

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

**ESQUEMAS CENTRAIS PARA LEIS DE CONSERVAÇÃO
EM MEIOS POROSOS**

Denise Schimitz de Carvalho Tristão

Juiz de Fora
Agosto de 2013

Denise Schimitz de Carvalho Tristão

Esquemas Centrais para Leis de Conservação em Meios Porosos

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

Orientador: Prof. D.Sc. Maicon Ribeiro Correa

Coorientador: Prof. D.Sc. Grigori Chapiro

Juiz de Fora

2013

Carvalho Tristão, Denise Schimitz de

Esquemas Centrais para Leis de Conservação em Meios Porosos/Denise Schimitz de Carvalho Tristão. – Juiz de Fora: UFJF/MMC, 2013.

XII, 96 p. 29, 7cm.

Orientador: Maicon Ribeiro Correa

Coorientador: Grigori Chapiro

Dissertação (mestrado) – UFJF/MMC/Programa de Modelagem Computacional, 2013.

Referências Bibliográficas: p. 92 – 96.

1. Escoamento em Meios Porosos. 2. Leis de Conservação. 3. Métodos Numéricos. 4. Esquemas Centrais de Alta Ordem. 5. Métodos de Volumes Finitos. I. Correa, Maicon Ribeiro *et al.* II. Universidade Federal de Juiz de Fora, MMC, Programa de Modelagem Computacional.

Denise Schimitz de Carvalho Tristão

Esquemas Centrais para Leis de Conservação em Meios Porosos

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

Aprovada em 30 de Agosto de 2013.

BANCA EXAMINADORA

Prof. D.Sc. Maicon Ribeiro Correa - Orientador
Universidade Estadual de Campinas, PPGMC/UFJF

Prof. D.Sc. Elson Magalhães Toledo
Universidade Federal de Juiz de Fora

Prof. D.Sc. Sandra Mara Cardoso Malta
Laboratório Nacional de Computação Científica

*À minha querida filha Letícia, ao
meu paciente marido Paulo, aos
meus pais e minhas irmãs*

AGRADECIMENTOS

À minha filha Letícia, por todas as vezes em que ficou jogando quietinha do meu lado enquanto eu estudava, ao meu marido Paulo, pelo companheirismo e carinho dedicados nos momentos em que precisei, aos meus pais, José e Regina e minhas irmãs, Daniela, Débora e Jenniffer, pelo apoio e compreensão nos momentos em que não pude estar presente.

Aos amigos, indispensáveis em uma caminhada tão multidisciplinar, em especial aos companheiros: á matemática Daiana, ao engenheiro civil Marcelo, ao engenheiro eletricista Acáccio e ao analista de sistemas Bruno. E a todos que colaboraram para que nesse período eu adquirisse mais do que conhecimento técnico.

Aos orientadores, Maicon e Grigori, pela paciência, pela dedicação, pela motivação e pelo conhecimento que obtive no desenvolvimento desta dissertação, espero ter correspondido às expectativas. E a todos os professores do Programa de Pós-Graduação em Modelagem Computacional, por conseguirem exercer de forma tão inspiradora a função do magistério.

À todos do CGCO, em especial à Cristina, ao Carlos Alberto e à equipe do SIGA-Ensino, por me apoiarem nesta importante conquista. À UFJF pela oportunidade de conciliar meus estudos com meu trabalho, dando total apoio a qualificação de seus funcionários.

*"E você aprende que realmente
pode suportar... que realmente é
forte, e que pode ir muito mais
longe depois de pensar que não
se pode mais."*

O Menestrel - Shakespeare

RESUMO

O desenvolvimento de modelos matemáticos e métodos computacionais para a simulação de escoamentos em meios porosos é de grande interesse, devido à sua aplicação em diversas áreas da engenharia e ciências aplicadas. Em geral, na simulação numérica de um modelo de escoamento em meios porosos, são adotadas estratégias de desacoplamento dos sistemas de equações diferenciais parciais que o compõem. Este estudo recai sobre esquemas numéricos para leis de conservação hiperbólicas, cuja aproximação é não-trivial. Os esquemas de volumes finitos de alta resolução baseados no algoritmo REA (Reconstruct, Evolve, Average) têm sido empregados com considerável sucesso para a aproximação de leis de conservação. Recentemente, esquemas centrais de alta ordem, baseados nos métodos de Lax-Friedrichs e de Rusanov (Local Lax-Friedrichs) têm sido apresentados de forma a reduzir a excessiva difusão numérica característica destes esquemas de primeira ordem. Nesta dissertação apresentamos o estudo e a aplicação de esquemas de volumes finitos centrais de alta ordem para equações hiperbólicas que aparecem na modelagem de escoamentos em meios porosos.

Palavras-chave: Escoamento em Meios Porosos. Leis de Conservação. Métodos Numéricos. Esquemas Centrais de Alta Ordem. Métodos de Volumes Finitos.

ABSTRACT

The development of mathematical models and computational methods for the simulation of flow in porous media has a great interest because of its applications in engineering and other sciences. In general, in order to solve numerically the flow model in porous media the system of partial differential equations are decoupled. This study focus on the numerical schemes for the hyperbolic conservation laws, which solution is non-trivial. The finite volume schemes based on high order algorithm REA (Reconstruct, Evolve, Average) have been used with considerable success for the numerical solution of the conservation laws. Recently, high-order central schemes, based on the methods of Lax-Friedrichs and Rusanov (Local Lax-Friedrichs) have been presented, they reduce the excessive numerical diffusion presented in the first order schemes. In this dissertation we present the study and application of the high-order finite volume central schemes for hyperbolic equations as appear in the porous media flow modeling.

Keywords: Porous media Flow. Conservation Laws. Numerical Methods. Higher Order Central Schemes. Finite Volume Methods.

SUMÁRIO

1	Introdução	12
2	Modelagem de Escoamentos em Meios Porosos	16
2.1	Lei de Conservação da Massa	17
2.2	Lei de Darcy	20
2.2.1	<i>Forma Empírica</i>	20
2.2.2	<i>Forma Multidimensional</i>	22
2.2.3	<i>Lei de Darcy para Escoamentos Multifásicos</i>	23
2.3	Escoamento Multifásico Incompressível	24
2.3.1	<i>Escoamento Bifásico Unidimensional</i>	26
2.3.2	<i>Escoamento Trifásico Unidimensional</i>	27
2.3.3	<i>Escoamento Monofásico Unidimensional</i>	28
3	Estudo de Equações Hiperbólicas	30
3.1	Conceitos Básicos	30
3.2	A Equação de Advecção Linear	33
3.2.1	<i>Características e Solução Geral</i>	34
3.2.2	<i>O Problema de Riemann</i>	35
3.3	Sistemas Hiperbólicos Lineares	36
3.3.1	<i>Variáveis Características</i>	36
3.3.2	<i>Sistema em Termos das Variáveis Características</i>	37
3.4	Leis de Conservação	37
3.4.1	<i>Formas Integrais das Leis de Conservação</i>	38
3.4.2	<i>Exemplos de Leis de Conservação escalares</i>	38
3.4.3	<i>Não-Linearidades e Formação de Choques</i>	39
3.4.4	<i>Construção de Soluções Sobre Características</i>	40
3.4.5	<i>Inclinação das Características</i>	41
3.4.6	<i>Ondas de Choque</i>	43
3.4.7	<i>Ondas de Rarefação</i>	45

4	Esquemas Centrais de Alta Ordem	46
4.1	O Esquema de Lax-Friedrichs	47
4.1.1	<i>Um Fluxo Instável</i>	49
4.1.2	<i>O Fluxo de Lax-Friedrichs</i>	49
4.2	Esquemas Centrais	50
4.3	Central-Upwind	54
4.3.1	<i>Reconstrução Linear</i>	54
4.3.2	<i>Evolução</i>	55
4.3.3	<i>Projeção</i>	57
4.3.4	<i>Algoritmo de Runge-Kutta</i>	58
4.3.5	<i>Variações do Esquema Central-Upwind</i>	59
5	Experimentos Numéricos	61
5.1	Equação do Transporte Linear	62
5.2	Equação de Burgers	69
5.3	Escoamento Bifásico: Buckley-Leverett	73
5.4	Escoamento Trifásico: Sistema Não-Linear	81
6	Conclusões	91
	REFERÊNCIAS	92

Capítulo 1

Introdução

O desenvolvimento de modelos matemáticos e métodos computacionais para a simulação de escoamentos em meios porosos é de grande interesse, devido à sua aplicação em diversas áreas da engenharia e ciências aplicadas. Dentre estas aplicações, destacamos duas vertentes onde a modelagem computacional tem um papel essencial: a simulação numérica de escoamentos de águas subterrâneas [1, 2, 3] e de escoamentos em reservatórios de petróleo [4, 5].

O escoamento de um fluido incompressível em um meio poroso rígido saturado conduz a um sistema de equações diferenciais parciais (EDPs) composto pela equação de conservação de massa mais a lei de Darcy [6, 7], que relaciona a velocidade média do escoamento ao gradiente de um potencial hidráulico através do tensor de condutividade hidráulica. Estas EDPs formam um sistema de natureza elíptica, cuja resolução fornece o campo potencial e o campo de velocidades do fluido no meio poroso, também denominado de fluxo. Uma vez determinado o fluxo no meio poroso, podemos calcular o transporte de substâncias miscíveis na fase que escoar. Em geral este transporte é descrito por uma EDP parabólica, que contém termos de difusão, advecção e reação [8, 9]. Em escoamentos fortemente advectivos esta equação assume característica predominantemente hiperbólica. Outro caso de interesse no qual encontramos EDPs com características hiperbólicas é o de escoamentos onde fases imiscíveis preenchem os poros do meio [4, 7, 10], tais como o escoamento água e ar em solos [1, 11], o escoamento água e gás em simulações de sequestro de gás carbônico [12] e o escoamento de água e óleo na extração secundária em reservatórios de petróleo [4, 13, 14], ou ainda o escoamento trifásico água, óleo e gás. Assim, temos diversos modelos de escoamentos em meios porosos que envolvem EDPs

hiperbólicas, apresentadas de forma geral como leis de conservação.

O tratamento numérico de leis de conservação hiperbólicas é não trivial, uma vez que problemas desta natureza admitem soluções não-clássicas, descontínuas. Para o caso de equações não-lineares, mesmo dados iniciais suaves podem gerar soluções descontínuas [15]. Assim, o desenvolvimento de esquemas numéricos robustos e precisos para problemas hiperbólicos é um tema que vem sendo intensamente investigado. Dentro da ampla classe de métodos numéricos desenvolvidos, destacamos os esquemas de volumes finitos centrais de alta ordem, que provêm uma classe de métodos robustos e eficientes para leis de conservação, sendo livres da necessidade da resolução de problemas de Riemann locais [16, 17, 18, 19]. Exemplos de esquemas centrais amplamente utilizados são o método de primeira ordem de Lax e Friedrichs (LxF, [20]) e de segunda ordem de Nessyahu e Tadmor (NT, [17]) Em geral, esquemas de segunda ordem tal como o NT podem ser deduzidos a partir do algoritmo de Reconstrução, Evolução e Projeção (REA, do inglês Reconstruct, Evolve, Average), utilizando a reconstrução linear por partes da solução em cada célula, seguido pela aplicação de algum operador de evolução para o próximo instante de tempo baseado na forma integral da lei de conservação sobre células de uma malha dual e, por fim, pela projeção da solução sobre a malha original. A propriedade não oscilatória do esquema é fornecida pelo uso de limitadores de derivadas tais como o MinMod [16].

Os esquemas LxF e NT apresentam dissipação numérica $\mathcal{O}(\Delta x^{2r}/\Delta t)$, onde r é a ordem formal do método ($r = 1$ para LxF e $r = 2$ para NT). Esta dissipação, inversamente proporcional a Δt , pode comprometer seriamente a representação de ondas de choque e rarefação na solução do problema, uma vez que é comum o uso de passos de tempo pequenos para atender a restrições de estabilidade dos esquemas. Uma possibilidade para superar essa dificuldade é utilizar uma formulação semi-discreta (contínua no tempo e discreta no espaço). Neste sentido, podemos citar o trabalho de Rusanov, que também é conhecido como Método de Lax-Friedrichs Local (LLF) [16, 13]. Os métodos LxF e NT não admitem formulações semi-discretas. Seguindo a idéia do algoritmo REA, Kurganov e Tadmor apresentaram em [18] uma versão de alta ordem do esquema LLF, também baseada em aproximações lineares por partes do tipo MUSCL (Monotone Upstream-centered Schemes for Conservation Laws [21, 16]). Este esquema utiliza informações locais para obter estimativas mais precisas da espessura dos leques de Riemann. A solução é então evoluída separadamente em volumes de controle definidos sobre regiões não-suaves (que contêm

o leque de Riemann) e suaves. Após a evolução, os dados distribuídos de forma não-uniforme são projetados sobre a malha original. A formulação semi-discreta do método de Kurganov e Tadmor (KT) possui dissipação numérica $\mathcal{O}(\Delta x^3)$ [18], não padecendo da excessiva dissipação presente no método NT, quando passos de tempo pequenos são empregados [22, 23]. Esta dissipação numérica pode ser ainda mais reduzida pela consideração de velocidades de propagação unidirecionais. Isto leva aos chamados esquemas Central-Upwind (CUp) [19, 24].

O objetivo principal desse trabalho é estudar a aplicação de diferentes esquemas centrais de alta ordem, com formulação semi-discreta, para a aproximação de leis de conservação unidimensionais de interesse na modelagem de escoamento em meios porosos, com destaque para a análise dos resultados obtidos pelo emprego dos esquemas KT [18] e CUp [19], e de suas contrapartidas de primeira ordem. Para tal, esse trabalho está organizado da seguinte forma:

No Capítulo 2 são apresentados os conceitos relacionados à modelagem de escoamentos em meios porosos. Começamos com a definição do meio poroso e suas grandezas macroscópicas, que aparecem na dedução da forma pontual da conservação de massa. Depois apresentamos o desenvolvimento empírico da lei de Darcy para escoamentos monofásicos, comentando sua extensão para escoamentos multifásicos e introduzindo o modelo de permeabilidade relativa. Finalizamos o Capítulo, com modelos matemáticos simplificados unidimensionais que descrevem o escoamento de um ou mais fluidos incompressíveis em meios porosos.

No Capítulo 3 são apresentados os conceitos básicos sobre equações hiperbólicas lineares e não lineares que auxiliarão na compreensão da dedução dos esquemas centrais, principalmente nas questões referentes à solução de problemas de Riemann, com o surgimento de ondas de choque e rarefação.

No Capítulo 4 são apresentados conceitos relacionados à dedução de métodos numéricos centrais. Discutimos a relação entre a difusão numérica e estabilidade do esquema LxF, e delineamos a dedução do esquema CUp [19, 24]. Por fim, comentamos algumas variações que levam aos esquemas KT [18] e LLF, além de apresentar um esquema baseado em Malha Dual.

No Capítulo 5 apresentamos diversos experimentos numéricos baseados na aproximação de modelos deduzidos no Capítulo 2. Tais experimentos visam o estudo da precisão e da es-

tabilidade dos esquemas apresentados no Capítulo 4, em problemas que possuem soluções descontínuas, típicas das encontradas na modelagem de escoamentos complexos em meios porosos. Finalmente, no Capítulo 6, são apresentadas as conclusões da dissertação e comentários finais.

Capítulo 2

Modelagem de Escoamentos em Meios Porosos

A modelagem de escoamentos em meios porosos envolve interações entre a matriz porosa, que constitui uma fase sólida com espaços vazios denominados poros, e os fluidos que escoam, tais como óleo, água e gases [1, 25]. A maneira como os poros estão preenchidos com as fases que escoam é determinante para caracterizar o escoamento. Aqui definimos *fase* como uma porção do sistema que é separada das outras, na escala microscópica, por um contorno bem definido, chamado de interface. Uma fase pode ser composta por mais de uma *espécie* (componente) que é miscível na fase, como por exemplo água e sal. Quando há mais de uma fase preenchendo os espaços vazios, temos um escoamento multifásico, como por exemplo o escoamento água e ar em solos [1, 11], o escoamento água e gás em simulações de sequestro de gás carbônico [12], o escoamento de água e óleo na extração secundária em reservatórios de petróleo [4, 13, 14] ou ainda o escoamento de água, óleo e gás em um reservatório de petróleo [10].

O escoamento em um meio poroso geralmente se dá a partir do gradiente de um potencial tal como a pressão, a gravidade, forças capilares e forças fisico-químicas, envolvendo fenômenos de difusão, dispersão, convecção e reação. A matriz porosa pode se deformar a partir de solicitações mecânicas [26], térmicas, fisico-químicas [27], etc.

Neste capítulo apresentaremos modelos matemáticos básicos que descrevem escoamentos não reativos de fases incompressíveis em meios porosos rígidos, desprezando os efeitos de capilaridade bem como os gravitacionais. Tais modelos, embora simplificados do ponto de vista físico, apresentam verdadeiros desafios do ponto de vista da análise numérica,

exigindo, como veremos no próximo capítulo, esquemas numéricos não triviais para sua aproximação.

2.1 Lei de Conservação da Massa

Embora neste trabalho nos restrinjamos às aproximações numéricas de problemas unidimensionais, apresentaremos os modelos em \mathbb{R}^d ($d = 1, 2, 3$), simplificando para o caso $d = 1$, quando for necessário. Na mecânica do contínuo a microescala é a escala molecular, em meios porosos é a escala dos poros. Modelar na escala microscópica é impraticável para a maioria das aplicações relacionadas a meios porosos. Abaixo citamos algumas grandezas de extrema importância que surgem na macroscopização de modelos multifásicos e que não possuem representação na microescala:

- A *porosidade* do meio, definida como

$$\phi = \frac{V_{\text{poros}}}{V} \quad (2.1)$$

onde V é o volume total de um volume elementar representativo (que é definido na escala microscópica e que está associado a um ponto na escala macroscópica) e V_{poros} o volume de vazios em V pelos quais os fluidos possam escoar.

- A *fração de volumes* de uma fase α , definida como

$$\phi_\alpha = \frac{V_\alpha}{V} \quad (2.2)$$

onde V_α é a porção de V que é ocupada pela fase α .

- Para uma fase α que escoa, podemos definir sua *saturação* como

$$s_\alpha = \frac{V_\alpha}{V_{\text{poros}}} \quad (2.3)$$

que representa a fração dos vazios que está preenchida pela fase α .

Pelas definições acima, vemos que a fração de volumes e a saturação de uma fase α que escoar, se relacionam através da porosidade pela equação

$$\phi_\alpha = \phi s_\alpha. \quad (2.4)$$

Para o caso de escoamentos monofásicos (ou saturados), temos que os conceitos de fração de volumes e porosidade se equivalem.

Consideremos M_α a massa da fase α de um corpo que ocupa a região fixa $\Omega \subset \mathbb{R}^d$ num instante $t \in I$. Definimos sua massa específica aparente pontual por

$$\rho_\alpha = \frac{M_\alpha}{V}$$

onde M_α é a massa da fase α existente em V , ou seja:

$$\begin{aligned} \rho_\alpha : \Omega \times I &\longrightarrow \mathbb{R} \\ (\mathbf{x}, t) &\longmapsto \rho_\alpha(\mathbf{x}, t). \end{aligned}$$

A massa específica intrínseca (média) ou real, pode então ser definida como

$$\rho_\alpha^r = \frac{M_\alpha}{V_{\text{poros}}} = \frac{\rho_\alpha}{\phi_\alpha},$$

onde ϕ_α é a fração de volumes da fase α .

Na existência de reações que resultem na troca de massa entre as fases e de fontes de massa distribuídas no domínio Ω , o balanço de massa é postulado como

$$\frac{dM_\alpha}{dt} + \dot{m}_\alpha = R_\alpha + F_\alpha, \quad (2.5)$$

onde dM_α/dt é a vazão volumétrica, \dot{m}_α a vazão mássica que cruza a fronteira Γ por unidade de tempo, R_α é a produção de massa da fase α , oriunda das outras fases e F_α é a massa da fase α adicionada ou retirada por fontes. Tais quantidades são dadas por:

$$\frac{dM_\alpha}{dt} = \frac{d}{dt} \int_\Omega \rho_\alpha d\Omega, \quad (2.6)$$

$$\dot{m}_\alpha = \int_\Gamma \rho_\alpha \mathbf{v}_\alpha \cdot \mathbf{n} d\Gamma, \quad (2.7)$$

$$R_\alpha = \int_\Omega r_\alpha d\Omega, \quad (2.8)$$

$$F_\alpha = \int_\Omega f_\alpha d\Omega, \quad (2.9)$$

com \mathbf{v}_α representando a velocidade da fase α , \mathbf{n} o vetor normal unitário externo à superfície Γ , r_α a densidade de produção de massa da fase devido às trocas e f_α devido às fontes.

A partir das equações (2.6), (2.7), (2.8) e (2.9), podemos reescrever a equação (2.5) na forma integral:

$$\frac{d}{dt} \int_\Omega \rho_\alpha d\Omega + \int_\Gamma \rho_\alpha \mathbf{v}_\alpha \cdot \mathbf{n} d\Gamma = \int_\Omega r_\alpha d\Omega + \int_\Omega f_\alpha d\Omega. \quad (2.10)$$

Como estamos considerando uma descrição Euleriana do processo, o domínio Ω é fixo e podemos escrever

$$\frac{d}{dt} \int_\Omega \rho_\alpha d\Omega = \int_\Omega \frac{\partial \rho_\alpha}{\partial t} d\Omega.$$

Pelo Teorema da Divergência temos ainda:

$$\int_\Gamma \rho_\alpha \mathbf{v}_\alpha \cdot \mathbf{n} d\Gamma = \int_\Omega \operatorname{div}(\rho_\alpha \mathbf{v}_\alpha) d\Omega,$$

e assim podemos escrever (2.10) como

$$\int_\Omega \left\{ \frac{\partial \rho_\alpha}{\partial t} + \operatorname{div}(\rho_\alpha \mathbf{v}_\alpha) - r_\alpha - f_\alpha \right\} d\Omega = 0.$$

Supondo regularidade dos campos, e como Ω é qualquer, chegamos à forma pontual da conservação da massa

$$\frac{\partial \rho_\alpha}{\partial t} + \operatorname{div}(\rho_\alpha \mathbf{v}_\alpha) = r_\alpha + f_\alpha, \quad (2.11)$$

ou, em termos da massa específica real:

$$\frac{\partial}{\partial t}(\rho_\alpha^r \phi_\alpha) + \operatorname{div}(\rho_\alpha^r \phi_\alpha \mathbf{v}_\alpha) = r_\alpha + f_\alpha. \quad (2.12)$$

Todos os modelos apresentados nesta dissertação tratarão de escoamentos em meios porosos rígidos, cujos vazios (poros) estão completamente preenchidos por fases incompressíveis, que escoam sem troca de massa ($r_\alpha = 0$). Adicionalmente, a existência de poços será tratada através de condições de contorno, de forma que não há fontes concentradas ou distribuídas no domínio ($f_\alpha = 0$). Sob as hipóteses de meio poroso rígido e fases incompressíveis, temos que a porosidade ϕ e as massas específicas ρ_α são constantes, de forma que a equação (2.12) pode ser reescrita como

$$\phi \frac{\partial s_\alpha}{\partial t} + \operatorname{div} \mathbf{u}_\alpha = 0, \quad (2.13)$$

onde $\mathbf{u}_\alpha = \phi_\alpha \mathbf{v}_\alpha$ representa a velocidade de Darcy da fase, que será discutida na próxima seção, e s_α é a saturação da fase.

2.2 Lei de Darcy

A lei de Darcy pode ser entendida como um caso particular da lei de conservação de momento linear para um fluido newtoniano que escoar em um meio poroso [16]. Neste sentido, apresentaremos a lei de Darcy segundo o seu desenvolvimento empírico para um escoamento monofásico, e em seguida comentamos sua extensão para escoamentos multifásicos, introduzindo o modelo de permeabilidade relativa.

2.2.1 Forma Empírica

A relação entre a taxa de escoamento de um fluido em um meio poroso e a diferença de potencial a ele aplicada foi primeiramente quantificada por Henri Darcy em 1856 [6]. Seu experimento consistia em fazer escoar, sob pressão, um fluido de massa específica e viscosidade uniformes através de um tubo cilíndrico de seção transversal A , com uma parte de espessura L preenchida com areia completamente saturada pelo fluido, conforme mostra a Figura 2.1.

A carga hidráulica h é medida, através de piezômetros, em dois pontos do tubo. Esta grandeza mede a energia potencial de uma massa unitária do fluido localizado no ponto

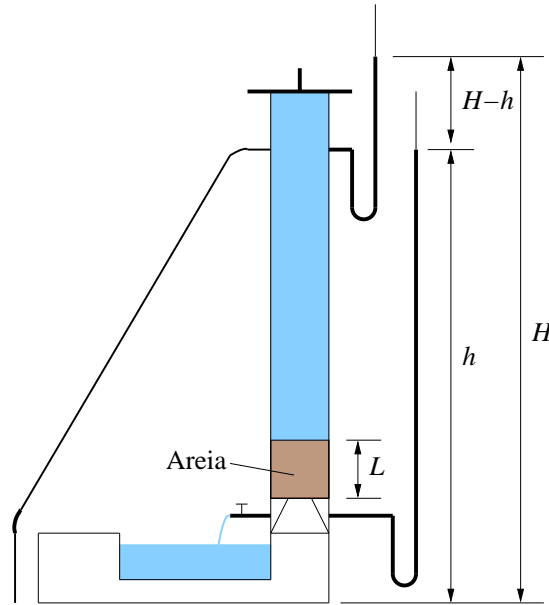


Figura 2.1: Esquema do experimento de Darcy.

em estudo, possuindo duas componentes,

$$h = z + \frac{p}{\rho g} \quad (2.14)$$

onde z é a elevação do ponto em relação a um nível, p é a pressão no fluido, ρ sua massa específica e g a magnitude da aceleração da gravidade. O termo $p/\rho g$ mede a elevação do fluido no piezômetro. Experimentalmente verifica-se que a taxa de escoamento Q (volume do fluido que atravessa a seção por unidade de tempo) é:

- proporcional à área A da seção transversal;
- proporcional à diferença de carga ($H - h$) e
- inversamente proporcional ao comprimento L

$$Q \propto A \frac{H - h}{L}.$$

Denominando a constante de proporcionalidade por condutividade hidráulica K e expressando em termos da taxa de variação da carga hidráulica, podemos escrever a forma unidimensional da lei de Darcy

$$Q = -KA \frac{dh}{dt}. \quad (2.15)$$

É muito frequente o uso da velocidade de Darcy, dada por

$$\mathbf{u} = \frac{Q}{A} = -K \frac{dh}{dl}.$$

Esta é uma velocidade média tomada a partir da vazão sobre toda a seção A , e não deve ser confundida com a velocidade real do fluido nos poros, que deve ser medida a partir da área efetiva dos poros na seção. A relação entre elas se dá por

$$\mathbf{v} = \frac{\mathbf{u}}{\phi} \quad (2.16)$$

onde ϕ é a porosidade efetiva (poros que possuem fluido em movimento) do meio.

2.2.2 Forma Multidimensional

A condutividade hidráulica é uma grandeza dependente das características do meio poroso e do fluido que escoar. Verifica-se que para um dado meio

$$K \propto \frac{\rho g}{\mu}$$

com μ sendo a viscosidade dinâmica do fluido, ou ainda

$$K = \frac{k \rho g}{\mu}$$

onde k é uma grandeza puramente geométrica, à qual chamaremos de permeabilidade intrínseca do meio poroso.

