritas por equações diferenciais simplificadas, as quais apresentam algumas características comuns com as equações do modelo de escoamento bifásico considerado no capítulo 5. Além de considerar equações simplificadas, são considerados também domínios de geometria regular, a fim de tornar possível a obtenção de soluções analíticas exatas, com as quais as soluções numéricas são comparadas. Em alguns casos faz-se uso da técnica denominada das soluções manufaturadas [72], na qual propõe-se a solução exata para uma equação diferencial e, por meio de diferenciação, determina-se a expressão matemática do termo fonte correspondente à equação. Esses diversos problemas com soluções conhecidas permitem testar, de forma separada, as características fundamentais do modelo numérico empregado para a simulação de reservatórios.

De posse da solução exata para um problema, é possível determinar a magnitude do erro de discretização de uma solução numérica para o problema. Isto permite, por sua vez, analisar o comportamento do erro de discretização à medida que as malhas são refinadas e determinar a ordem

de convergência da discretização, isto é, a taxa de diminuição desse erro quando o tamanho médio dos elementos da malha é reduzido. Sempre que possível, uma análise de convergência desse tipo é realizada nos problemas apresentados neste capítulo. Quando pertinente, é analisada também a influência de algumas características das malhas e/ou do problema sobre a ordem de convergência.

O modelo de poço considerado neste trabalho é também objeto de verificação em um dos problemas deste capítulo. Entretanto, nesse caso a obtenção de uma solução exata apresenta maior dificuldade e por tal razão optou-se por utilizar uma solução numérica como solução de referência para realizar as comparações. Nessa malha, a superfície e a vizinhança do poço são discretizadas com um grau de refino suficiente para dispensar o uso de um modelo de poço.

Um problema de recuperação secundária de óleo em um reservatório de geometria complexa é considerado na parte final deste capítulo. Dado que a obtenção da solução exata para um problema dessa natureza está fora de questão, alguns aspectos da solução numérica desse problema são apresentados apenas com caráter ilustrativo, sem qualquer comparação ou verificação.

Todos os resultados apresentados neste capítulo foram obtidos com códigos implementados na linguagem  $C^{++}$ , com a auxílio das bibliotecas EFVLib e ACMLib. A biblioteca EFVLib [47], cujo objetivo é a sistematização da implementação de formulações de volumes finitos baseadas em elementos, foi desenvolvida com a fundamentação teórica apresentada neste trabalho. Já a biblioteca ACMLib [46] permite a solução dos sistemas de equações lineares, oriundos do processo de discretização, pelo método *multigrid* de correções aditivas [18, 39]. Para todos os problemas apresentados neste capítulo, os sistemas de equações lineares foram resolvidos com o referido método, iterando-se até a norma  $L_2$  dos resíduos do sistema ser menor que  $10^{-8}$ .

## 6.1 Problemas de difusão

Nesta seção são considerados problemas descritos pela equação diferencial elíptica

$$-\nabla \cdot \mathbf{K} \nabla P = \psi(x, y, z) \text{ em } \Omega, \quad (6.1)$$

em que o domínio  $\Omega$  é o cubo unitário  $0 \leq x \leq 1; 0 \leq y \leq 1; 0 \leq z \leq 1$ . O contorno  $\partial\Omega$  desse domínio é sujeito à condição de Dirichlet

$$P = P_{\text{Dir}}(x, y, z) \text{ em } \partial\Omega. \quad (6.2)$$

A equação (6.1) pode ser considerada um protótipo da equação da pressão em uma formulação de escoamento multifásico. A representação discreta de um termo diferencial de segunda ordem da forma que aparece nessa equação é um dos ingredientes fundamentais de qualquer formulação numérica para simulação de reservatórios. O propósito dos testes apresentados aqui é verificar a ordem de convergência para uma variável elíptica para os diferentes tipos de elementos considerados. Além disso, procura-se identificar se a distorção dos elementos da malha ou a variação espacial do tensor  $\mathbf{K}$  têm alguma influência sobre a convergência.

Os testes realizados seguem as diretrizes de um exercício comparativo proposto no *5th International Symposium on Finite Volumes for Complex Applications* [31]. A forma adimensional da norma  $L_2$  do erro para a variável da equação foi computada pela expressão

$$\epsilon_p = \left( \frac{\sum_{p \in \mathcal{M}} [P(x_p, y_p, z_p) - \check{P}_p]^2 \Delta V_p}{\sum_{p \in \mathcal{M}} [P(x_p, y_p, z_p)]^2 \Delta V_p} \right)^{1/2}, \quad (6.3)$$

em que  $P(x_p, y_p, z_p)$  é o valor correspondente à solução exata no ponto coincidente com o nó  $p$ , enquanto que  $\check{P}_p$  é o valor obtido na solução numérica para o mesmo nó.

Por analogia com a expressão da norma do erro da variável da equação, foi definida a seguinte norma para o erro na aproximação do seu gradiente

$$\epsilon_{\nabla P} = \left( \frac{\sum_{f \in \mathcal{M}} \left| \nabla P(x_f^*, y_f^*, z_f^*) - \nabla \check{P}_f^* \right|^2 \Delta S_f}{\sum_{f \in \mathcal{M}} \left| \nabla P(x_f^*, y_f^*, z_f^*) \right|^2 \Delta S_f} \right)^{1/2}. \quad (6.4)$$

Uma vez que nas equações discretizadas o gradiente é aproximado no baricentro das faces, a norma do gradiente foi definida com base nessas aproximações, denotadas na expressão (6.4) como  $\nabla \check{P}_f^*$ . Nessa expressão,  $\nabla P(x_f^*, y_f^*, z_f^*)$  é o valor exato do gradiente no baricentro da face, obtido por diferenciação da solução analítica. Além disso,  $\Delta S_f$  é a área da face em questão.

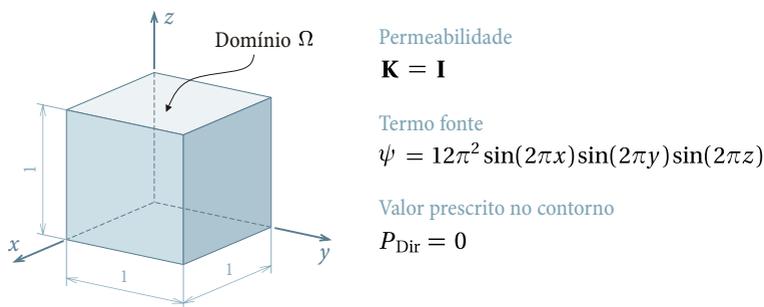
Entretanto, na aproximação do fluxo difusivo em uma face, apenas participa a componente normal à face do produto  $\mathbf{K}\nabla P$ . Devido a isso, decidiu-se comparar o valor da aproximação numérica dessa componente com o valor determinado a partir da solução analítica no baricentro das faces. Para tanto, definiu-se a norma para o erro nos fluxos

$$\epsilon_q = \left( \frac{\sum_{f \in \mathcal{M}} \left[ \mathbf{K}\nabla P(x_{\hat{f}}, y_{\hat{f}}, z_{\hat{f}}) \cdot \Delta \mathbf{S}_f - \mathbf{K}^e \nabla \check{P}_{\hat{f}} \cdot \Delta \mathbf{S}_f \right]^2}{\sum_{f \in \mathcal{M}} \left[ \mathbf{K}\nabla P(x_{\hat{f}}, y_{\hat{f}}, z_{\hat{f}}) \cdot \Delta \mathbf{S}_f \right]^2} \right)^{1/2}, \quad (6.5)$$

em que  $\mathbf{K}\nabla P(x_{\hat{f}}, y_{\hat{f}}, z_{\hat{f}})$  é computado com o valor exato do gradiente no baricentro de uma face e o valor do tensor  $\mathbf{K}$  avaliado no mesmo ponto, quando for variável espacialmente. No entanto, na aproximação numérica,  $\mathbf{K}^e$  é o valor associado ao elemento em que a face se encontra, avaliado no baricentro do elemento, quando  $\mathbf{K}$  for uma função da posição.<sup>1</sup>

### 6.1.1 Problema 1-A

No problema 1-A, a permeabilidade é dada por um tensor identidade, portanto, trata-se de um problema de difusão em um meio isotrópico. O termo fonte da equação está definido na figura 6.1. Conforme indicado na mesma figura, um valor nulo é prescrito para a variável no contorno do domínio.



**Figura 6.1** – Problema 1-A.

<sup>1</sup> Uma vez que em problemas de simulação de reservatórios a variação espacial da permeabilidade é aproximada associando um valor constante a blocos da malha, na formulação implementada esses valores são atribuídos aos elementos da malha primária.

Para as condições especificadas, a solução exata da equação (6.1) é

$$P = \sin(2\pi x)\sin(2\pi y)\sin(2\pi z). \quad (6.6)$$

Na solução numérica do problema foram consideradas sequências de malhas com nível de refinamento progressivamente maior, mantendo exatamente a mesma estrutura sempre que possível. O intuito foi verificar a redução do valor das normas dos erros definidas anteriormente e estimar para cada caso a taxa de convergência. Além disso, analisar a influência da distorção dos elementos da malha sobre a convergência.

Inicialmente são apresentados os resultados com malhas formadas somente por elementos hexaédricos. A primeira sequência de malhas está formada por malhas regulares igualmente espaçadas. Mediante deslocamento dos vértices internos dessas malhas obtiveram-se sequências de malhas com elementos distorcidos. Para tanto, aplicaram-se as relações matemáticas

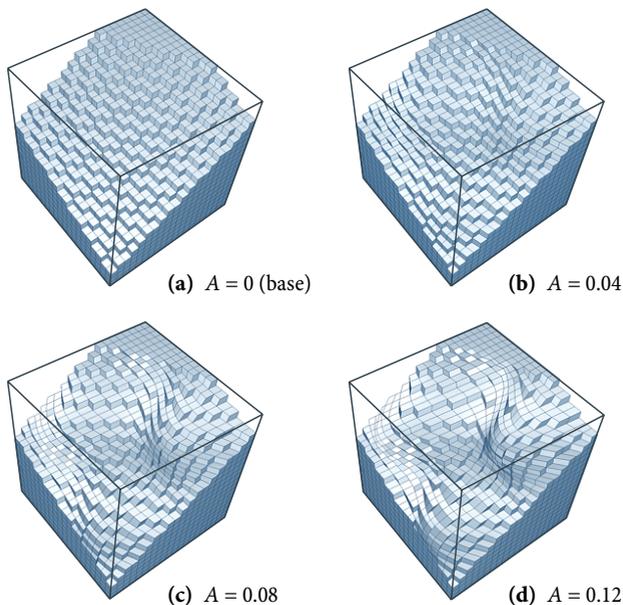
$$\begin{cases} x'_p = x_p + \delta_p, \\ y'_p = y_p + \delta_p, \\ z'_p = z_p + \delta_p, \\ \delta_p = A \sin(2\pi x_p)\sin(2\pi y_p)\sin(2\pi z_p). \end{cases} \quad (6.7)$$

Nestas expressões,  $x_p$ ,  $y_p$  e  $z_p$  são as coordenadas dos vértices na malha-base regular, enquanto que  $x'_p$ ,  $y'_p$  e  $z'_p$  são as coordenadas dos vértices na malha com elementos distorcidos. Estipulando diferentes valores para a amplitude  $A$  controla-se o grau de distorção das sequências de malhas.<sup>2</sup> Nos experimentos numéricos realizados foram consideradas sequências de malhas distorcidas obtidas com amplitudes 0.04, 0.08 e 0.12.<sup>3</sup> Para ilustrar, a figura 6.2 mostra as malhas resultantes após a distorção, considerando uma malha-base de  $20 \times 20 \times 20$  hexaedros regulares.

Nas figuras 6.3, 6.4 e 6.5 são apresentados gráficos da variação das normas dos erros definidos nas equações (6.3), (6.4) e (6.5), respectivamente, em relação ao comprimento representativo dos elementos da malha. Neste

<sup>2</sup> Este tipo de distorção senoidal das malhas de hexaedros é uma extensão tridimensional da distorção considerada em [6] para malhas quadriláteros.

<sup>3</sup> É fácil comprovar que uma amplitude maior a 0.012 desloca alguns vértices para fora do domínio do problema e produz também elementos anômalos.



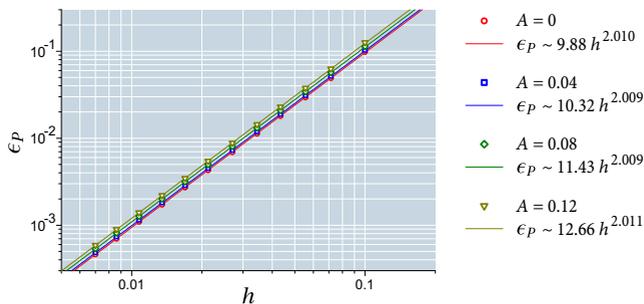
**Figura 6.2** – Malhas de  $20 \times 20 \times 20$  hexaedros, apresentando diferente amplitude de distorção dos elementos.

e todos os casos apresentados mais adiante, esse comprimento característico é determinado pela expressão [32]

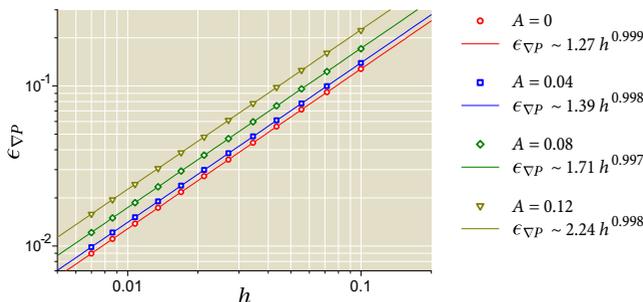
$$h = \left( V^\Omega / N_e^{\mathcal{M}} \right)^{\frac{1}{3}}, \quad (6.8)$$

em que  $V^\Omega$  é o volume do domínio e  $N_e^{\mathcal{M}}$  é o número total de elementos volumétricos da malha  $\mathcal{M}$  que discretiza tal domínio.

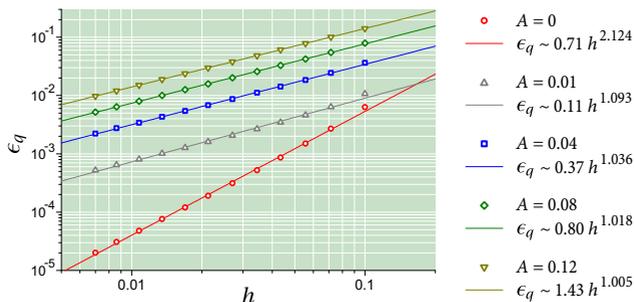
Nos gráficos apresentados, cada ponto representa o valor da norma de um dos erros, determinada na solução numérica em uma dada malha. Nas malhas de hexaedros consideraram-se seqüências de malhas em que a malha mais grosseira possui  $10 \times 10 \times 10$  elementos e a mais refinada  $143 \times 143 \times 143$  elementos. Para cada seqüência de malhas, apresentam-se também ajustes dos pontos a expressões da forma  $\epsilon = ah^b$ , cujas representações na escala logarítmica são as linhas retas presentes nos gráficos. O expoente do ajuste indica a taxa de convergência observada, na norma  $L_2$  considerada, da variável da equação, do gradiente ou dos fluxos.



**Figura 6.3** – Convergência da pressão no problema 1-A, para malhas de hexaedros com diferente amplitude de distorção.



**Figura 6.4** – Convergência do gradiente da pressão no problema 1-A, para malhas de hexaedros com diferente amplitude de distorção.



**Figura 6.5** – Convergência dos fluxos no problema 1-A, para malhas de hexaedros com diferente amplitude de distorção.

Conforme se pode observar nas figuras 6.3 e 6.4, a acurácia é de segunda ordem para  $P$  e de primeira ordem para  $\nabla P$ , independentemente da distorção considerada para as malhas. No caso de  $P$ , a influência da distorção é mínima e os ajustes obtidos para as sequências de malhas estão quase superpostos. No caso da norma do erro nos fluxos, cuja convergência é mostrada na figura 6.5 é observado um fenômeno particular. A convergência dessa norma para as malhas regulares acontece a uma taxa levemente maior a segunda ordem, enquanto que para todas as malhas distorcidas observa-se uma taxa de primeira ordem. Já que no problema 1-A a permeabilidade é isotrópica, isso significaria que para malhas de hexaedros regulares a aproximação da componente normal às faces converge a uma taxa maior que a aproximação do próprio gradiente. Na literatura, quando o erro de uma aproximação numérica em um ponto se reduz a uma taxa maior do que no entorno, diz-se que a aproximação é superconvergente nesse ponto [84]. Pelos resultados obtidos, os baricentros das faces apresentam superconvergência em malhas regulares, para a aproximação da componente do gradiente normal à face. Infelizmente, apenas uma leve distorção nos elementos já causa uma redução significativa na taxa de convergência. Como mostra a figura 6.5, uma amplitude de distorção de 0.01, que na prática apenas pode distinguir-se visualmente, reduz a taxa de convergência a um valor próximo á unidade.

Os resultados apresentados até agora mostram que a distorção dos elementos hexaédricos não influencia de modo significativo a taxa de convergência, pelo menos para os erros associados à variável da equação e ao gradiente. Contudo, é importante quantificar de alguma forma a distorção nas malhas consideradas até agora. Uma medida usualmente utilizada para quantificar a deformação de elementos hexaédricos é a razão entre o mínimo e o máximo valor do jacobiano da transformação de coordenadas, definida previamente na equação (3.1) [2, 43]. Aqui foi considerado o seguinte índice de deformação para os elementos hexaédricos

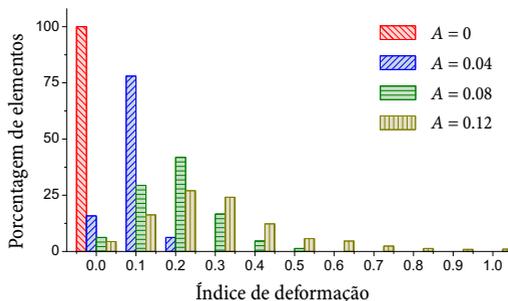
$$I_{\text{def}}^e = 1 - \frac{\min_{p \in \mathcal{N}^e} |\mathbf{J}|_p}{\max_{p \in \mathcal{N}^e} |\mathbf{J}|_p}, \quad (6.9)$$

o qual será nulo quando o hexaedro for regular e tenderá a 1 á medida que aumentar a deformação do elemento.<sup>4</sup>

---

<sup>4</sup> Se  $\min_{p \in \mathcal{N}^e} |\mathbf{J}|_p$  for negativo atribui-se diretamente um valor unitário a  $I_{\text{def}}^e$

Os histogramas da figura 6.6 ilustram a distribuição de valores do índice de distorção definido na equação (6.9), para as malhas mostradas na figura 6.2. Conforme se pode observar, nas malhas com amplitudes de distorção  $A = 0.08$  e  $A = 0.12$  existe uma grande porcentagem de elementos com valor significativamente alto do índice de deformação.



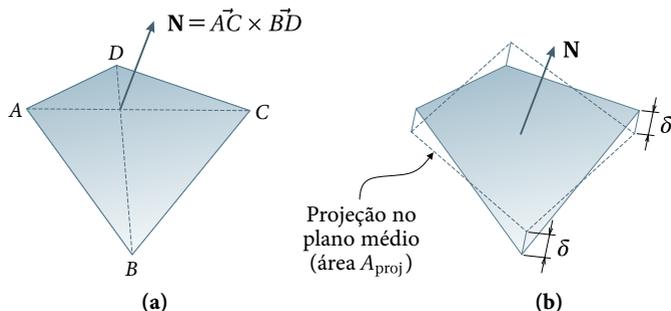
**Figura 6.6** – Índice de deformação dos elementos para diferentes amplitudes de distorção, nas malhas de  $20 \times 20 \times 20$  hexaedros.

Devido ao deslocamento dos vértices, as facetas das malhas distorcidas devem ter adquirido curvatura e deixado de ser planas. Como esperado, esse fenômeno não teve incidência sobre a taxa de convergência, porém, é importante também quantificar o grau de arqueamento que sofreram as facetas no processo de distorção das malhas. Baseado na projeção de uma faceta quadrangular sobre um plano médio, na referência [2] é definido o seguinte índice de arqueamento

$$I_{\text{arq}} = \frac{2\delta}{\sqrt{A_{\text{proj}}}}. \quad (6.10)$$

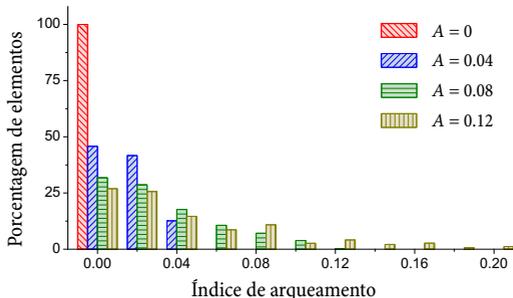
O procedimento de cômputo do índice e o significado dos parâmetros envolvidos estão ilustrados na figura 6.7. Inicialmente é determinado um vetor normal médio para a faceta, mediante o produto vetorial de suas diagonais. Com ajuda desse vetor determina-se um plano médio passando pelo baricentro dos vértices da faceta. O comprimento  $\delta$  na equação (6.10) é a distância de um dos vértices ao referido plano médio. Por construção, essa distância é a mesma para os quatro vértices. Finalmente,  $A_{\text{proj}}$  é a área do quadrilátero projetada no plano médio. O índice de arqueamento para

um elemento hexaédrico será o máximo valor dos índices determinados pela equação (6.10), entre todas as facetas do elemento [2].



**Figura 6.7** – Projeção de uma faceta arqueada sobre o plano médio.

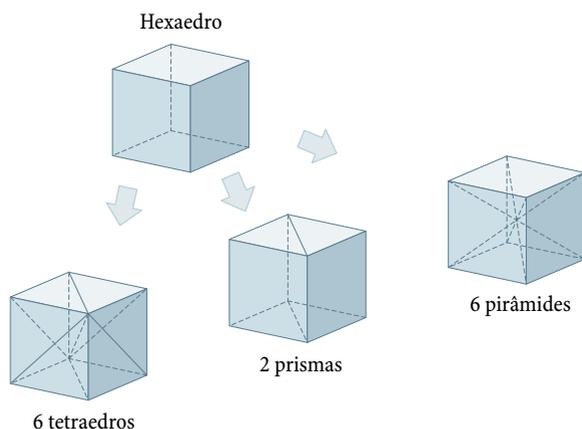
Os histogramas da figura 6.8 apresentam a distribuição de valores do índice de arqueamento definido previamente, para as malhas mostradas na figura 6.2. Na malha com amplitude de distorção  $A = 0.12$ , os valores máximos do índice de arqueamento atingem 0.2. Apesar desse valor não ser especialmente alto, pode-se observar que a porcentagem de elementos com facetas não-planas nessa malha é próximo a 75%.



**Figura 6.8** – Índice de arqueamento dos elementos para diferentes amplitudes de distorção, nas malhas de  $20 \times 20 \times 20$  hexaedros.

A fim de determinar o comportamento dos erros com elementos de outras formas, o problema 1-A foi resolvido com sequências de malhas for-

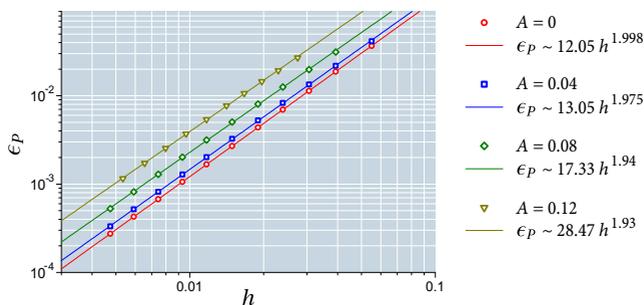
malhas por tetraedros, prismas e pirâmides. Para manter controle sobre a estrutura dessas malhas ao serem refinadas, elas foram obtidas por divisão das malhas de hexaedros descritas anteriormente. Cada elemento dessas malhas foi dividido em tetraedros, prismas ou pirâmides, da forma ilustrada na figura 6.9. As malhas de tetraedros e prismas possuem o mesmo número de vértices que as correspondentes de hexaedros, porém, maior quantidade de elementos. Já as malhas de pirâmides, além de possuir mais elementos que as de hexaedros, possuem também mais vértices, pela adição de um vértice central em cada hexaedro, como mostra a figura 6.9.



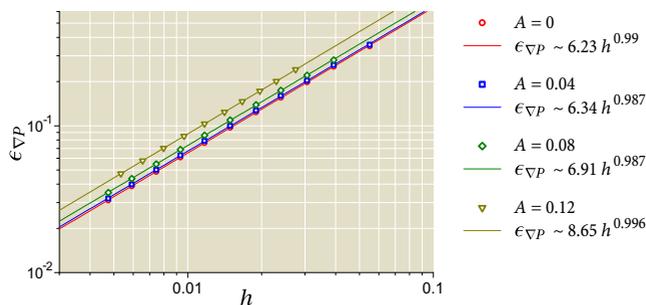
**Figura 6.9** – Divisão de um hexaedro em tetraedros, prismas ou pirâmides.

Nas figuras 6.10, 6.11 e 6.12 são apresentados gráficos que mostram a redução das normas dos erros  $\epsilon_p$ ,  $\epsilon_{\nabla p}$  e  $\epsilon_q$ , respectivamente, com malhas de tetraedros obtidas da forma descrita acima. Como nas malhas de hexaedros, nesses gráficos compara-se a convergência para sequências de malhas apresentando diferente amplitude de distorção. Para distorcer as malhas empregou-se o mesmo procedimento sintetizado na equação (6.7).

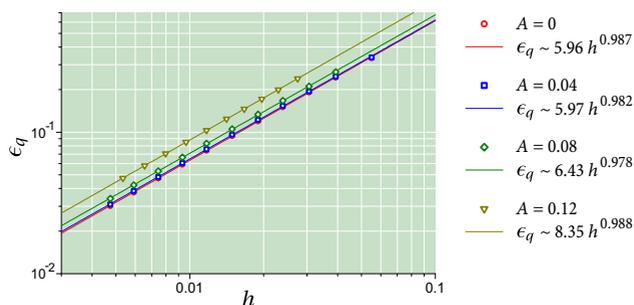
A taxa de convergência da pressão é praticamente de segunda ordem para as malhas sem distorção. O incremento do erro e a diminuição da taxa de convergência ao distorcer as malhas são mais acentuados que no caso dos hexaedros, porém, mesmo assim são pouco significativos. A influência da distorção no erro do gradiente é ainda menor, podendo-se afirmar que a convergência é de primeira ordem em todos os casos. A convergência do



**Figura 6.10** – Convergência da pressão no problema 1-A, para malhas de tetraedros com diferente amplitude de distorção.



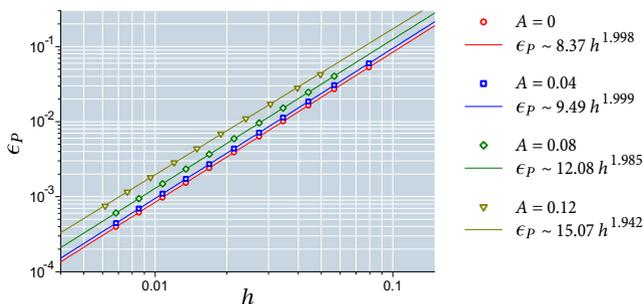
**Figura 6.11** – Convergência do gradiente da pressão no problema 1-A, para malhas de tetraedros com diferente amplitude de distorção.



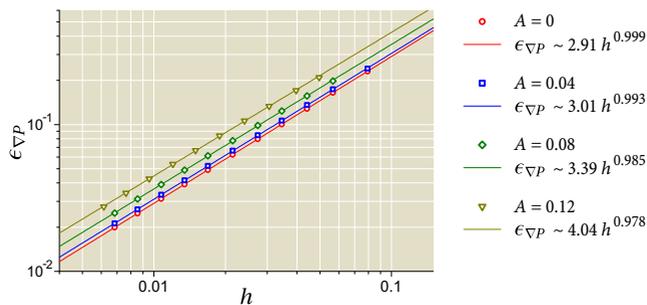
**Figura 6.12** – Convergência dos fluxos no problema 1-A, para malhas de tetraedros com diferente amplitude de distorção.

erro dos fluxos é praticamente idêntica à do erro do gradiente, diferentemente do fenômeno observado nas malhas de hexaedros.

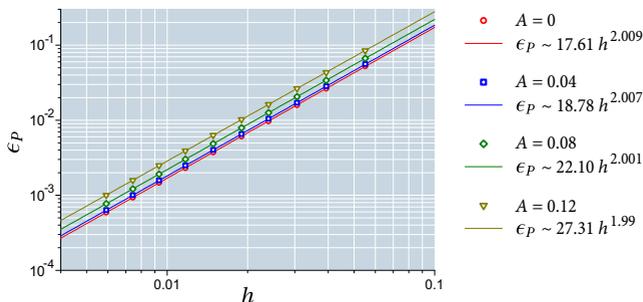
As figuras 6.13 e 6.14 apresentam os resultados obtidos para a convergência da pressão e do gradiente, respectivamente, nas malhas de prismas. Resultados equivalentes obtidos nas malhas de pirâmides são mostrados nas figuras 6.15 e 6.16. A convergência dessas grandezas em ambos os casos é qualitativamente semelhante àquela observada nas malhas de tetraedros, sendo que a taxa de convergência para a pressão é próxima a 2, enquanto que para o gradiente é próxima de 1. Como nos outros tipos de elementos já examinados, não é observada uma influência significativa da distorção das malhas nos valores dessas taxas de convergência.



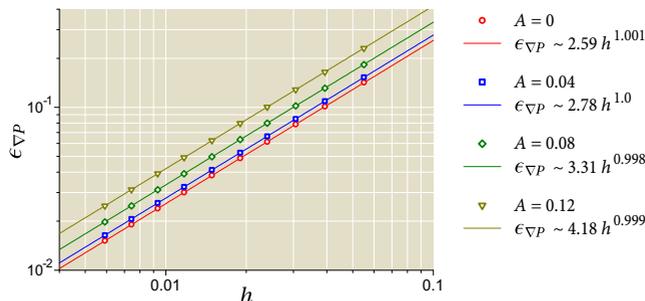
**Figura 6.13** – Convergência da pressão no problema 1-A, para malhas de prismas com diferente amplitude de distorção.



**Figura 6.14** – Convergência do gradiente da pressão no problema 1-A, para malhas de prismas com diferente amplitude de distorção.



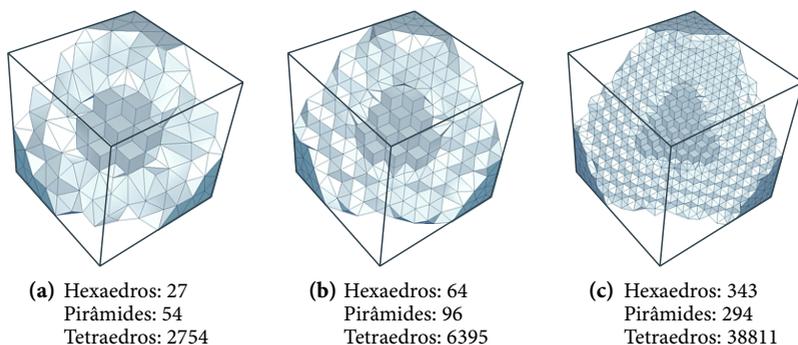
**Figura 6.15** – Convergência da pressão no problema 1-A, para malhas de pirâmides com diferente amplitude de distorção.



**Figura 6.16** – Convergência do gradiente da pressão no problema 1-A, para malhas de pirâmides com diferente amplitude de distorção.

Para finalizar esta seção são apresentados resultados obtidos em uma sequência de malhas híbridas. A estrutura das malhas híbridas utilizadas no teste pode ser evidenciada na figura 6.17, a qual mostra as três malhas mais grosseiras da sequência. Todas as malhas têm uma porção central cúbica formada por elementos hexaédricos regulares, cuja dimensão é 40% da dimensão do domínio. A porção externa é formada por elementos tetraédricos, existindo entre ela e a porção central uma região de transição formada por pirâmides.

Os resultados correspondentes à convergência das três normas analisadas são apresentados nas figuras 6.18, 6.19 e 6.20, respectivamente. Para fins de comparação, os gráficos incluem resultados já apresentados,



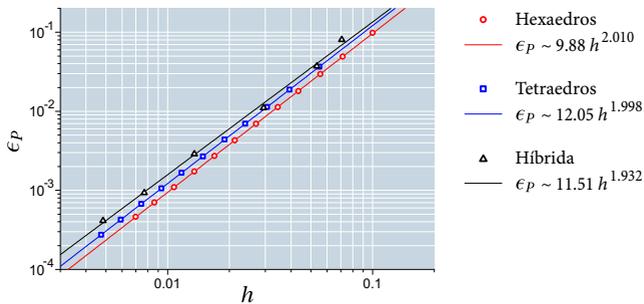
**Figura 6.17** – Três malhas híbridas utilizadas nos testes de convergência.

correspondentes às malhas regulares de hexaedros e tetraedros. No caso da convergência dos erros da pressão, os valores obtidos para a norma desses erros nas malhas híbridas são levemente maiores que os obtidos nas malhas de hexaedros e tetraedros. A taxa de convergência também é levemente menor, contudo, os três valores são bastante próximos entre si. No caso da convergência do gradiente e dos fluxos, os valores obtidos para as normas dos erros nas malhas híbridas são intermediários entre os das malhas hexaédricas, que sempre são menores, e os das malhas tetraédricas. No caso da norma dos erros para os fluxos, os valores nas malhas de hexaedros são significativamente menores e a taxa de convergência é maior, pelo fenômeno de superconvergência comentado previamente. Os valores dessa norma e a taxa de convergência nas malhas híbridas consideradas são mais próximos dos valores obtidos com as malhas tetraédricas.

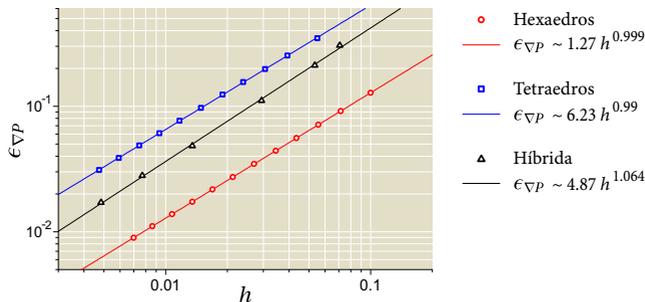
### 6.1.2 Problema 1-B

No problema de difusão 1-B, descrito também pelas equações (6.1) e (6.2), é considerado um tensor permeabilidade cujas componentes são funções das coordenadas espaciais. O objetivo deste problema é determinar como esse tipo de anisotropia influencia a convergência da solução numérica obtida com a formulação proposta.

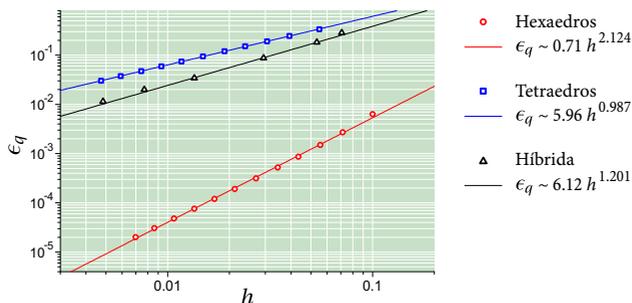
O tensor permeabilidade e a solução exata para o problema 1-B estão especificados na figura 6.21. Neste caso empregou-se a técnica das solu-



**Figura 6.18** – Comparação da convergência da pressão no problema 1-A, em malhas hexaédricas, tetraédricas e híbridas.

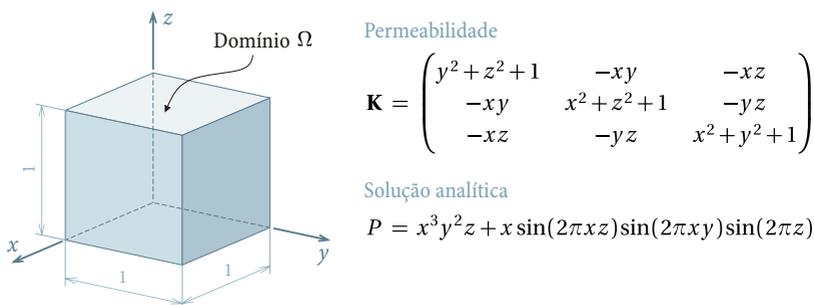


**Figura 6.19** – Comparação da convergência do gradiente da pressão no problema 1-A em malhas hexaédricas, tetraédricas e híbridas.



**Figura 6.20** – Comparação da convergência dos fluxos no problema 1-A, em malhas hexaédricas, tetraédricas e híbridas.

ções manufaturadas [72]. Isto é, substituindo a solução exata na equação diferencial, obteve-se o termo fonte  $\psi(x, y, z)$  correspondente. O referido termo fonte foi obtido com auxílio de um software de matemática simbólica e incorporado diretamente ao código em C++ implementado para obter a solução numérica. Além disso, os valores prescritos como condição de Dirichlet no contorno do domínio, para a obtenção da solução numérica, foram determinados a partir da própria solução exata.



**Figura 6.21** – Problema 1-B.

Da mesma forma que no problema 1-A, foram consideradas sequências de malhas progressivamente refinadas para analisar a convergência das três normas,  $\epsilon_P$ ,  $\epsilon_{\nabla P}$  e  $\epsilon_q$ . No entanto, neste caso unicamente foram empregadas malhas regulares, sem nenhuma distorção, a fim de isolar o efeito da anisotropia do tensor  $\mathbf{K}$ . Os resultados obtidos são apresentados nas figuras 6.22, 6.23 e 6.24. Nos gráficos são comparadas as normas dos erros nas malhas regulares de hexaedros, tetraedros, prismas e pirâmides, e também nas malhas híbridas empregadas no problema anterior.

No caso da norma do erro associado à pressão, nas malhas regulares novamente observa-se convergência de segunda ordem. Já nas malhas híbridas, a taxa de convergência é menor, embora os valores da norma do erro não sejam muito diferentes do que nas outras malhas. No caso das normas dos erros relativos ao gradiente e aos fluxos, as taxas de convergência encontram-se em quase todos os casos próximas de primeira ordem. A exceção é o caso da norma dos fluxos nas malhas híbridas, que apresenta uma taxa de convergência ligeiramente maior.