Para o caso mais geral, onde a matriz porosa é anisotrópica, \mathbf{K} é um tensor de segunda ordem positivo definido e podemos escrever:

$$\mathbf{u} = -\mathbf{K} \nabla h \quad (2.17)$$

ou, em termos do tensor permeabilidade intrínseca k ,

$$\mathbf{u} = -\frac{k}{\mu} (\nabla p - \rho g \nabla z) \quad (2.18)$$

onde p é a pressão aplicada no meio poroso, também denominada pressão no poro e z é

uma função que indica a elevação do ponto. Para maiores detalhes indicamos, além do texto fundamental de BEAR [1], as referências [28] e [29].

2.2.3 Lei de Darcy para Escoamentos Multifásicos

A lei de Darcy é estabelecida para escoamentos monofásicos, onde a fase que escoar preenche completamente os poros do meio. A sua aplicação para escoamentos multifásicos se dá a partir da hipótese de que a lei é válida para cada uma das fases que escoam

$$\mathbf{u}_\alpha = -\frac{k_\alpha}{\mu_\alpha} \nabla p_\alpha,$$

ou seja, a velocidade de Darcy da fase α está relacionada com o gradiente de pressão na fase através de uma função k_α , que denominaremos de permeabilidade da fase α . Por motivos de simplicidade de notação, omitimos os termos oriundos da ação gravitacional. Verifica-se que

- A mistura pode ter diferentes permeabilidades para diferentes fluidos (a permeabilidade da fase não é mais uma grandeza puramente geométrica);
- A permeabilidade da fase é dependente da presença das outras fases na mistura.

Com isso, postula-se que a permeabilidade da fase pode ser decomposta em

- Um termo dependente da geometria e distribuição dos poros;
- Um termo dependente da saturação

ou seja,

$$k_\alpha(\mathbf{x}, s_\alpha) = k(\mathbf{x})k_{r\alpha}(s_\alpha(\mathbf{x}))$$

onde $k(\mathbf{x})$ é a permeabilidade intrínseca do meio e $k_{r\alpha}(s_\alpha(\mathbf{x}))$ é a permeabilidade relativa da fase α . A permeabilidade relativa

$$k_{r\alpha} = \frac{k_\alpha}{k}$$

é um número adimensional que indica o grau com que a presença de outras fases prejudica o escoamento da fase α . Este modelo, conhecido como modelo da permeabilidade relativa, foi introduzido por Muskat [4, 30]. De uma forma geral a permeabilidade relativa de uma

fase é dada como uma função crescente da saturação desta fase e pode estar sujeita à histerese na medida em que a saturação da fase aumenta ou diminui [31, 7]. Com isso, escrevemos a lei de Darcy para escoamentos multifásicos como

$$\mathbf{u}_\alpha = -k \frac{k_{r\alpha}}{\mu_\alpha} \nabla p_\alpha. \quad (2.19)$$

O quociente $k_{r\alpha}/\mu_\alpha$ mede o grau de mobilidade da fase num meio poroso com permeabilidade intrínseca k , ou seja, a facilidade ou a dificuldade com que uma fase escoar no meio. Assim, definindo a mobilidade da fase α como

$$\lambda_\alpha = \frac{k_{r\alpha}}{\mu_\alpha}, \quad (2.20)$$

reescrevemos a lei de Darcy na forma

$$\mathbf{u}_\alpha = -k \lambda_\alpha \nabla p_\alpha. \quad (2.21)$$

A mobilidade total (da mistura) e o fluxo fracionário da fase α são definidas como

$$\lambda = \sum_\alpha \lambda_\alpha \quad (2.22)$$

e

$$f_\alpha(s_\alpha) = \frac{\lambda_\alpha}{\lambda}, \quad (2.23)$$

respectivamente, o que nos permite reescrever a lei de Darcy como

$$\mathbf{u}_\alpha = -k \lambda f_\alpha \nabla p_\alpha. \quad (2.24)$$

2.3 Escoamento Multifásico Incompressível

Nesta seção, com base na lei de conservação de massa (2.13) e na lei de Darcy (2.24), apresentaremos alguns modelos matemáticos simplificados para a modelagem de diferentes escoamentos em meios porosos.

Vamos considerar o escoamento de m fases incompressíveis e imiscíveis ($m \leq 3$), sem efeitos capilares e gravitacionais. Seja $s_\alpha : \Omega \times I \rightarrow [s_\alpha^{\min}, s_\alpha^{\max}] \in (0, 1)$ a saturação da fase

α ($\alpha = 1, \dots, m$) que escoam, satisfazendo

$$\sum_{\alpha=1}^m s_{\alpha} = 1. \quad (2.25)$$

Como não consideramos os efeitos de capilaridade, temos uma pressão p que atua em todas as fases, ou seja, $p_{\alpha} = p$. Para modelar o escoamento, utilizaremos o sistema de EDP's composto por $m - 1$ equações de balanço de massa para as $m - 1$ primeiras fases, mais uma equação de balanço de massa para a mistura, dada pela soma em α da equação (2.13), ou seja

$$\operatorname{div} \mathbf{u} = 0,$$

onde \mathbf{u} é a velocidade total da mistura

$$\mathbf{u} = \sum_{\alpha=1}^m \mathbf{u}_{\alpha} = k\lambda \nabla p. \quad (2.26)$$

Assim, o sistema fica escrito em termos da pressão p , da velocidade total da mistura \mathbf{u} e das $m - 1$ saturações, determinando o problema:

Problema M: Encontrar a pressão $p : \Omega \times I \rightarrow \mathbb{R}$, a velocidade de Darcy da mistura $\mathbf{u} : \Omega \times I \rightarrow \mathbb{R}^d$ e as saturações $s_{\alpha} : \Omega \times I \rightarrow [s_{\alpha}^{\min}, s_{\alpha}^{\max}] \in (0, 1)$ tais que

$$\mathbf{u} = -k\lambda \nabla p \quad \text{em } \Omega \times I \quad (2.27)$$

$$\operatorname{div} \mathbf{u} = 0 \quad \text{em } \Omega \times I \quad (2.28)$$

$$\phi \frac{\partial s_{\alpha}}{\partial t} + \operatorname{div} (f_{\alpha} \mathbf{u}) = 0 \quad \text{em } \Omega \times I, \quad \alpha = 1, \dots, m - 1 \quad (2.29)$$

$$s_m = 1 - \sum_{\alpha=1}^{m-1} s_{\alpha} \quad (2.30)$$

satisfazendo as condições de contorno

$$\mathbf{u} \cdot \mathbf{n} = \bar{q} \quad \text{sobre } \Gamma_{\mathbf{u}} \times I \quad (2.31)$$

$$p = \bar{p} \quad \text{sobre } \Gamma_p \times I \quad (2.32)$$

onde $\Gamma = \Gamma_{\mathbf{u}} \cup \Gamma_p$, e as condições iniciais $s_\alpha(\mathbf{x}, 0) = s_{\alpha 0}(\mathbf{x})$, $\alpha = 1, \dots, m-1$ e $s_m(\mathbf{x}, 0) = 1 - \sum_{\alpha=1}^{m-1} s_\alpha(\mathbf{x}, 0)$.

Para o fechamento deste sistema é necessária a inclusão de relações para a permeabilidade relativa das fases, o que será comentado nas seções a seguir.

2.3.1 Escoamento Bifásico Unidimensional

Consideremos agora o escoamento de duas fases incompressíveis e imiscíveis denotadas pelos índices $\alpha = 1$ para a fase molhante e $\alpha = 2$ para a fase não-molhante. Tomaremos as seguintes hipóteses simplificadoras [10]

- Escoamento unidimensional na direção x ;
- Geometria uniforme em y e z , com área constante A ;
- Porosidade constante.

Sob estas hipóteses, o balanço de massa para a mistura (2.28) pode ser escrito como

$$\frac{\partial u}{\partial x} = 0,$$

o que resulta em

$$u = \text{cte}$$

ou seja, a velocidade total da mistura é constante. O balanço de massa (2.29) da fase molhante se torna

$$A\phi \frac{\partial s_1}{\partial t} + A \frac{\partial}{\partial x} (f_1 u) = 0$$

e, como a velocidade total é constante, podemos escrever

$$\frac{\partial s_1}{\partial t} + \frac{u}{\phi} \frac{\partial f_1}{\partial x} = 0. \quad (2.33)$$

Utilizando a relação (2.23) temos

$$f_1 = \frac{\lambda_1}{\lambda_1 + \lambda_2} = \frac{k_{r1}/\mu_1}{k_{r1}/\mu_1 + k_{r2}/\mu_2}$$

ou seja,

$$f_1 = \frac{k_{r_1}}{k_{r_1} + ak_{r_2}} \quad (2.34)$$

onde $a = \mu_1/\mu_2$ é a razão de viscosidades. Com isso, a equação (2.33) pode ser reescrita como

$$\frac{\partial s_1}{\partial t} + \frac{u}{\phi} \frac{\partial}{\partial x} \left(\frac{k_{r_1}}{k_{r_1} + ak_{r_2}} \right) = 0, \quad (2.35)$$

que é conhecida como equação de Buckley-Leverett [16].

Em relação às permeabilidades relativas, verifica-se experimentalmente que a forma da curva pode depender da história da saturação das fases, caso se encontre em um ciclo de embebedimento ou drenagem, originando o efeito de histerese [31, 7]. Nesta dissertação, assumiremos que as permeabilidades relativas das fases serão descritas segundo as relações de Corey quadráticas [31, 7]

$$k_{r\alpha}(s_\alpha) = \left(\frac{s_\alpha - s_{r\alpha}}{1 - s_{r\alpha}} \right)^2 \quad (2.36)$$

onde $s_{r\alpha}$ é a saturação residual da fase α . Do ponto de vista matemático, podemos tomar, sem perda de generalidade, $s_{r\alpha} = 0$ e escrever:

$$\frac{\partial s}{\partial t} + \frac{u}{\phi} \frac{\partial}{\partial x} \left[\frac{s^2}{s^2 + a(1-s)^2} \right] = 0, \quad (2.37)$$

onde s é a saturação da fase molhante. Como veremos no próximo capítulo, a equação de Buckley-Leverett (2.37) consiste em uma equação hiperbólica não linear, sendo largamente empregada como protótipo para teste de esquemas numéricos para esta classe de problemas.

2.3.2 Escoamento Trifásico Unidimensional

Sejam agora três fases incompressíveis e imiscíveis ($m = 3$) em um escoamento unidimensional na direção x , como descrito na seção anterior. Utilizando as mesmas hipóteses simplificadoras, podemos reescrever o Problema M através de um sistema de duas equações hiperbólicas, para as fases $\alpha = 1$ e $\alpha = 2$

$$\frac{\partial s_1}{\partial t} + \frac{u}{\phi} \frac{\partial f_1}{\partial x} = 0 \quad (2.38)$$

$$\frac{\partial s_2}{\partial t} + \frac{u}{\phi} \frac{\partial f_2}{\partial x} = 0 \quad (2.39)$$

mais a relação algébrica para a saturação da fase $\alpha = 3$

$$s_3 = 1 - s_1 - s_2. \quad (2.40)$$

Podemos ainda reescrever as equações (2.38) e (2.39) na forma vetorial

$$\frac{\partial \mathbf{s}}{\partial t} + \frac{u}{\phi} \frac{\partial \mathbf{f}}{\partial x} = \mathbf{0} \quad (2.41)$$

onde

$$\mathbf{s} = \begin{bmatrix} s_1 \\ s_2 \end{bmatrix} \quad \text{e} \quad \mathbf{f} = \begin{bmatrix} f_1 \\ f_2 \end{bmatrix}.$$

A determinação de permeabilidades relativas para o problema trifásico é uma questão mais complexa do que o considerado para o problema bifásico [7]. No caso trifásico é obtido experimentalmente um diagrama ternário que relaciona o estado do sistema para diferentes valores das saturações das fases. Segundo CHEN [7], há experimentos que embasam o uso das relações de Corey (2.36) para a fase molhante e a fase não molhante. Uma terceira relação, em geral dependente das saturações dessas duas fases, é então empregada para a fase intermediária.

Nesta dissertação, utilizaremos de forma simplificada as relações de Corey quadráticas (2.36) para as três fases. O uso de tais relações, pode originar perda de hiperbolicidade nos casos em que não são considerados os efeitos de capilaridade [32, 33, 34, 35, 36, 37]. Tal tema será abordado de forma numérica no Capítulo 4.

2.3.3 Escoamento Monofásico Unidimensional

Sob as hipóteses consideradas, vimos que a velocidade total é constante. Com isso, o caso de um escoamento monofásico, recai sobre o simples problema em que o fluxo é constante em todo o domínio. Contudo, pode ser do interesse determinar a concentração, ou densidade, de uma substância presente na fase que escoar [16]. A presença da substância é pequena o suficiente para não afetar a dinâmica do escoamento da fase. Neste caso, podemos calcular o transporte da j -ésima substância miscível na fase que escoar. Em

geral, este transporte é descrito pela EDP parabólica, que contém termos de difusão, advecção e reação [8, 9],

$$\phi \frac{\partial c_j}{\partial t} + u \frac{\partial c_j}{\partial x} - \frac{\partial}{\partial x} \left(D_j \frac{\partial c_j}{\partial x} \right) + r_j = 0 \quad (2.42)$$

onde u é a velocidade do escoamento da fase, D_j é o coeficiente de difusão/dispersão da j -ésima substância transportada e r_j é o termo que computa trocas de massa (por exemplo reações) para esta substância. Um modelo de grande interesse representado por esta equação é o transporte de contaminantes orgânicos em meios porosos [8, 9]. Neste trabalho trataremos apenas do transporte predominantemente advectivo de substâncias não-reativas, de forma que a equação (2.42) pode ser simplificada na forma

$$\frac{\partial c_j}{\partial t} + \frac{u}{\phi} \frac{\partial c_j}{\partial x} = 0 \quad (2.43)$$

que representa a equação da onda de primeira ordem, constituindo o protótipo de equação hiperbólica linear.

Capítulo 3

Estudo de Equações Hiperbólicas

Neste capítulo serão estudados alguns conceitos básicos sobre equações hiperbólicas lineares e não-lineares [38, 15], sendo destacado o estudo de problemas de Riemann que auxiliarão na compreensão da dedução dos esquemas centrais que serão apresentados no Capítulo 4. Adotamos neste capítulo a notação comum à maioria dos livros e artigos de leis de conservação, onde a quantidade conservada é denotada pela letra \mathbf{u} , sem risco de confusão com a notação utilizada no capítulo de modelagem, onde a quantidade conservada foi denotada pela letra \mathbf{s} .

3.1 Conceitos Básicos

Seja o seguinte sistema de m equações diferenciais parciais de primeira ordem com m incógnitas u_i que dependem do espaço e da variável associada ao tempo, t :

$$\frac{\partial u_i}{\partial t} + \sum_{j=1}^m a_{ij}(x, t, u_1, \dots, u_m) \frac{\partial u_j}{\partial x} + b_i(x, t, u_1, \dots, u_m) = 0, \quad (3.1)$$

para $i = 1, \dots, m$. Aqui, u_i são as variáveis dependentes e x, t são as variáveis independentes. Este sistema pode ser escrito na forma matricial como

$$\mathbf{u}_t + \mathbf{A}\mathbf{u}_x + \mathbf{b} = \mathbf{0} \quad (3.2)$$

com

$$\mathbf{u} = \begin{bmatrix} u_1 \\ u_2 \\ \vdots \\ u_m \end{bmatrix}, \quad \mathbf{b} = \begin{bmatrix} b_1 \\ b_2 \\ \vdots \\ b_m \end{bmatrix}, \quad \mathbf{A} = \begin{bmatrix} a_{11} & \cdots & a_{1m} \\ a_{21} & \cdots & a_{2m} \\ \vdots & \vdots & \vdots \\ a_{m1} & \cdots & a_{mm} \end{bmatrix}. \quad (3.3)$$

Segundo [38], podemos classificar o sistema (3.2) da seguinte forma:

- Se as entradas a_{ij} da matriz \mathbf{A} forem todas constantes e as componentes b_i do vetor \mathbf{b} também forem constantes, então o sistema (3.2) é linear com coeficientes constantes;
- Se $a_{ij} = a_{ij}(x, t)$ e $b_i = b_i(x, t)$, o sistema é linear com coeficientes variáveis;
- O sistema é ainda linear se \mathbf{b} depende linearmente de \mathbf{u} ;
- O sistema é chamado de quase-linear se a matriz dos coeficientes \mathbf{A} é uma função apenas do vetor \mathbf{u} , isto é $\mathbf{A} = \mathbf{A}(\mathbf{u})$;
- Se $\mathbf{b} = \mathbf{0}$, então o sistema é dito homogêneo.

Para um sistema de equações diferenciais parciais (EDPs) na forma (3.2), é necessário definir o domínio das variáveis independentes x e t . Usualmente, x é um subintervalo da linha real, $x_L < x < x_R$, denominado domínio espacial das EDPs, ou apenas domínio. Condições de contorno devem ser especificadas nos pontos x_L e/ou x_R . A variação em t ocorre em $t_0 < t < \infty$, sendo necessária a especificação de uma condição inicial em $t = t_0$.

Definição 3.1 (Leis de Conservação). *Leis de conservação são sistemas de equações diferenciais parciais que podem ser escritos na forma*

$$\mathbf{u}_t + \mathbf{f}(\mathbf{u})_x = \mathbf{0}, \quad (3.4)$$

onde

$$\mathbf{u} = \begin{bmatrix} u_1 \\ u_2 \\ \vdots \\ u_m \end{bmatrix}, \quad \mathbf{f}(\mathbf{u}) = \begin{bmatrix} f_1(u_1, \dots, u_m) \\ f_2(u_1, \dots, u_m) \\ \vdots \\ f_m(u_1, \dots, u_m) \end{bmatrix}. \quad (3.5)$$

\mathbf{u} é denominado o vetor das variáveis conservadas e $\mathbf{f}(\mathbf{u})$ é o vetor dos fluxos.

Exemplo 3.1 (Escoamento Trifásico). *O sistema de equações (2.41), que modela o escoamento trifásico, incompressível representa um sistema de leis de conservação.*

Definição 3.2 (Matriz Jacobiana.). *A matriz jacobiana, ou apenas jacobiano, da função de fluxo $\mathbf{f}(\mathbf{u})$ em (3.4) é a matriz*

$$\mathbf{A}(\mathbf{u}) = \frac{\partial \mathbf{f}}{\partial \mathbf{u}} = \begin{bmatrix} \frac{\partial f_1}{\partial u_1} & \dots & \frac{\partial f_1}{\partial u_m} \\ \vdots & \vdots & \vdots \\ \frac{\partial f_m}{\partial u_1} & \dots & \frac{\partial f_m}{\partial u_m} \end{bmatrix}. \quad (3.6)$$

Note que leis de conservação na forma (3.4) podem ser escritas na forma quase-linear (3.2), com $\mathbf{b} = \mathbf{0}$, pela aplicação da regra da cadeia no segundo termo da equação (3.4), ou seja, substituindo

$$\frac{\partial \mathbf{f}(\mathbf{u})}{\partial x} = \frac{\partial \mathbf{f}}{\partial \mathbf{u}} \frac{\partial \mathbf{u}}{\partial x}$$

em (3.4), temos:

$$\mathbf{u}_t + \mathbf{A}(\mathbf{u}) \mathbf{u}_x = \mathbf{0},$$

que é um caso especial de (3.2).

Definição 3.3 (Autovalores). *Os autovalores λ_i de uma matriz \mathbf{A} são as soluções do polinômio característico*

$$|\mathbf{A} - \lambda \mathbf{I}| = \det(\mathbf{A} - \lambda \mathbf{I}) = 0, \quad (3.7)$$

onde \mathbf{I} é a matriz identidade. Os autovalores da matriz dos coeficientes \mathbf{A} de um sistema na forma (3.2) são chamados autovalores do sistema.

Fisicamente, autovalores representam as diferentes velocidades com que a informação é propagada, sendo positivas no sentido do crescimento do eixo x e negativas de forma contrária.

Definição 3.4 (Autovetores). *Um autovetor de uma matriz \mathbf{A} , correspondente a um autovalor λ_i de \mathbf{A} , é um vetor*

$$\mathbf{k}^{(i)} = \begin{bmatrix} k_1^{(i)} \\ k_2^{(i)} \\ \vdots \\ k_m^{(i)} \end{bmatrix}$$

satisfazendo

$$\mathbf{A}\mathbf{k}^{(i)} = \lambda_i \mathbf{k}^{(i)}.$$

Definição 3.5 (Sistema Hiperbólico). *Um sistema na forma quase linear (3.2) é dito hiperbólico em um ponto (x, t) se \mathbf{A} tem m autovalores reais $\lambda_1, \dots, \lambda_m$ e um conjunto correspondente de m autovetores $\mathbf{k}^{(1)}, \dots, \mathbf{k}^{(m)}$ linearmente independentes. Se os autovalores λ_i são distintos, então o sistema é chamado de estritamente hiperbólico.*

- Hiperbolicidade estrita implica em hiperbolicidade, uma vez que autovalores reais e distintos garantem a existência de um conjunto linearmente independente de autovetores.
- Um sistema (3.2) é dito elíptico em um ponto (x, t) se nenhum autovalor λ_i de \mathbf{A} é real.

3.2 A Equação de Advecção Linear

Uma equação de advecção linear geral em uma dimensão pode ser escrita como

$$u_t + a(x, t)u_x = 0, \quad (3.8)$$

onde a incógnita é $u = u(x, t)$ e $a(x, t)$ um coeficiente variável. Se o coeficiente for suficientemente suave, podemos escrever (3.8) como uma lei de conservação com termo de fonte:

$$u_t + (au)_x = u(a_x). \quad (3.9)$$

Nesta seção será estudado em detalhe o caso especial do problema de valor inicial (PVI) que representa a equação de advecção linear, ou seja:

$$u_t + au_x = 0, \quad -\infty < x < \infty, t > 0 \quad (3.10)$$

com condição inicial

$$u(x, 0) = u_0(x), \quad (3.11)$$

onde a é a velocidade de propagação da onda, sendo constante nesse caso.

3.2.1 Características e Solução Geral

Características podem ser definidas como curvas $x = x(t)$ no plano (t, x) ao longo das quais a EDP se torna uma EDO. Considerando $x = x(t)$, podemos escrever u como uma função de t apenas, ou seja $u = u(x(t), t)$. A taxa de variação de u pode então ser calculada por

$$\frac{du}{dt} = \frac{\partial u}{\partial t} + \frac{dx}{dt} \frac{\partial u}{\partial x}. \quad (3.12)$$

Se a curva característica $x = x(t)$ satisfaz a EDO

$$\frac{dx}{dt} = a, \quad (3.13)$$

então a EDP (3.10), junto com (3.12) e (3.13), fornece

$$\frac{du}{dt} = \frac{\partial u}{\partial t} + a \frac{\partial u}{\partial x} = 0. \quad (3.14)$$

Desta forma a taxa de variação de u ao longo da curva característica $x = x(t)$ satisfazendo (3.13) é zero, isto é, u é constante ao longo da curva $x = x(t)$.

- A velocidade a em (3.13) é chamada de velocidade característica;
- De acordo com (3.13), a velocidade característica a é a inclinação da curva $x = x(t)$ no plano (t, x) ;
- Na prática, é mais comum o uso do plano (x, t) para esboçar as características, de forma que neste caso a inclinação das curvas é $1/a$;
- Para EDPs hiperbólicas lineares com coeficientes constantes, tais como a equação (3.10), as curvas características são paralelas.

Resolvendo a equação (3.13) temos uma família de características. Se tomarmos, por exemplo,

$$x(0) = x_0, \quad (3.15)$$

a curva

$$x = x_0 + at \quad (3.16)$$

é a única característica que passa pelo ponto $(x_0, 0)$.

Se u satisfaz a condição inicial $u(x, 0) = u_0(x)$ em $t = 0$, então ao longo da curva característica $x(t) = x_0 + at$ que passa pelo ponto inicial x_0 do eixo x , a solução é

$$u(x, t) = u_0(x_0) = u_0(x - at), \quad (3.17)$$

onde foi utilizada a equação (3.16). A interpretação desta solução para a equação (3.10) é a seguinte: dado um perfil inicial $u_0(x)$, a EDP irá simplesmente transladar este perfil com velocidade a para a direita se $a > 0$ ou para a esquerda se $a < 0$. A forma deste perfil inicial permanecerá inalterada.

3.2.2 O Problema de Riemann

O problema de Riemann consiste em resolver o seguinte PVI

$$u_t + au_x = 0 \quad \text{com condição inicial} \quad u(x, 0) = \begin{cases} u_L & \text{se } x < 0 \\ u_R & \text{se } x > 0, \end{cases} \quad (3.18)$$

no domínio $-\infty < x < \infty, t > 0$, onde u_L e u_R são dois valores constantes. Este é o PVI mais simples que se pode apresentar, onde o caso trivial resulta de $u_L = u_R$.

Para a EDP (3.10), verificamos por (3.17) que a solução do problema de Riemann é simplesmente

$$u(x, t) = u_0(x - at) = \begin{cases} u_L & \text{se } x - at < 0, \\ u_R & \text{se } x - at > 0. \end{cases} \quad (3.19)$$

3.3 Sistemas Hiperbólicos Lineares

Para o caso de sistemas de m EDPs hiperbólicas na forma

$$\mathbf{u}_t + \mathbf{A}\mathbf{u}_x = \mathbf{0}, \quad (3.20)$$

com os coeficientes da matriz \mathbf{A} constantes, a hiperbolicidade garante que \mathbf{A} possui m autovalores reais e m autovetores linearmente independentes $\mathbf{k}^{(i)}, i = 1, \dots, m$. Com isso, a matriz \mathbf{A} é diagonalizável [39], podendo ser escrita como

$$\mathbf{A} = \mathbf{K}\mathbf{\Lambda}\mathbf{K}^{-1}, \quad (3.21)$$

onde $\mathbf{\Lambda}$ é uma matriz diagonal formada pelos autovalores λ_i de \mathbf{A} e a matriz \mathbf{K} possui como colunas os autovetores de \mathbf{A} , que denominaremos por $\mathbf{k}^{(i)}$. Com isso:

$$\mathbf{\Lambda} = \begin{bmatrix} \lambda_1 & \cdots & 0 \\ \vdots & \ddots & \vdots \\ 0 & \cdots & \lambda_m \end{bmatrix}, \quad \mathbf{K} = [\mathbf{k}^{(1)}, \dots, \mathbf{k}^{(m)}], \quad \mathbf{A}\mathbf{k}^{(i)} = \lambda_i\mathbf{k}^{(i)}. \quad (3.22)$$

Um sistema hiperbólico (3.20) pode ser definido como um sistema com autovalores reais e matriz dos coeficientes diagonalizável.

3.3.1 Variáveis Características

Para analisar e resolver o PVI geral (3.20), é comum transformar as variáveis dependentes $\mathbf{u}(x, t)$ em um novo conjunto de variáveis dependentes $\mathbf{w}(x, t)$. Uma vez que existe a inversa \mathbf{K}^{-1} , podemos definir um novo conjunto de variáveis dependentes $\mathbf{w} = (w_1, w_2, \dots, w_m)^T$ através da transformação

$$\mathbf{w} = \mathbf{K}^{-1}\mathbf{u} \quad \text{ou} \quad \mathbf{u} = \mathbf{K}\mathbf{w}, \quad (3.23)$$

de forma que o sistema (3.20), quando expresso em termos de \mathbf{w} , se torna completamente desacoplado (i.e., onde uma equação não depende das outras). As novas variáveis \mathbf{w} são denominadas variáveis características.