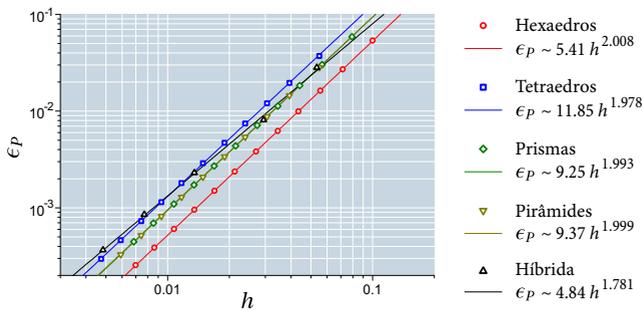


Figura 6.22 – Convergência da pressão no problema 1-B em malhas de diferente topologia.

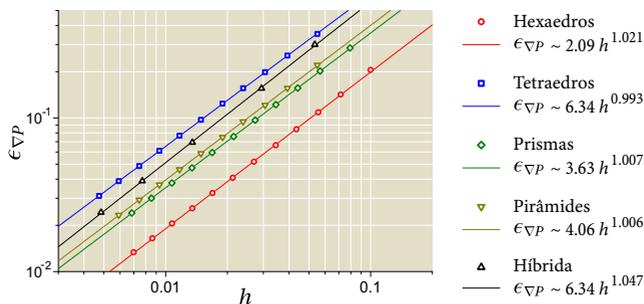


Figura 6.23 – Convergência do gradiente da pressão no problema 1-B em malhas de diferente topologia.

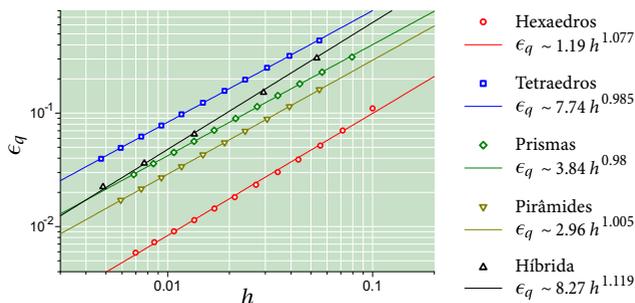
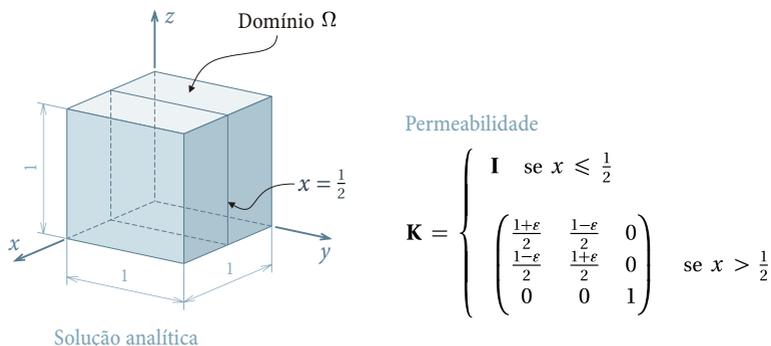


Figura 6.24 – Convergência dos fluxos no problema 1-B em malhas de diferente topologia.

### 6.1.3 Problema 1-C

No problema 1-C considera-se um tensor permeabilidade descontínuo. Conforme mostra a figura 6.25, a descontinuidade se encontra localizada no plano  $x = \frac{1}{2}$ , que divide o domínio em duas regiões.<sup>5</sup> Para  $x \leq \frac{1}{2}$  a permeabilidade é dada pelo tensor identidade, enquanto que na outra região é dada por um tensor com duas direções principais rotacionadas  $45^\circ$  em relação aos eixos  $x$  e  $y$ , e a terceira coincidente com o eixo  $z$ . Os autovalores desse tensor são  $\{1, \varepsilon, 1\}$ , sendo  $\varepsilon$  um parâmetro que permite controlar o nível de anisotropia na região  $x > \frac{1}{2}$ . Nos resultados apresentados nesta seção considerou-se  $\varepsilon = 10^{-4}$ .



Solução analítica

$$P = \begin{cases} \frac{1}{2} \left(x - \frac{1}{2}\right) \left[ (1 + \varepsilon) \sin y + (1 - \varepsilon) \cos y \right] + \sin y + z & \text{se } x \leq \frac{1}{2} \\ e^{x - \frac{1}{2}} \sin y + z & \text{se } x > \frac{1}{2} \end{cases}$$

Figura 6.25 – Problema 1-C.

A solução analítica considerada para o problema, especificada na figura 6.25, satisfaz a condição de fluxo contínuo através da superfície de descontinuidade, como requerido na equação diferencial (6.1). A densidade de fluxo nessa superfície é dada por

$$-\mathbf{K}\nabla P \cdot \mathbf{u}_n \Big|_{x=\frac{1}{2}} = -\frac{1}{2} \left[ (1 + \varepsilon) \sin y + (1 - \varepsilon) \cos y \right], \quad (6.11)$$

<sup>5</sup> O problema 1-C é uma generalização do problema 4.4 apresentado na referência [32].

em que  $\mathbf{u}_n = (1, 0, 0)$  é o vetor unitário normal à superfície  $x = \frac{1}{2}$ .

Mediante substituição da solução analítica na equação diferencial (6.1), determina-se o termo fonte correspondente, o qual é dado por

$$\psi = \begin{cases} \frac{1}{2} \left(x - \frac{1}{2}\right) \left[ (1 + \varepsilon) \sin y + (1 - \varepsilon) \cos y \right] + \sin y & \text{se } x \leq \frac{1}{2} \\ -(1 - \varepsilon) e^{x - \frac{1}{2}} \cos y & \text{se } x > \frac{1}{2}. \end{cases} \quad (6.12)$$

Como nos problemas anteriores, para o problema 1-C são apresentados a seguir resultados da convergência das normas dos erros  $\epsilon_p$ ,  $\epsilon_{\nabla p}$  e  $\epsilon_q$ . Esses resultados encontram-se nos gráficos das figuras 6.26, 6.27 e 6.28, respectivamente. Para a obtenção das soluções numéricas, os valores prescritos no contorno como condição de Dirichlet foram determinados a partir da solução analítica do problema.

No problema 1-C somente foram consideradas as sequências de malhas regulares de hexaedros, tetraedros, prismas e pirâmides, utilizadas para os problemas anteriores. Neste caso, os valores observados para as taxas de convergência coincidem quase exatamente com os valores teóricos, independentemente da topologia dos elementos da malha. Isto é, segunda ordem para os erros na pressão, e primeira ordem para os erros no gradiente e nos fluxos. Apesar dessa regularidade nas taxas de convergência, observa-se diferenças pronunciadas nos valores das normas dos erros para diferentes tipos de elementos considerados.

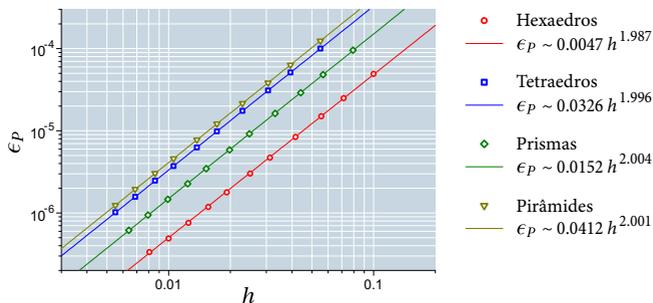
## 6.2 Problema 2: advecção não-linear

Nesta seção é considerado o problema de advecção descrito pela equação

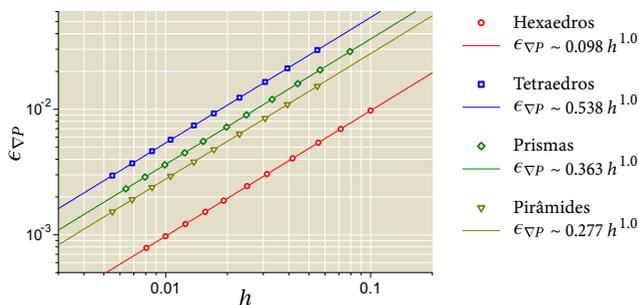
$$\frac{\partial s}{\partial t} + \nabla \cdot (F_w \mathbf{v}) = 0 \text{ em } \Omega, \quad (6.13)$$

em que  $F_w(s)$  é uma função não-linear e  $\mathbf{v}$  é o vetor velocidade. No problema considerado, o domínio  $\Omega$  é o cubo unitário  $0 \leq x \leq 1$ ;  $0 \leq y \leq 1$ ;  $0 \leq z \leq 1$ .

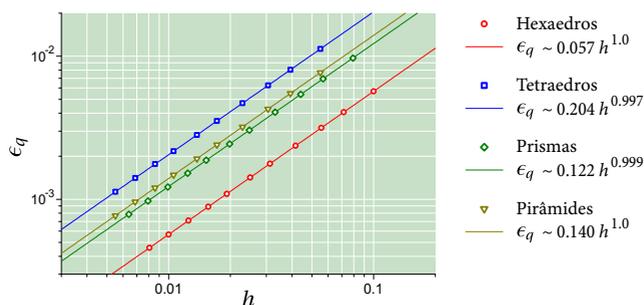
A equação (6.13) é uma forma simplificada da equação da saturação, que forma parte do modelo de deslocamento bifásico descrito no capítulo 5. No caso mais simples, em que o vetor  $\mathbf{v}$  é constante, é possível obter uma solução analítica exata para a equação (6.13). Com auxílio dessa solução é



**Figura 6.26** – Convergência da pressão no problema 1-C em malhas de diferentes topologias.



**Figura 6.27** – Convergência do gradiente da pressão no problema 1-C em malhas de diferentes topologias.



**Figura 6.28** – Convergência dos fluxos no problema 1-C em malhas de diferentes topologias.

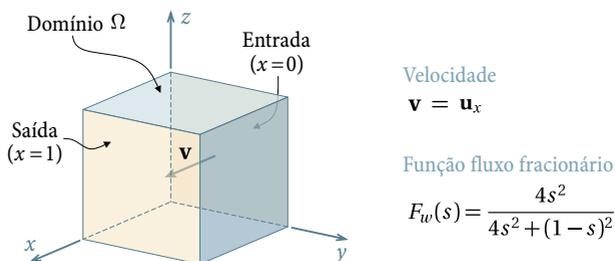
possível analisar a convergência de soluções numéricas para o problema advectivo, de forma semelhante ao feito nos problemas de difusão apresentados anteriormente.

Conforme mostra a figura 6.29, para os experimentos numéricos foi estipulada uma velocidade igual a  $\mathbf{u}_x$ , isto é, uma velocidade unitária na direção  $x$ . Isso implica que o deslocamento acontece somente nessa direção. A superfície de entrada do escoamento é o plano  $x = 0$  e a superfície de saída o plano  $x = 1$ . As outras superfícies de contorno não são atravessadas pelos fluidos. A condição de contorno na superfície de entrada é estipulada como

$$s = 1 \text{ em } x = 0; t > 0. \quad (6.14)$$

Para completar a especificação do problema, prescreve-se a condição inicial

$$s = 0 \text{ em } \Omega; t = 0. \quad (6.15)$$

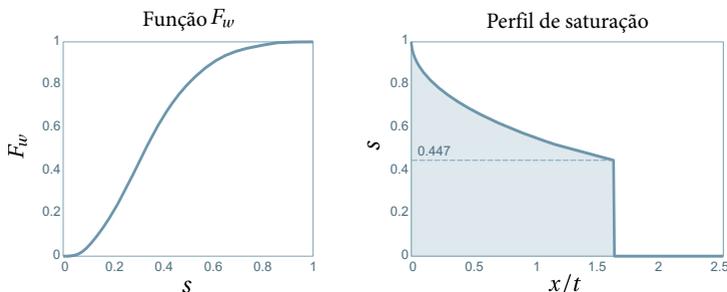


**Figura 6.29** – Problema 2.

O problema especificado é uma descrição simplificada de um processo de deslocamento água-óleo. O óleo, que inicialmente preenche o domínio, é deslocado gradualmente pela água que ingressa por  $x = 0$ . A equação diferencial considerada ignora qualquer influência da gravidade, da pressão capilar ou da compressibilidade. Unicamente com essas simplificações é possível determinar uma solução analítica simples para o problema, a denominada solução de Buckley-Leverett [16].

Na descrição matemática do problema, a forma em que a água desloca o óleo durante o processo depende da função fluxo fracionário. Para os experimentos numéricos foi considerada a função indicada na figura

6.29, a qual corresponde às curvas de permeabilidade relativa dadas por  $k_{rw} = s^2$  e  $k_{ro} = (1 - s)^2$ , e uma razão de viscosidades  $\mu_o/\mu_w = 4$ . A figura 6.30 mostra a representação gráfica da função fluxo fracionário considerada.



**Figura 6.30** – Função fluxo fracionário e perfil de saturação analítico para o problema 2.

A equação 6.13 pode ser transformada em uma equação diferencial ordinária, introduzindo a nova variável independente  $v = x/t$ . Portanto, a solução da equação é auto-similar, ou seja, apesar de evoluir no tempo, seu formato geométrico permanece inalterado. A representação da solução analítica para o problema 2, em relação à variável independente  $x/t$ , é mostrada também na figura 6.30. Para o tipo de problema físico considerado, essa curva é usualmente denominada perfil de saturação. A referida solução analítica foi obtida segundo o procedimento descrito em [4]. Note-se que o perfil apresenta uma descontinuidade, a qual é típica em equações hiperbólicas não-lineares como a equação 6.13.

A fim de analisar a convergência de soluções numéricas para o problema 2, considerou-se a norma  $L_1$  do erro na aproximação discreta do campo de saturação. Essa norma, mais adequada para soluções que apresentam descontinuidades [44, 85], é dada por

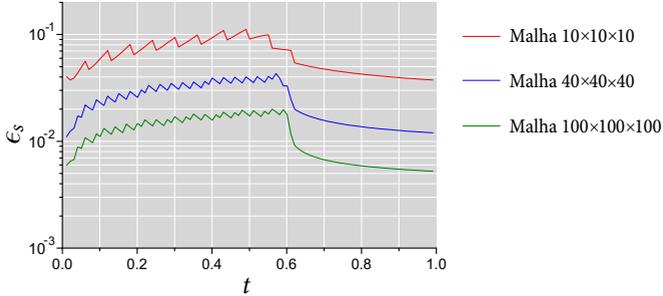
$$\epsilon_s = \sum_{p \in \mathcal{M}} |s(x_p, y_p, z_p) - \check{s}_p| \Delta V_p. \quad (6.16)$$

Note-se que neste caso não é considerada nenhuma normalização, pois os valores da saturação estão restritos sempre ao intervalo  $[0, 1]$ .

Para a obtenção das soluções numéricas, empregou-se uma implementação simplificada da formulação de escoamento bifásico apresentada no capítulo 5. Considerou-se um esquema explícito para o avanço da solução no tempo, além de interpolação *upwind* de um ponto para aproximar o fluxo fracionário nas faces dos volumes de controle. A condição de contorno dada na equação (6.14) não foi implementada como condição de Dirichlet, isto é, não se forçou que os valores nodais na fronteira de entrada adquiram o valor  $s = 1$ . Em vez disso, como é costumeiro em formulações de volumes finitos, introduziu-se esse valor na equação de balanço para os volumes adjacentes, como parte do fluxo advectivo ingressando pelas faces coincidentes com a fronteira. O fluxo através de uma dessas faces é dado por  $(F_w|_{s=1})\mathbf{v} \cdot \Delta\mathbf{S}_{bf}$ , no entanto, como  $F_w|_{s=1} = 1$ , o fluxo prescrito se reduz a  $\mathbf{v} \cdot \Delta\mathbf{S}_{bf}$ .

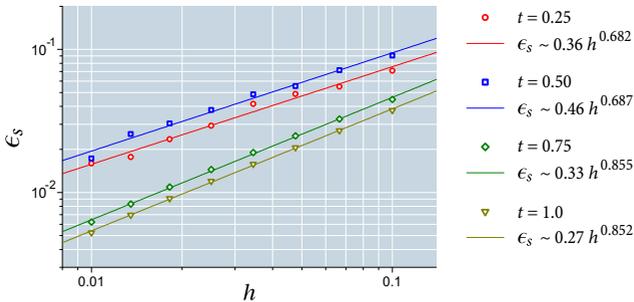
Uma dificuldade adicional para a análise de convergência no problema 2 é a dependência da solução com o tempo. Entretanto, o propósito principal da análise é verificar a convergência da solução numérica ao refinar progressivamente as malhas. Como uma forma de isolar o efeito do refinamento espacial, o passo de tempo foi mantido fixo durante todo o processo transiente e para todas as malhas. O valor do passo de tempo utilizado foi  $\Delta t = 0.001$ , o qual satisfaz o critério CFL em todas as malhas consideradas nos testes.

A fim de se obter uma percepção inicial do comportamento da norma do erro da saturação, a figura 6.31 mostra a variação dessa norma com o tempo, para soluções em três malhas estruturadas igualmente espaçadas, formadas por elementos hexaédricos. Segundo se observa, as curvas apresentam um crescimento oscilatório na parte inicial. Uma vez que na equação (6.16) apenas são considerados valores discretos da solução analítica, a posição exata da descontinuidade nessa solução, em um dado instante de tempo, não pode ser percebida pela norma considerada. Além disso, a maior parte dos erros se concentram na vizinhança da descontinuidade. Essas duas particularidades explicam o comportamento oscilatório na parte inicial das curvas. Ao redor de  $t = 0.6$ , a descontinuidade abandona o domínio e a partir desse instante observa-se uma redução nos valores da norma do erro. Uma vez que, como já mencionado, o erro encontra-se concentrado principalmente em torno a descontinuidade, grande parte dele é advectado para fora do domínio quando a descontinuidade atravessa a fronteira de saída.



**Figura 6.31** – Variação temporal da norma do erro na saturação no problema 2, para três malhas de hexaedros regulares.

No intuito de analisar a taxa de convergência das soluções numéricas, foram selecionados quatro instantes de tempo:  $t = \{0.25, 0.5, 0.75, 1\}$ . Nos dois primeiros, a descontinuidade se encontra ainda no interior do domínio, enquanto que nos dois últimos, ela já atravessou a fronteira de saída. Os valores determinados para a norma do erro, em malhas hexaédricas regulares, encontram-se representados na figura 6.32, versus o tamanho representativo dos elementos. Da mesma forma que para os problemas difusivos, os gráficos incluem ajustes dos valores obtidos a expressões da forma  $\epsilon_s = ah^b$ .

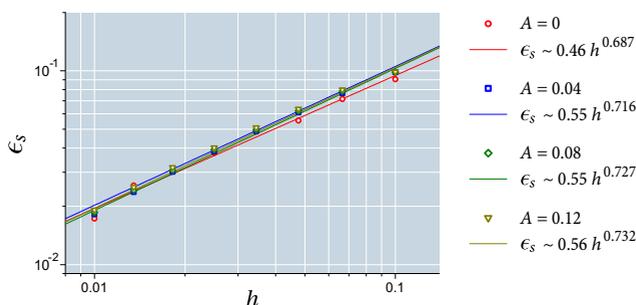


**Figura 6.32** – Convergência do erro da saturação em 4 instantes de tempo, para malhas hexaédricas regulares.

Para  $t = 0.25$  e  $t = 0.5$ , a taxa de convergência observada é de aproximadamente 0.68. Este valor é inferior à taxa de primeira ordem que seria

esperada para uma formulação em que é utilizada interpolação *upwind*, cuja acurácia é formalmente de primeira ordem [78]. Entretanto, a partir de considerações teóricas é possível mostrar que, em presença de descontinuidades, a ordem de acurácia de um esquema numérico de primeira ordem pode ser reduzida à metade [85]. Para os outros dois instantes de tempo considerados,  $t = 0.75$  e  $t = 1$ , a taxa de convergência observada é de aproximadamente 0.85 em ambos os casos. Como para esses tempos não há mais descontinuidade no domínio, a solução é suave e, portanto, era de se esperar uma taxa de convergência mais próxima de 1. Porém, em nenhum dos muitos casos testados, inclusive com perfis de saturação sem qualquer descontinuidade, obtiveram-se valores da taxa de convergência maiores aos apresentados aqui.

A seguir são apresentados resultados com malhas distorcidas de elementos hexaédricos, do tipo considerado anteriormente nos problemas de difusão. A convergência da norma do erro para essas malhas, no instante  $t = 0.5$ , encontra-se representada na figura 6.33. Nota-se pouca influência da distorção das malhas sobre a forma como o valor da norma do erro é reduzida. Os valores da taxa de convergência obtidos nos ajustes para as malhas distorcidas é ligeiramente maior que no caso da malha regular. Apesar disso, os valores da norma dos erros para essas malhas são ainda levemente maiores do que na malha regular.



**Figura 6.33** – Convergência do erro da saturação em  $t = 0.5$ , para malhas hexaédricas apresentando diferente amplitude de distorção.

A fim de se obter uma visão alternativa da influência da distorção das malhas sobre a solução numérica, na figura 6.34 são comparados os

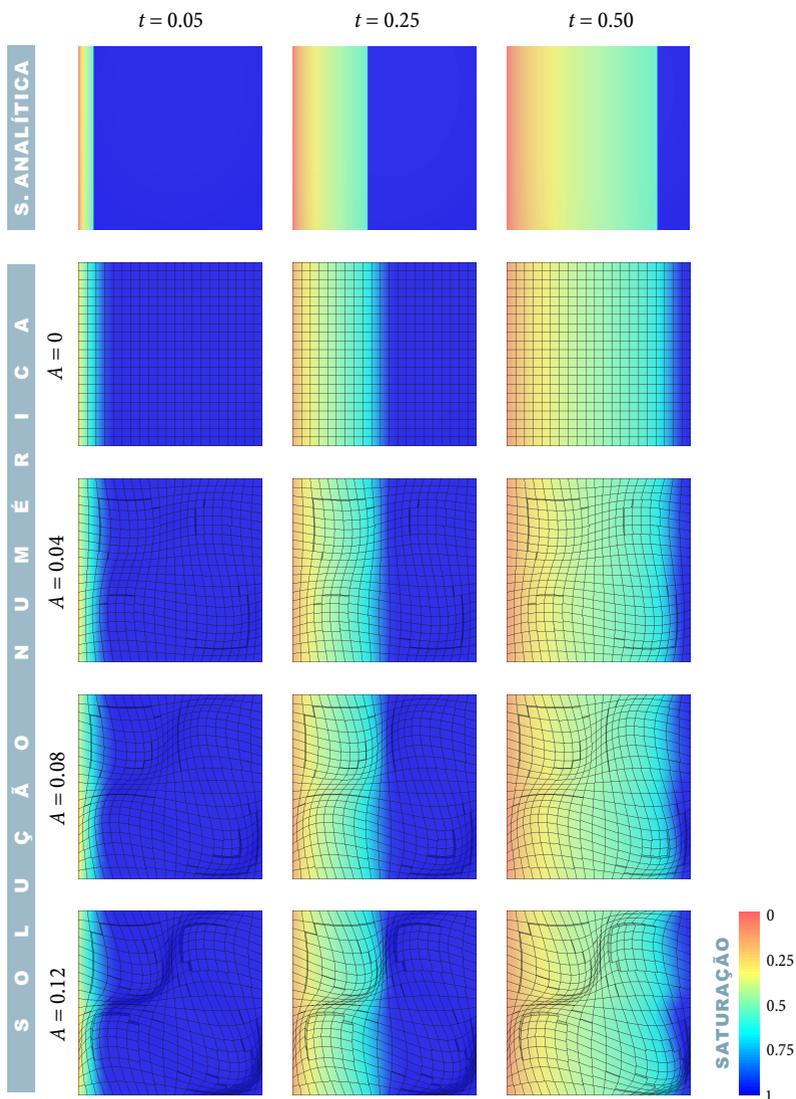
campos de saturação correspondentes à solução analítica e às soluções numéricas nas malhas com distorção. Os campos para as soluções numéricas correspondem, de forma aproximada, ao plano  $y = 0.25$  das malhas de  $21 \times 21 \times 21$  elementos hexaédricos. Esse é um dos planos em que a distorção das malhas é máxima.

Uma das primeiras particularidades a ser notada na figura 6.34 é o aparente adiantamento da descontinuidade nas soluções numéricas. Em realidade, devido ao caráter difusivo dos erros, a descontinuidade encontra-se espalhada em uma espessura equivalente a dois ou três elementos. Isso causa uma leve variação da saturação diante do que seria a posição exata da descontinuidade, dando a impressão de ser a própria descontinuidade na solução numérica. Por outro lado, a deformação da geometria da descontinuidade não é tão severa quanto a deformação da malha. Devido ao caráter senoidal da distorção das malhas, a deformação da descontinuidade adquire também formato senoidal. Provavelmente por causa disso é que erros adicionais no campo de saturação se cancelam e, como resultado, não há um incremento apreciável na norma do erro para as malhas distorcidas.

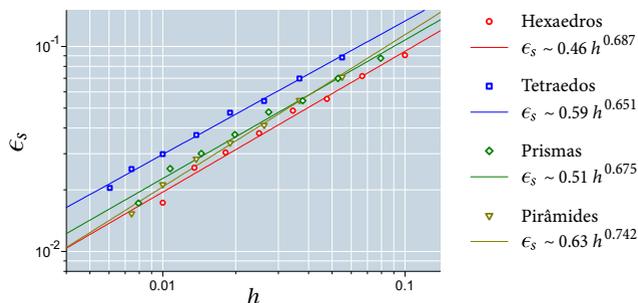
Para finalizar a apresentação de resultados relativos ao problema 2, na figura 6.35 é comparada a convergência do erro da saturação para malhas formadas por outros tipos de elementos. Os resultados correspondem ao instante  $t = 0.5$ , para malhas regulares de hexaedros, tetraedros, prismas e pirâmides. Em cada um desses tipos de malhas, a taxa de convergência observada é similar à previamente obtida para o problema 2.

### 6.3 Verificação do modelo de poço

Na seção 5.5 foi apresentado um modelo de poço adequado para uso em malhas não-estruturadas. Nesta seção procura-se verificar essa abordagem, mediante comparação de resultados obtidos utilizando o modelo com resultados de uma solução de referência. Infelizmente não foi possível encontrar uma situação para a qual seja possível determinar uma solução exata para um problema envolvendo um poço. A situação na qual é factível obter uma solução analítica para o escoamento em torno a um poço já é empregada como parte do procedimento de determinação dos índices de poço, portanto, não é adequada para verificar o modelo. Considerou-se como solução de referência, por tal razão, uma solução numérica em



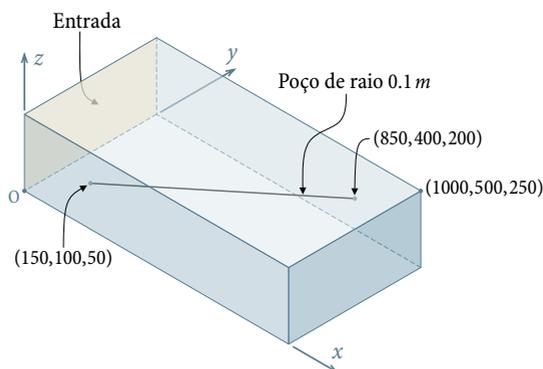
**Figura 6.34** – Campos de saturação no plano  $y = 0.25$  correspondentes à solução analítica e a soluções numéricas obtidas em malhas com diferentes amplitudes de distorção.



**Figura 6.35** – Convergência do erro da saturação em  $t = 0.5$ , para malhas regulares de diferentes topologias.

uma malha extremamente refinada na vizinhança do poço, com a qual é possível dispensar o uso de um modelo de poço.

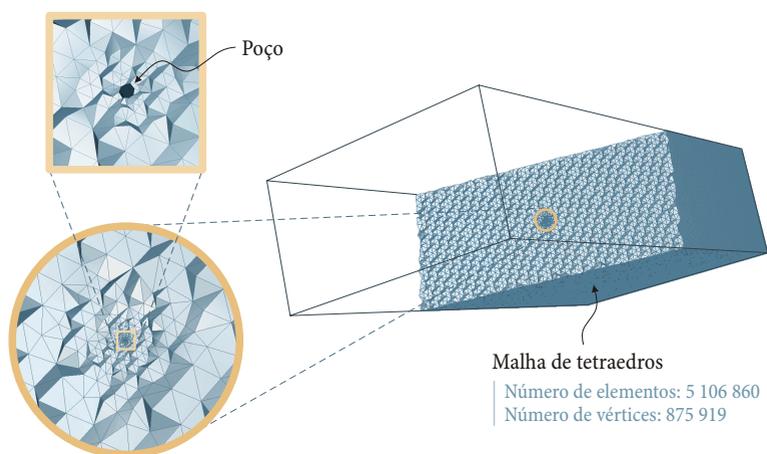
A geometria dos problemas considerados está especificada na figura 6.36. Trata-se de um domínio paralelepípedo que contém um poço reto de raio 0.1 m, inclinado em relação às fronteiras.<sup>6</sup> Em todos os problemas apresentados a seguir, o escoamento ingressa ao domínio pela fronteira  $x = 0$  e o abandona através do poço. Todas as restantes fronteiras são consideradas impermeáveis.



**Figura 6.36** – Geometria do domínio e do poço.

<sup>6</sup> Todas as coordenadas indicadas na figura 6.36, as quais determinam a geometria do problema, estão em metros.

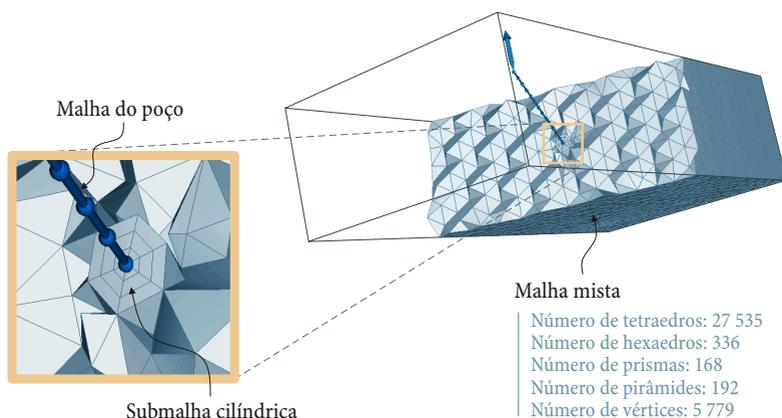
Duas malhas não-estruturadas foram empregadas para os experimentos numéricos nesta seção. A primeira malha, denominada malha M-1, é utilizada para obter a solução de referência. Nela, a superfície do poço, isto é, a interface entre o poço e o meio circundante, é discretizada com elementos de contorno triangulares. No modelo numérico para a solução de referência, portanto, essa superfície é considerada como uma fronteira do domínio. Conforme ilustra a figura 6.37, a malha volumétrica está formada exclusivamente por elementos tetraédricos. Dado que o raio do poço é várias ordens de grandeza menor que as dimensões do domínio, foi necessário considerar uma redução gradual do tamanho dos elementos até a superfície do poço, conforme mostra a referida figura. Esse refinamento permite discretizar adequadamente a superfície do poço e captar com suficiente precisão na solução numérica o forte gradiente de pressão adjacente ao poço. Entretanto, esse tratamento exige um número desproporcional de elementos em relação a magnitude do problema considerado, mais de 5 milhões de elementos, como indica a figura 6.37.



**Figura 6.37** – Malha M-1: superfície do poço discretizada com elementos de contorno triangulares.

A segunda malha considerada é a malha M-2, mostrada na figura 6.38. Nesta malha o poço é representado de forma discreta como uma sequência

de elementos unidimensionais. Ao redor do poço, a malha volumétrica possui formato cilíndrico, como mostrado no detalhe da figura 6.38, com uma camada de prismas e duas camadas de hexaedros. A porção restante do domínio é discretizada com elementos tetraédricos, além de alguns elementos piramidais na região de transição. Note-se que o número total de elementos e o número de vértices na malha M-2 são duas ordens de grandeza menores que na malha M-1.



**Figura 6.38** – Malha M-2: poço discretizado com elementos de poço unidimensionais.

No domínio mostrado na figura 6.36 foram resolvidos três problemas de escoamento monofásico incompressível em regime estacionário. A equação diferencial considerada para descrever tal tipo de escoamento é

$$-\nabla \cdot \frac{\mathbf{K}}{\mu} \nabla P = 0, \quad (6.17)$$

que provém da substituição da velocidade de Darcy na equação de conservação de massa, a qual, para o caso considerado, reduz-se a  $\nabla \cdot \mathbf{v} = 0$ . Para simplificar ainda mais a análise, desconsiderou-se também a influência da gravidade sobre o escoamento.

A especificação matemática do problema é completada pelas condições de contorno

$$P = 1000 \text{ bar em } x = 0, \quad (6.18)$$

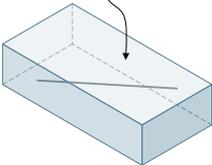
$$P = 1 \text{ bar em } \partial\Omega_W, \quad (6.19)$$

onde  $\partial\Omega_W$  é a superfície do poço. Conforme mencionado previamente, as restantes fronteiras do domínio são consideradas impermeáveis.

A rigor, a condição (6.19) somente é considerada quando o problema é resolvido numericamente na malha M-1. Quando a solução é obtida na malha M-2, emprega-se o modelo de poço, definido pela equação (5.49). Nessa equação considera-se  $\Pi = 1 \text{ bar}$  ao longo de todo o poço, isto é, o mesmo valor de pressão considerado na malha M-1 como pressão na superfície do poço. Os valores dos índices de poço para todos os volumes de controle em contato com o poço são determinados segundo o procedimento descrito na seção 5.5.

A seguir são apresentados resultados de três casos, os quais diferem no tensor permeabilidade, o qual é uniforme em todo o domínio. Na figura 6.39 estão especificados os tensores permeabilidade considerados. Nos três casos o valor da viscosidade do fluido é  $10^{-3} \text{ Pa}\cdot\text{s}$ .

Meio homogêneo de permeabilidade  $\mathbf{K}$



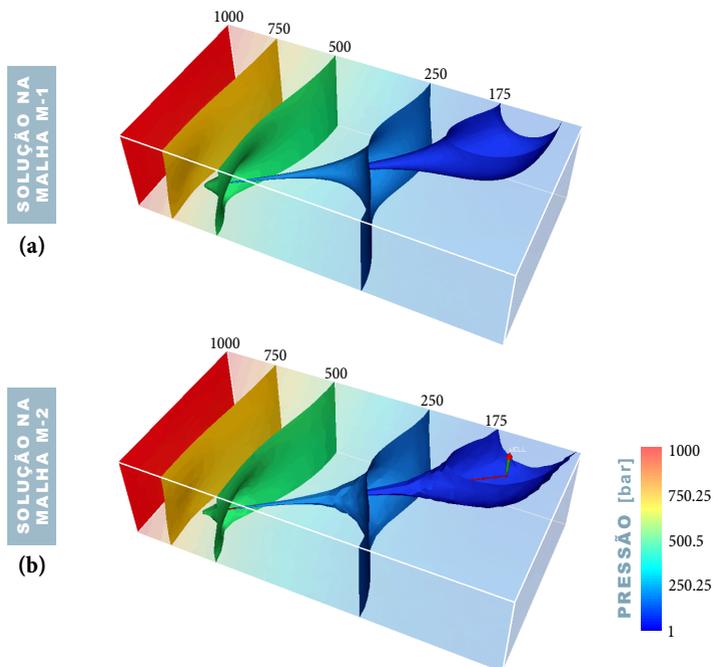
	$\mathbf{K} [m^2]$
Problema 3-A	$10^{-13} \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ & 1 & 0 \\ & & 1 \end{pmatrix}$
Problema 3-B	$10^{-13} \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ & 1 & 0 \\ & & 0.1 \end{pmatrix}$
Problema 3-C	$10^{-13} \begin{pmatrix} 0.0786 & -0.0343 & -0.0171 \\ & 0.2251 & -0.3874 \\ & & 0.8063 \end{pmatrix}$

**Figura 6.39** – Tensor permeabilidade para os problemas 3-A, 3-B e 3-C.

### 6.3.1 Problema 3-A

No problema 3-A, a permeabilidade é um tensor esférico e o meio poroso é, portanto, isotrópico. Os campos de pressão obtidos nas malhas M-1 e M-2 são comparados na figura 6.40. Os gráficos mostram a variação do campo nas fronteiras externas, assim como algumas superfícies de valor constante ou isosuperfícies. Observa-se uma proximidade notável no formato das

isosuperfícies, considerando que a malha M-2 é muito mais grosseira do que a malha M-1. As isosuperfícies apresentam um formato aguçado na vizinhança do poço por causa do elevado gradiente nessa região.



**Figura 6.40** – Comparação dos campos de pressão para o problema 3-A resolvido nas malhas M-1 e M-2.

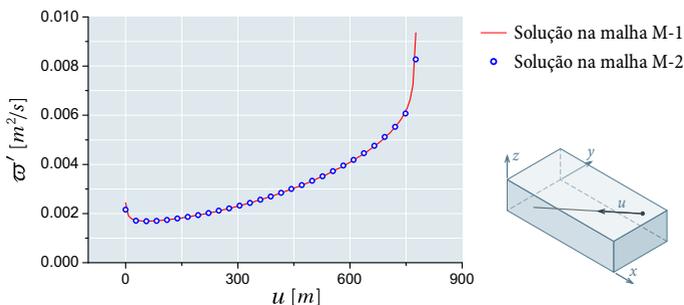
No problema especificado, o valor de pressão na interface entre poço e reservatório é mantido constante ao longo do poço. Nessa circunstância, o resultado relevante para o poço é a vazão. A vazão que ingressa em um poço não é uniforme e, em geral, apresenta variação significativa ao longo do seu comprimento. Se  $u$  for a coordenada ao longo do poço, a vazão total que abandona o reservatório pelo poço será dada por

$$\varpi_w = \int_w \varpi' du, \quad (6.20)$$

em que a derivada  $\varpi' = d\varpi/du$  pode ser aproximada, no problema discreto, por

$$\varpi' \approx \varpi_p / \Delta u_p. \tag{6.21}$$

Esta aproximação é adequada para a solução na malha M-2, sendo  $\varpi_p$  a vazão para um volume de controle associado ao poço e  $\Delta u_p$  a dimensão desse volume na direção axial do poço. A figura 6.41 apresenta a variação de  $\varpi'$  ao longo do poço no problema 3-A, determinada em ambas as malhas. Para determinar os valores na malha M-1, a superfície do poço foi dividida em 100 fatias do mesmo comprimento, somaram-se os valores da vazões através de todos os elementos de contorno em cada fatia e o resultado foi dividido pelo comprimento da respectiva fatia. Conforme se pode observar na figura 6.41, a concordância entre os resultados em ambas as malhas é notável, tanto na variação de  $\varpi'$ , quanto no valor total da vazão.