3.3.2 Sistema em Termos das Variáveis Características

Podemos mostrar [38] que, em termos das variáveis características, o sistema (3.20) fica escrito como

$$\mathbf{w}_t + \mathbf{\Lambda} \mathbf{w}_x = \mathbf{0}. \quad (3.24)$$

Esta é a chamada forma canônica ou forma característica do sistema (3.20). Expandindo a notação matricial, temos

$$\begin{bmatrix} w_1 \\ \vdots \\ w_m \end{bmatrix}_t + \begin{bmatrix} \lambda_1 & \cdots & 0 \\ \vdots & \ddots & \vdots \\ 0 & \cdots & \lambda_m \end{bmatrix} \begin{bmatrix} w_1 \\ \vdots \\ w_m \end{bmatrix}_x = \begin{bmatrix} 0 \\ \vdots \\ 0 \end{bmatrix}. \quad (3.25)$$

Claramente, a i -ésima EDP deste sistema é

$$\frac{\partial w_i}{\partial t} + \lambda_i \frac{\partial w_i}{\partial x} = 0, \quad i = 1, \dots, m \quad (3.26)$$

e envolve unicamente a variável $w_i(x, t)$; o sistema é então desacoplado, sendo idêntico à EDP linear (3.10). Agora, a velocidade característica é λ_i e existem m curvas características satisfazendo m EDOs

$$\frac{dx}{dt} = \lambda_i, \quad \text{para } i = 1, \dots, m. \quad (3.27)$$

Para concluir esta seção, apresentamos a seguinte definição:

Definição 3.6 (Domínio de Dependência). *Para a equação escalar de advecção linear a solução em um dado ponto $P = (x^*, t^*)$ depende apenas do dado inicial em um ponto x_0 no eixo x . Este ponto é obtido pela interseção da característica que passa por $P = (x^*, t^*)$ com o eixo x . De fato, a solução em $P = (x^*, t^*)$ é idêntica ao valor do dado inicial $u_0(x)$ em x_0 . Dizemos que o domínio de dependência do ponto $P = (x^*, t^*)$ é o ponto x_0 . Para um sistema 2×2 , o domínio de dependência é um intervalo $[x_L, x_R]$ no eixo x que é delimitado pelas características que passam por $P = (x^*, t^*)$.*

3.4 Leis de Conservação

As leis de conservação podem ser escritas em sua forma diferencial (3.4) ou através de diferentes formas integrais. A forma diferencial (3.4) também pode ser chamada de forma

forte, isto porque esta forma é obtida supondo suavidade nas funções u e $f(u)$. Alguns métodos de aproximação são aplicados diretamente a esta forma, como o método de diferenças finitas [40].

3.4.1 Formas Integrais das Leis de Conservação

Existem ao menos duas boas razões para se estudar as leis de conservação em sua(s) forma(s) integral(is):

- (i) Como vimos no Capítulo anterior, a dedução das equações que modelam o escoamento em meios porosos é baseada em princípios físicos de conservação expressos como relações integrais;
- (ii) Ao considerar uma formulação integral aumentamos o espaço onde podemos encontrar soluções do problema. Por exemplo, nesta formulação é possível considerar o caso de soluções descontínuas.

Podemos considerar diferentes formas integrais, cada uma apropriada para o estudo que se deseja avaliar. Por exemplo: considere um sistema unidimensional dependente do tempo e escolha um volume de controle $V = [x_L, x_R] \times [t_1, t_2]$ no plano (x, t) . A partir da integração do sistema na forma (3.4), entre x_L e x_R , obtemos:

$$\frac{d}{dt} \int_{x_L}^{x_R} \mathbf{u}(x, t) dx = \mathbf{f}(\mathbf{u}(x_L, t)) - \mathbf{f}(\mathbf{u}(x_R, t)), \quad (3.28)$$

onde $\mathbf{f}(\mathbf{u})$ é a função de fluxo vetorial. Integrando (3.28) no tempo, entre t_1 e t_2 , com $t_1 \leq t_2$, fornece

$$\int_{x_L}^{x_R} \mathbf{u}(x, t_2) dx = \int_{x_L}^{x_R} \mathbf{u}(x, t_1) dx + \int_{t_1}^{t_2} \mathbf{f}(\mathbf{u}(x_L, t)) dt - \int_{t_1}^{t_2} \mathbf{f}(\mathbf{u}(x_R, t)) dt, \quad (3.29)$$

que é uma forma muito utilizada na dedução de esquemas numéricos, como veremos adiante.

3.4.2 Exemplos de Leis de Conservação escalares

A seguir apresentamos alguns exemplos de leis de conservação escalares, escritas em termos da incógnita u .

Exemplo 3.2 (Advecção linear (2.43)).

$$u_t + f(u)_x = 0, \quad f(u) = au \quad (3.30)$$

onde a é a velocidade da onda.

Exemplo 3.3 (Equação de Burgers Invíscida).

$$u_t + f(u)_x = 0, \quad f(u) = \frac{u^2}{2}. \quad (3.31)$$

Exemplo 3.4 (Equação de Buckley-Leverett (2.37)).

$$u_t + f(u)_x = 0, \quad f(u) = \frac{u^2}{u^2 + a(1-u)^2}, \quad (3.32)$$

onde a é a razão de viscosidades, no escoamento bifásico imiscível em meios porosos.

3.4.3 Não-Linearidades e Formação de Choques

Nos deteremos ao PVI composto por leis de conservação escalares não-lineares na forma

$$u_t + f(u)_x = 0, \quad u(x, 0) = u_0(x). \quad (3.33)$$

A lei de conservação (3.33) pode ser reescrita como

$$u_t + \lambda(u)u_x = 0, \quad (3.34)$$

onde

$$\lambda(u) = \frac{df}{du} = f'(u) \quad (3.35)$$

é a velocidade característica. A forma da função de fluxo $f(u)$ tem profundas consequências no comportamento da solução $u(x, t)$ da lei de conservação. Uma propriedade crucial é a monotonicidade da velocidade característica $\lambda(u)$. Existem, essencialmente, três possibilidades:

- $\lambda(u)$ é uma função monotonicamente crescente de u , ou seja:

$$\frac{d\lambda(u)}{du} = \lambda'(u) = f''(u) > 0 \quad (\text{fluxo convexo})$$

- $\lambda(u)$ é uma função monotonicamente decrescente de u , ou seja:

$$\frac{d\lambda(u)}{du} = \lambda'(u) = f''(u) < 0 \quad (\text{fluxo côncavo})$$

- $\lambda(u)$ possui ponto crítico para algum valor de u , ou seja:

$$\frac{d\lambda(u)}{du} = \lambda'(u) = f''(u) = 0 \quad (\text{fluxo não-convexo e não-côncavo}).$$

Para estudar o PVI (3.33), supomos que o dado inicial $u(x, 0) = u_0(x)$ é suave. Para algum tempo finito, a solução $u(x, t)$ permanecerá suave [16]. Reescrevemos o PVI como:

$$u_t + \lambda(u)u_x = 0, \quad \lambda(u) = f'(u), \quad u(x, 0) = u_0(x). \quad (3.36)$$

Note que a EDP em (3.36) é uma generalização da equação de advecção linear, na qual a velocidade característica é $\lambda(u) = a$, constante. As soluções para o PVI (3.36) serão construídas seguindo as características, se assemelhando de alguma forma ao feito para a equação de advecção linear.

3.4.4 Construção de Soluções Sobre Características

Considere curvas características $x = x(t)$ satisfazendo o PVI

$$\frac{dx}{dt} = \lambda(u(x, t)), \quad x(0) = x_0. \quad (3.37)$$

Tomando ambos x e u como função de t , temos a derivada total de u ao longo da curva $x(t)$, dada por:

$$\frac{du}{dt} = u_t + \lambda(u)u_x = 0. \quad (3.38)$$

Isto é, $u(x(t), t)$ é constante ao longo da curva característica satisfazendo o PVI (3.37) e, como consequência, a inclinação de $\lambda(u)$ também é constante ao longo da característica. Assim, as curvas características são linhas retas, de forma que o valor de u ao longo de cada curva é o valor de u no ponto inicial $x(0) = x_0$ e escrevemos

$$u(x(t), t) = u_0(x_0). \quad (3.39)$$

A inclinação $\lambda(u)$ da característica pode então ser calculada em x_0 de forma que as soluções do PVI (3.37) são

$$x = x_0 + \lambda(u_0(x_0))t. \quad (3.40)$$

As relações (3.39) e (3.40) podem ser consideradas as soluções analíticas do PVI (3.37). Note que o ponto x_0 depende do ponto dado (x, t) , de forma que a solução dada por (3.39) e (3.40) é implícita. Este fato se torna mais aparente se substituirmos x_0 de (3.40) em (3.39), obtendo:

$$u(x(t), t) = u_0(x - \lambda(u_0(x_0))t). \quad (3.41)$$

Note que esta solução é idêntica em forma à solução (3.17) da equação da advecção linear em (3.10).

3.4.5 Inclinação das Características

No caso da equação de advecção linear a velocidade característica é $\lambda(u) = a = \text{constante}$ e a solução consiste na simples translação do dado inicial $u_0(x)$, com velocidade constante a . No caso não linear, a velocidade característica $\lambda(u)$ depende da solução. Com isso distorções no dado inicial são produzidas [38]. Para explicar tal fenômeno, consideremos uma função de fluxo convexa, isto é

$$\lambda'(u) = f''(u) > 0$$

e um dado inicial separado em dois intervalos:

- I_E onde $u_0(x)$ é crescente em x e
- I_C onde $u_0(x)$ é decrescente em x .

Devido à característica convexa do fluxo, valores mais altos de $u_0(x)$ originam velocidades características maiores do aquelas oriundas de menores valores de $u_0(x)$, conforme indicado na Figura 3.1.

O intervalo I_E define uma uma região de expansão, onde a velocidade característica cresce na medida que x cresce, isto é: $\lambda'(u) > 0$. Com o tempo a solução se torna

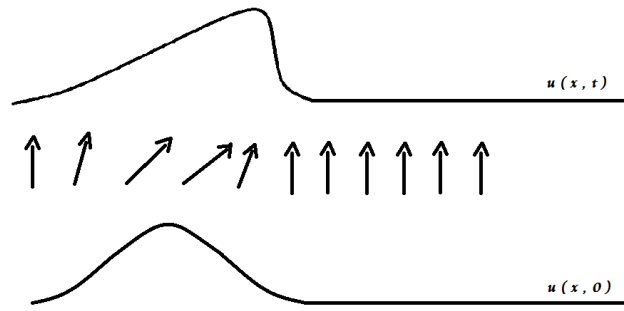


Figura 3.1: Inclinação das características para a equação de Burgers (Baseado em [15]).

mais plana. Já o intervalo I_C define uma região de compressão, com $\lambda'(u) < 0$. Nesta região a inclinação da solução tende a aumentar com o tempo. Note que a característica de expansão ou compressão da solução se reverte no caso de fluxo côncavo: $\lambda'(u) = f''(u) < 0$.

Nos instantes anteriores ao cruzamento das características (caso da Figura 3.1), a solução única pode ser encontrada seguindo as características, como descrito anteriormente. Quando as características se cruzam pela primeira vez, dizemos que a onda quebra, como indicado na Figura 3.2; a derivada u_x se torna infinita e temos o denominado tempo de quebramento [38, 15]

$$t_b = -\frac{1}{\lambda_x(x_0)}. \quad (3.42)$$

O quebramento primeiro ocorre na característica que emana de $x = x_0$ para a qual $\lambda_x(x_0)$ é negativa e $|\lambda_x(x_0)|$ é máximo [16].

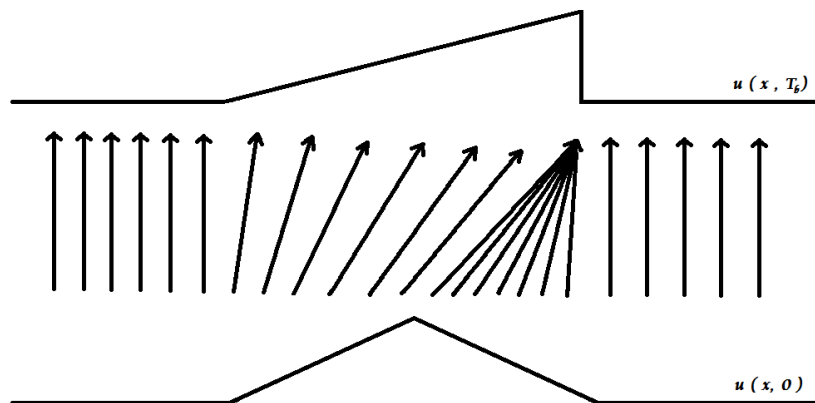


Figura 3.2: Formação de choque na equação de Burgers (Baseado em [15]).

3.4.6 Ondas de Choque

Considere o PVI (3.33) e uma solução $u(x, t)$ tal que $u(x, t)$, $f(u)$ e suas derivadas são contínuas, exceto sobre uma linha $s = s(t)$ no plano (x, t) onde $u(x, t)$ tem descontinuidade do tipo salto (Figura 3.3). Tomamos dois pontos fixos x_L e x_R no eixo x tais que $x_L <$

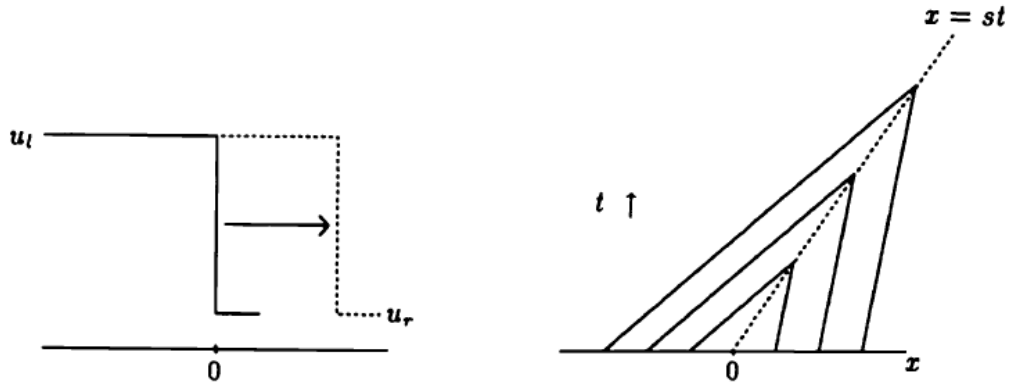


Figura 3.3: Onda de choque (Baseado em [15]).

$s(t) < x_R$ e escrevemos a lei de conservação na forma integral (3.28) sobre o volume de controle $[x_L, x_R]$:

$$f(u(x_L, t)) - f(u(x_R, t)) = \frac{d}{dt} \int_{x_L}^{s(t)} u(x, t) dx + \frac{d}{dt} \int_{s(t)}^{x_R} u(x, t) dx. \quad (3.43)$$

Utilizando a fórmula

$$\frac{d}{d\alpha} \int_{\xi_1(\alpha)}^{\xi_2(\alpha)} f(\xi, \alpha) d\xi = \int_{\xi_1(\alpha)}^{\xi_2(\alpha)} \frac{\partial f}{\partial \alpha} d\xi + f(\xi_2, \alpha) \frac{d\xi_2}{d\alpha} - f(\xi_1, \alpha) \frac{d\xi_1}{d\alpha}, \quad (3.44)$$

nos primeiro e segundo termos do lado direito da equação integral (3.43), temos

$$\frac{d}{dt} \int_{x_L}^{s(t)} u(x, t) dx = \int_{x_L}^{s(t)} u_t(x, t) dx + u(s_L, t) \frac{ds}{dt} \quad (3.45)$$

e

$$\frac{d}{dt} \int_{s(t)}^{x_R} u(x, t) dx = \int_{s(t)}^{x_R} u_t(x, t) dx - u(s_R, t) \frac{ds}{dt}, \quad (3.46)$$

respectivamente. Com isso, a equação (3.43) pode ser reescrita como

$$\begin{aligned}
f(u(x_L, t)) - f(u(x_R, t)) &= [u(s_L, t) - u(s_R, t)] S \\
&\quad + \int_{x_L}^{s(t)} u_t(x, t) dx + \int_{s(t)}^{x_R} u_t(x, t) dx, \quad (3.47)
\end{aligned}$$

onde $u(s_L, t)$ é o limite de $u(s(t), t)$ quando x tende a $s(t)$ pela esquerda, $u(s_R, t)$ é o limite de $u(s(t), t)$ quando x tende a $s(t)$ pela direita e

$$S = \frac{ds(t)}{dt}$$

é a velocidade da descontinuidade. Através da equação (3.47) podemos escrever o seguinte resultado geral, para a velocidade de propagação:

$$S = \frac{f(u(x_L, t)) - f(u(x_R, t)) - \left[\int_{x_L}^{s(t)} u_t(x, t) dx + \int_{s(t)}^{x_R} u_t(x, t) dx \right]}{u(s_L, t) - u(s_R, t)}. \quad (3.48)$$

Esta expressão pode ser simplificada se a avaliarmos sobre o salto, ou seja, tomarmos os limites $x_L \rightarrow s(t)$ e $x_R \rightarrow s(t)$. Como a função $u_t(x, t)$ é limitada, as integrais se anulam quando tomamos tais limites, e obtemos:

$$S = \frac{f(u(x_L, t)) - f(u(x_R, t))}{u(s_L, t) - u(s_R, t)}. \quad (3.49)$$

Esta relação algébrica, relacionando os saltos

$$\Delta f = f(u(x_L, t)) - f(u(x_R, t)),$$

$$\Delta u = u(s_L, t) - u(s_R, t)$$

e a velocidade S da descontinuidade, é denominada *condição de Rankine-Hugoniot*, e é usualmente expressa como

$$\Delta f = S \Delta u. \quad (3.50)$$

Para o caso escalar considerado aqui, a velocidade pode ser calculada como:

$$S = \frac{\Delta f}{\Delta u}. \quad (3.51)$$

Desta forma, para admitir soluções descontínuas, devemos formular o problema em termos de EDPs que são válidas para as partes suaves da solução, e condições de Rankine-Hugoniot ao longo das discontinuidades.

3.4.7 Ondas de Rarefação

Seja o PVI (3.18) com uma função de fluxo convexa $f(u)$ qualquer e dado inicial expansivo $u_L < u_R$. Neste caso, existem infinitas soluções fracas [15]. A solução entrópica deste problema é dada por

$$u(x, t) = \begin{cases} u_L & \text{se } \frac{x}{t} \leq \lambda_L \\ \frac{x}{t} & \text{se } \lambda_L < \frac{x}{t} < \lambda_R \\ u_R & \text{se } \frac{x}{t} \geq \lambda_R. \end{cases} \quad (3.52)$$

consistindo de dois estados constantes u_L e u_R , separados por uma região de transição suave entre os valores u_L e u_R (ver Figura 3.4). Esta região é chamada de *onda de rarefação* [38, 15].

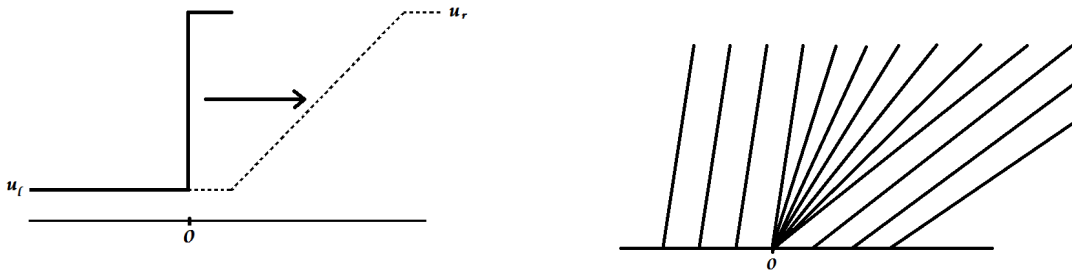


Figura 3.4: Onda de rarefação (Baseado em [15]).

Capítulo 4

Esquemas Centrais de Alta Ordem

Neste capítulo, estudaremos esquemas numéricos para obter soluções aproximadas para equações hiperbólicas unidimensionais tais como (2.37), (2.41) e (2.43), que serão escritas, genericamente, através da lei de conservação

$$\frac{\partial \mathbf{u}(x, t)}{\partial t} + \frac{\partial \mathbf{f}(\mathbf{u}(x, t))}{\partial x} = \mathbf{0} \quad (4.1)$$

sujeita à condição inicial

$$\mathbf{u}(x, 0) = \mathbf{u}_0(x), \quad x \in \mathbb{R} \quad (4.2)$$

onde $\mathbf{u}(x, t) = (u_1(x, t), u_2(x, t), \dots, u_N(x, t))$ representa um vetor de N quantidades conservadas e \mathbf{f} é um vetor de fluxo não-linear.

Em uma dimensão, o domínio espacial é discretizado em uma malha composta por intervalos, também chamados de células ou volumes finitos, sobre os quais são construídas soluções aproximadas que, de certa forma, representam médias da solução \mathbf{u} . Naturalmente, essas aproximações resultam em soluções descontínuas nas fronteiras das células, dando origem a problemas de Riemann locais.

Neste trabalho serão estudados esquemas de volumes finitos centrais do tipo de Godunov [41], que podem ser vistos como métodos de diferenças finitas universais para resolução de equações convectivo-difusivas não-lineares, por não serem ligados a estrutura específica do problema [18]. Tais esquemas são construídos com base na integração de (4.1) sobre volumes de controle contendo os leques de Riemann que surgem nas fronteiras das células. Assim a avaliação do passo evolutivo se dá sobre projeções polinomiais por partes da solução aproximada, sem a necessidade de resolver os problemas de Riemann

locais, resultando em métodos de alta resolução simples e eficientes.

4.1 O Esquema de Lax-Friedrichs

Conhecido como o precursor dos esquemas centrais, o método de Lax-Friedrichs [20] possui estrutura simples. Nesta seção apresentaremos alguns conceitos básicos para a compreensão de esquemas centrais, contextualizando com a dedução do esquema de Lax-Friedrichs em sua forma de diferenças. Como veremos na próxima seção, este esquema também pode ser naturalmente deduzido no contexto dos métodos de Godunov.

Seja uma discretização do domínio Ω em uma malha uniforme com pontos nodais $x_i = i\Delta x$ e do tempo em instantes $t^n = n\Delta t$. Assim, definimos volumes $\mathcal{C}_i = (x_{i-\frac{1}{2}}, x_{i+\frac{1}{2}})$ de comprimento $\Delta x = x_{i+\frac{1}{2}} - x_{i-\frac{1}{2}}$. Integrando a equação (4.1) sobre o volume \mathcal{C}_i e entre os instantes de tempo t^n e t^{n+1} , obtemos uma forma integral da lei de conservação, equivalente à (3.29) discutida no Capítulo 3. Rearranjando e dividindo por Δx , podemos escrevê-la como

$$\begin{aligned} \frac{1}{\Delta x} \int_{x_{i-\frac{1}{2}}}^{x_{i+\frac{1}{2}}} \mathbf{u}(x, t_{n+1}) dx &= \frac{1}{\Delta x} \int_{x_{i-\frac{1}{2}}}^{x_{i+\frac{1}{2}}} \mathbf{u}(x, t_n) dx \\ &- \frac{1}{\Delta x} \left[\int_{t_n}^{t_{n+1}} \mathbf{f}(\mathbf{u}(x_{i+\frac{1}{2}}, t)) dt - \int_{t_n}^{t_{n+1}} \mathbf{f}(\mathbf{u}(x_{i-\frac{1}{2}}, t)) dt \right] \end{aligned} \quad (4.3)$$

Definindo o valor médio de $\mathbf{u}(\cdot, t)$ na célula \mathcal{C}_i por

$$\bar{\mathbf{u}}(x_i, t) = \frac{1}{\Delta x} \int_{x_{i-\frac{1}{2}}}^{x_{i+\frac{1}{2}}} \mathbf{u}(x, t) dx, \quad (4.4)$$

podemos reescrever (4.3) como

$$\bar{\mathbf{u}}(x_i, t_{n+1}) = \bar{\mathbf{u}}(x_i, t_n) - \frac{1}{\Delta x} \left[\int_{t_n}^{t_{n+1}} \mathbf{f}(\mathbf{u}(x_{i+\frac{1}{2}}, t)) dt - \int_{t_n}^{t_{n+1}} \mathbf{f}(\mathbf{u}(x_{i-\frac{1}{2}}, t)) dt \right]. \quad (4.5)$$

Esta equação nos mostra como a média de \mathbf{u} deve ser atualizada em um passo de tempo. Em geral não é possível avaliar exatamente as integrais do lado direito de (4.5) uma vez que $\mathbf{u}(x_{i\pm\frac{1}{2}}, t)$ varia na fronteira de cada célula [16]. Assim, aproximando estas integrais por fluxos na forma

$$\mathbf{h}_{i\pm\frac{1}{2}}^n \approx \frac{1}{\Delta t} \int_{t_n}^{t_{n+1}} \mathbf{f}(\mathbf{u}(x_{i\pm\frac{1}{2}}, t)) dt \quad (4.6)$$

chegamos a esquemas numéricos do tipo

$$\mathbf{u}_i^{n+1} = \mathbf{u}_i^n - \frac{\Delta t}{\Delta x} (\mathbf{h}_{i+\frac{1}{2}}^n - \mathbf{h}_{i-\frac{1}{2}}^n), \quad (4.7)$$

onde \mathbf{u}_i^n representa uma aproximação para a média $\bar{\mathbf{u}}(x_i, t_n)$ definida em (4.4).

Construiremos as aproximações $\mathbf{h}_{i-\frac{1}{2}}^n$ com base em valores de \mathbf{u}_j^n para $i-k_1 \leq j \leq i+k_2$ onde $k_1, k_2 \geq 0$ definem uma vizinhança em torno do ponto x_i . Por exemplo, tomando $k_1 = 1$ e $k_2 = 0$ podemos obter $\mathbf{h}_{i-\frac{1}{2}}^n$ a partir dos valores de \mathbf{u}_{i-1}^n e \mathbf{u}_i^n .

$$\mathbf{h}_{i-\frac{1}{2}}^n = \mathbf{h}(\mathbf{u}_{i-1}^n, \mathbf{u}_i^n) \quad (4.8)$$

onde $\mathbf{h}(\mathbf{u}_{i-1}^n, \mathbf{u}_i^n)$ é alguma função de fluxo numérico. Com isso o método (4.7) pode ser escrito como:

$$\mathbf{u}_i^{n+1} = \mathbf{u}_i^n - \frac{\Delta t}{\Delta x} [\mathbf{h}(\mathbf{u}_i^n, \mathbf{u}_{i+1}^n) - \mathbf{h}(\mathbf{u}_{i-1}^n, \mathbf{u}_i^n)]. \quad (4.9)$$

De acordo com [42], o fluxo numérico deve ser consistente com o fluxo físico, no sentido que:

$$\mathbf{h}(\mathbf{u}, \mathbf{u}) = \mathbf{f}(\mathbf{u}). \quad (4.10)$$

A função de fluxo define se o método resultante será convergente, ou seja, se a solução numérica converge para a solução exata da equação diferencial com o refinamento da malha (com $\Delta x, \Delta t \rightarrow 0$). Isto geralmente requer duas condições (Teorema da Equivalência de Lax [16, 43]):

- O método deve ser consistente com a equação diferencial, ou seja, é uma boa aproximação local;
- O método deve ser estável, ou seja, pequenos erros gerados a cada passo de tempo não devem crescer muito rápido.