	Vazão total $\varpi_w$ [ $m^3/s$ ]	
Malha M-1	2.422	
Malha M-2	2.428	Erro: 0.2%

**Figura 6.41** – Comparação dos resultados de vazão no poço para o problema 3-A.

### 6.3.2 Problema 3-B

No problema 3-B, as direções principais do tensor  $\mathbf{K}$  coincidem com as direções coordenadas, entretanto, a permeabilidade na direção  $z$  é um décimo da permeabilidade nas outras direções. As figuras 6.42 e 6.43 apresentam os resultados correspondentes a este problema.

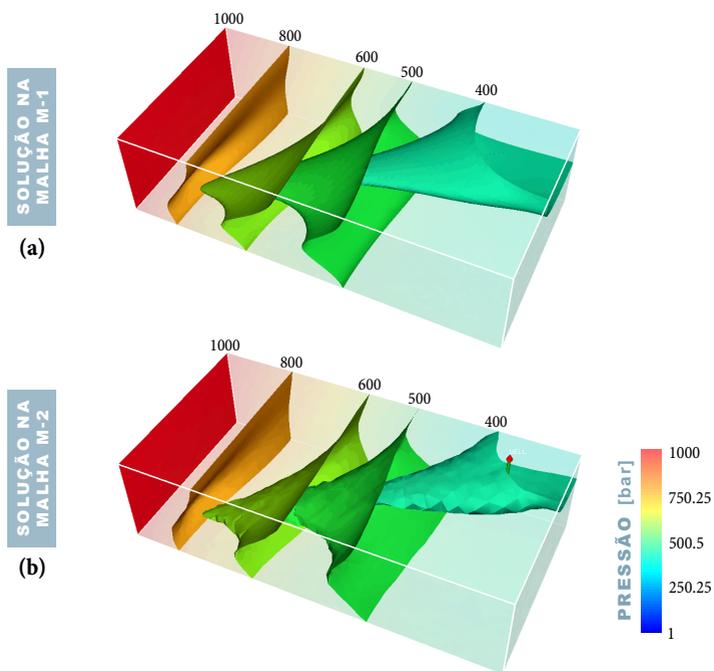
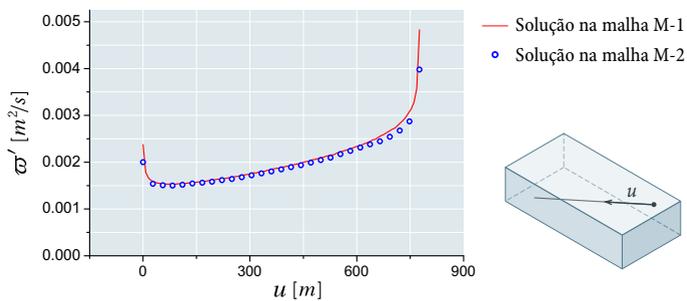


Figura 6.42 – Comparação dos campos de pressão para o problema 3-B resolvido nas malhas M-1 e M-2.



	Vazão total $\varpi_w$ [ $m^3/s$ ]	
Malha M-1	1.217	
Malha M-2	1.146	Erro: 5.8%

Figura 6.43 – Comparação dos resultados de vazão no poço para o problema 3-B.

Conforme se pode evidenciar na figura 6.42, as isosuperfícies apresentam um formato achatado na direção  $z$ , pelo fato da permeabilidade ser menor nessa direção. Em geral, em problemas como o resolvido, a componente maior do gradiente de pressão está orientada na direção da menor permeabilidade e, portanto, as isosuperfícies tendem a ser perpendiculares a essa direção.

Dos três problemas considerados aqui para verificar o modelo de poço, o problema 3-B é o que maior discrepância apresenta entre os resultados nas malhas M-1 e M-2. Isso é mais evidente nos resultados da vazão no poço, mostrados na figura 6.43. A causa mais provável para essa discrepância encontra-se no procedimento de determinação dos índices de poço. Quando o problema numérico é resolvido em uma porção de malha ao redor de um elemento de poço, como a ilustrada na figura 5.7, assume-se que a vazão pelas fronteiras transversais é desprezível. Essa hipótese é aceitável quando o meio for isotrópico, situação em que o escoamento será radial na vizinhança imediata do poço e, portanto, o gradiente de pressão apontará sempre na direção radial. Em um meio anisotrópico, no entanto, pode existir uma componente importante do gradiente na direção axial, pelo fato comentado previamente do gradiente tender a orientar-se na direção de menor permeabilidade. A omissão da vazão axial induzida por essa componente pode estar causando um desvio no valor dos índices de poço calculados, o qual, por sua vez, estaria provocando a maior discrepância observada no problema 3-B.

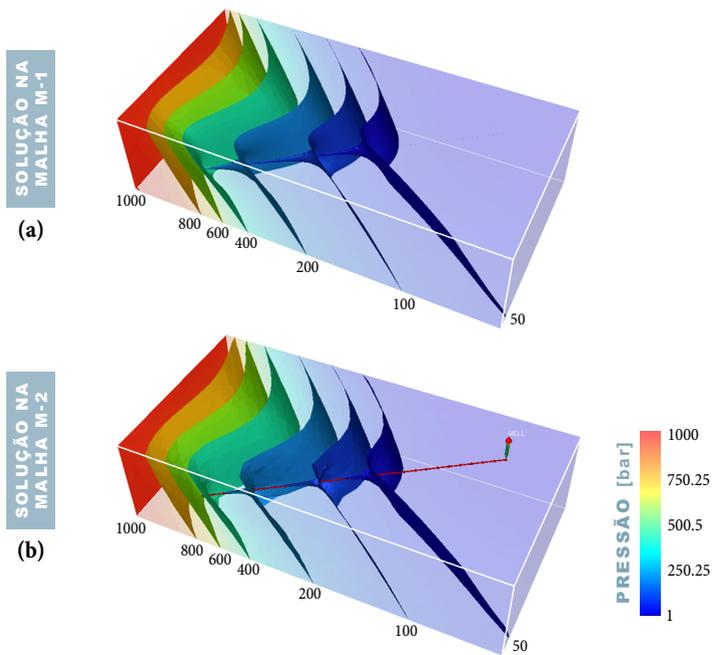
### 6.3.3 Problema 3-C

A permeabilidade especificada para o problema 3-C é dada por um tensor cheio, isto é, um tensor com todas as componentes não-nulas. Os valores principais do tensor são  $10^{-14}$ ,  $10^{-13}$  e  $10^{-15} m^2$ , associados aos autovalores  $(0.873, -0.436, -0.218)$ ,  $(0, -0.447, 0.894)$  e  $(-0.488, -0.781, -0.390)$ , respectivamente. Os resultados relevantes para este problema estão resumidos nas figuras 6.44 e 6.45.

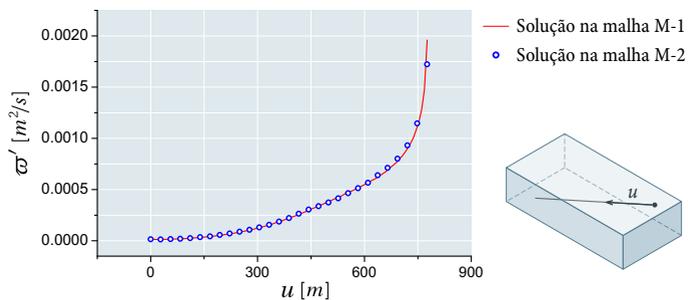
Uma das características destacáveis dos resultados do problema 3-C é a vazão quase nula na porção inicial do poço.<sup>7</sup> Como se pode deduzir da figura 6.44, a maior variação da pressão está concentrada na região

---

<sup>7</sup> Inicial em relação à coordenada  $u$  que, como mostrado na figura 6.45, tem sua origem no topo do poço.



**Figura 6.44** – Comparação dos campos de pressão para o problema 3-C resolvido nas malhas M-1 e M-2.



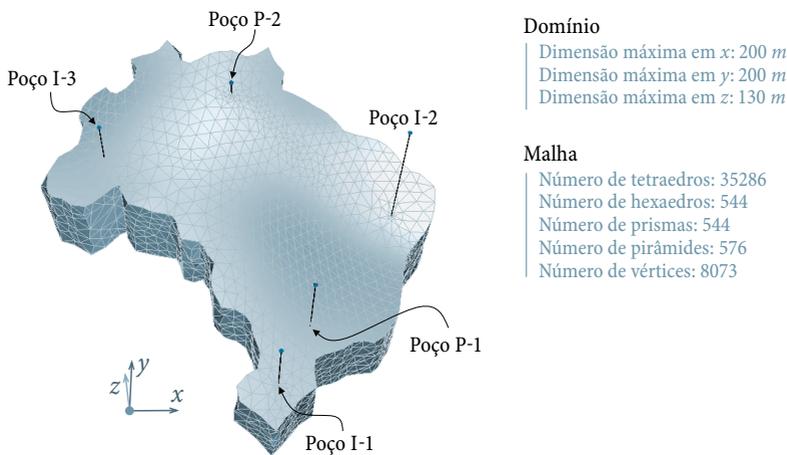
	Vazão total $\varpi_w$ [ $m^3/s$ ]	
Malha M-1	0.2586	
Malha M-2	0.2636	Erro: 1.9%

**Figura 6.45** – Comparação dos resultados de vazão no poço para o problema 3-C.

próxima à fronteira de entrada. No outro extremo do domínio, a pressão é praticamente constante, o que implica um gradiente nulo nessa região. A vazão nula na parte superior do poço é concordante com essa distribuição espacial da pressão. Por outro lado, é possível observar que as isosuperfícies de pressão tendem a se posicionar perpendicularmente ao autovetor  $(-0.488, -0.781, -0.390)$ , o qual está associado ao menor autovalor do tensor permeabilidade.

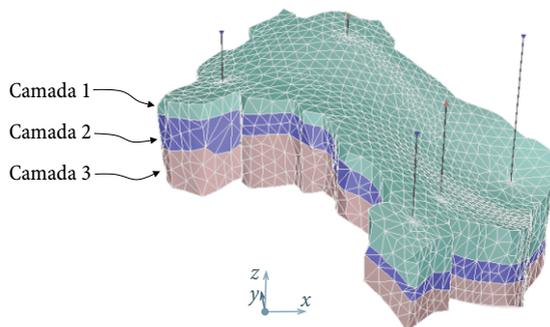
## 6.4 Problema 4: deslocamento bifásico

Para finalizar este capítulo são apresentados alguns resultados correspondentes a um problema em que o escoamento é descrito pelo modelo de deslocamento bifásico apresentado no capítulo 5. Trata-se do processo de recuperação secundária de óleo em um reservatório tridimensional, no qual existem três poços injetores e dois poços produtores. Um esboço da geometria e da malha considerada é mostrado na figura 6.46.



**Figura 6.46** – Malha não-estruturada para o problema 4.

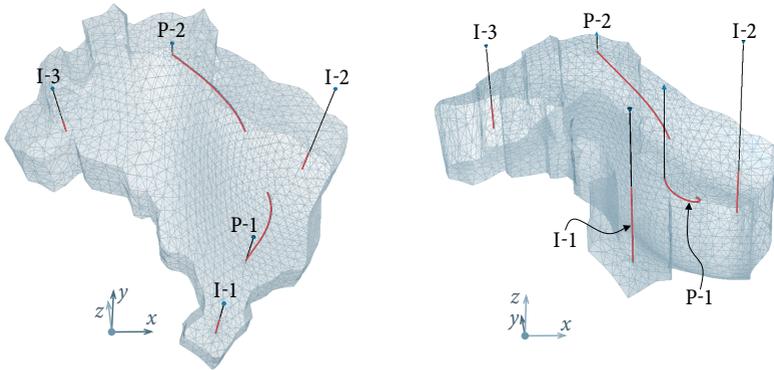
O reservatório possui três camadas de diferentes rochas, as quais apresentam propriedades físicas diferentes. A geometria das camadas e os valores das propriedades correspondentes são apresentados na figura 6.47.



	$\phi$	$\mathbf{K} [m^2]$
Camada 1	0.15	$10^{-15} \begin{pmatrix} 77.5 & 13.0 & 36.7 \\ & 92.5 & 21.2 \\ & & 40.0 \end{pmatrix}$
Camada 2	0.13	$10^{-14} \begin{pmatrix} 17.5 & -10.0 & -8.2 \\ & 5.9 & 4.7 \\ & & 16.7 \end{pmatrix}$
Camada 3	0.18	$10^{-14} \begin{pmatrix} 22.6 & -12.8 & 12.2 \\ & 7.8 & -7.1 \\ & & 40.0 \end{pmatrix}$

**Figura 6.47** – Propriedades físicas associadas às camadas do reservatório no problema 4.

Os três poços injetores são poços verticais que atravessam integralmente a espessura do reservatório. Já os dois poços produtores são poços direcionais, cuja geometria é mostrada de forma esquemática na figura 6.48. Conforme indicado nessa figura, a vazão de água injetada em todos os poços injetores é de  $0.005 \text{ m}^3/\text{s}$ . Por outro lado, a pressão de referência para ambos os poços produtores é de  $10 \text{ bar}$ . Para o problema considerado, essa pressão corresponde à pressão interna na seção onde cada poço atravessa à fronteira superior do reservatório. Em torno a cada um dos poços a malha volumétrica tem formato cilíndrico, acompanhando a trajetória da linha que representa o poço no modelo discreto. A porção restante da malha do reservatório está formada por tetraedros e algumas pirâmides, na transição com as porções de geometria cilíndrica ao redor dos poços.



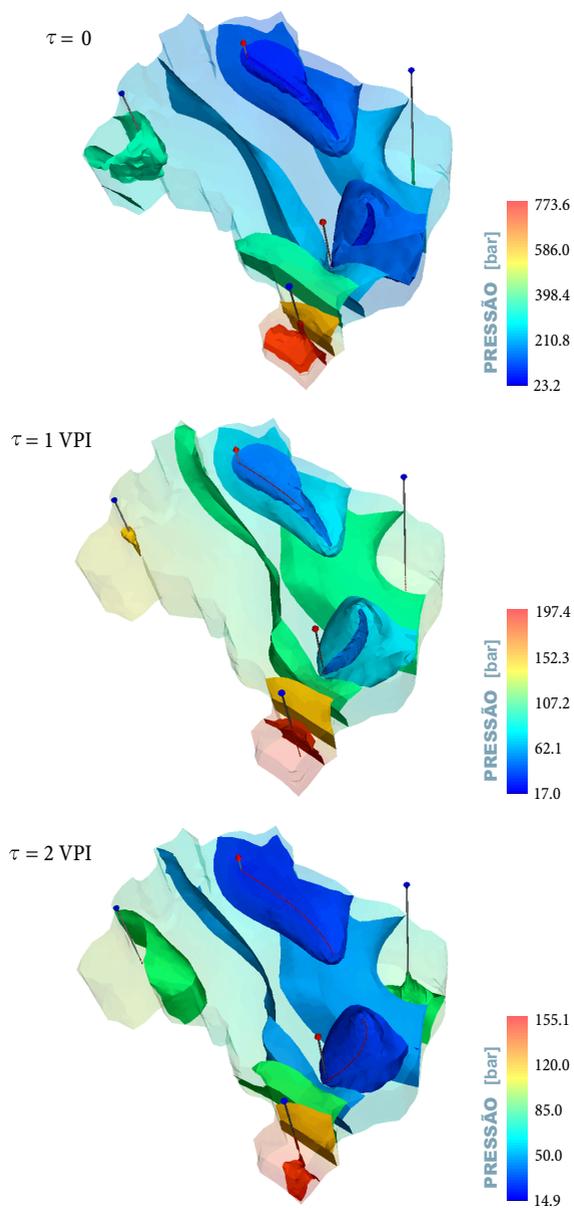
	Raio [m]	Condição de operação
Poços injetores I-1, I-2, I-3	0.1	$\omega_w = 0.005 \text{ m}^3/\text{s}$
Poços produtores P-1, P-2	0.1	$\Pi_{\text{ref}} = 10 \text{ bar}$

**Figura 6.48** – Geometria dos poços e condições de operação prescritas para o problema 4.

O processo de deslocamento água-óleo no reservatório foi simulado considerando as curvas de permeabilidade relativa dadas por  $k_{rw} = s^2$  e  $k_{ro} = (1 - s)^2$ , para as fases água e óleo, respectivamente. Os valores de viscosidade considerados para essas fases foram  $\mu_w = 0.001 \text{ Pa} \cdot \text{s}$  e  $\mu_o = 0.01 \text{ Pa} \cdot \text{s}$ , respectivamente. Além disso, os valores da densidade das fases foram fixados em  $\rho_w = 1000 \text{ kg/m}^3$  e  $\rho_o = 800 \text{ kg/m}^3$ , respectivamente. A aceleração devida à gravidade especificada foi  $\mathbf{g} = (9.8, 0, 0) \text{ m/s}^2$ . Finalmente, como condição inicial para o processo, considerou-se  $s = 0$  em todo o domínio de solução. Todas as fronteiras do reservatório são impermeáveis.

A seguir são apresentados alguns resultados numéricos relevantes, obtidos para o problema com a formulação proposta. Os resultados mostrados têm apenas caráter ilustrativo, pois, para um problema dessa envergadura é extremamente difícil determinar uma solução de referência para fins de comparação.

A figura 6.49 mostra algumas isosuperfícies de pressão em três estágios do processo transiente. Os níveis de tempo correspondem ao ins-



**Figura 6.49** – Campo de pressão em três instantes de tempo.

tante inicial do processo,<sup>8</sup> e depois de terem-se injetado volumes de água equivalentes a 1 e 2 volumes porosos do reservatório. Na simulação de processos de recuperação secundária de óleo é usual definir como tempo adimensional o *volume poroso injetado* (VPI) que é, precisamente, a fração do volume poroso do reservatório equivalente ao volume de água injetada até um dado nível de tempo. Matematicamente, tem-se

$$\tau = \frac{\sum_{\mathcal{W}_{inj} \in \Omega} \int_0^t \omega_{\mathcal{W}} dt}{\int_{\Omega} \phi dV}, \quad (6.22)$$

onde a soma no numerador se estende a todos os poços injetores no domínio. Em todos os resultados apresentados nesta seção, a grandeza adimensional definida na equação (6.22) substitui a variável tempo.

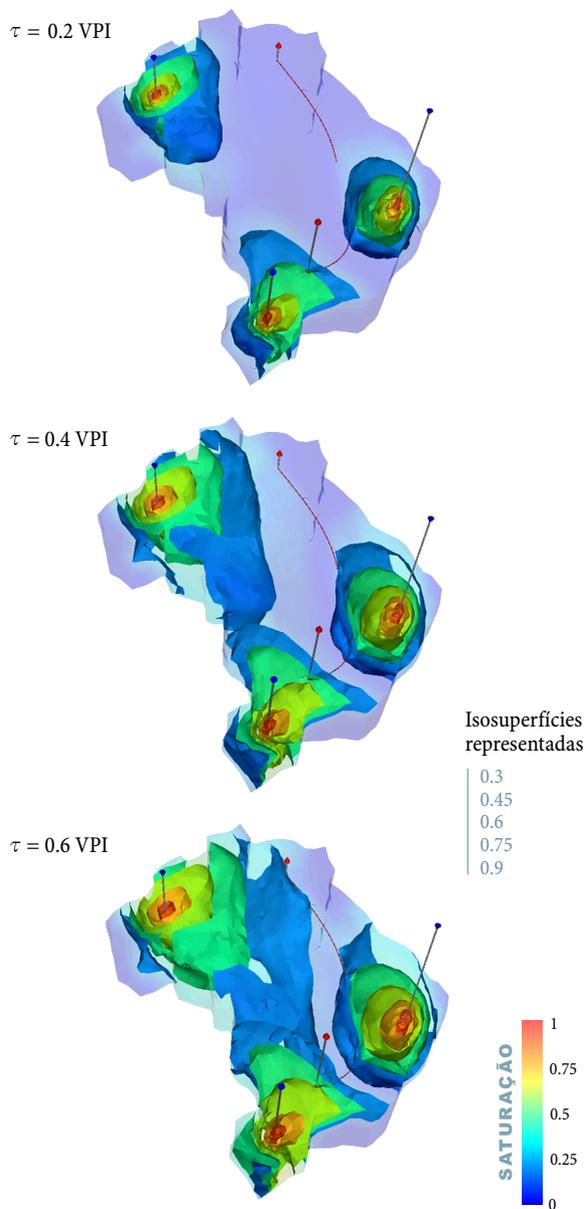
A figura 6.50 ilustra a evolução do campo de saturação mediante iso-superfícies, em três estágios iniciais do processo de deslocamento. Em estágios posteriores do processo, a geometria das isosuperfícies de saturação torna-se bem mais intrincada, o qual dificulta sua visualização. De forma complementar, a figura 6.51 mostra a configuração do campo de saturação em duas seções obtidas cortando o domínio com dois planos verticais.

Geralmente, os resultados mais importantes na simulação de um processo de recuperação são referidos aos poços produtores. Para o problema considerado, a figura 6.52 apresenta a variação das vazões por unidade de comprimento, determinadas segundo indica a equação (6.21), em três níveis de tempo selecionados e para os dois poços produtores. Essa variação é representada em relação às coordenadas curvilíneas  $u_1$  e  $u_2$ , definidas ao longo dos poços P-1 e P-2, respectivamente. A origem desses sistemas coordenados está localizada na seção em que esses poços atravessam a fronteira superior do reservatório. Complementando os gráficos da figura 6.52, as figuras 6.53 e 6.54 apresentam a variação temporal das vazões completas de óleo, água e a soma de ambas, para os poços P-1 e P-2, respectivamente.

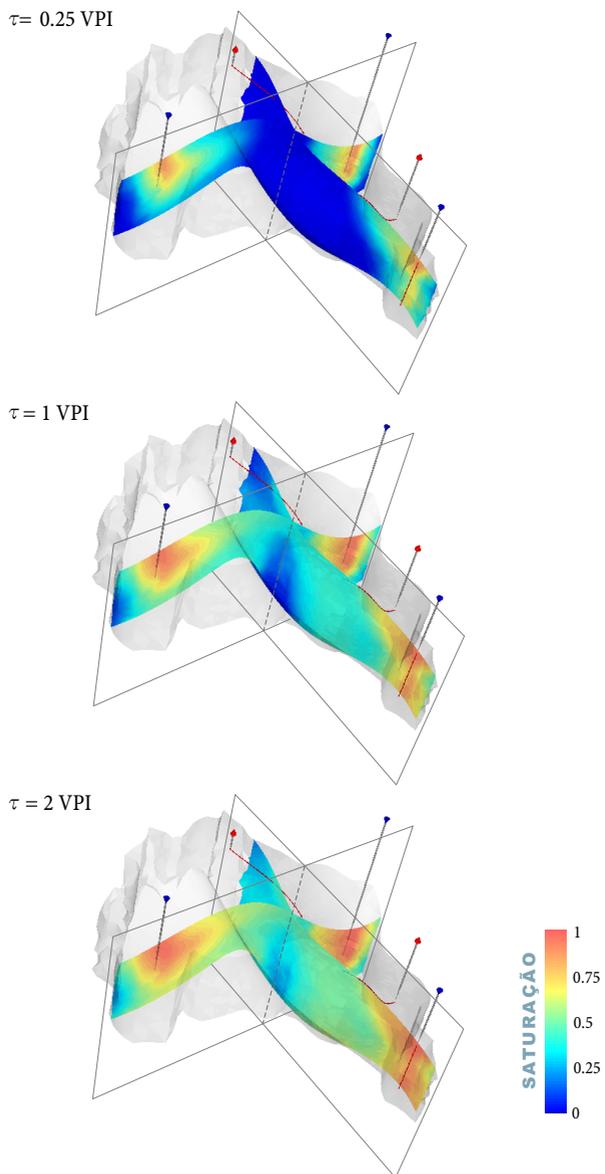
Nessas figuras pode-se evidenciar que a frente de água chega primeiro ao poço P-1 do que ao poço P-2, em um estágio bastante inicial do processo. Essa frente de água procede do poço injetor I-1, o qual se encontra localizado bastante próximo da parte inicial do poço P-1. Uma visão

---

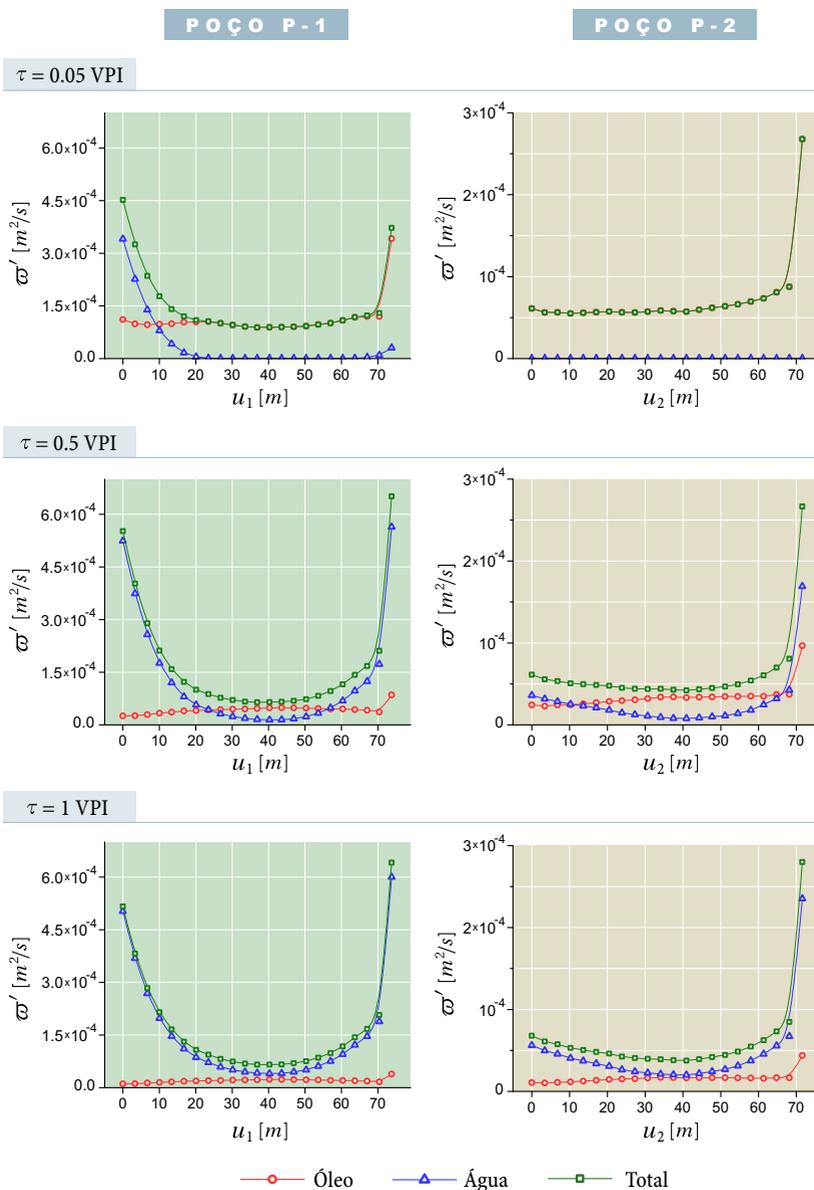
<sup>8</sup> Uma vez que no modelo considerado os fluidos são incompressíveis, após um infinito de tempo do processo de injeção ter-se iniciado, um campo de pressão estabelece-se em todo o domínio. Esse é o campo mostrado na figura 6.49, para  $\tau = 0$ .



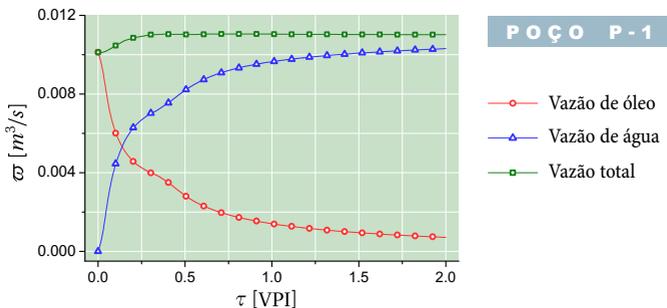
**Figura 6.50** – Campo de saturação em três instantes de tempo, na parte inicial do processo transiente.



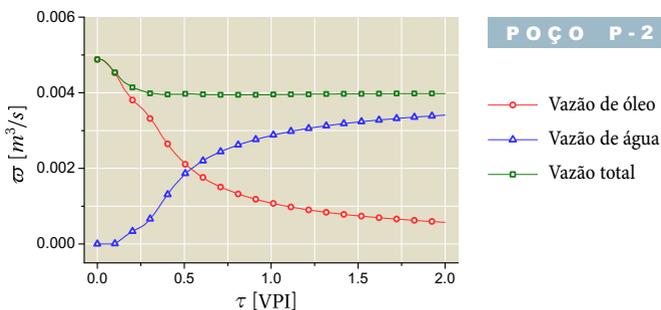
**Figura 6.51** – Campo de saturação em duas seções transversais do domínio, para três instantes de tempo.



**Figura 6.52** – Vazões ao longo dos poços produtores em três níveis de tempo.



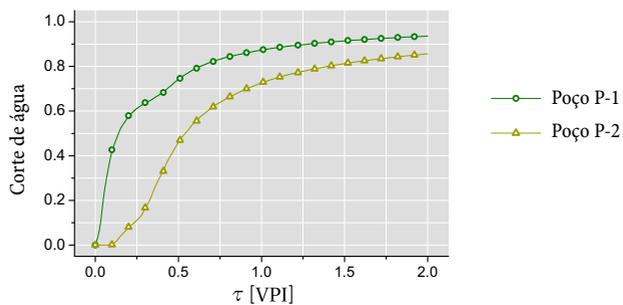
**Figura 6.53** – Variação temporal das vazões completas no poço P-1.



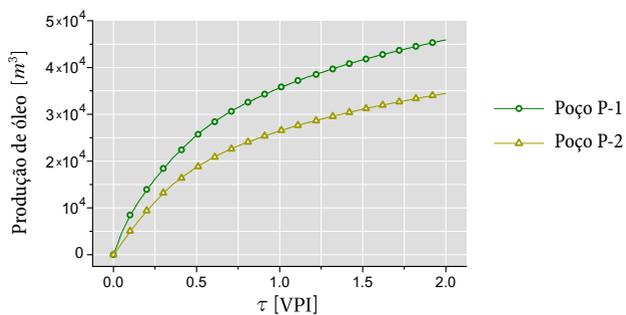
**Figura 6.54** – Variação temporal das vazões completas no poço P-2.

mais abrangente do desempenho qualitativo dos poços produtores pode ser obtida com o gráfico de corte de água. O corte de água é definido como a razão entre a vazão de água e a vazão total produzida por um poço. O gráfico do corte de água para os poços P-1 e P-2 é mostrado na figura 6.55. Nele evidencia-se mais claramente que não apenas a água chega mais rapidamente ao poço P-1, como ele produz proporcionalmente mais água durante todo o processo simulado. Apesar disso, o volume de óleo produzido por esse poço é maior que o produzido pelo poço P-2, conforme mostra a figura 6.56. Esse aparente paradoxo pode ser explicado examinando novamente as figuras 6.53 e 6.54, as quais mostram que a vazão total produzida em um dado tempo pelo poço P-1 é mais do dobro da vazão total produzida pelo poço P-2. Assim, a vazão de óleo produzido pelo poço P-1 é proporcionalmente menor, em relação à vazão total produzida por

esse poço, porém, ainda assim é maior do a que vazão de óleo produzida pelo poço P-2, em termos absolutos.



**Figura 6.55** – Corte de água nos dois poços produtores.



**Figura 6.56** – Volume de óleo produzido nos dois poços produtores.

## Conclusão

Neste trabalho foi apresentada uma formulação numérica tridimensional, aplicando o método de volumes finitos baseado em elementos a um modelo de deslocamento de fluidos em reservatórios de petróleo. A formulação admite a utilização de malhas não-estruturadas híbridas formadas por hexaedros, tetraedros, prismas e pirâmides. Além de proporcionar uma maior flexibilidade para a representação geométrica de reservatórios tridimensionais, a formulação é conservativa no nível discreto, característica fundamental de todo método de volumes finitos. Por construção, todas as aproximações numéricas são restritas aos elementos da malha empregada para representar o reservatório, o qual facilita de forma significativa a implementação computacional do método. A formulação admite, além disso, que a permeabilidade de um meio anisotrópico esteja representada por um tensor completo, quando as direções principais do tensor não coincidirem com os eixos coordenados. Reservatórios heterogêneos podem ser representados com permeabilidade e porosidade variando de um elemento a outro da malha.

Os resultados apresentados no capítulo 6 permitem estabelecer algumas conclusões quanto ao desempenho de diferentes aspectos da formulação. Para os testes nesse capítulo, adotou-se um enfoque em que as

partes componentes da formulação são testadas de forma separada. Esse enfoque é comum com modelos numéricos de certa complexidade, pela dificuldade de se obter soluções analíticas, para comparar os resultados numéricos, envolvendo a formulação como um todo.

Em problemas puramente difusivos, a taxa de convergência observada para a variável da equação foi de segunda ordem. Essa taxa de convergência foi a mesma em malhas formadas por hexaedros, tetraedros, prismas ou pirâmides. Em um tipo especial de malha híbrida considerado em um dos experimentos numéricos, o valor da taxa de convergência observada foi ligeiramente menor a 2. Entretanto, a causa para essa redução pode estar na diferente estrutura topológica da porção tetraédrica para diferentes níveis de refinamento, pois na geração das malhas não se teve controle sobre essa estrutura. Por outro lado, nos testes realizados com malhas formadas por um único tipo de elemento, o valor da taxa de convergência manteve-se praticamente inalterado mesmo quando os elementos das malhas foram distorcidos. Resultados semelhantes foram obtidos com permeabilidade constante e isotrópica quanto com permeabilidade variável e anisotrópica.

Nos mesmos experimentos numéricos foi evidenciada uma taxa de convergência de primeira ordem para a aproximação do gradiente da variável e para a aproximação dos fluxos nas faces dos volumes de controle. A notável exceção foram as soluções nas malhas regulares de hexaedros, nas quais a norma do erro associado aos fluxos nas faces diminuiu a uma taxa levemente maior a 2, quando a permeabilidade é isotrópica.

Em um problema advectivo não-linear, determinado pela equação de Buckley-Leverett, observaram-se taxas de convergência com valores inferiores ao valor teórico de primeira ordem associado ao tipo de aproximações numéricas consideradas para o termo advectivo. Esse valor teórico, contudo, corresponde a casos em que a solução é suave, sem descontinuidades. Entretanto, a solução para o problema considerado apresenta uma descontinuidade que avança com velocidade constante. Os valores observados para a taxa de convergência em instantes de tempo em que a descontinuidade se encontra no domínio são levemente menores aos correspondentes a instantes posteriores a sua saída.

Em outro conjunto de problemas, o modelo de poço considerado neste trabalho foi testado considerando diferentes tensores permeabilidade. Ante a carência de uma solução exata para os problemas considerados, solu-

ções numéricas em malhas extremamente refinadas foram consideradas como ponto de comparação para as soluções em malhas grosseiras em que o modelo de poço era utilizado. O grau de concordância observado entre essas soluções testemunha o desempenho satisfatório da abordagem proposta neste trabalho para a modelagem dos poços no modelo numérico. A maior discordância observada nos casos anisotrópicos pode ser atribuída à hipótese de vazão nula em superfícies transversais ao poço, considerada no subproblema auxiliar para a determinação dos índices de poço. Acredita-se que eliminando essa hipótese e calculando essas vazões a partir da solução analítica do subproblema auxiliar, os resultados possam melhorar e se equiparar aos do caso isotrópico.

O último problema apresentado no capítulo 6 permitiu mostrar um pouco do potencial da formulação numérica em aplicações mais realísticas. Um domínio tridimensional contendo poços direcionais foi discretizado por uma malha híbrida, formada principalmente por elementos tetraédricos. Nesse caso, uma malha relativamente grosseira permitiu determinar uma aproximação numérica detalhada de grandezas associadas ao escoamento nos poços produtores, os quais apresentavam trajetória curva no problema considerado. O enfoque considerado para os poços na formulação é promissor para casos em que a representação da trajetória dos poços no modelo numérico seja de importância crítica. Obviamente que, quando necessário, maiores detalhes podem ser introduzidos na modelagem, especialmente no referido à descrição do escoamento no interior dos poços.

É previsível que no futuro malhas não-estruturadas tridimensionais sejam adotadas na simulação de reservatórios em aplicações específicas que requeiram uma descrição acurada de detalhes geométricos. A possibilidade de considerar malhas com elementos de diferentes topologias e de refinar facilmente nos locais de maior interesse, tornam as malhas não-estruturadas híbridas uma excelente alternativa para a aproximação da geometria dos reservatórios. Como visto ao longo deste trabalho, métodos de volumes finitos baseados em elementos são uma opção que oferece múltiplas vantagens. Além de permitir a utilização de elementos de diferente topologia de modo unificado e simples em uma mesma formulação, garante a conservação no nível discreto, tanto global como localmente, como todo método de volumes finitos. A aproximação consistente dos fluxos para tensores permeabilidade completos, um problema de longa

data na simulação de reservatórios com malhas convencionais, é uma característica intrínseca da forma do método apresentada neste trabalho.