Em geral, a consistência de um método é demonstrada com base na análise dos erros de truncamento locais, o que pode ser feito com simplicidade para problemas lineares [43]. Contudo, a questão da estabilidade é uma tarefa mais difícil de ser provada, mesmo para alguns esquemas simples [43, 16, 15]. A seguir, mencionamos a condição CFL (devida a Courant, Friedrichs e Levy [44]), que é uma condição *necessária* para a convergência de qualquer esquema de volumes finitos para equações hiperbólicas [43, 15, 16].

Definição 4.1 (Condição de CFL). *O método numérico irá convergir para a solução da equação diferencial apenas se o domínio de dependência numérico contém o domínio de dependência da equação (ver Seção 3.3).*

Em outras palavras, a condição CFL nos diz que em um passo de tempo de tamanho Δt a informação não pode ser propagada a uma distância maior do que o tamanho Δx do volume.

Por fim, notamos que o método (4.9) pode ser visto como uma aproximação direta por diferenças finitas da lei de conservação (4.1), pois rearranjando os termos temos:

$$\frac{\mathbf{u}_i^{n+1} - \mathbf{u}_i^n}{\Delta t} + \frac{\mathbf{h}_{i+\frac{1}{2}}^n - \mathbf{h}_{i-\frac{1}{2}}^n}{\Delta x} = 0. \quad (4.11)$$

4.1.1 Um Fluxo Instável

Uma forma simples de definir uma função de fluxo $\mathbf{h}_{i-\frac{1}{2}}^n$ consiste em tomar a média aritmética dos valores de \mathbf{u}_{i-1}^n e \mathbf{u}_i^n

$$\mathbf{h}_{i-\frac{1}{2}}^n = \mathbf{h}(\mathbf{u}_{i-1}^n, \mathbf{u}_i^n) = \frac{1}{2}[\mathbf{f}(\mathbf{u}_{i-1}^n) + \mathbf{f}(\mathbf{u}_i^n)], \quad (4.12)$$

o que, substituído em (4.7), fornece

$$\mathbf{u}_i^{n+1} = \mathbf{u}_i^n - \frac{\Delta t}{2\Delta x}(\mathbf{f}(\mathbf{u}_{i+1}^n) - \mathbf{f}(\mathbf{u}_{i-1}^n)). \quad (4.13)$$

Este método é incondicionalmente instável para problemas hiperbólicos, mesmo quando a condição de CFL é satisfeita [43, 16, 13].

4.1.2 O Fluxo de Lax-Friedrichs

Substituindo \mathbf{u}_i^n pela média $\frac{1}{2}(\mathbf{u}_{i-1}^n + \mathbf{u}_{i+1}^n)$ em (4.13) temos o método clássico de Lax-Friedrichs [20],

$$\mathbf{u}_i^{n+1} = \frac{1}{2}(\mathbf{u}_{i-1}^n + \mathbf{u}_{i+1}^n) - \frac{\Delta t}{2\Delta x}(\mathbf{f}(\mathbf{u}_{i+1}^n) - \mathbf{f}(\mathbf{u}_{i-1}^n)). \quad (4.14)$$

Rearranjando os termos na forma (4.7), vemos que o fluxo numérico deste método é

definido como

$$\mathbf{h}(\mathbf{u}_{i-1}^n, \mathbf{u}_i^n) = \frac{1}{2}[\mathbf{f}(\mathbf{u}_{i-1}^n) + \mathbf{f}(\mathbf{u}_i^n)] - \frac{\Delta x}{2\Delta t}(\mathbf{u}_i^n - \mathbf{u}_{i-1}^n), \quad (4.15)$$

que é o fluxo (4.12) acrescido de um termo. Este fluxo pode ser interpretado como o fluxo da equação de advecção-difusão

$$\frac{\partial \mathbf{u}}{\partial t} + \frac{\partial \mathbf{f}(\mathbf{u})}{\partial x} - \beta \frac{\partial^2 \mathbf{u}}{\partial x^2} = \mathbf{0}$$

com $\beta = \frac{1}{2}(\Delta x)^2/\Delta t$. Assim, fixando $\Delta t/\Delta x$ e refinando a malha, o coeficiente do termo de difusão tende a zero, mantendo o método consistente com a equação hiperbólica original. Este termo adicional é interpretado como difusão numérica e, apesar de manter o método estável, ele também é responsável por introduzir muita difusão, forçando a utilização de malhas muito refinadas para se obter bons resultados numéricos.

4.2 Esquemas Centrais

Uma base para a construção de diversos esquemas numéricos do tipo de Godunov para leis de conservação é o algoritmo REA (Reconstruct, Evolve, Average), consistindo basicamente nas seguintes etapas:

- **Reconstrução:** A partir dos valores médios sobre as células \mathcal{C}_i , reconstrua uma função polinomial por partes definida para todo \mathbf{x} .
- **Evolução:** Evolua a equação hiperbólica de forma exata ou aproximada com os dados iniciais estabelecidos no passo anterior e obtenha $\mathbf{u}_{\mathcal{D}_i}^{n+1}$ após o tempo Δt , onde \mathcal{D}_i designa uma célula de um novo domínio.
- **Projeção:** Projete $\mathbf{u}_{\mathcal{D}_i}^{n+1}$ (ou sua reconstrução) sobre cada célula da malha original para obter os novos valores médios \mathbf{u}_i^{n+1} .

No contexto do algoritmo REA, o método de Lax-Friedrichs pode ser deduzido utilizando as funções constantes por partes \mathbf{u}_i^n , onde a evolução é realizada sobre a malha dual (malha centrada nos nós)

$$\bar{\mathcal{C}}_i = (x_i, x_{i+1}).$$

A Figura 4.1 ilustra o esquema de Lax-Friedrichs (LxF) em uma dimensão. A exces-

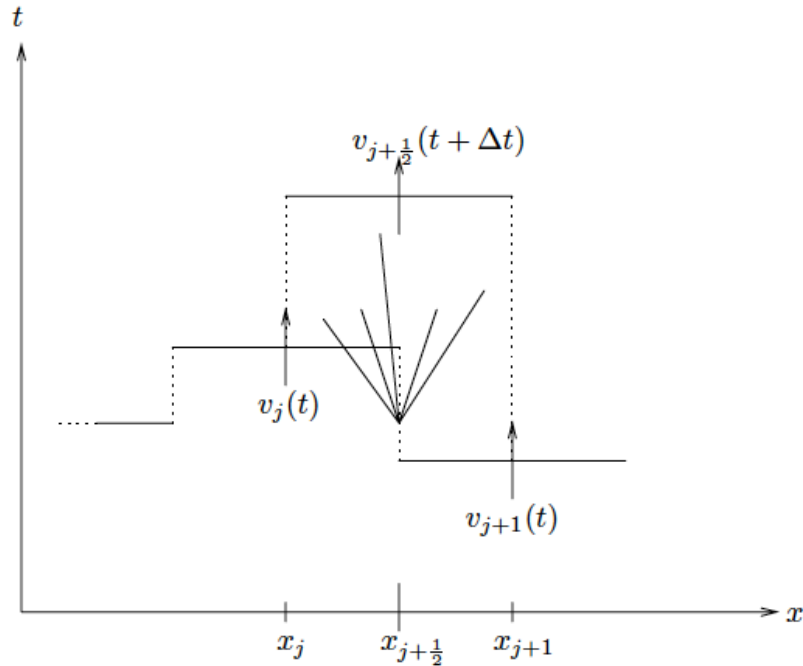


Figura 4.1: Esquema de Lax-Friedrichs (Retirado de [17]).

siva dissipação numérica introduzida, de ordem $\mathcal{O}(\Delta x^2/\Delta t)$, compromete fortemente a representação de ondas de choque e rarefação. Uma extensão natural de alta-ordem do esquema LxF é a apresentada por Nessyahu e Tadmor em [17], onde as aproximações (de primeira ordem) constantes por partes são substituídas por aproximações (de segunda ordem) lineares por partes do tipo MUSCL (Monotone Upstream-centered Schemes for Conservation Laws) reconstruídas a partir de tais valores constantes [21].

Assim como o esquema LxF, o método de Nessyahu-Tadmor (NT) é obtido pela evolução sobre a malha dual \bar{C}_i . Sob certas limitações de CFL, o método satisfaz a propriedade de diminuição da variação total (TVD, ver [17]), que implica em estabilidade numérica sob certas condições. Por ser de segunda ordem, o esquema NT possui dissipação numérica $\mathcal{O}(\Delta x^4/\Delta t)$, consideravelmente menor do que a do esquema LxF. Contudo, isto não contorna as dificuldades com passos de tempo pequenos que surgem, por exemplo, por restrições do tipo CFL.

Uma possibilidade para superar essa dificuldade é utilizar uma formulação semi-discreta (contínua no tempo e discreta no espaço). Os métodos LxF e NT não admitem formulações semi-discretas. Neste sentido, podemos citar o trabalho de Rusanov, que também é conhecido como Método de Lax-Friedrichs Local (LLF) [16, 13]. No contexto de equações escalares, apresentamos esse método a partir da observação de que a equação

(4.15) pode ser escrita como um caso particular do fluxo numérico

$$F_{i-\frac{1}{2}} = \frac{1}{2}[f(u_{i-1}^n) + f(u_i^n) - a(u_i^n - u_{i-1}^n)] \quad (4.16)$$

para o caso em que a viscosidade numérica

$$a = \frac{\Delta x}{\Delta t}$$

é fixada em termos dos parâmetros de discretização. A idéia do método LLF é substituir esta viscosidade fixa por um valor calculado localmente

$$F_{i-\frac{1}{2}}^R = \frac{1}{2}[f(u_{i-1}^n) + f(u_i^n) - a_{i-\frac{1}{2}}(u_i^n - u_{i-1}^n)] \quad (4.17)$$

onde

$$a_{i-\frac{1}{2}} = \max_u \{|f'(u)|\} \quad (4.18)$$

para u entre u_{i-1}^n e u_i^n . Este método pode ser escrito na seguinte forma semidiscreta

$$\frac{d}{dt}u_i(t) = -\frac{F_{i+\frac{1}{2}}^R(t) - F_{i-\frac{1}{2}}^R(t)}{\Delta x}. \quad (4.19)$$

O sistema de equações diferenciais formado por (4.19) pode ser resolvido utilizando métodos de Runge-Kutta de alta ordem [45], por exemplo. Ao contrário dos esquemas LxF e NT onde a dissipação numérica cresce com a redução do parâmetro de discretização do tempo, a dissipação numérica deste método é $\mathcal{O}(\Delta x)$.

Seguindo a idéia do algoritmo REA, Kurganov e Tadmor apresentaram em [18] uma versão de alta ordem do esquema LLF, também baseada em aproximações lineares por partes do tipo MUSCL. Este esquema utiliza informações locais para obter estimativas mais precisas da espessura dos leques de Riemann. A solução é então evoluída separadamente em volumes de controle definidos sobre regiões não-suaves (que contêm o leque de Riemann) e suaves. Após a evolução, os dados distribuídos de forma não-uniforme são projetados sobre a malha original.

A formulação semidiscreta do método de Kurganov e Tadmor (KT) possui dissipação numérica $\mathcal{O}(\Delta x^3)$ [18], não padecendo da excessiva dissipação presente no método NT quando passos de tempo pequenos são empregados. Comparações entre os esquemas

NT e KT na simulação de escoamentos bifásicos em meios porosos com permeabilidade intrínseca heterogênea, podem ser encontradas, por exemplo em [22, 23].

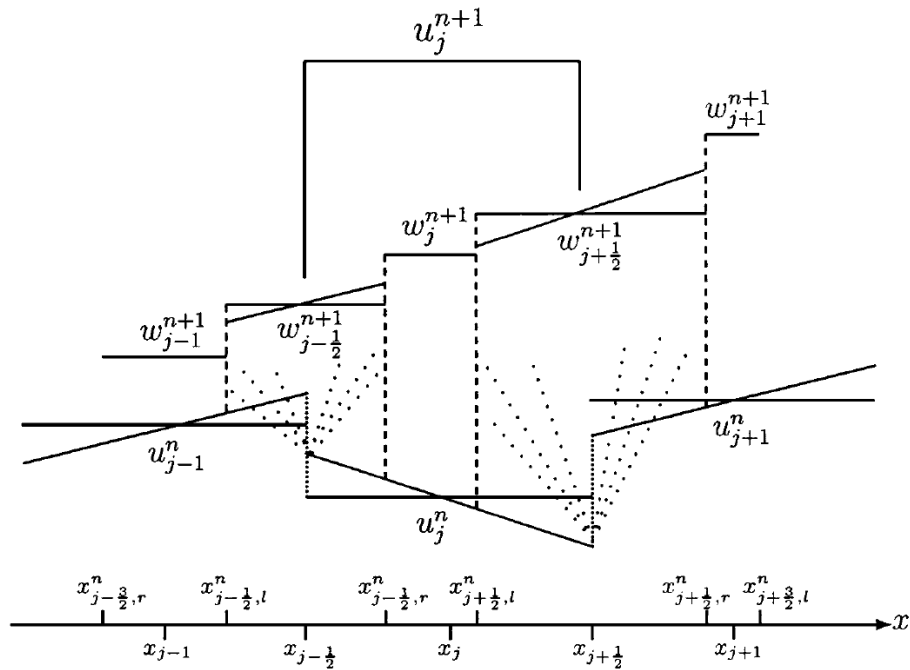


Figura 4.2: Esquema de Kurganov-Tadmor (Retirado de [18]).

O esquema KT utiliza o valor absoluto das velocidades de propagação nas faces dos volumes para calcular o passo evolutivo do algoritmo REA em novas células, de tamanho proporcional a tais velocidades, como indica a Figura 4.2. Em [19] Kurganov, Noelle e Petrova utilizam tais informações locais de forma mais precisa, levando em consideração o sentido em que a informação é advectada. Assim as velocidades de propagação não são tomadas em seu maior valor absoluto, como em (4.18), mas sim em seu valor mínimo e máximo. Por associar características de esquemas Upwind ao esquema central KT, tal método é denominado Central-Upwind. Em [24], Kurganov e Lin propuseram uma alteração no passo de projeção do esquema Central-Upwind para diminuir ainda mais a dissipação numérica.

Na próxima seção descreveremos o esquema Central-Upwind, evidenciando sua construção com base no algoritmo REA. Em seguida mostraremos que os esquemas KT e LLF podem ser facilmente obtidos a partir deste.

4.3 Central-Upwind

Como veremos nesta seção, a dissipação numérica presente nos esquemas centrais pode ser ainda mais reduzida pela consideração de velocidades de propagação unidirecionais. Isto leva aos chamados esquemas Central-Upwind (CUp) [19, 24].

Tais esquemas apresentam as vantagens já discutidas dos esquemas centrais e ao mesmo tempo, possuem natureza típica de esquemas Upwind uma vez que são utilizadas mais informações sobre as direções de propagação de ondas, resultando em volumes de controle sobre os leques de Riemann que não são mais simétricos (ao contrário dos esquemas KT e LLF).

4.3.1 Reconstrução Linear

Com base nos valores médios \mathbf{u}_i^n , são construídas aproximações lineares na forma

$$\mathbf{p}_i^n(x) = \mathbf{u}_i^n + \partial \mathbf{u}_i^n (x_i - x) \quad x \in \mathcal{C}_i, \quad (4.20)$$

onde as derivadas numéricas

$$\partial \mathbf{u}_i^n = \frac{\partial \mathbf{u}_i^n}{\partial x} + \mathcal{O}(\Delta x)$$

são calculadas com uso de limitadores de fluxo [16, 46, 21]. A característica não oscilatória dos esquemas centrais reside na escolha apropriada das aproximações destas derivadas.

Destacamos que os esquemas numéricos apresentam boa estabilidade com o uso do limitador minmod clássico [16]. Com o uso deste limitador, a derivada numérica de uma função escalar v genérica, avaliada na célula \mathcal{C}_i e no instante t^n , é calculada por

$$\partial v_i^n = \text{minmod} \left(\frac{v_i^n - v_{i-1}^n}{\Delta x}, \frac{v_{i+1}^n - v_i^n}{\Delta x} \right) \quad (4.21)$$

onde a função minmod para vários argumentos é definida como

$$\text{minmod}(a_1, a_2, \dots) = \begin{cases} \min_i \{a_i\} & \text{se } a_i > 0 \quad \forall i, \\ \max_i \{a_i\} & \text{se } a_i < 0 \quad \forall i, \\ 0 & \text{caso contrário.} \end{cases} \quad (4.22)$$

Dentre outras possibilidades, podemos empregar também o limitador Superbee [46]

$$\partial v_i^n = \text{maxmod} \left(\sigma_i^{(1)}, \sigma_i^{(2)} \right) \quad (4.23)$$

com

$$\begin{aligned} \sigma_i^{(1)} &= \text{minmod} \left(\left(\frac{v_{i+1}^n - v_i^n}{\Delta x} \right), \alpha \left(\frac{v_i^n - v_{i-1}^n}{\Delta x} \right) \right), \\ \sigma_i^{(2)} &= \text{minmod} \left(\alpha \left(\frac{v_{i+1}^n - v_i^n}{\Delta x} \right), \left(\frac{v_i^n - v_{i-1}^n}{\Delta x} \right) \right), \end{aligned}$$

ou o MC [21]

$$\partial v_i^n = \text{minmod} \left(\alpha \left(\frac{v_{i+1}^n - v_i^n}{\Delta x} \right), \left(\frac{v_{i+1}^n - v_{i-1}^n}{2\Delta x} \right), \alpha \left(\frac{v_i^n - v_{i-1}^n}{\Delta x} \right) \right). \quad (4.24)$$

Na verdade, os limitadores são implementados de forma genérica, dependente de um parâmetro $\alpha \in [1, 2]$. Superbee e MC, em sua forma original, equivalem à escolha $\alpha = 2$, enquanto o valor $\alpha = 1$ reproduz o limitador minmod clássico (4.21). Observando que a escolha $\alpha = 2$, conduz a derivadas mais acentuadas sendo, no entanto, mais sujeita a instabilidades. Assim, a derivada numérica $\partial \mathbf{u}_i^n$ em (4.20) é calculada com o uso de (4.21), (4.23) ou (4.24), tomando v como a j -ésima componente do vetor \mathbf{u}_i^n , para $j = 1, \dots, N$. Finalmente, notamos que a reconstrução linear (4.20) satisfaz

$$\frac{1}{|\mathcal{C}_i|} \int_{\mathcal{C}_i} \mathbf{p}_i^n(x) dx = \mathbf{u}_i^n.$$

4.3.2 Evolução

A reconstrução linear (4.20) conduz a descontinuidades nos pontos de interface $x_{i\pm\frac{1}{2}}$, de onde definimos os valores

$$\mathbf{u}_{i+\frac{1}{2}}^+ = \mathbf{p}_{i+1}(x_{i+\frac{1}{2}}) \quad \text{e} \quad \mathbf{u}_{i+\frac{1}{2}}^- = \mathbf{p}_i(x_{i+\frac{1}{2}})$$

no nó $x_{i+\frac{1}{2}}$ e

$$\mathbf{u}_{i-\frac{1}{2}}^+ = \mathbf{p}_i(x_{i-\frac{1}{2}}) \quad \text{e} \quad \mathbf{u}_{i-\frac{1}{2}}^- = \mathbf{p}_{i-1}(x_{i-\frac{1}{2}})$$

no nó $x_{i-\frac{1}{2}}$. Devido à hiperbolicidade do problema, estas descontinuidades se propagam para a direita ou para a esquerda com velocidades locais finitas, que podem ser estimadas

por

$$a_{i+\frac{1}{2}}^+ = \max_{\mathbf{w} \in C(\mathbf{u}_{i+\frac{1}{2}}^-, \mathbf{u}_{i+\frac{1}{2}}^+)} \left\{ \lambda_N \left(\frac{\partial \mathbf{f}}{\partial \mathbf{u}}(\mathbf{w}) \right), 0 \right\} \quad (4.25)$$

e

$$a_{i+\frac{1}{2}}^- = \max_{\mathbf{w} \in C(\mathbf{u}_{i+\frac{1}{2}}^-, \mathbf{u}_{i+\frac{1}{2}}^+)} \left\{ \lambda_1 \left(\frac{\partial \mathbf{f}}{\partial \mathbf{u}}(\mathbf{w}) \right), 0 \right\} \quad (4.26)$$

respectivamente, onde $\lambda_1 < \dots < \lambda_N$ são os N autovalores do jacobiano $\frac{\partial \mathbf{f}}{\partial \mathbf{u}}$, e $C(\mathbf{u}_{i+\frac{1}{2}}^-, \mathbf{u}_{i+\frac{1}{2}}^+)$ é uma curva no espaço de fase que conecta os estados à esquerda e à direita. No esquema KT [18] tais velocidades são calculadas em relação ao raio espectral de $\frac{\partial \mathbf{f}}{\partial \mathbf{u}}$.

No caso onde a função de fluxo é convexa, as velocidades locais de propagação serão estimadas por

$$a_{i+\frac{1}{2}}^+ = \max \left\{ \lambda_N \left(\frac{\partial \mathbf{f}}{\partial \mathbf{u}}(\mathbf{u}_{i+\frac{1}{2}}^-) \right), \lambda_N \left(\frac{\partial \mathbf{f}}{\partial \mathbf{u}}(\mathbf{u}_{i+\frac{1}{2}}^+) \right), 0 \right\}. \quad (4.27)$$

$$a_{i+\frac{1}{2}}^- = \max \left\{ \lambda_1 \left(\frac{\partial \mathbf{f}}{\partial \mathbf{u}}(\mathbf{u}_{i+\frac{1}{2}}^-) \right), \lambda_1 \left(\frac{\partial \mathbf{f}}{\partial \mathbf{u}}(\mathbf{u}_{i+\frac{1}{2}}^+) \right), 0 \right\}. \quad (4.28)$$

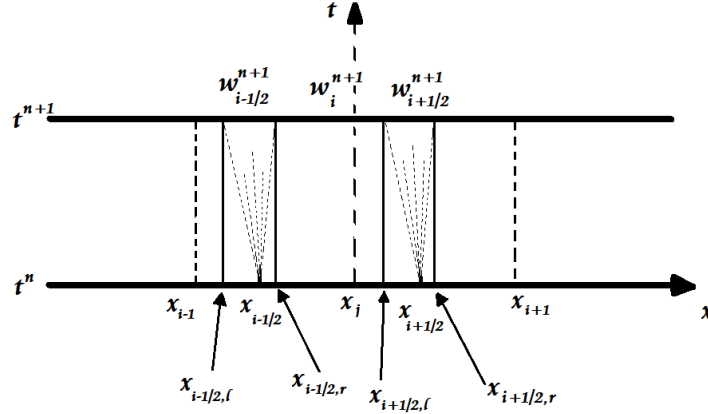


Figura 4.3: Volumes de controle selecionados de acordo com as áreas suaves e não-suaves (Baseado em [24]).

Com isso, dividimos a faixa $S = X \times [t^n, t^{n+1}]$, onde X é um domínio computacional, em áreas não suaves e áreas suaves. As áreas suaves $[x_{i-\frac{1}{2},r}^n, x_{i+\frac{1}{2},l}^n] \times [t^n, t^{n+1}]$ são regiões onde a solução é suave, e as áreas não suaves $[x_{i+\frac{1}{2},l}^n, x_{i+\frac{1}{2},r}^n] \times [t^n, t^{n+1}]$ são regiões onde a solução pode apresentar discontinuidades. Os limites destas regiões são definidos de

acordo com as velocidades locais estimadas na forma:

$$x_{i+\frac{1}{2},l}^n = x_{i+\frac{1}{2}} + a_{i+\frac{1}{2}}^- \Delta t \quad \text{e} \quad x_{i+\frac{1}{2},r}^n = x_{i+\frac{1}{2}} + a_{i+\frac{1}{2}}^+ \Delta t.$$

Esta divisão é possível apenas se a seguinte condição de CFL for satisfeita [24]:

$$\max_i \left\{ \max \left(a_{i+\frac{1}{2}}^+, -a_{i+\frac{1}{2}}^- \right) \right\} < \frac{1}{2} \frac{\Delta x}{\Delta t} \quad (4.29)$$

Integrando (4.1) sobre os correspondentes domínios suaves e não suaves ilustrados na Figura (4.3), temos os valores médios

$$\begin{aligned} \mathbf{w}_i^{n+1} = & \frac{1}{x_{i+\frac{1}{2},l}^n - x_{i-\frac{1}{2},r}^n} \left[\int_{x_{i-\frac{1}{2},r}^n}^{x_{i+\frac{1}{2},l}^n} \mathbf{p}_i^n(x) dx \right. \\ & \left. - \int_{t^n}^{t^{n+1}} \left(\mathbf{f}(\mathbf{u}(x_{i+\frac{1}{2},l}^n, t)) - \mathbf{f}(\mathbf{u}(x_{i-\frac{1}{2},r}^n, t)) \right) dt \right] \end{aligned} \quad (4.30)$$

e

$$\begin{aligned} \mathbf{w}_{i+\frac{1}{2}}^{n+1} = & \frac{1}{x_{i+\frac{1}{2},r}^n - x_{i+\frac{1}{2},l}^n} \left[\int_{x_{i+\frac{1}{2},l}^n}^{x_{i+\frac{1}{2}}} \mathbf{p}_i^n(x) dx + \int_{x_{i+\frac{1}{2}}}^{x_{i+\frac{1}{2},r}^n} \mathbf{p}_{i+1}^n(x) dx \right. \\ & \left. - \int_{t^n}^{t^{n+1}} \left(\mathbf{f}(\mathbf{u}(x_{i+\frac{1}{2},r}^n, t)) - \mathbf{f}(\mathbf{u}(x_{i+\frac{1}{2},l}^n, t)) \right) dt \right]. \end{aligned} \quad (4.31)$$

As integrais espaciais podem ser computadas analiticamente, uma vez que as reconstruções lineares são conhecidas. Para discretizar as integrais dos termos de fluxo, podemos utilizar fórmulas de quadratura adequadas [19].

4.3.3 Projeção

O passo final do esquema é dado por uma nova reconstrução $\tilde{\mathbf{w}}^{n+1}$, agora baseada nos valores $\mathbf{w}_{i-\frac{1}{2}}^{n+1}$, \mathbf{w}_i^{n+1} e $\mathbf{w}_{i+\frac{1}{2}}^{n+1}$ sobre a malha não uniforme auxiliar, com sua consecutiva projeção sobre a malha original, definindo o valor médio

$$\mathbf{u}_i^{n+1} = \frac{1}{\Delta x} \int_{x_{i-\frac{1}{2}}}^{x_{i+\frac{1}{2}}} \tilde{\mathbf{w}}^{n+1}(x) dx.$$

Isto leva a um método completamente discreto. Para encontrar sua forma semidiscreta, tomamos

$$\begin{aligned} \frac{d}{dt} \mathbf{u}_i^n &= \lim_{\Delta t \rightarrow 0} \frac{\mathbf{u}_i^{n+1} - \mathbf{u}_i^n}{\Delta t} \\ &= \lim_{\Delta t \rightarrow 0} \frac{1}{\Delta t} \left[\frac{1}{\Delta x} \int_{x_{i-\frac{1}{2}}}^{x_{i+\frac{1}{2}}} \tilde{\mathbf{w}}^{n+1}(x) dx - \mathbf{u}_i^n \right]. \end{aligned}$$

A avaliação desta integral, que pode ser vista com detalhes na referência [19], leva à seguinte formulação semi-discreta, escrita em sua forma conservativa,

$$\frac{d}{dt} \mathbf{u}_i(t) = - \frac{\mathbf{h}_{i+\frac{1}{2}}(t) - \mathbf{h}_{i-\frac{1}{2}}(t)}{\Delta x}, \quad (4.32)$$

com os fluxos numéricos $\mathbf{h}_{i+\frac{1}{2}}$ dados por

$$\mathbf{h}_{i+\frac{1}{2}}(t) = \frac{a_{i+\frac{1}{2}}^+ \mathbf{f}(\mathbf{u}_{i+\frac{1}{2}}^-) - a_{i+\frac{1}{2}}^- \mathbf{f}(\mathbf{u}_{i+\frac{1}{2}}^+)}{a_{i+\frac{1}{2}}^+ - a_{i+\frac{1}{2}}^-} + \frac{a_{i+\frac{1}{2}}^+ a_{i+\frac{1}{2}}^-}{a_{i+\frac{1}{2}}^+ - a_{i+\frac{1}{2}}^-} \left[\mathbf{u}_{i+\frac{1}{2}}^+ - \mathbf{u}_{i+\frac{1}{2}}^- \right]. \quad (4.33)$$

4.3.4 Algoritmo de Runge-Kutta

Aproximações de alta ordem no tempo podem ser obtidas através do uso de esquemas de Runge-Kutta, como os apresentados em [47, 45], obtidos pela combinação convexa de métodos de Euler. Princípios do máximo para tais esquemas podem ser encontrados em [18].

De acordo com [13], é suficiente exigir a restrição

$$\frac{\Delta t_{RK}}{\Delta x} \max_{\mathbf{w}} |\mathbf{f}'(\mathbf{w})| < TRK, \quad (4.34)$$

onde $1 \leq TRK \leq 1,5$ para garantir a estabilidade ao esquema numérico de Kurganov-Tadmor.

Considerando a equação semi-discreta na forma (4.32) e denotando seu lado direito por $C[\mathbf{u}]$, os esquemas modificados de Euler, usados neste trabalho, serão na forma

$$\begin{aligned} \mathbf{u}^1 &= \mathbf{u}^n + \Delta t_{cfl}^n \cdot C[\mathbf{u}^n] \\ \mathbf{u}^{l+1} &= n_l \cdot \mathbf{u}^n + (1 - n_l) \cdot (\mathbf{u}^l + \Delta t_{cfl}^n \cdot C[\mathbf{u}^l]), \quad l = 1, 2, \dots, r-1, \\ \mathbf{u}^{n+1} &= \mathbf{u}^r \end{aligned} \quad (4.35)$$

para o esquema de segunda ordem, $r = 2$ e $n_1 = \frac{1}{2}$, para o esquema de terceira ordem, $r = 2$, $n_1 = \frac{3}{4}$ e $n_2 = \frac{1}{3}$.

4.3.5 Variações do Esquema Central-Upwind

Discutiremos agora alguns métodos que podem ser obtidos do esquema CUp, a partir de modificações na função de fluxo (4.33).

Esquema de Kurganov-Lin [24]: Em [24], Kurganov e Lin propuseram uma alteração no passo de projeção do esquema Central-Upwind para diminuir a dissipação numérica. Com isso eles chegam à nova forma do fluxo numérico

$$\mathbf{h}_{i+\frac{1}{2}}(t) = \frac{a_{i+\frac{1}{2}}^+ \mathbf{f}(\mathbf{u}_{i+\frac{1}{2}}^-) - a_{i+\frac{1}{2}}^- \mathbf{f}(\mathbf{u}_{i+\frac{1}{2}}^+)}{a_{i+\frac{1}{2}}^+ - a_{i+\frac{1}{2}}^-} + a_{i+\frac{1}{2}}^+ a_{i+\frac{1}{2}}^- \left[\frac{\mathbf{u}_{i+\frac{1}{2}}^+ - \mathbf{u}_{i+\frac{1}{2}}^-}{a_{i+\frac{1}{2}}^+ - a_{i+\frac{1}{2}}^-} - \mathbf{q}_{i+\frac{1}{2}} \right] \quad (4.36)$$

onde o termo de correção é calculado por

$$\mathbf{q}_{i+\frac{1}{2}} = \text{minmod} \left(\frac{\mathbf{u}_{i+\frac{1}{2}}^+ - \mathbf{w}_{i+\frac{1}{2}}^{\text{int}}}{a_{i+\frac{1}{2}}^+ - a_{i+\frac{1}{2}}^-}, \frac{\mathbf{w}_{i+\frac{1}{2}}^{\text{int}} - \mathbf{u}_{i+\frac{1}{2}}^-}{a_{i+\frac{1}{2}}^+ - a_{i+\frac{1}{2}}^-} \right), \quad (4.37)$$

e os valores intermediários $\mathbf{w}_{i+\frac{1}{2}}^{\text{int}}$ são obtidos por

$$\mathbf{w}_{i+\frac{1}{2}}^{\text{int}} = \frac{a_{i+\frac{1}{2}}^+ \mathbf{u}_{i+\frac{1}{2}}^+ - a_{i+\frac{1}{2}}^- \mathbf{u}_{i+\frac{1}{2}}^- - \left\{ \mathbf{f}(\mathbf{u}_{i+\frac{1}{2}}^+) - \mathbf{f}(\mathbf{u}_{i+\frac{1}{2}}^-) \right\}}{a_{i+\frac{1}{2}}^+ - a_{i+\frac{1}{2}}^-}. \quad (4.38)$$

Esquema de Kurganov-Tadmor [18]: O método KT pode ser obtido pelo CUp a partir da consideração

$$a_{i+\frac{1}{2}}^+ = -a_{i+\frac{1}{2}}^- = a_{i+\frac{1}{2}} = \max_{\mathbf{w} \in C(\mathbf{u}_{i+\frac{1}{2}}^-, \mathbf{u}_{i+\frac{1}{2}}^+)} \rho \left(\frac{\partial \mathbf{f}(\mathbf{w})}{\partial \mathbf{u}} \right). \quad (4.39)$$

Assim, o fluxo (4.33) se reduz a

$$\mathbf{h}_{i+\frac{1}{2}}(t) = \frac{\mathbf{f}(\mathbf{u}_{i+\frac{1}{2}}^-) + \mathbf{f}(\mathbf{u}_{i+\frac{1}{2}}^+)}{2} - \frac{a_{i+\frac{1}{2}}}{2} \left[\mathbf{u}_{i+\frac{1}{2}}^+ - \mathbf{u}_{i+\frac{1}{2}}^- \right] \quad (4.40)$$

que é exatamente o fluxo numérico do KT [18].

Esquema LLF: O esquema LLF nada mais é do que a versão de primeira ordem do KT. Com isso, a partir do algoritmo do KT, tal método é obtido tomando $\partial \mathbf{u}_i^n = 0$ em (4.20), conduzindo ao fluxo

$$\mathbf{h}_{i+\frac{1}{2}}(t) = \frac{\mathbf{f}(\mathbf{u}_i^n) + \mathbf{f}(\mathbf{u}_{i+1}^n)}{2} - \frac{a_{i+\frac{1}{2}}}{2} [\mathbf{u}_{i+1}^n - \mathbf{u}_i^n] \quad (4.41)$$

Esquema Baseado em Malha Dual: Como vimos na Seção 4.1, o esquema LxF pode ser obtido tomando

$$a_{i+\frac{1}{2}} = \frac{\Delta x}{\Delta t} \quad (4.42)$$

em (4.41). Devido restrição CFL (4.29), tomaremos a velocidade limite

$$a_{i+\frac{1}{2}} = \frac{1}{2} \frac{\Delta x}{\Delta t} \quad (4.43)$$

em (4.40), definindo o fluxo

$$\mathbf{h}_{i+\frac{1}{2}}(t) = \frac{\mathbf{f}(\mathbf{u}_{i+\frac{1}{2}}^-) + \mathbf{f}(\mathbf{u}_{i+\frac{1}{2}}^+)}{2} - \frac{1}{4} \frac{\Delta x}{\Delta t} [\mathbf{u}_{i+\frac{1}{2}}^+ - \mathbf{u}_{i+\frac{1}{2}}^-] \quad (4.44)$$

Esta versão do método KT passa a ter características do método NT [17], uma vez que é utilizada uma velocidade de propagação global, e não mais local. Com isso, este método semidiscreto, ao qual chamaremos de DS (Dual Scheme) possui um algoritmo relativamente mais simples, uma vez que não é necessária a avaliação das velocidades locais. Contudo, esperamos que ele seja mais difusivo do que o KT.

Central-Upwind de Primeira Ordem: Por fim, comentamos também a versão de primeira ordem do CUp, que aqui chamaremos de CUp1. De forma análoga ao caso do LLF, são utilizadas soluções constantes por partes tomando $\partial \mathbf{u}_i^n = 0$ em (4.20).

Capítulo 5

Experimentos Numéricos

Neste capítulo apresentaremos experimentos numéricos com o objetivo de estudar a precisão e a estabilidade dos esquemas apresentados no Capítulo 4, em problemas que possuem soluções descontínuas, típicas das encontradas na modelagem de escoamentos em meios porosos, como os discutidos no Capítulo 2.

A implementação dos métodos numéricos foi feita utilizando a linguagem de programação Fortran. Para a realização dos experimentos, prescreveremos a discretização do domínio e o número de Courant desejado.

O número de Courant (Cr) pode ser definido como a fração do volume da malha que a informação se propaga em um passo de tempo [16], ou seja

$$Cr = v \max |f'(u)| \frac{\Delta t}{\Delta x},$$

onde v é uma constante que representa velocidade real do fluido nos poros (2.16) e $\max |f'(u)|$ a maior velocidade do fluxo.

Como Δx e Cr serão conhecidos, e v e $\max |f'(u)|$ são definidos de acordo com o modelo, o tamanho do passo de tempo será calculado, servindo de base para a definição de quantos passos de tempo serão utilizados,

$$\Delta t \leq \frac{\Delta x Cr}{v \max |f'(u)|}$$

e, denotando o número de passos no tempo pelo número inteiro N_t , temos

$$N_t \geq \frac{T}{\Delta t}$$

com T representando o tempo total a ser simulado. Em todos os experimentos escalares os resultados foram divididos entre os métodos de primeira ordem:

- Central Upwind de primeira ordem (CUp-1o);
- Local Lax-Friedrichs (LLF);
- Dual Scheme de primeira ordem (DS-1o);
- Lax-Friedrichs (LxF);

e os métodos de alta ordem:

- Central Upwind(CUp);
- Kurganov-Tadmor (KT);
- Dual Scheme (DS).

Em todos os esquemas semi-discretos, foi utilizado o método de Runge-Kutta de terceira ordem para a integração do sistema de EDOs, como descrito na Seção 4.3.4. Como descrito na Seção 4.3.1, o parâmetro $\alpha \in [1, 2]$ indica o quão acentuadas serão as derivadas retornadas pelo limitador. Os métodos CUp-1o, LLF e DS-1o utilizam o limitador com o parâmetro $\alpha = 0$, levando os métodos a terem precisão de primeira ordem pois as soluções a serão reconstruídas como constantes por partes.

Nos experimentos escalares com os esquemas numéricos de segunda ordem, o parâmetro do limitador será $\alpha = 2$. Já para o sistema hiperbólico que modela o escoamento trifásico, empregamos $\alpha = 1$.

5.1 Equação do Transporte Linear

Neste experimento, avaliaremos as soluções numéricas para a equação de transporte advectivo linear (3.10) e (3.30)

$$\frac{\partial u}{\partial t} + a \frac{\partial u}{\partial x} = 0$$

com velocidade $a = v = 1,0$ constante. Para tal, tomaremos o domínio $\Omega = (0, 1)$ e o tempo total de simulação $T = 0, 2$. Aplicando a condição inicial

$$u(x, 0) = u_0(x) = \begin{cases} 1 & \text{se } 0,1 < x < 0,5, \\ 0 & \text{caso contrário} \end{cases}$$

onde temos duas descontinuidades, em $x = 0,1$ e $x = 0,5$. Para este problema, $\max |f'(u)| = 1,0$.

A solução exata deste problema para $T = 0,2$ é simplesmente a condição inicial deslocada, com isso as descontinuidades que estavam em $x = 0,1$ e $x = 0,5$, estarão em $x = 0,3$ e $x = 0,7$.

As discretizações utilizadas neste experimento serão:

- para os resultados mostrados nas Figuras 5.1 e 5.5, o domínio foi dividido em 50 volumes ($\Delta x = 0,02$), com $Cr = 0,5$ levando a

$$\Delta t = \frac{\Delta x Cr}{v \max |f'(u)|} = \frac{0,02 \times 0,5}{1 \times 1} = 0,01$$

$$N_t \approx \frac{T}{\Delta t} = \frac{0,2}{0,01} = 20$$

- para os resultados mostrados nas Figuras 5.2 e 5.6, o domínio foi dividido em 100 volumes ($\Delta x = 0,01$), com $Cr = 0,5$ levando a

$$\Delta t = 0,005 \quad N_t = 40$$

- para os resultados mostrados nas Figuras 5.3 e 5.7, o domínio foi dividido em 50 volumes ($\Delta x = 0,02$), com $Cr = 1$ levando a

$$\Delta t = 0,02 \quad N_t = 10$$

- para os resultados mostrados nas Figuras 5.4 e 5.8, o domínio foi dividido em 100 volumes ($\Delta x = 0,01$), com $Cr = 0,25$ levando a

$$\Delta t = 0,0025 \quad N_t = 80.$$

Os resultados mostrados nas Figuras 5.1 e 5.2 exibem o efeito de diferentes discretizações da malha para o mesmo número de Courant ($Cr = 0,5$). É possível observar que, como o esperado, os métodos apresentaram resultados mais precisos com o refinamento da malha baseado no mesmo Cr e que os métodos CUp-1o, LLF e DS-1o obtiveram resultado coincidentes.

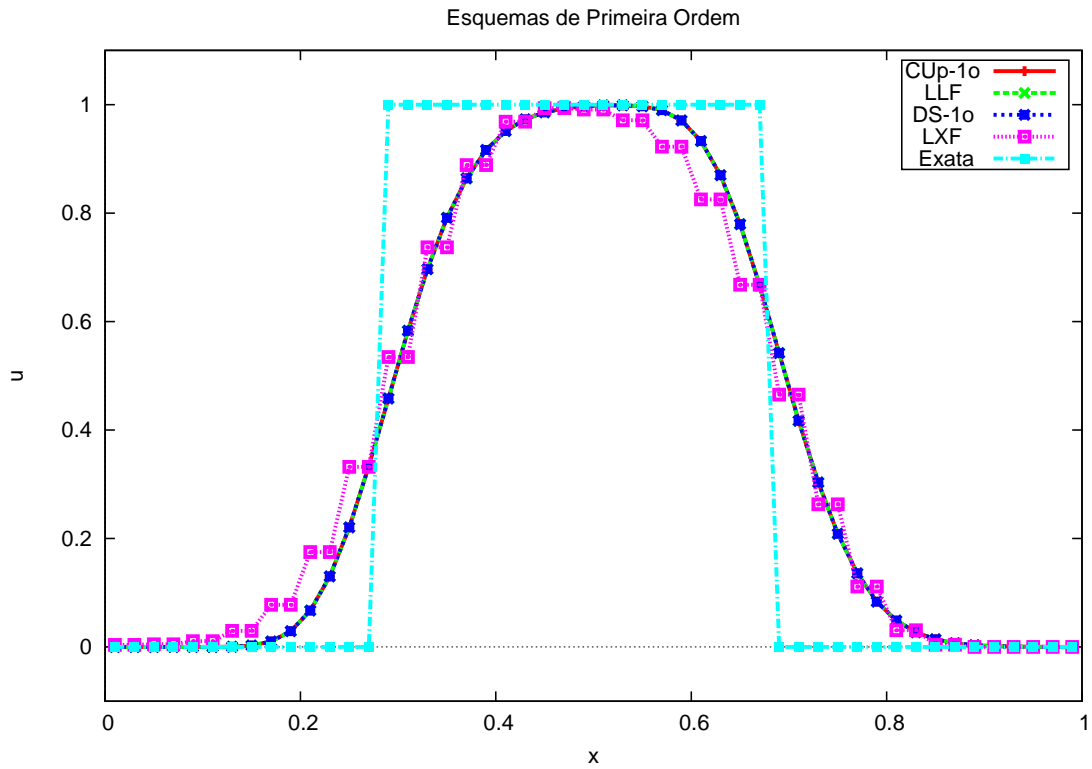


Figura 5.1: Aproximação de 1a. ordem para o problema linear com 50 volumes e $Cr = 0,5$

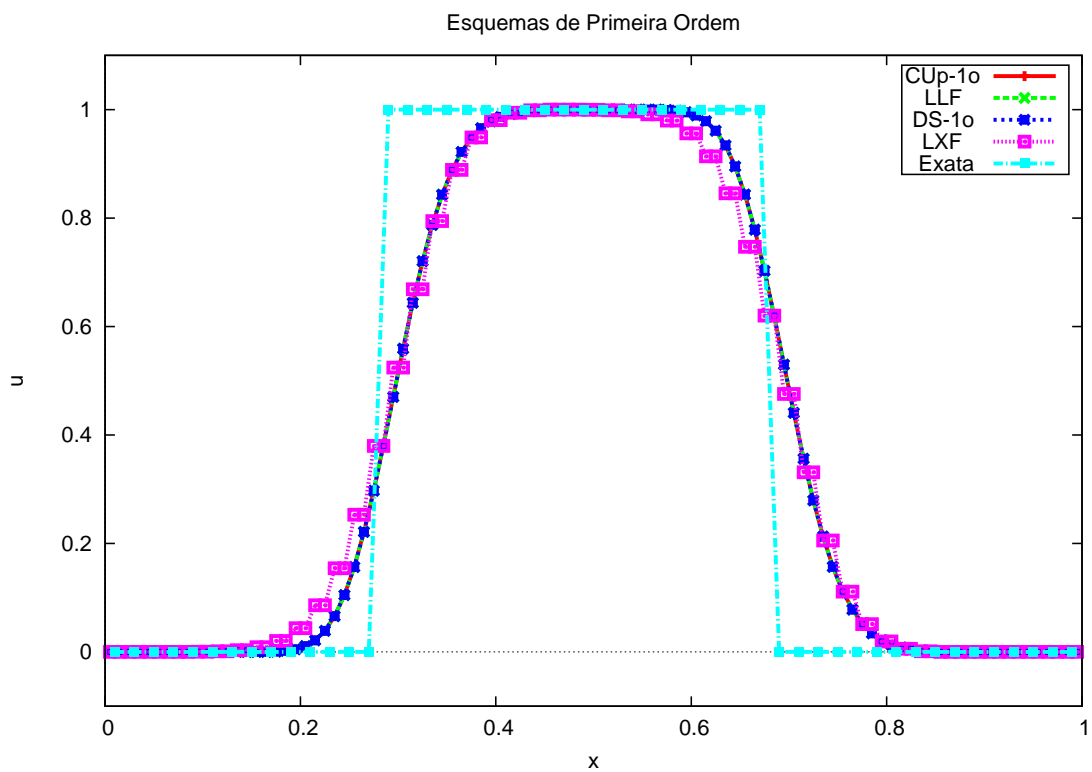


Figura 5.2: Aproximação de 1a. ordem para o problema linear com 100 volumes e $Cr = 0,5$

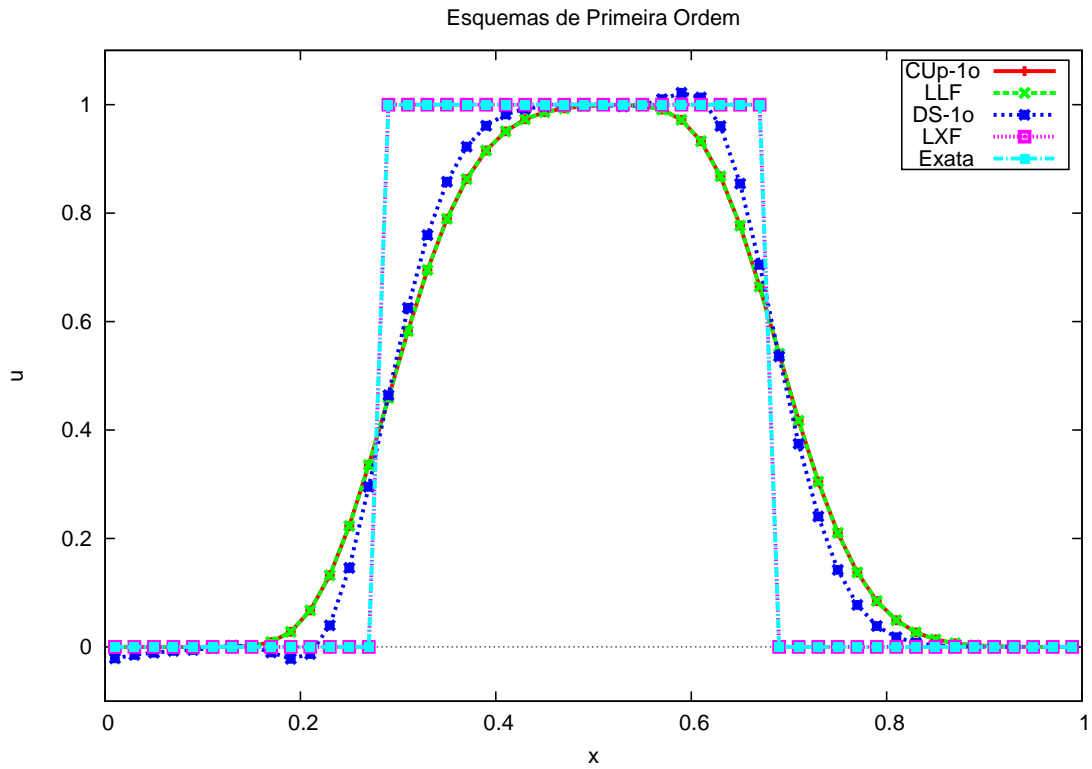


Figura 5.3: Aproximação de 1a. ordem para o problema linear com 50 volumes e $Cr = 1,0$

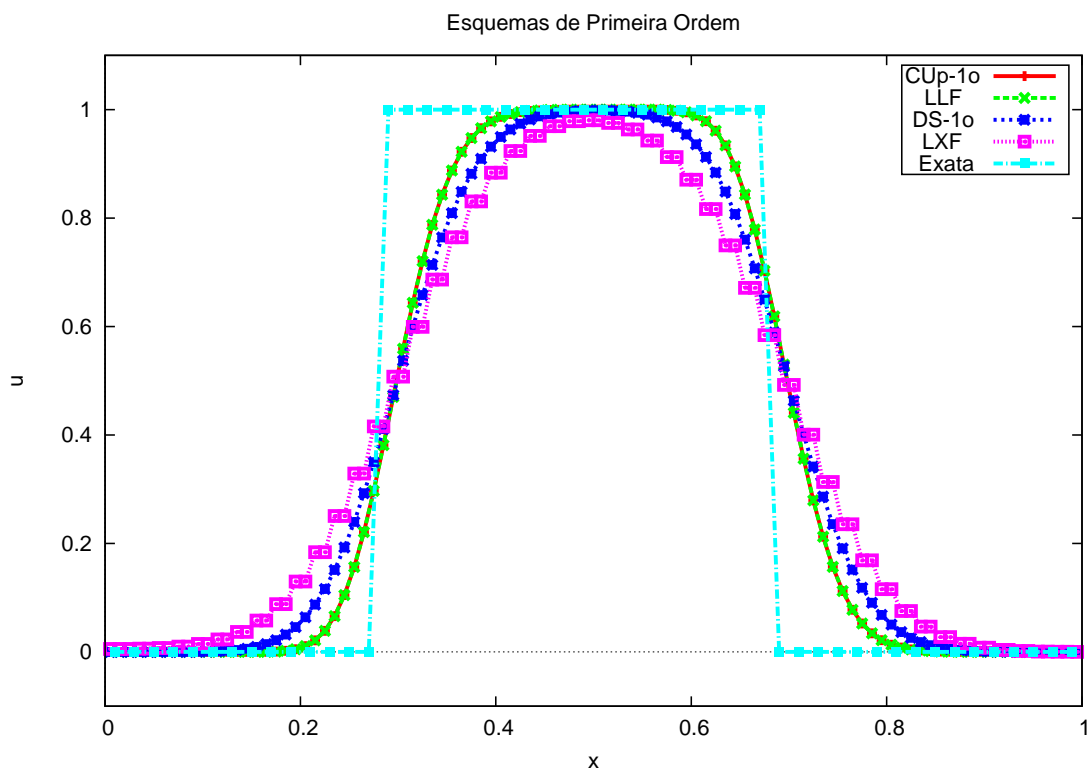


Figura 5.4: Aproximação de 1a. ordem para o problema linear com 100 volumes e $Cr = 0,25$

Já os resultados mostrados nas Figuras 5.3 e 5.4 exibem o efeito de diferentes números de Courant nos métodos de 1a. ordem. Com $Cr = 1$, o resultado para Lxf foi exato, em contraste com as pequenas oscilações encontradas no DS-1o e com o resultado difusivo do CUp-1o e LLF. No caso onde $Cr = 0,25$ o resultado mais difusivo foi do Lxf, seguido pelo DS-1o, sem oscilações, e os menos difusivos foram o CUp-1o e LLF.

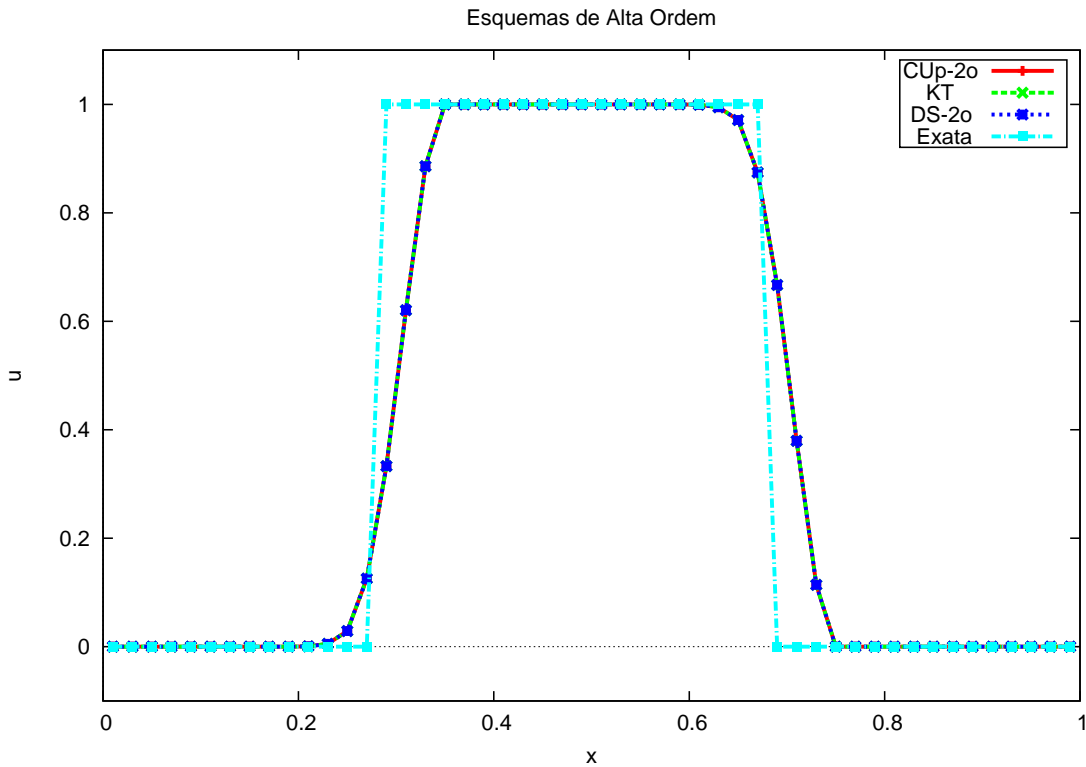


Figura 5.5: Aproximação de alta ordem para o problema linear com 50 volumes e $Cr = 0,5$

Os resultado mostrados nas Figuras 5.5 e 5.6, assim como nos métodos de 1a. ordem, exibem o efeito de uma malha mais refinada para o mesmo número de Courant ($Cr = 0,5$), todos os métodos apresentaram resultados similares e, conseqüentemente, maior precisão com a malha mais refinada.