Certamente a adoção de malhas não-estruturadas para a representação de reservatórios de petróleo ainda requer um longo processo de adequação. O modelo físico de um reservatório, que é utilizado como base para a simulação dos escoamentos, é resultado de um trabalho multidisciplinar envolvendo uma série de operações para interpretar dados de campo e de laboratório. Muitos desses procedimentos estão fortemente enraizados em representações geométricas dos reservatórios mediante malhas cartesianas ou *corner point*. Consequentemente, a adaptação a uma representação discreta com malhas não-estruturadas não envolve apenas a formulação numérica para resolver os escoamentos, mas todo o conjunto de ferramentas computacionais empregadas na construção do modelo físico do reservatório.

Com alguns desenvolvimentos complementares, contudo, seria possível viabilizar a adoção de malhas não-estruturadas em situações particulares. Esses desenvolvimentos poderiam incluir, por exemplo, procedimentos de *upscaling* para transferir a informação referente às propriedades físicas em modelos convencionais para as malhas não-estruturadas. Além disso, podem ser desenvolvidos procedimentos especiais de geração de malha para, apenas nas regiões de maior interesse, substituir alguns blocos de uma malha convencional *corner-point* por porções mais refinadas de malha não-estruturada que acompanhem a geometria de componentes importantes do reservatório. Dessa forma, a maior parte do modelo físico já existente para um reservatório poderia ser aproveitada e apenas nas regiões discretizadas com malha não-estruturada seria necessário realizar *upscaling* das propriedades físicas. O intuito, logicamente, seria incrementar a precisão da simulação nessas regiões de maior interesse.

Seja qual for o cenário futuro para o uso de malhas não-estruturadas na simulação de reservatórios, o presente trabalho tem procurado contribuir apresentando uma formulação numérica apta para o uso dessas malhas em problemas tridimensionais. Pelos motivos previamente expostos, a formulação será uma alternativa apropriada para ser adotada, quando as condições forem propícias para a adoção de malhas não-estruturadas na simulação de reservatórios.

# Referências bibliográficas

- [1] AAVATSMARK, I., KLAUSEN, R. A. **Well index in reservoir simulation for slanted and slightly curved wells in 3D grids.** *SPE Journal*, v. 8, n. 1, pp. 41–48, 2003.
- [2] ANSYS. **Theory reference for ANSYS and ANSYS Workbench Release 12.0.** ANSYS Inc., Canonsburg, USA, 2009.
- [3] AZIZ, K., SETTARI, A. **Petroleum reservoir simulation.** Applied Science Publishers Ltd., London, England, 1979.
- [4] BARENBLATT, G. I., ENTOV, V. M., RYZHIK, V. M. **Theory of fluid flow through natural rocks.** Kluwer Academic Publishers, Dordrecht, The Netherlands, 1990.
- [5] BENNIS, C., BOROUCHAKI, H., FLANDRIN, N. **3D conforming power diagrams for radial LGR in CPG reservoir grids.** *Engineering with Computers*, v. 24, pp. 253–265, 2008.
- [6] BERNDT, M., LIPNIKOV, K., MOULTON, J. D., SHASHKOV, M. **Convergence of mimetic finite difference discretizations of the diffusion equation.** *East-west Journal of Numerical Mathematics*, v. 9, n. 4, pp. 253–316, 2001.
- [7] BERTI, G. **Generic software components for scientific computing.** Ph.D. Thesis, Faculty of Mathematics, Computer Science, and Natural Science, Cottbus, Germany, 2000.
- [8] BLAZEK, J. **Computational fluid dynamics: principles and applications.** Elsevier Science Ltd., Oxford, UK, 2001.

- [9] CHEN, Z., HUAN, G., LI, B. **An improved IMPES method for two-phase flow in porous media.** *Transport in Porous Media*, v. 54, pp. 361–376, 2004.
- [10] CHEN, Z., HUAN, G., MA, Y. **Computational methods for multiphase flows in porous media.** Society for Industrial and Applied Mathematics, Philadelphia, USA, 2006.
- [11] COATS, K. H. **IMPES stability: selection of stable timesteps.** *SPE Journal*, v. June 2003, pp. 181–188, 2003.
- [12] CORDAZZO, J. **Simulação de reservatórios de petróleo utilizando o método EbFVM e multigrid algébrico.** Tese de doutorado, Departamento de Engenharia Mecânica, Universidade Federal de Santa Catarina, Florianópolis, Brasil, 2006.
- [13] DING, Y., LEMONNIER, P. **Use of corner point geometry in reservoir simulation.** In *International Meeting on Petroleum Engineering*, Beijing, China, 1995.
- [14] DING, Y., RENARD, G., WEILL, L. **Representation of wells in numerical reservoir simulation.** *SPE Reservoir Evaluation & Engineering*, v. February 1998, pp. 18–23, 1998.
- [15] DOUGLASS, R. W., CAREY, G. E., WHITE, D. R., HANSEN, G. A., KALLINDERIS, Y., WEATHERILL, N. P. **Current views on grid generation: summaries of a panel discussion.** *Numerical Heat Transfer, Part B*, v. 41, pp. 211–237, 2002.
- [16] DULLIEN, F. A. L. **Porous media fluid transport and pore structure.** Academic Press Inc., London, England, 1979.
- [17] DURLOFSKY, L. J. **A triangle based mixed finite element - finite volume technique for modeling two phase flow through porous media.** *Journal of Computational Physics*, v. 105, pp. 252–266, 1993.
- [18] ELIAS, S. R., STUBLEY, G. D., RAITHBY, G. D. **An adaptive agglomeration method for the additive correction multigrid.** *International Journal for Numerical Methods in Engineering*, v. 40, pp. 887–903, 1997.

- [19] FARMER, C. L. **Geological modelling and reservoir simulation**. In ISKE, A., RANDEN, T., editors, *Mathematical methods and modeling in hydrocarbon exploration and production*. Springer-Verlag, Berlin, Germany, 2005.
- [20] FERZIGER, J. H., PERIĆ, M. **Computational methods for fluid dynamics**, third edition. Springer-Verlag, Berlin, Germany, 2002.
- [21] FLANDRIN, N., BOROUCHAKI, H., BENNIS, C. **3D hybrid mesh generation for reservoir simulation**. *International Journal for Numerical Methods in Engineering*, v. 65, n. 10, pp. 1639–1672, 2005.
- [22] FORSYTH, P. A. **A control-volume, finite-element method for local mesh refinement in thermal reservoir simulation**. *SPE Reservoir Engineering*, v. November 1990, pp. 561–566, 1990.
- [23] FREY, P. J., GEORGE, P. L. **Mesh generation: application to finite elements**. Hermes Science Publications, Paris, France, 2000.
- [24] FROLKOVIC, P., SCHEPPER, H. **Numerical modelling of convection dominated transport coupled with density driven flow in porous media**. *Advances in Water Resources*, v. 24, n. 1, pp. 63–72, 2000.
- [25] FU, Y., YANG, Y. K., DEO, M. **Three-dimensional, three-phase discrete-fracture reservoir simulator based on control volume finite element formulation**. In *SPE Reservoir Simulation Symposium*, Houston, USA, 2005.
- [26] FUNG, L. S. K., HIEBERT, A. D., NGHIEM, L. X. **Reservoir simulation with a control-volume finite-element method**. *SPE Reservoir Engineering*, v. August 1992, pp. 349–357, 1992.
- [27] FUNG, L. S. K., BUCHANAN, L., SHARMA, R. **Hybrid-CVFE method for flexible-grid reservoir simulation**. *SPE Reservoir Engineering*, v. August 1994, pp. 188–194, 1994.
- [28] GEIGER, S., ROBERTS, S., MATTHÄI, S. K., ZOPPOU, C., BURRI, A. **Combining finite element and finite volume methods for efficient multiphase flow simulations in highly heterogeneous and structurally complex geologic media**. *Geofluids*, v. 4, pp. 284–299, 2004.

- [29] HEINEMANN, G. F., HEINEMANN, Z. E. **Gridding concept for the third generation of reservoir simulators.** In *6th International Forum on Reservoir Simulation*, Schloss Fuschl, Austria, 2001.
- [30] HEINEMANN, Z. E., BRAND, C. W., MUNKA, M., CHEN, Y. M. **Modeling reservoir geometry with irregular grids.** *SPE Reservoir Engineering*, v. May 1991, pp. 225–232, 1991.
- [31] HERBIN, R., HUBERT, F. **Benchmark on the discretization schemes for anisotropic diffusion problems on general grids.** In *5th International Symposium on Finite Volumes for Complex Applications*, Aussois, France, 2008.
- [32] HERMELINE, F. **A finite volume method for approximating 3D diffusion operators on general meshes.** *Journal of Computational Physics*, v. 228, pp. 5763–5786, 2009.
- [33] HOTEIT, H., FIROOZABADI, A. **An efficient numerical model for incompressible two-phase flow in fractured media.** *Advances in Water Resources*, v. 31, pp. 891–905, 2008.
- [34] HUBER, R., HELMIG, R. **Node-centered finite volume discretizations for the numerical simulation of multiphase flow in heterogeneous porous media.** *Computational Geosciences*, v. 4, pp. 141–164, 2000.
- [35] HUGHES, T. J. R. **The finite element method.** Prentice-Hall, Inc., New Jersey, USA, 1987.
- [36] HURTADO, F. S. V., MALISKA, C. R., SILVA, A. F. C. **A variable timestep strategy for accelerating the IMPES solution algorithm in reservoir simulation.** In *XXVII Iberian Latin American Congress on Computational Methods in Engineering – CILAMCE 2006*, Belém, Brazil, 2006.
- [37] HURTADO, F. S. V., MALISKA, C. R., SILVA, A. F. C. **On the factors influencing the grid orientation effect in reservoir simulation.** In *19th International Congress of Mechanical Engineering – COBEM 2007*, Brasilia, Brazil, 2007.
- [38] HURTADO, F. S. V., MALISKA, C. R., SILVA, A. F. C., CORDAZZO, J. **A quadrilateral element-based finite-volume formulation for the**

- simulation of complex reservoirs.** In *X Latin American and Caribbean Petroleum Engineering Conference – LACPEC 2007*, Buenos Aires, Argentina, 2007.
- [39] HUTCHINSON, B. R., RAITHBY, G. D. **A multigrid method based on the additive correction strategy.** *Numerical Heat Transfer*, v. 9, pp. 511–537, 1986.
- [40] KAPLAN, M. A., POPETTI, R. A. **A note on quadrilateral interpolation.** *Journal of the Association for Computing Machinery*, v. 18, n. 4, pp. 576–585, 1971.
- [41] KOZDON, J., MALLISON, B. T., GERRITSEN, M. G. **Robust multi-D transport schemes with reduced grid orientation effects.** *Transport in Porous Media*, v. 78, pp. 47–75, 2009.
- [42] KUZMIN, D., MÖLLER, M. **Algebraic flux correction I: Scalar conservation laws.** In KUZMIN, D., LÖHNER, R., TUREK, S., editors, *Flux-corrected transport: Principles algorithms and applications*. Springer-Verlag, Berlin, Germany, 2005.
- [43] KWOK, W., CHEN, Z. **A simple and effective mesh quality metric for hexaedral and wedge elements.** In *Proceedings of the 9th International Meshing Roundtable*, p. 325–333, New Orleans, USA, 2000.
- [44] LEVEQUE, R. J. **Finite volume methods for hyperbolic problems.** Cambridge University Press, Cambridge, UK, 2002.
- [45] MALISKA, C. R. **Transferência de calor e mecânica dos fluidos computacional**, segunda edição. LTC Editora S.A., Rio de Janeiro, Brasil, 2004.
- [46] MALISKA, C. R., HURTADO, F. S. V., DONATTI, C. N., PESCADOR, A. V. B., SILVA, A. F. C. **Desenvolvimento da biblioteca ACMLib – Conclusão.** Relatório técnico SIGER-4, parte 2, Laboratório SINMEC/UFSC, Florianópolis, Brasil, 2009.
- [47] MALISKA, C. R., HURTADO, F. S. V., DONATTI, C. N., PESCADOR, A. V. B., SILVA, A. F. C. **Desenvolvimento da biblioteca EFVLib – Conclusão.** Relatório técnico SIGER-4, parte 1, Laboratório SINMEC/UFSC, Florianópolis, Brasil, 2009.

- [48] MARCONDES, F. **Solução numérica usando métodos adaptativos-implícitos e malha de Voronoi de problemas de reservatórios de petróleo.** Tese de doutorado, Departamento de Engenharia Mecânica, Universidade Federal de Santa Catarina, Florianópolis, Brasil, 1996.
- [49] MATTAX, C. C., DALTON, R. L. **Reservoir simulation.** Society of Petroleum Engineers Inc., Richardson, USA, 1990.
- [50] MATTHÄI, S. K., MAZENTEV, A., BELAYNEH, M. **Control-volume finite-element two-phase flow experiments with fractured rock represented by unstructured 3D hybrid meshes.** In *SPE Reservoir Simulation Symposium*, Houston, USA, 2005.
- [51] MATTIUSSI, C. **A reference discretization strategy for the numerical solution of physical field problems.** *Advances in Imaging and Electron Physics*, v. 121, pp. 143–279, 2002.
- [52] MIN, W. **Generating hexahedron-dominant mesh based on shrink-mapping method.** In *6th International Meshing Roundtable*, p. 171–182, Park City, USA, 1997.
- [53] MONTEAGUDO, J. E. P., FIROOZABADI, A. **Control-volume model for simulation of water injection in fractured media: Incorporating matrix heterogeneity and reservoir wettability effects.** *SPE Journal*, v. September 2007, pp. 355–366, 2007.
- [54] MORITA, N., SINGH, S. P., CHEN, H. S., WHITFILL, D. L. **Three-dimensional well model pre-processors for reservoir simulation with horizontal and curved inclined wells.** In *65th Annual Technical Conference and Exhibition of the SPE*, New Orleans, USA, 1990.
- [55] MOUTON, T., BENNIS, C., BOROUCHE, H. **Hybrid mesh generation for reservoir flow simulation in CPG grids.** In CLARK, B. W., editor, *Proceedings of the 18th International Meshing Roundtable*, pp. 415–427. Springer-Verlag, 2009.
- [56] OUYANG, L. B., ARBABI, S., AZIZ, K. **A single-phase wellbore-flow model for horizontal, vertical, and slanted wells.** *SPE Journal*, v. June 1998, pp. 124–133, 1998.

- [57] OWEN, J. O. **A survey of unstructured mesh generation technology.** In *7th International Meshing Roundtable*, Dearborn, USA, 1998.
- [58] PALUSZNY, A., MATTHÄI, S. K., HOHMEYER, M. **Hybrid finite element-finite volume discretization of complex geologic structures and a new simulation workflow demonstrated on fractured rocks.** *Geofluids*, v. 7, pp. 186–208, 2007.
- [59] PATANKAR, S. V. **Numerical heat transfer and fluid flow.** Hemisphere Publishing Corporation, New York, USA, 1980.
- [60] PEACEMAN, D. W. **Fundamentals of numerical reservoir simulation.** Elsevier Scientific Publishing Company, Amsterdam, The Netherlands, 1977.
- [61] PEACEMAN, D. W. **Interpretation of well-block pressures in numerical reservoir simulation.** *SPE Journal*, v. June 1978, pp. 183–194, 1978.
- [62] PEACEMAN, D. W. **Interpretation of well-block pressures in numerical reservoir simulation with nonsquare grid blocks and anisotropic permeability.** *SPE Journal*, v. June 1983, pp. 531–543, 1983.
- [63] PEACEMAN, D. W. **Representation of a horizontal well in numerical reservoir simulation.** *SPE Advanced Technology Series*, v. 1, n. 1, pp. 7–16, 1993.
- [64] PEACEMAN, D. W. **A new method for calculating well indexes for multiple wellblocks with arbitrary rates in numerical reservoir simulation.** In *SPE Reservoir Simulation Symposium*, Houston, USA, 2003.
- [65] PEDROSA, O. A., AZIZ, K. **Use of a hybrid grid in reservoir simulation.** *SPE Reservoir Engineering*, v. November 1986, pp. 611–621, 1986.
- [66] POTEMPA, T. **Mobility weighting in numerical reservoir simulation.** *SPE Journal*, v. August 1985, pp. 565–572, 1985.
- [67] RAW, M. **A new control-volume based finite element procedure for the numerical solution of the fluid flow and scalar transport equations.** PhD Thesis, University of Waterloo, Canada, 1985.

- [68] REICHENBERGER, V., JAKOBS, H., BASTIAN, P., HELMIG, R. **A mixed-dimensional finite volume method for two-phase flow in fractured porous media.** *Advances in Water Resources*, v. 29, n. 7, pp. 1020–1036, 2006.
- [69] ROE, P. L., SIDILKOVER, D. **Optimum positive linear schemes for advection in two and three dimensions.** *SIAM Journal of Numerical Analysis*, v. 29, n. 6, pp. 1542–1568, 1992.
- [70] ROZON, B. J. **A generalized finite volume discretization method for reservoir simulation.** In *Reservoir Simulation Symposium*, Houston, USA, 1989.
- [71] SAAD, Y. **Iterative methods for sparse linear systems**, second edition. Society for Industrial and Applied Mathematics, Philadelphia, USA, 2003.
- [72] SALARI, K., KNUPP, P. **Code verification by the method of manufactured solutions.** Technical report SAND2000–1444, Sandia National Laboratories, Albuquerque, USA, 2000.
- [73] SHAW, J. A. **Hybrid grids.** In THOMPSON, J. F., SONI, B. K., WEATHERILL, N. P., editors, *Handbook of grid generation*, ch. 23. CRC Press, Boca Raton, USA, 1999.
- [74] SHIMADA, K. **Current trends and issues in automatic mesh generation.** *Computer-Aided Design & Applications*, v. 3, n. 6, pp. 741–750, 2006.
- [75] THOMPSON, J. F., SONI, B. K., WEATHERILL, N. P., editors. **Handbook of grid generation.** CRC Press, Boca Raton, USA, 1999.
- [76] TONTI, E. **A direct discrete formulation for the wave equation.** *Journal of Computational Acoustics*, v. 9, n. 4, pp. 1355–1382, 2001.
- [77] TONTI, E. **A direct discrete formulation of field laws: the Cell method.** *Computer Modeling in Engineering & Sciences*, v. 2, n. 2, pp. 237–258, 2001.
- [78] VAN LEER, B. **Upwind and high-resolution methods for compressible flow: from donor cell to residual-distribution schemes.** *Communications in Computational Physics*, v. 1, n. 2, pp. 192–206, 2006.