No resultado mostrado nas Figuras 5.7, com $Cr = 1$, é possível observar que o DS está menos difusivo em relação ao CUp e o KT, porém, assim como no DS-1o, ele apresenta uma pequena oscilação. Já na Figura 5.8, o CUp e o KT conseguem resultados mais precisos que o DS.

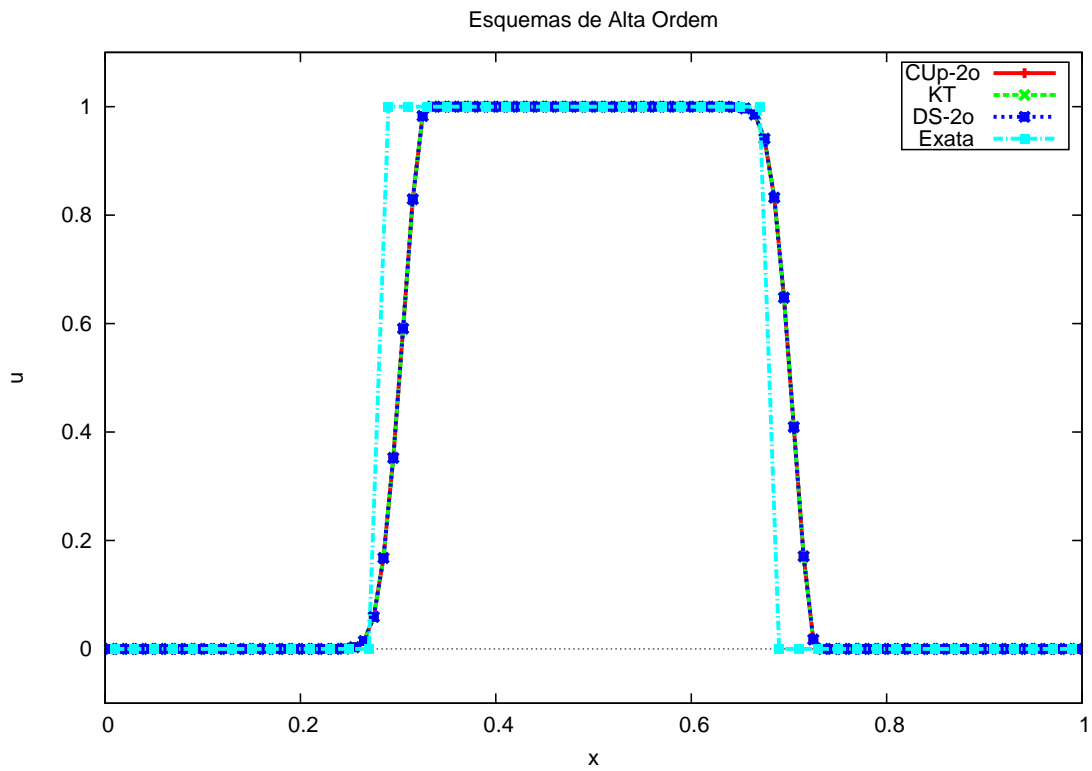


Figura 5.6: Aproximação de alta ordem para o problema linear com 100 volumes e $Cr = 0,5$

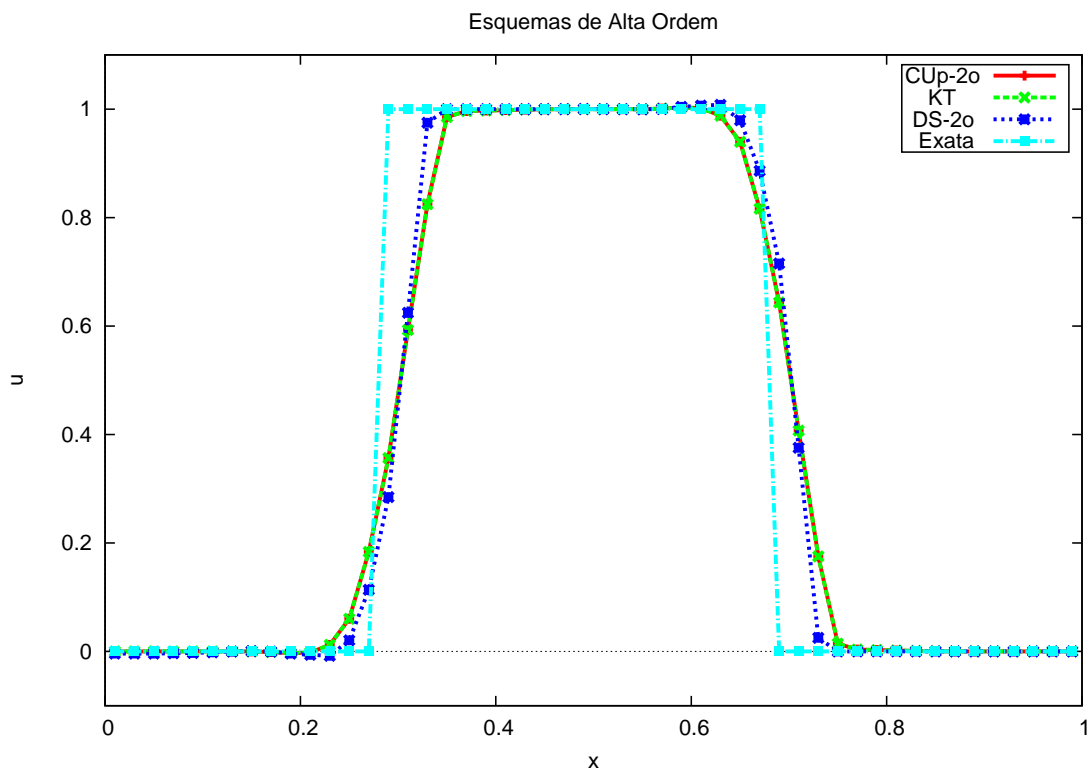


Figura 5.7: Aproximação de alta ordem para o problema linear com 50 volumes e $Cr = 1$

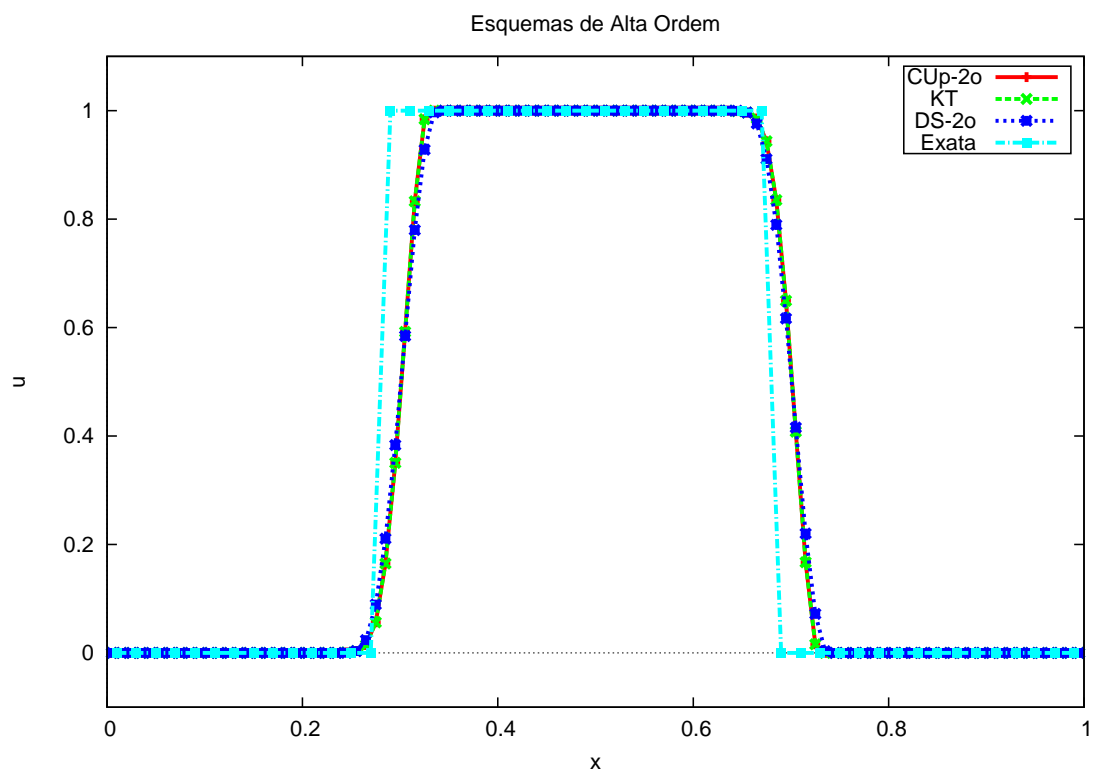


Figura 5.8: Aproximação de alta ordem para o problema linear com 100 volumes e $Cr = 0,25$

5.2 Equação de Burgers

Neste experimento, avaliaremos soluções numéricas para a equação de Burgers (3.31)

$$\frac{\partial u}{\partial t} + \frac{\partial}{\partial x} \left(\frac{u^2}{2} \right) = 0.$$

Assim como no experimento anterior, tomaremos o domínio $\Omega = (0, 1)$ discretizado em uma malha de 100 volumes e o tempo total de simulação $T = 0, 2$. Aplicando a condição inicial

$$u(x, 0) = u_0(x) = \begin{cases} 1 & \text{se } 0, 1 < x < 0, 5, \\ 0 & \text{caso contrário} \end{cases}$$

que para a função de fluxo de Burgers, levará a propagação de uma onda de rarefação em $x = 0, 1$, e a propagação de uma onda de choque em $0, 5$. Para este problema, $\max |f'(u)| = 1$, pois $f'(u) = u$ e assumimos que para os modelos apresentados $\max |u| = 1$, $0 \leq u \leq 1$.

Em $T = 0, 2$, o resultado exato será uma onda de rarefação que começa em $x = 0, 1$ e se estende até $x = 0, 3$ e uma onda de choque em $x = 0, 6$.

Neste experimento todos os resultados foram obtidos com o domínio dividido em 100 volumes e:

- $Cr = 0, 2$ com $N_t = 100$,
- $Cr = 0, 4$ com $N_t = 50$.

Nos resultados para métodos de primeira ordem, como esperado, o método Lxf foi o mais difusivo, sendo seguido pelo DS-1o. A difusão numérica de ambos foi evidenciada utilizando $Cr = 0, 2$.

Já os métodos LLF e CUp-1o obtiveram resultados próximos, em ambos experimentos, com o resultado melhor do CUp-1o principalmente no ponto $x = 0, 1$ onde começa a onda de rarefação. Este bom comportamento do CUp-1o é fruto do emprego de volumes de controle não simétricos utilizado em sua dedução.

Os resultados para os métodos de alta ordem ficaram bem próximos, com o CUp obtendo o melhor resultado. É possível observar no ponto $x = 0, 1$ que apenas o CUp não apresenta difusão no começo da onda de rarefação. Este bom comportamento, assim como no CUp-1o, se deve ao emprego de volumes de controle não simétricos.

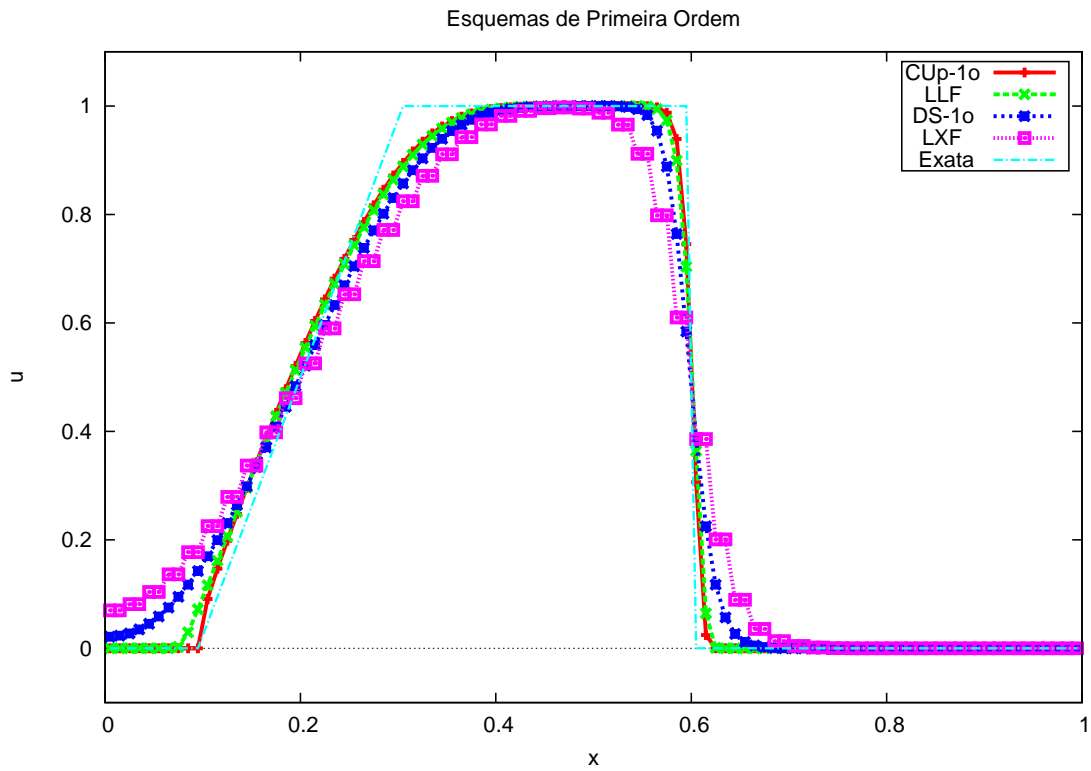


Figura 5.9: Aproximação de 1a. ordem para o problema de Burgers com 100 volumes e $Cr = 0,4$

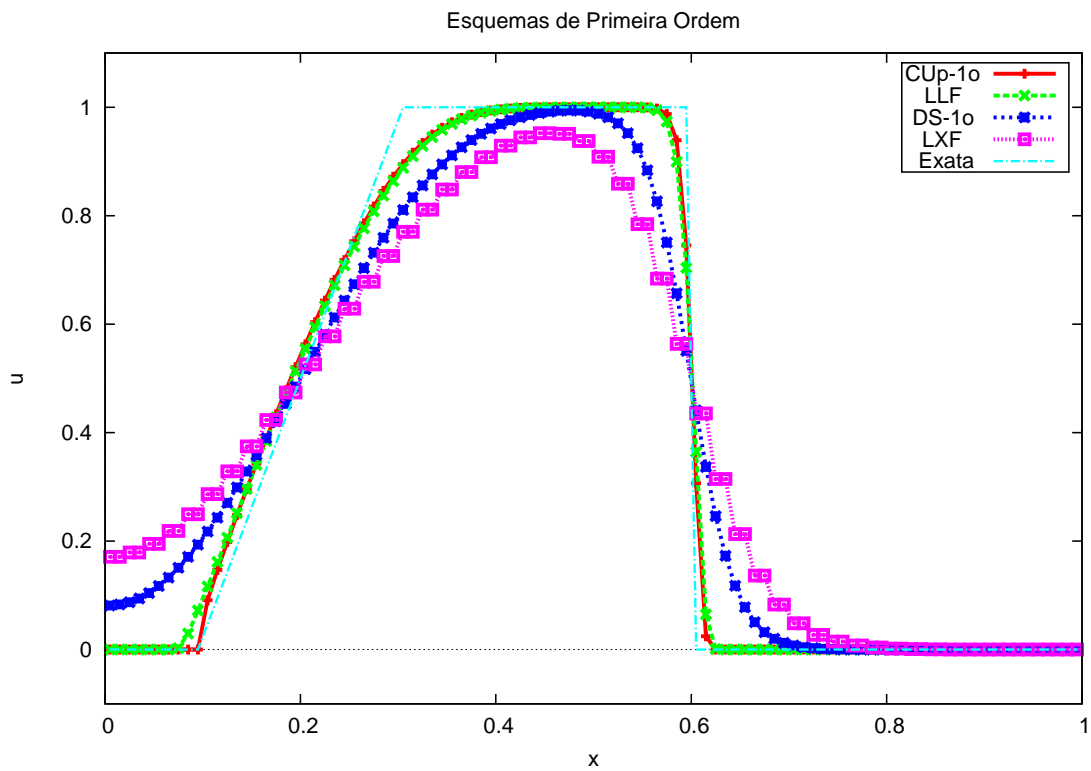


Figura 5.10: Aproximação de 1a. ordem para o problema de Burgers com 100 volumes e $Cr = 0,2$

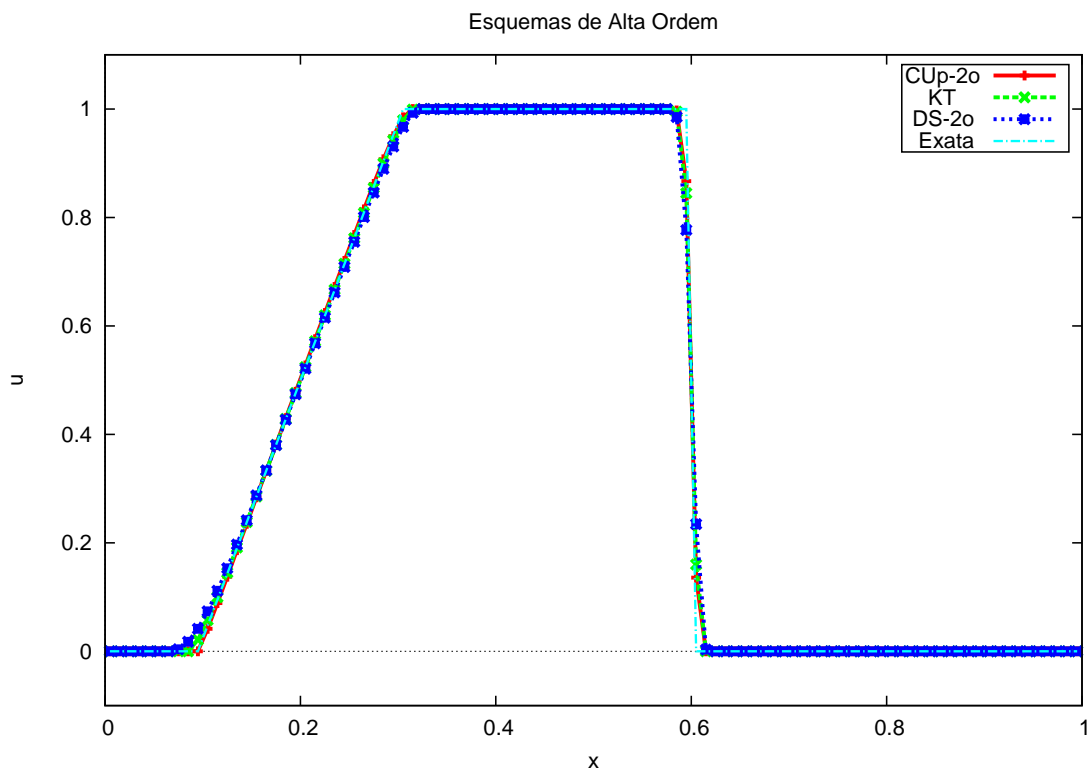


Figura 5.11: Aproximação de alta ordem para o problema de Burgers com 100 volumes e $Cr = 0,4$

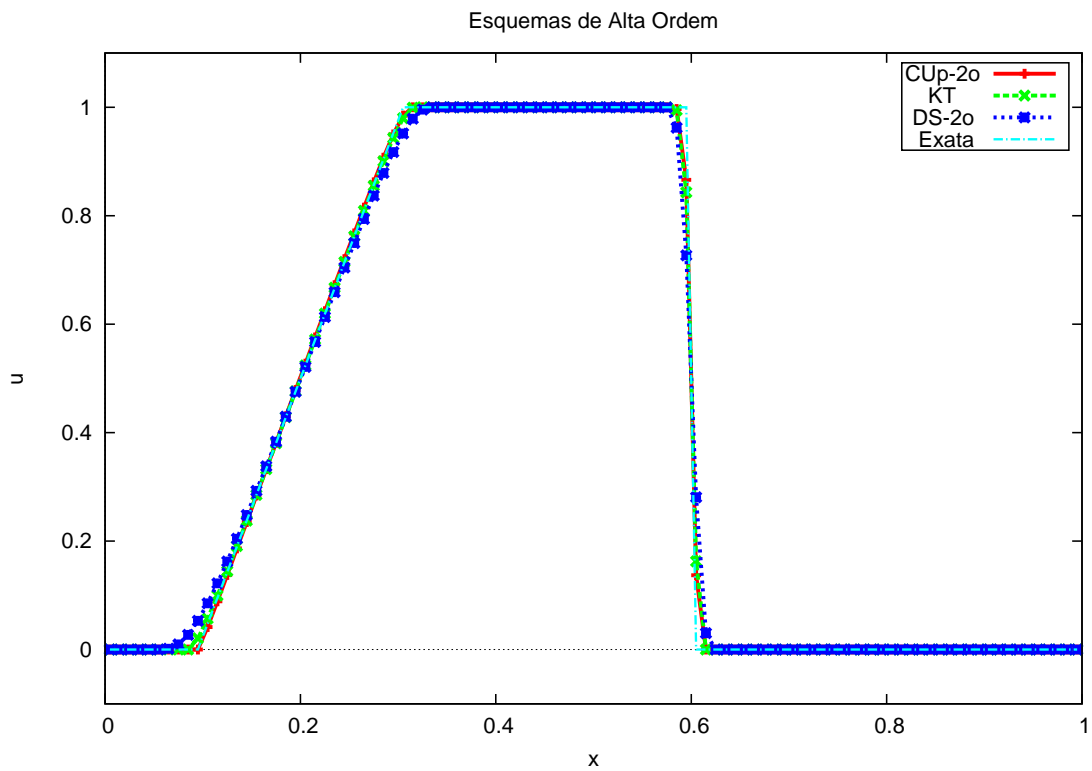


Figura 5.12: Aproximação de alta ordem para o problema de Burgers com 100 volumes e $Cr = 0,2$

Observando os resultados do CUp-1o nas Figuras 5.9 e 5.10 e em relação aos resultados do CUp nas Figuras 5.11 e 5.12 fica claro a influência da reconstrução linear para a obtenção de resultados mais precisos. Ainda em relação as Figuras 5.11 e 5.12, é possível notar que o método DS obteve um resultado mais preciso com $Cr = 0,4$.

5.3 Escoamento Bifásico: Buckley-Leverett

Neste experimento, avaliaremos soluções numéricas para a equação de Buckley-Leverett (3.32)

$$\frac{\partial u}{\partial t} + \frac{v}{\phi} \frac{\partial}{\partial x} \left(\frac{u^2}{u^2 + a(1-u)^2} \right) = 0,$$

com $a = 1/2$ e $a = 1/50$. Novamente tomaremos o domínio $\Omega = (0, 1)$ discretizado em uma malha de 100 volumes e o tempo total de simulação será de $T = 0,5$, para o caso onde $a = 1/2$, e $T = 0,2$, para $a = 1/50$. A condição de injeção $u(0, t) = 1$ foi incorporada através do cálculo do fluxo numérico no ponto $x = 0$, e a condição inicial é dada por $u(x, 0) = u_0(x) = 0$.

Para esse experimento continuaremos a usar $Cr = 0,2$ e $Cr = 0,4$, e, baseado nas Figuras 5.13 e 5.14, $\max |f'(u)|$ será limitado a 2,5 para $a = 1/2$ e 5,5 para $a = 1/50$.

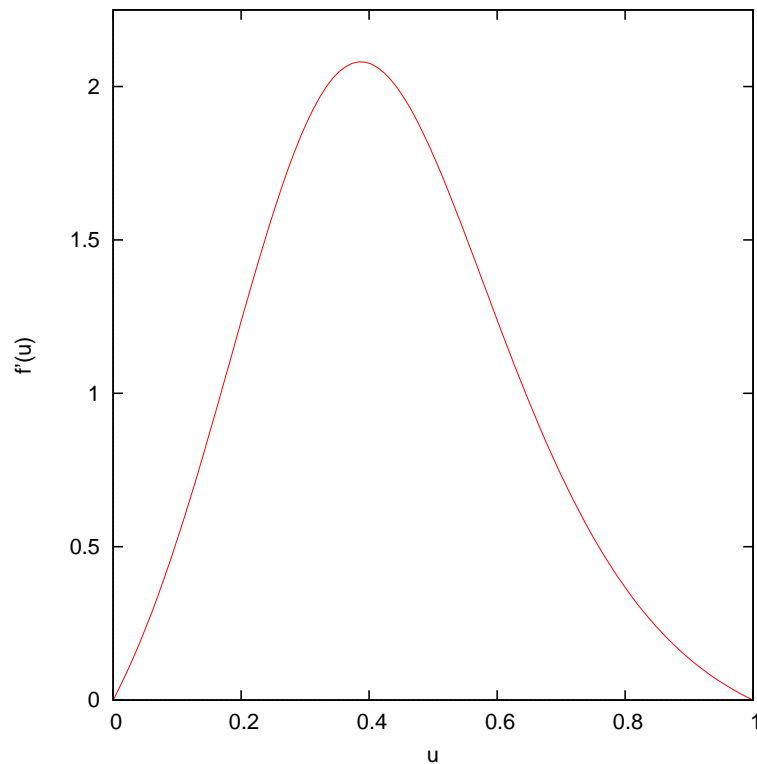


Figura 5.13: Variação de $f'(u)$ para Buckley-Leverett com $a = \frac{1}{2}$.

Considerando que o domínio esteja preenchido inicialmente com óleo e que seja injetado água, a escolha de $a = 1/2$ reflete um escoamento bifásico em um reservatório contendo óleo de baixa viscosidade, ou óleo leve. Já a escolha de $a = 1/50$ reflete um escoamento bifásico em um reservatório contendo óleo pesado.

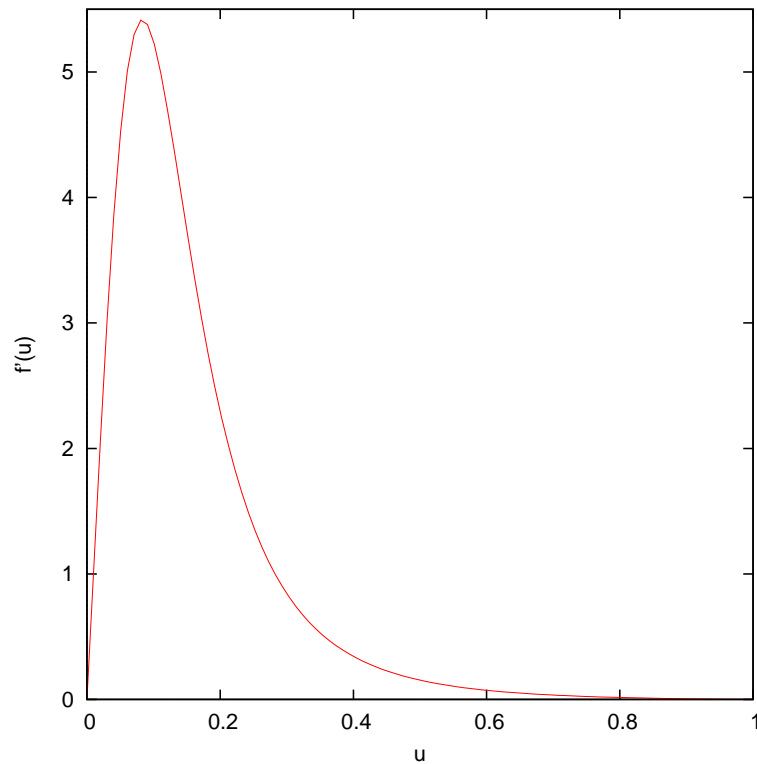


Figura 5.14: Variação de $f'(u)$ para Buckley-Leverett com $a = \frac{1}{50}$.

É possível observar que a região de mistura macroscópica das fases é menor para o óleo leve, que representa a onda de rarefação que precede o choque, característico na equação de Buckley-Leverett.

Como referência do resultado esperado será usado o resultado obtido com o método CUp em uma malha com 500 volumes e $CR = 0, 1$.

Numericamente, em relação aos métodos de 1a. ordem, as Figuras 5.15, 5.16, 5.21 e 5.22 mostram a dificuldade desses métodos em aproximar a onda de rarefação seguida da onda de choque, principalmente para $a = 1/50$. Além disso a utilização de $Cr = 0, 2$ não trouxe grande melhora para os resultados, apenas mais difusão para os métodos DS-1o e Lxf, na região do choque.

Os resultados para os métodos de 2a. ordem mostrados nas Figuras 5.17, 5.19, 5.23 e 5.25 mostram que os métodos CUp e KT apresentam resultados bem próximos, a maior diferença entre eles acontece na formação da onda de choque que pode ser observado no detalhe da transição da onda de rarefação para a onda de choque nas Figuras 5.18, 5.20, 5.24 e 5.26. Além disso, o método DS apresentou um comportamento não entrópico no limite entre o fim da onda de rarefação e o início da onda de choque.

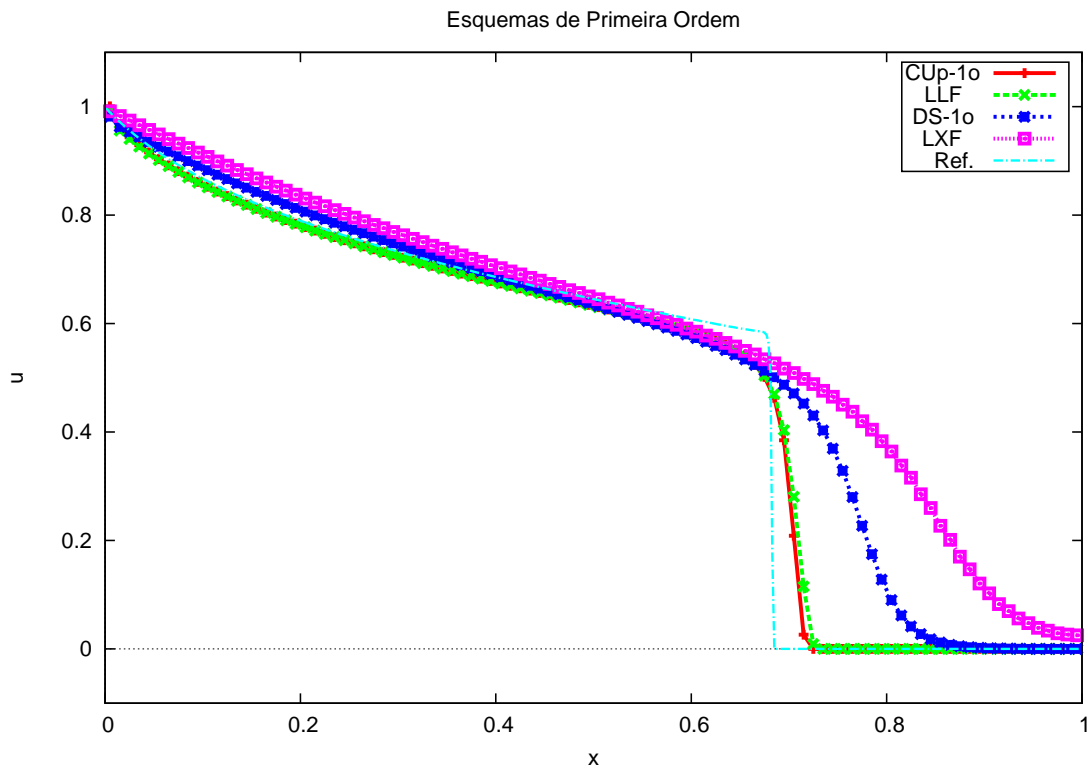


Figura 5.15: Aproximação de 1a. ordem para o problema de Buckley-Leverett com 100 volumes, $Cr = 0,2$ e $a = \frac{1}{2}$.

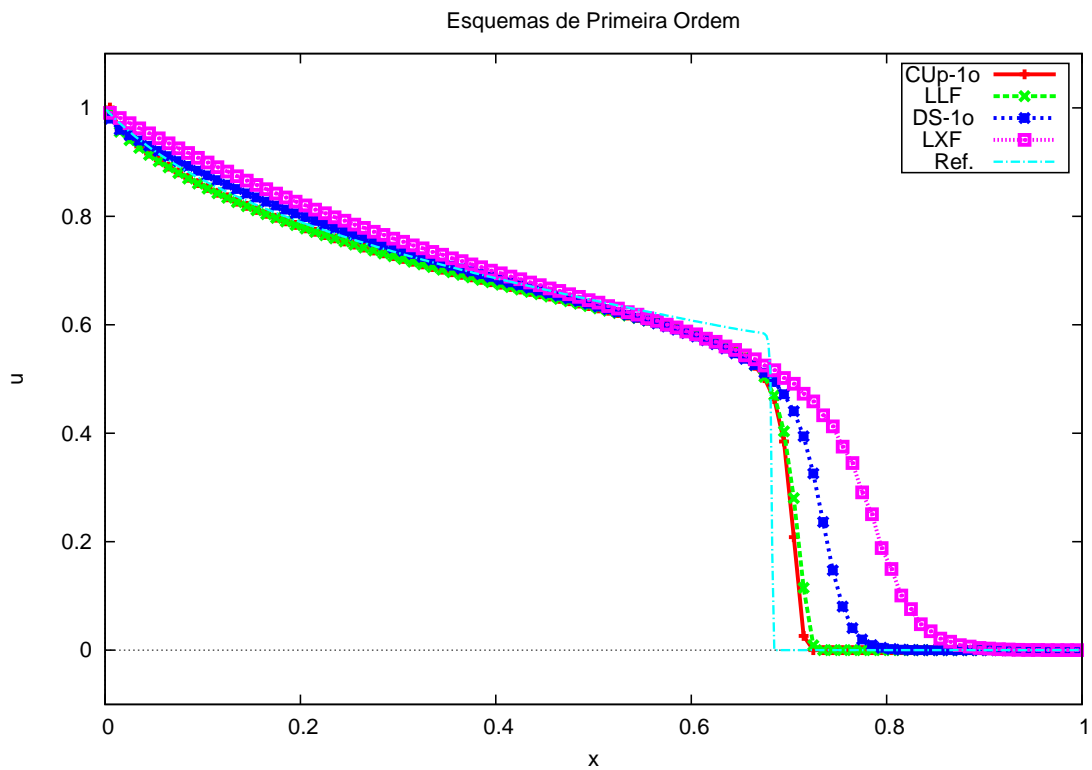


Figura 5.16: Aproximação de 1a. ordem para o problema de Buckley-Leverett com 100 volumes, $Cr = 0,4$ e $a = \frac{1}{2}$.

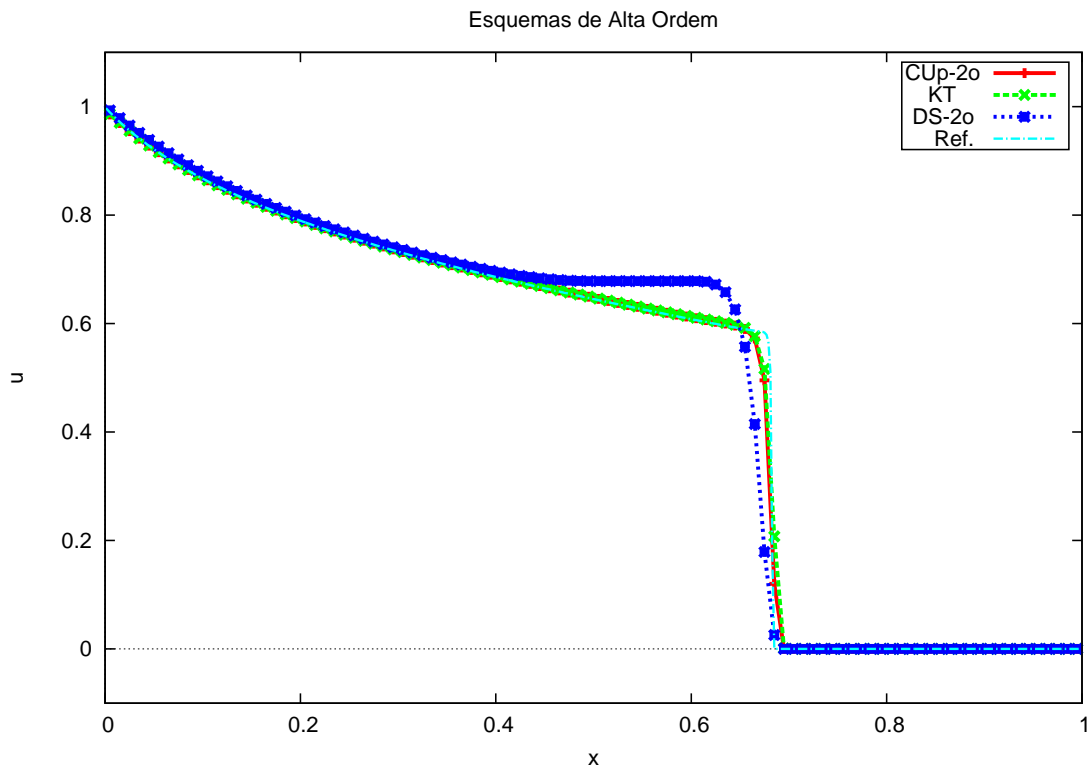


Figura 5.17: Aproximação de alta ordem para o problema de Buckley-Leverett com 100 volumes, $Cr = 0,2$ e $a = \frac{1}{2}$.

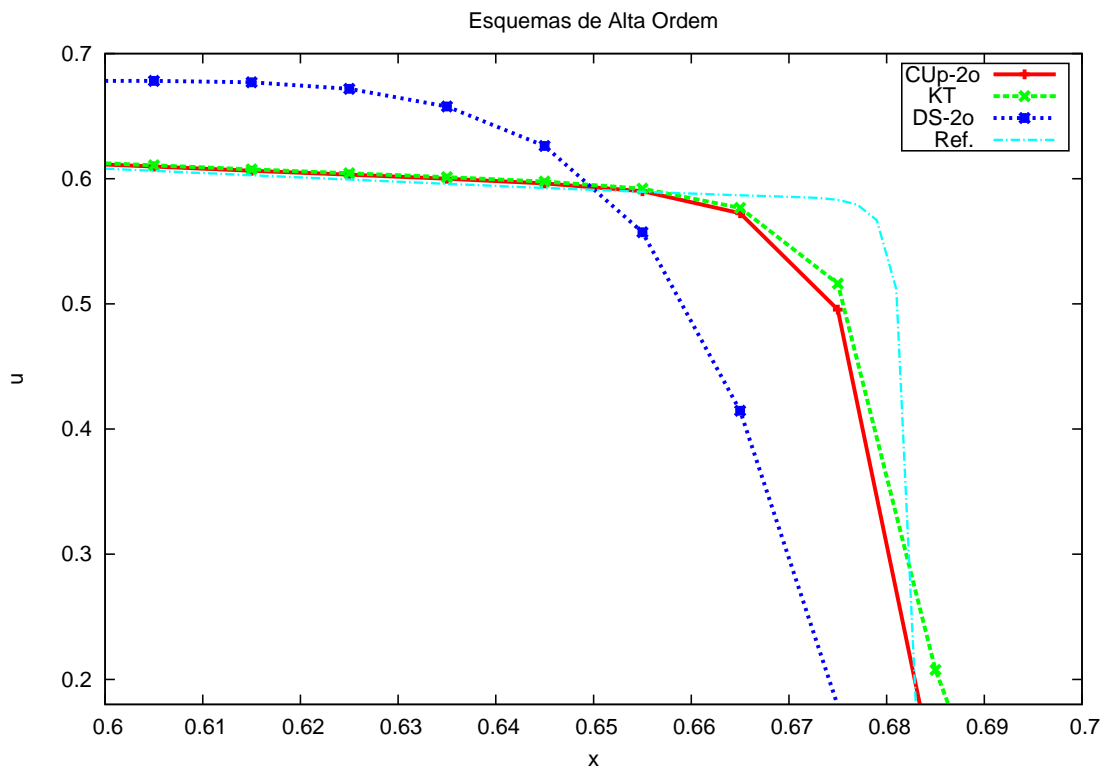


Figura 5.18: Detalhe da aproximação de alta ordem para o problema de Buckley-Leverett com 100 volumes, $Cr = 0,2$ e $a = \frac{1}{2}$.

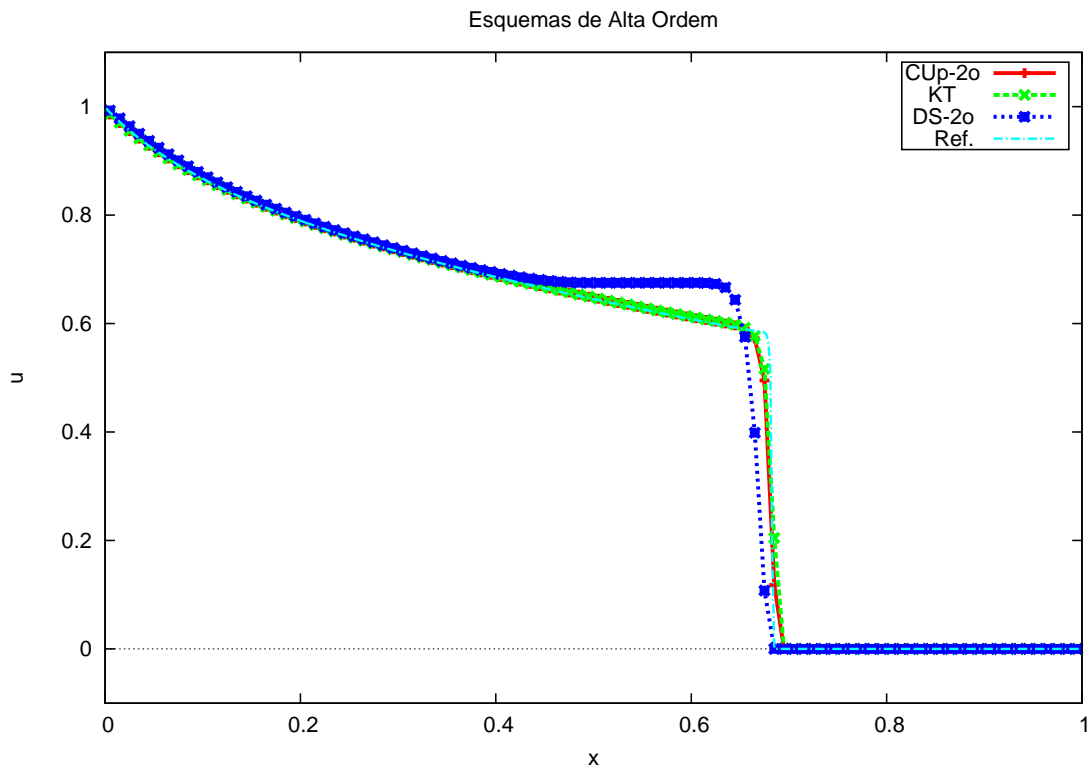


Figura 5.19: Aproximação de alta ordem para o problema de Buckley-Leverett com 100 volumes, $Cr = 0,4$ e $a = \frac{1}{2}$.

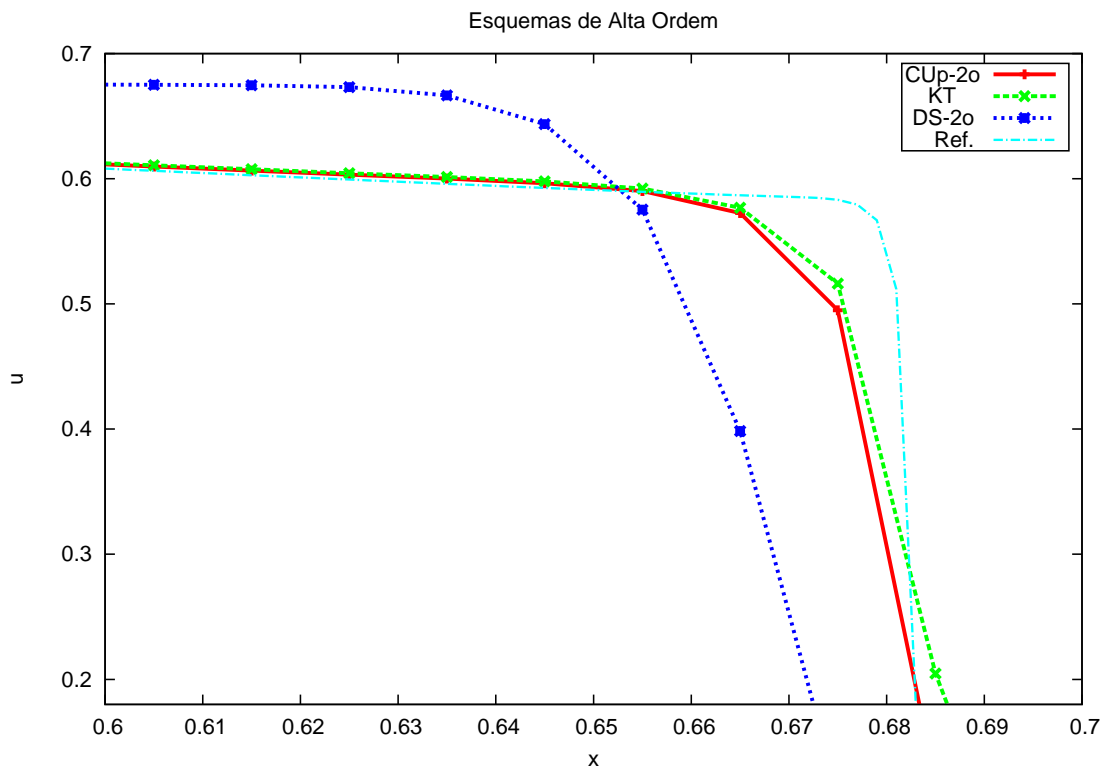


Figura 5.20: Detalhe da aproximação de alta ordem para o problema de Buckley-Leverett com 100 volumes, $Cr = 0,4$ e $a = \frac{1}{2}$.

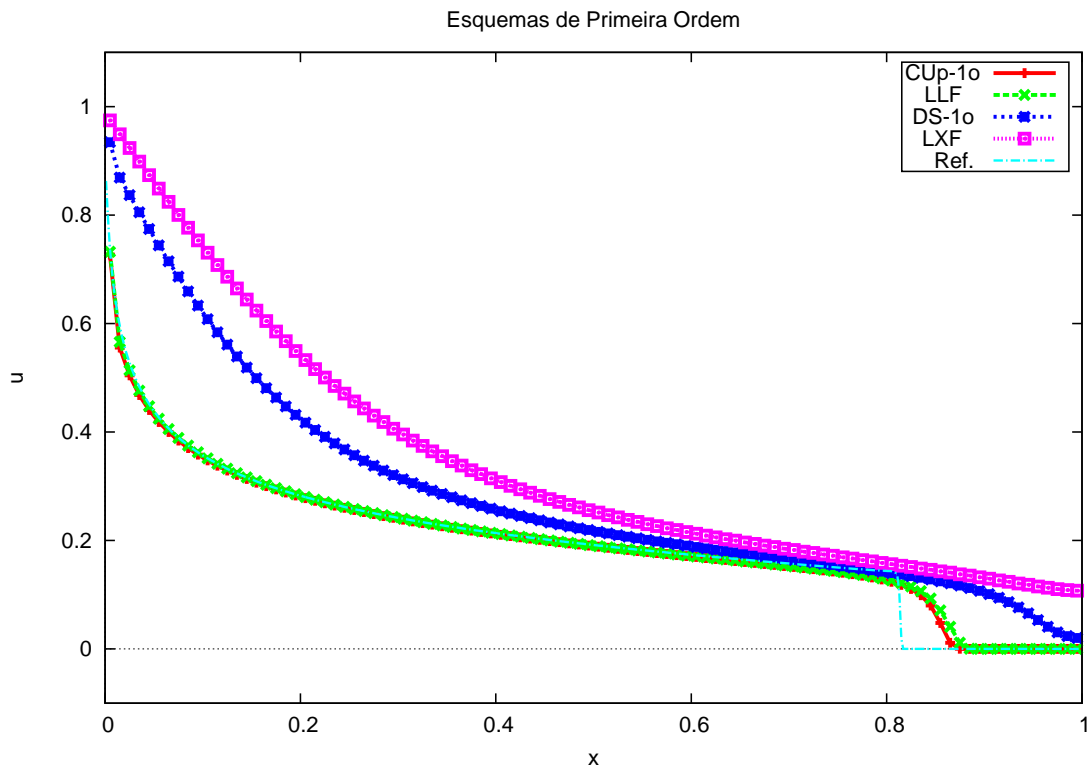


Figura 5.21: Aproximação de 1a. ordem para o problema de Buckley-Leverett com 100 volumes, $Cr = 0,2$ e $a = \frac{1}{50}$.

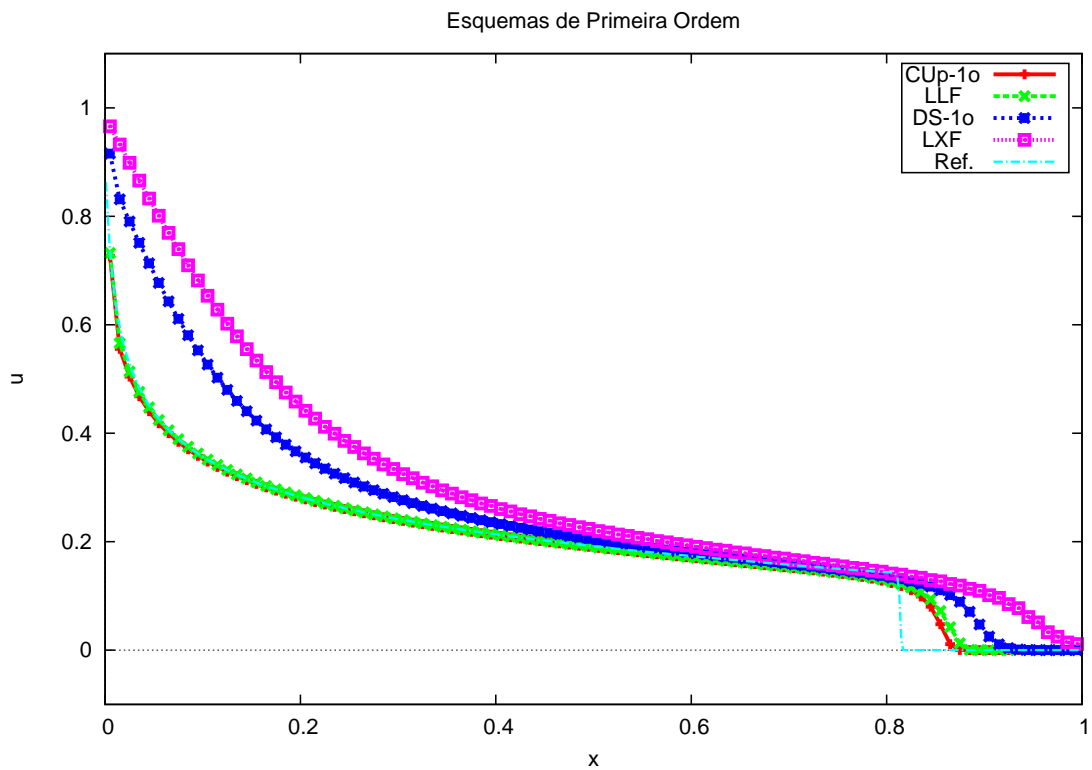


Figura 5.22: Aproximação de 1a. ordem para o problema de Buckley-Leverett com 100 volumes, $Cr = 0,4$ e $a = \frac{1}{50}$.

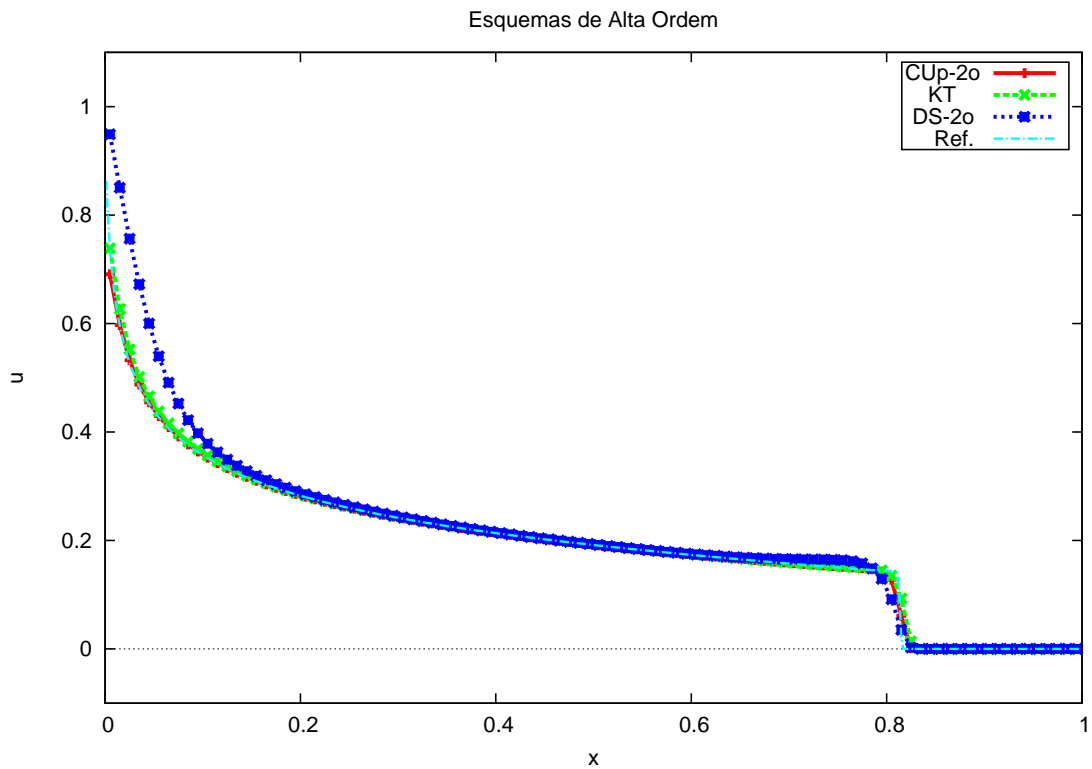


Figura 5.23: Aproximação de alta ordem para o problema de Buckley-Leverett com 100 volumes, $Cr = 0,2$ e $a = \frac{1}{50}$.