- [79] VERMA, S. K. **Flexible grids for reservoir simulation**. PhD Dissertation, Department of Petroleum Engineering, Stanford University, Palo Alto, USA, 1996.
- [80] VINSOME, P. K., AU, A. D. K. **One approach to the grid orientation problem in reservoir simulation**. In *54th Annual Fall Technical Conference and Exhibition of the SPE*, Las Vegas, USA, 1979.
- [81] WADA, Y., YOSHIMURA, S., YAGAWA, G. **Automatic mesh generation of hexahedral elements using intelligent local approach**. Annual report ADV 99-1, School of Engineering, University of Tokyo, Japan, 1999.
- [82] WEISSTEIN, E. W. **Concise encyclopedia of mathematics**. CRC Press, Boca Raton, USA, 1999.
- [83] ZGAINSKI, F. X., COULOMB, J. L., MARÉCHAL, Y., CLAEYSSEN, F., BRUNOTTE, X. **A new family of finite elements: the pyramidal elements**. *IEEE Transactions on Magnetics*, v. 32, n. 3, pp. 1393-1396, 1996.
- [84] ZIENKIEWICZ, O. C., TAYLOR, R. L. **The finite element method, Volume 1: the basis**, fifth edition. Butterworth-Heinemann, Oxford, UK, 2000.
- [85] ZOPPOU, C., ROBERTS, S. **Behaviour of finite difference solution of the advection equation**. Technical report MRR 062-96, School of Mathematical Sciences, Australian National University, Canberra, Australia, 1996.

# A

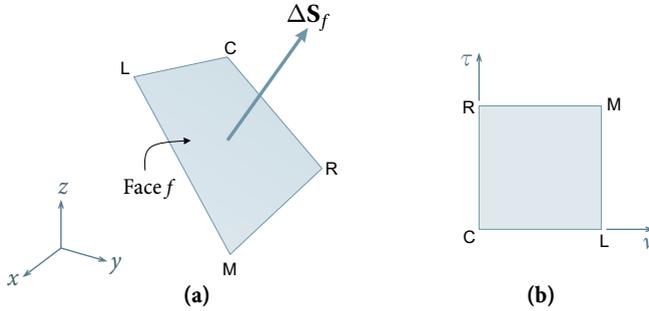
## Parâmetros geométricos

### A.1 Determinação do vetor área de face

Um dos parâmetros geométricos mais importantes em um método de volumes finitos é a área das faces que limitam os volumes de controle. No método de volumes finitos baseado em elementos considerado, as faces são quadriláteros ou triângulos localizados no interior dos elementos. A seguir é descrito o procedimento para a determinação do vetor área das faces quadrilaterais.

A figura A.1(a) mostra uma face quadrangular convexa, cujos vértices C, L, M e R podem ser não-coplanares no espaço físico. A face pode ser mapeada em um quadrado unitário plano, mostrado na figura A.1(b), mediante a transformação de coordenadas

$$\left\{ \begin{array}{l} x = \sum_{k=1}^4 N_k(\nu, \tau) x_k, \\ y = \sum_{k=1}^4 N_k(\nu, \tau) y_k, \\ z = \sum_{k=1}^4 N_k(\nu, \tau) z_k. \end{array} \right. \quad (\text{A.1})$$



**Figura A.1** – Transformação de coordenadas para o cômputo do vetor área de uma face quadrangular.

Na transformação da equação (A.1) são consideradas as funções de forma bilineares

$$\begin{cases} N_1(v, \tau) = (1 - v)(1 - \tau), \\ N_2(v, \tau) = v(1 - \tau), \\ N_3(v, \tau) = v\tau, \\ N_4(v, \tau) = (1 - v)\tau. \end{cases} \quad (\text{A.2})$$

Além disso, na equação (A.1),  $x_k, y_k$  e  $z_k, k \in \{1, 2, 3, 4\}$ , são as coordenadas dos vértices da face no espaço físico. Convencionalmente, apenas para uso na equação (A.1), considera-se a seguinte equivalência entre a numeração dos vértices e a notação indicada para eles na figura A.1:  $\{C, L, M, R\} \equiv \{1, 2, 3, 4\}$ . Para a orientação absoluta do vetor área de face coincidir com a orientação da aresta associada, como definido na seção 3.4.2, os vértices da face devem ser ordenados de acordo a regra da mão direita. Isto é, quando o polegar da mão direita apontar no sentido atribuído à aresta, os outros dedos indicarão o sentido na ordenação dos vértices.

Considerando a transformação bilinear definida, o vetor área de face pode ser determinado mediante integração no plano transformado, empregando a expressão seguinte [82]

$$\Delta \mathbf{S}_f = \int_0^1 \int_0^1 \partial_v \mathbf{r} \times \partial_\tau \mathbf{r} \, dv \, d\tau, \quad (\text{A.3})$$

em que  $\mathbf{r} = x \mathbf{u}_x + y \mathbf{u}_y + z \mathbf{u}_z$  é o vetor posição de um ponto pertencente ao quadrilátero, no espaço físico. Os vetores  $\partial_v \mathbf{r}$  e  $\partial_\tau \mathbf{r}$  são tangentes à su-

perfície da face no ponto correspondente e, portanto,  $\partial_v \mathbf{r} \times \partial_\tau \mathbf{r}$  é um vetor normal à face. Além disso, o módulo desse produto é um fator de escala entre as áreas de elementos diferenciais sobre a superfície, no espaço físico e no plano transformado.

Realizando a integração indicada na equação (A.3), obtém-se a seguinte expressão para o cômputo do vetor área de uma face

$$\begin{aligned} \Delta \mathbf{S}_f = & \frac{1}{2} [(y_C - y_M)(z_L - z_R) - (y_L - y_R)(z_C - z_M)] \mathbf{u}_x + \\ & \frac{1}{2} [(z_C - z_M)(x_L - x_R) - (z_L - z_R)(x_C - x_M)] \mathbf{u}_y + \\ & \frac{1}{2} [(x_C - x_M)(y_L - y_R) - (x_L - x_R)(y_C - y_M)] \mathbf{u}_z. \end{aligned} \quad (\text{A.4})$$

Esta expressão é válida para quadriláteros planos e não-planos. O módulo do vetor é numericamente igual à área do quadrilátero definido pelos quatro vértices. No caso dos vértices não se encontrarem em um mesmo plano, a área corresponde a uma porção do hiperboloide de uma folha [40], definido pela transformação bilinear (A.1). Para uma face plana,  $\Delta \mathbf{S}_f$  é perpendicular ao plano da face. Para uma face não-plana, a direção de  $\Delta \mathbf{S}_f$  é a direção média das normais à superfície da face.

É interessante notar que a equação (A.4) pode ser escrita na forma compacta

$$\Delta \mathbf{S}_f = \frac{1}{2} \overrightarrow{\text{CM}} \times \overrightarrow{\text{LR}}. \quad (\text{A.5})$$

onde  $\overrightarrow{\text{CM}}$  e  $\overrightarrow{\text{LR}}$  são vetores coincidentes com as diagonais da face quadrangular.

Outro fato a destacar é que a aproximação numérica da integral da equação (A.3) pela quadratura de Gauss [84] com um único ponto, isto é,

$$\int_0^1 \int_0^1 \partial_v \mathbf{r} \times \partial_\tau \mathbf{r} \, dv \, d\tau \approx \left( \partial_v \mathbf{r} \times \partial_\tau \mathbf{r} \right)_{v=\frac{1}{2}, \tau=\frac{1}{2}}, \quad (\text{A.6})$$

conduz à expressão exata para o vetor  $\Delta \mathbf{S}_f$ , dada na equação (A.4). A quadratura de Gauss de um ponto é equivalente à regra do ponto médio [20], mencionada na seção 3.4.2.

A equação (A.4) pode ser empregada em todas as faces quadrangulares, inclusive as da pirâmide.<sup>1</sup> Já o vetor área para as faces triangulares desse elemento pode ser determinado mediante o método convencional

<sup>1</sup> Para manter consistência com a notação empregada na seção 3.4.2, para as faces da pirâmide o índice C deve ser substituído pelo índice B na equação (A.4).

do cálculo da área de um triângulo em três dimensões. Assim, para a face triangular de vértices B, L e M, o vetor área pode ser determinado pela expressão

$$\Delta \mathbf{S}_f = \frac{1}{2} \overrightarrow{\text{BL}} \times \overrightarrow{\text{BM}}. \quad (\text{A.7})$$

onde  $\overrightarrow{\text{BL}}$  e  $\overrightarrow{\text{BM}}$  são vetores coincidentes com dois lados da face triangular.

## A.2 Baricentro das faces

Na seção 3.4.2 foi vista a aproximação numérica de integrais de superfície. Uma integral desse tipo, restrita à superfície de em uma face, pode ser expressa também considerando a transformação bilinear definida na seção anterior. Dessa forma resulta

$$\int_f \boldsymbol{\vartheta} \cdot d\mathbf{S} = \int_0^1 \int_0^1 \boldsymbol{\vartheta} \cdot (\partial_\nu \mathbf{r} \times \partial_\tau \mathbf{r}) \, d\nu \, d\tau. \quad (\text{A.8})$$

O lado direito da equação pode ser aproximado por uma quadratura de Gauss de um ponto, com o qual obtém-se

$$\int_f \boldsymbol{\vartheta} \cdot d\mathbf{S} \approx \left[ \boldsymbol{\vartheta} \cdot (\partial_\nu \mathbf{r} \times \partial_\tau \mathbf{r}) \right]_{\nu=\frac{1}{2}, \tau=\frac{1}{2}}. \quad (\text{A.9})$$

Como mencionado na seção anterior, a avaliação do produto  $\partial_\nu \mathbf{r} \times \partial_\tau \mathbf{r}$  no ponto médio de uma face quadrilateral conduz a expressão exata para o vetor área. Logo, pode-se escrever

$$\int_f \boldsymbol{\vartheta} \cdot d\mathbf{S} \approx \boldsymbol{\vartheta} \Big|_{\nu=\frac{1}{2}, \tau=\frac{1}{2}} \cdot \Delta \mathbf{S}_f. \quad (\text{A.10})$$

Consequentemente, a densidade de fluxo  $\boldsymbol{\vartheta}$  deve ser avaliada no ponto cujas coordenadas no plano transformado são  $\nu = \frac{1}{2}$  e  $\tau = \frac{1}{2}$ . Esse ponto é o baricentro dos vértices da face, cuja posição no espaço físico é dada pela média aritmética das coordenadas dos vértices da face. A menos que a face seja um retângulo, a posição do baricentro dos vértices será diferente da posição do baricentro da própria superfície da face. Entretanto, já que, pelos argumentos prévios, a aproximação numérica de uma integral na face requer avaliar o integrando sempre no baricentro dos vértices da face,

por simplicidade, esse ponto sempre é referido neste trabalho como baricentro da face e denotado como  $\tilde{f}$ . As figuras A.2, A.3, A.4 e A.5 apresentam as coordenadas que determinam a posição do baricentro das faces do tetraedro, do hexaedro, do prisma e da pirâmide, respectivamente. Essas coordenadas estão referidas ao sistema local definido em cada elemento.

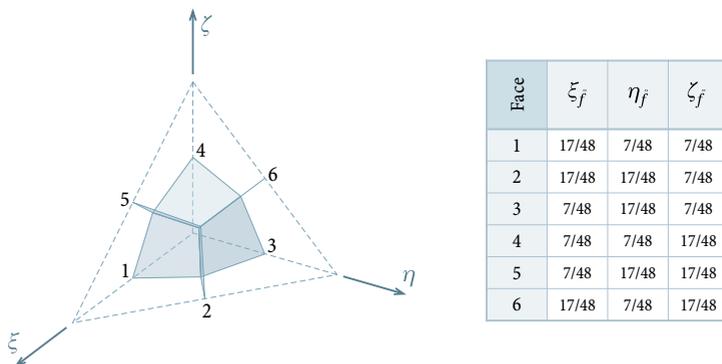


Figura A.2 – Coordenadas locais dos baricentros das faces do tetraedro.

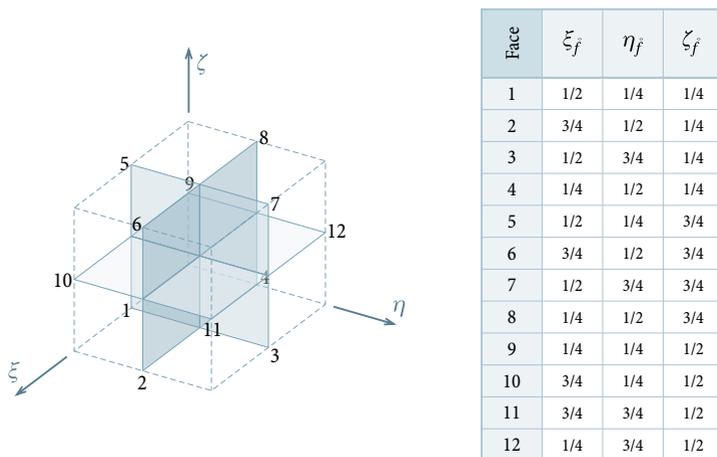
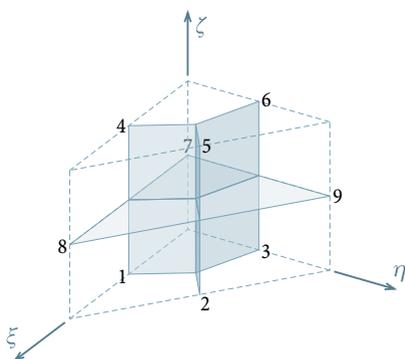
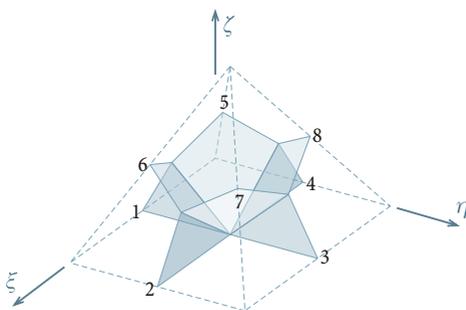


Figura A.3 – Coordenadas locais dos baricentros das faces do hexaedro.



Face	$\xi_f$	$\eta_f$	$\zeta_f$
1	5/12	1/6	1/4
2	5/12	5/12	1/4
3	1/6	5/12	1/4
4	5/12	1/6	3/4
5	5/12	5/12	3/4
6	1/6	5/12	3/4
7	5/24	5/24	1/2
8	7/12	5/24	1/2
9	5/24	7/12	1/2

Figura A.4 – Coordenadas locais dos baricentros das faces do prisma.



Face	$\xi_f$	$\eta_f$	$\zeta_f$
1	1/2	2/9	1/9
2	7/9	1/2	1/9
3	1/2	7/9	1/9
4	2/9	1/2	1/9
5	17/48	17/48	7/24
6	31/48	17/48	7/24
7	31/48	31/48	7/24
8	17/48	31/48	7/24

Figura A.5 – Coordenadas locais dos baricentros das faces da pirâmide.

### A.3 Cômputo do volume de um subelemento

Conforme visto na seção 3.4.1, o volume de um subelemento pode ser determinado mediante integração no espaço transformado, empregando a expressão

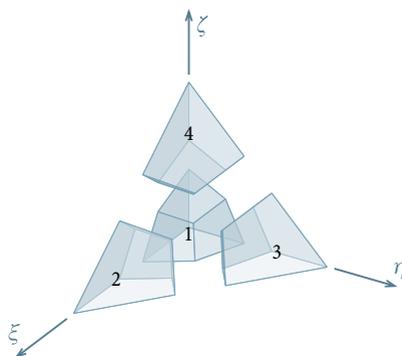
$$\Delta V_s = \int_s |\mathbf{J}| dV^{\xi\eta\zeta}. \tag{A.11}$$

Neste trabalho, o valor da integral foi computado por uma quadratura de Gauss de um ponto, isto é

$$\Delta V_s \approx |\mathbf{J}|_s \Delta V_s^{\xi\eta\zeta}, \tag{A.12}$$

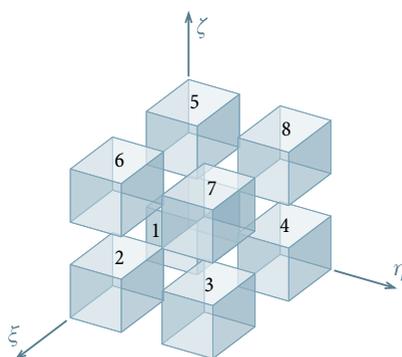
em que  $\hat{s}$  é o baricentro dos vértices do subelemento e  $\Delta V_s^{\xi\eta\zeta}$  é seu volume no espaço transformado. A equação (A.12) fornece um valor exato para os subelementos do tetraedro e aproximado para outros elementos.

Para utilização na equação (A.12), as coordenadas locais dos baricentros dos subelementos, além dos volumes no espaço transformado, são indicados nas figuras A.6, A.7, A.8 e A.9, respectivamente, para o tetraedro, o hexaedro, o prisma e a pirâmide.



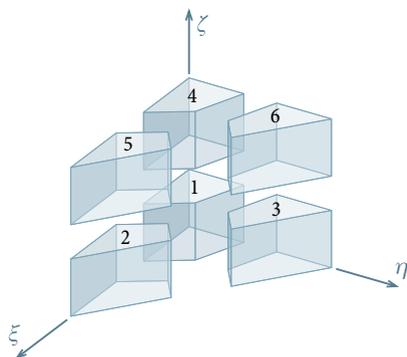
Subel.	$\xi_{\hat{s}}$	$\eta_{\hat{s}}$	$\zeta_{\hat{s}}$	$\Delta V_s^{\xi\eta\zeta}$
1	17/96	17/96	17/96	1/24
2	15/32	17/96	17/96	1/24
3	17/96	15/32	17/96	1/24
4	17/96	17/96	15/32	1/24

**Figura A.6** – Coordenadas locais dos baricentros e volume dos subelementos do tetraedro.



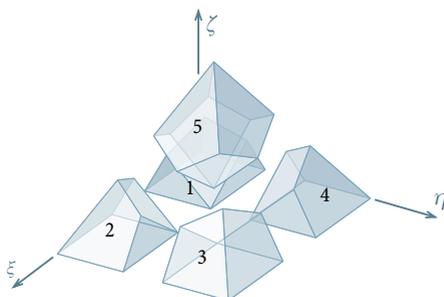
Subel.	$\xi_{\hat{s}}$	$\eta_{\hat{s}}$	$\zeta_{\hat{s}}$	$\Delta V_s^{\xi\eta\zeta}$
1	1/4	1/4	1/4	1/8
2	3/4	1/4	1/4	1/8
3	3/4	3/4	1/4	1/8
4	1/4	3/4	1/4	1/8
5	1/4	1/4	3/4	1/8
6	3/4	1/4	3/4	1/8
7	3/4	3/4	3/4	1/8
8	1/4	3/4	3/4	1/8

**Figura A.7** – Coordenadas locais dos baricentros e volume dos subelementos do hexaedro.



Subel.	$\xi_s$	$\eta_s$	$\zeta_s$	$\Delta V_s^{\xi\eta\zeta}$
1	5/24	5/24	1/4	1/12
2	7/12	5/24	1/4	1/12
3	5/24	7/12	1/4	1/12
4	5/24	5/24	3/4	1/12
5	7/12	5/24	3/4	1/12
6	5/24	7/12	3/4	1/12

**Figura A.8** – Coordenadas locais dos baricentros e volume dos subelementos do prisma.



Subel.	$\xi_s$	$\eta_s$	$\zeta_s$	$\Delta V_s^{\xi\eta\zeta}$
1	29/96	29/96	7/48	1/18
2	67/96	29/96	7/48	1/18
3	67/96	67/96	7/48	1/18
4	29/96	67/96	7/48	1/18
5	1/2	1/2	13/24	1/9

**Figura A.9** – Coordenadas locais dos baricentros e volume dos subelementos da pirâmide.