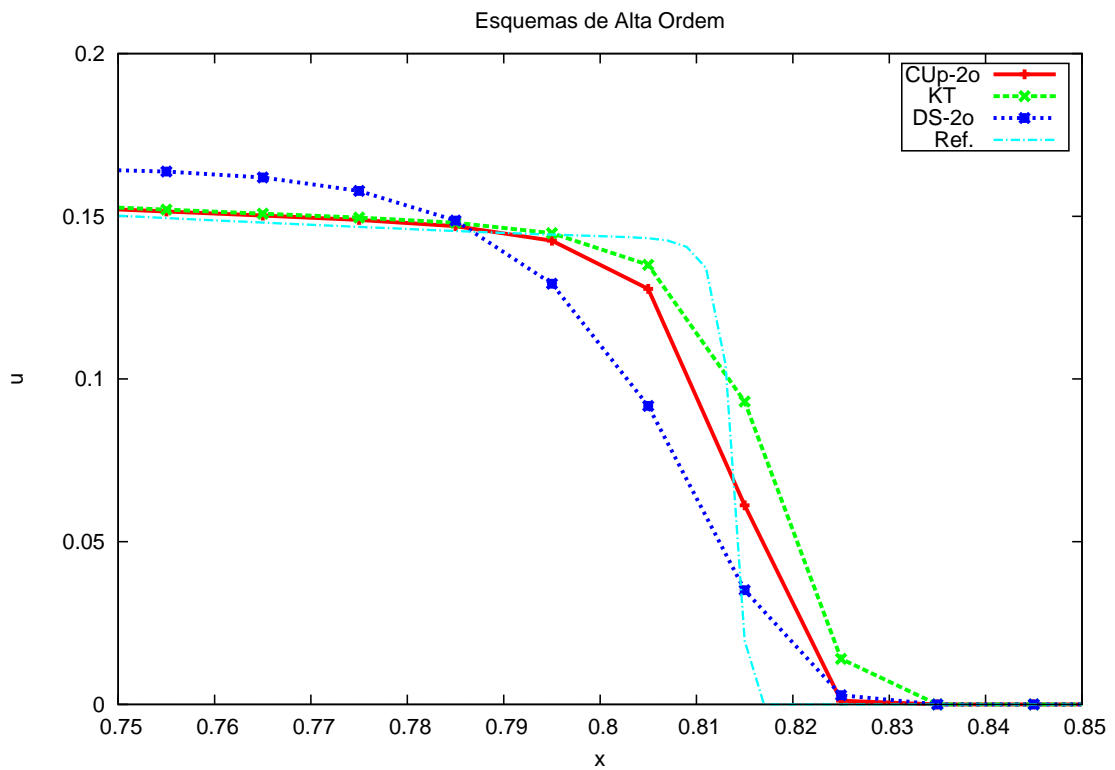


Figura 5.24: Detalhe da aproximação de alta ordem para o problema de Buckley-Leverett com 100 volumes, $Cr = 0,2$ e $a = \frac{1}{50}$.

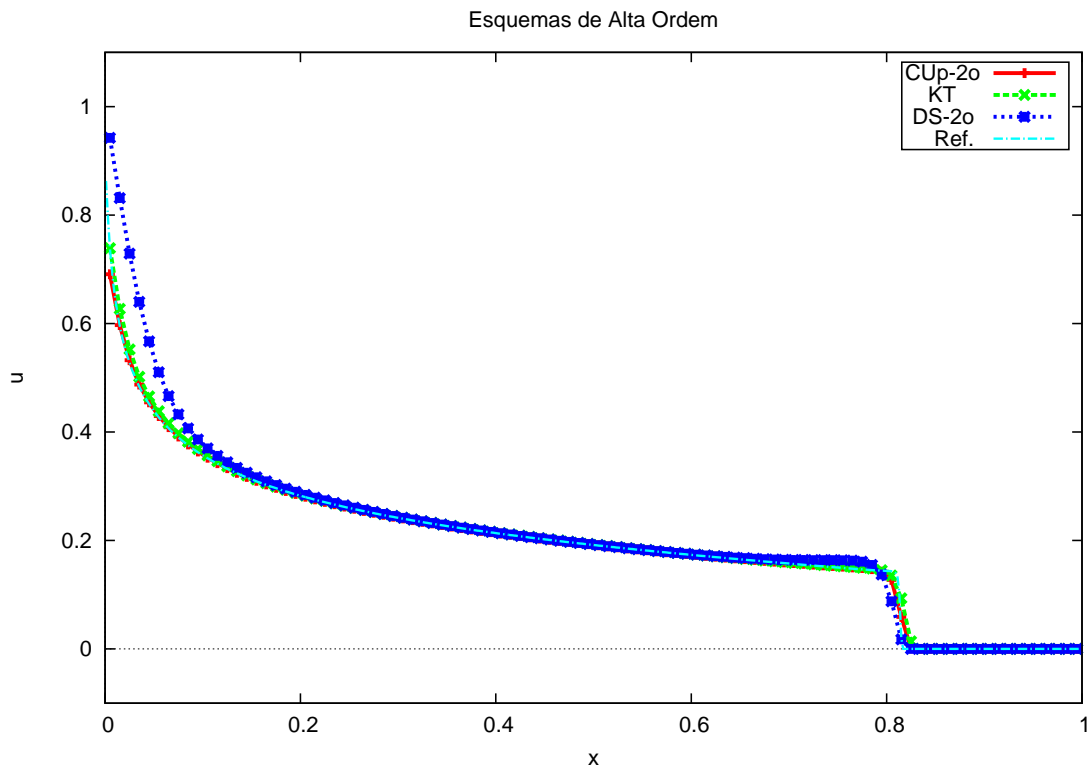


Figura 5.25: Aproximação de alta ordem para o problema de Buckley-Leverett com 100 volumes, $Cr = 0,4$ e $a = \frac{1}{50}$.

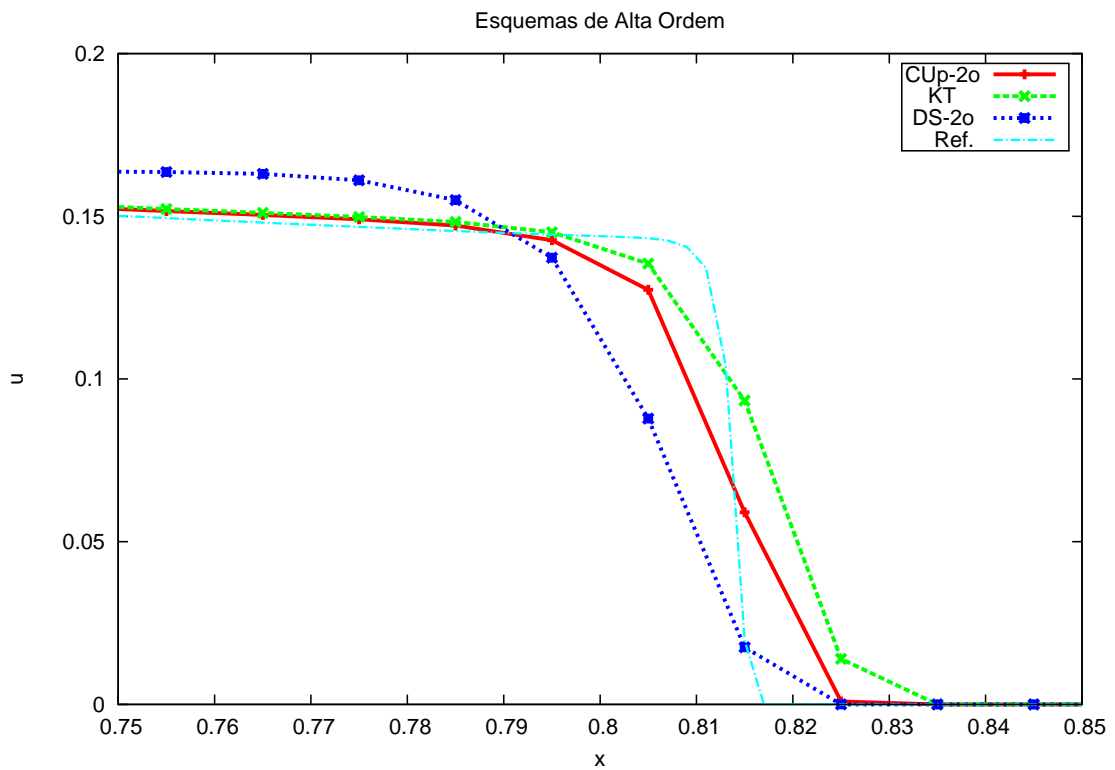


Figura 5.26: Detalhe da aproximação de alta ordem para o problema de Buckley-Leverett com 100 volumes, $Cr = 0,4$ e $a = \frac{1}{50}$.

5.4 Escoamento Trifásico: Sistema Não-Linear

Neste experimento, aplicamos os esquemas centrais ao problema do escoamento trifásico incompressível descrito na Seção 2.3.2. Problemas semelhantes foram tratados em [33, 34]. Adotaremos, de forma simplificada, as relações quadráticas para as permeabilidades relativas [31]

$$k_{ri} = u_i^2, \quad i = 1, 2, 3$$

onde u_i representa a saturação da i -ésima fase. Com isso a função de fluxo fracionário da i -ésima fase pode ser escrito como

$$\begin{aligned} f_i &= \frac{k_{ri}/\mu_i}{k_{r1}/\mu_1 + k_{r2}/\mu_2 + k_{r3}/\mu_3} \\ &= \frac{u_i^2}{a_{i1}u_1^2 + a_{i2}u_2^2 + a_{i3}u_3^2} \\ &= \frac{u_i^2}{\sum_{k=1}^3 a_{ik}u_k^2} \end{aligned}$$

com $a_{ik} = \mu_i/\mu_k$. Assim temos o sistema

$$\frac{\partial}{\partial t} \begin{bmatrix} u_1 \\ u_2 \end{bmatrix} + v \frac{\partial}{\partial x} \begin{bmatrix} f_1 \\ f_2 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 0 \\ 0 \end{bmatrix} \quad (5.1)$$

e a terceira incógnita é determinada pela relação $u_3 = 1 - u_1 - u_2$. O Jacobiano da função de fluxo é dado por

$$J(\mathbf{u}) = v \begin{bmatrix} \frac{\partial f_1}{\partial u_1} & \frac{\partial f_1}{\partial u_2} \\ \frac{\partial f_2}{\partial u_1} & \frac{\partial f_2}{\partial u_2} \end{bmatrix}, \quad (5.2)$$

cujos autovalores podem ser calculados por

$$\mu_{\pm} = \frac{v}{2} \left[\frac{\partial f_1}{\partial u_1} + \frac{\partial f_2}{\partial u_2} \pm \sqrt{\Delta} \right], \quad (5.3)$$

com o discriminante Δ dado por

$$\Delta = \left(\frac{\partial f_1}{\partial u_1} + \frac{\partial f_2}{\partial u_2} \right)^2 - 4 \left(\frac{\partial f_1}{\partial u_1} \frac{\partial f_2}{\partial u_2} - \frac{\partial f_2}{\partial u_1} \frac{\partial f_1}{\partial u_2} \right). \quad (5.4)$$

Podemos mostrar que

$$\frac{\partial f_i}{\partial u_j} = \frac{2u_j}{\sum_{k=1}^3 a_{ik}u_k^2} \left(\delta_{ij} - \frac{a_{ij}u_i^2}{\sum_{k=1}^3 a_{ik}u_k^2} \right). \quad (5.5)$$

Assim os autovalores, que são necessários para o cálculo das velocidades locais (4.25) e (4.26), podem ser obtidos analiticamente.

O domínio $\Omega = (0, 1)$ está discretizado em uma malha de 100 volumes e o tempo total de simulação é $T = 0,08$. As viscosidades das fases são

$$\mu_1 = 0,5 \quad \mu_2 = 1,0 \quad \mu_3 = 0,3,$$

além disso, $v = 5$ e verificamos computacionalmente que $v \max |f'(u)| \approx 11$, lembrando que $f'(u)$ é o raio espectral do Jacobiano da função de fluxo. Aplicando a condição inicial [35]

$$\mathbf{u}(x, 0) = \begin{cases} u_1(x, 0) = 0,05 \\ u_2(x, 0) = 0,8 \\ u_3(x, 0) = 1 - u_1 - u_2 = 0,15 \end{cases}$$

e a condição de contorno

$$\mathbf{u}(0, t) = \begin{cases} u_1(x, 0) = 0,721 \\ u_2(x, 0) = 0 \\ u_3(x, 0) = 1 - u_1 - u_2 = 0,279 \end{cases} \quad t > 0$$

Neste experimento foram utilizados apenas os métodos DS, KT e CUp, e os resultados de cada fase podem ser vistos, respectivamente, nas Figuras 5.27 e 5.28, 5.29 e 5.30, 5.31 e 5.32 para $Cr = 0,2$ e $Cr = 0,4$.

Já nas Figuras 5.33, 5.34, 5.35, 5.36, 5.37 e 5.38 comparamos os resultados obtidos em cada fase, novamente para $Cr = 0,2$ e $Cr = 0,4$.

Como nos experimentos anteriores, para o método DS, diminuir o Cr de 0,4 para 0,2 trouxe mais difusão numérica ao resultado, como mostrado nas figuras com os resultados por fase, por exemplo, as Figuras 5.33 e 5.34.

O método KT, diferente do que aconteceu nos experimentos anteriores, apresentou oscilações. Dentre os métodos utilizados, o CUp apresentou melhor resultado. As Figuras

5.39 e 5.40 mostram a CUp com uma malha mais refinada, com 500 volumes, e $Cr = 0.1$. A Figura 5.40 mostra, de forma simplificada, quanto cada fase satura o domínio. As saturações mostradas para $x > 0,75$ são as condições iniciais.

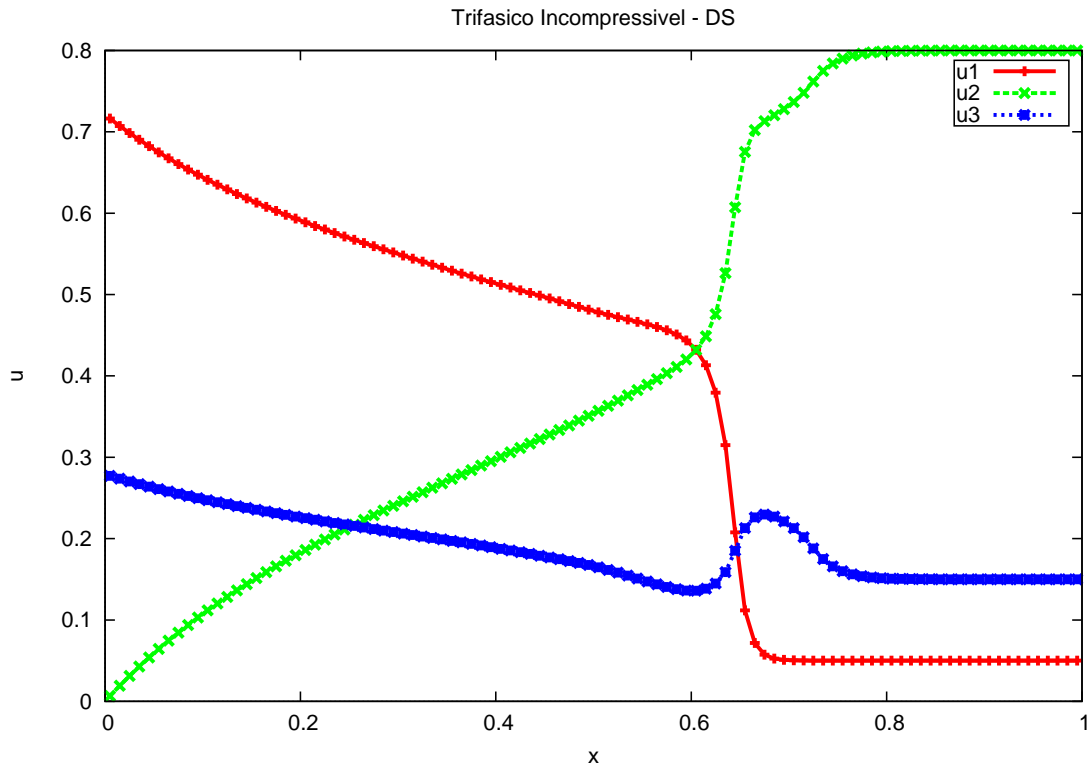


Figura 5.27: Solução do escoamento trifásico - DS - $Cr = 0,2$

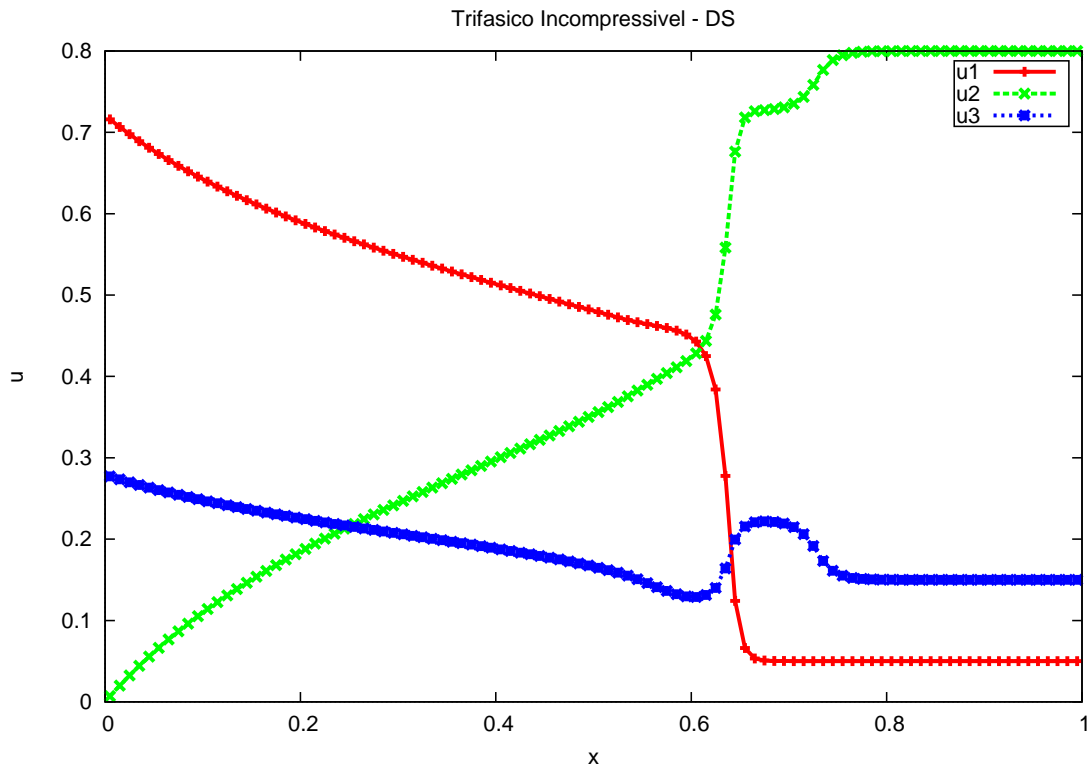


Figura 5.28: Solução do escoamento trifásico - DS - $Cr = 0,4$

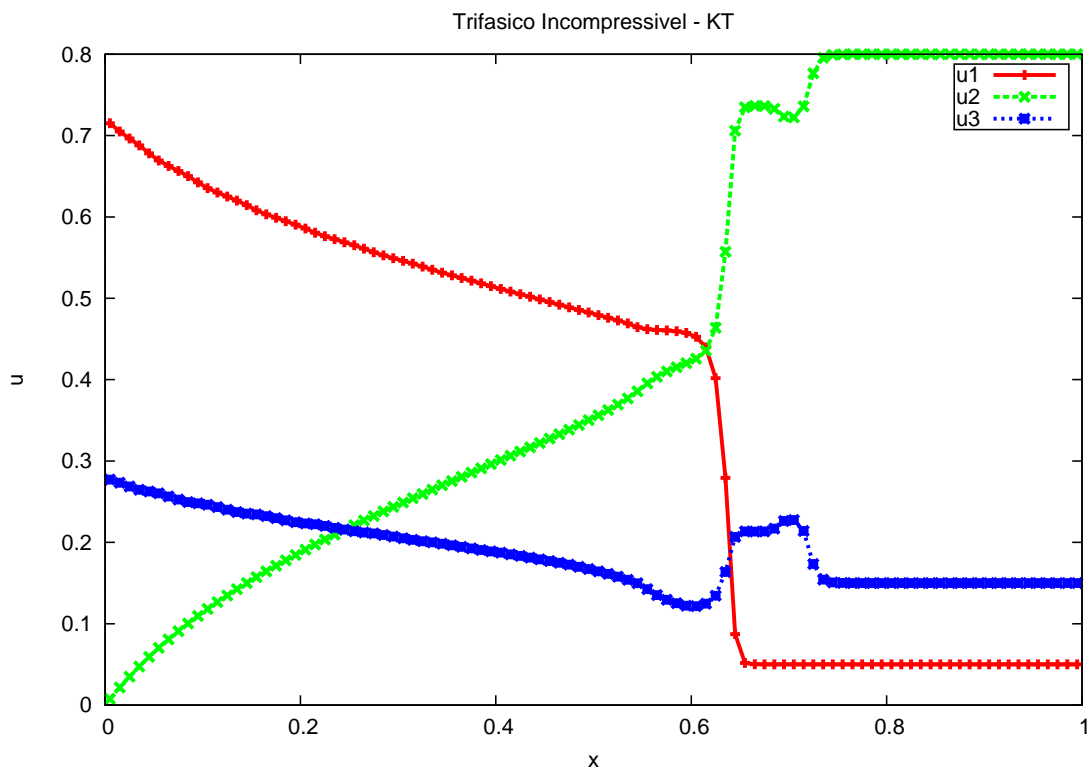


Figura 5.29: Solução do escoamento trifásico - KT - $Cr = 0,2$

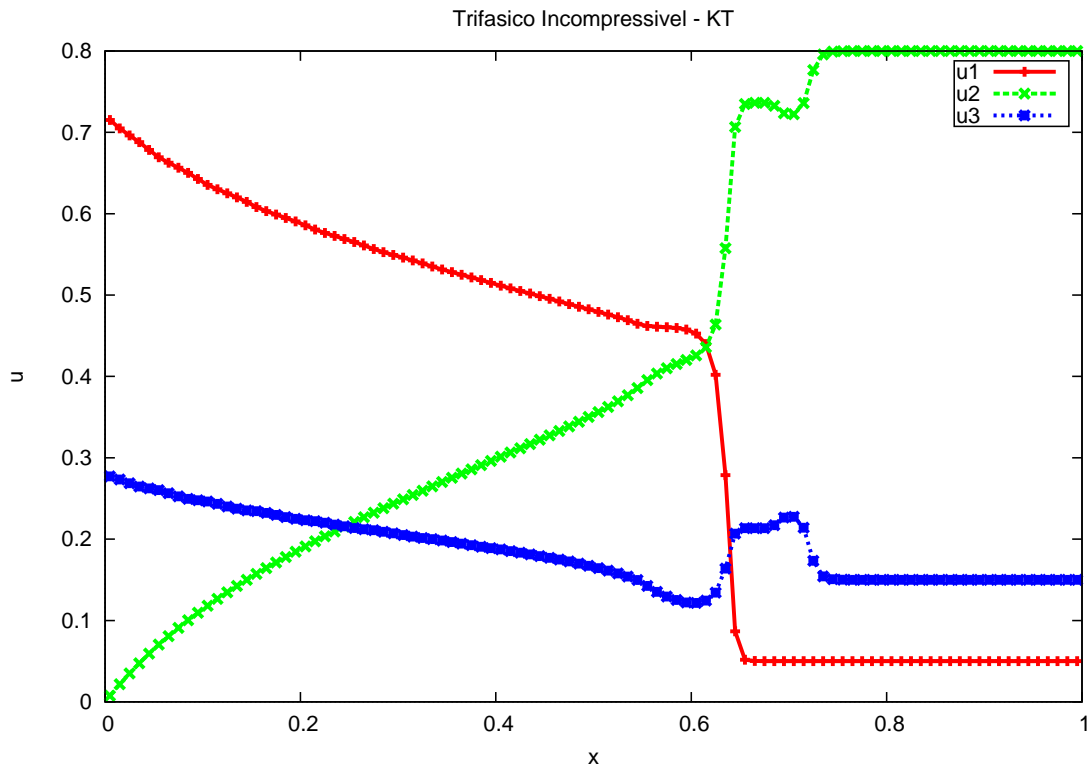


Figura 5.30: Solução do escoamento trifásico - KT - $Cr = 0,4$

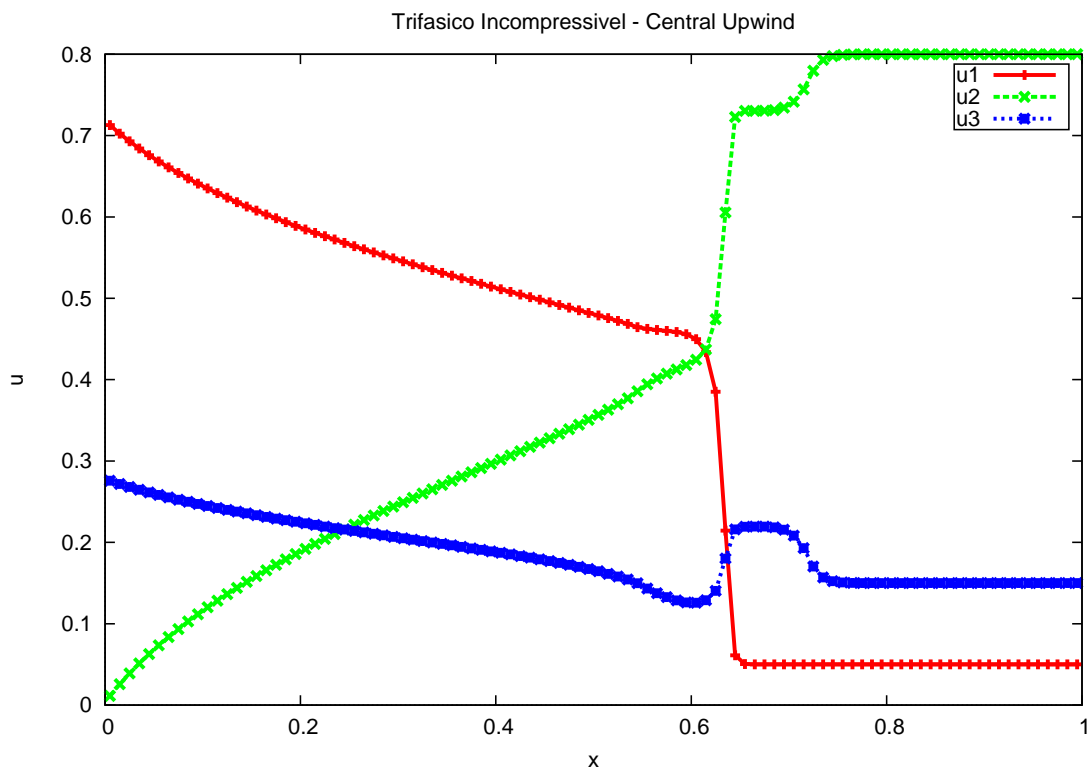


Figura 5.31: Solução do escoamento trifásico - CUp - $Cr = 0,2$

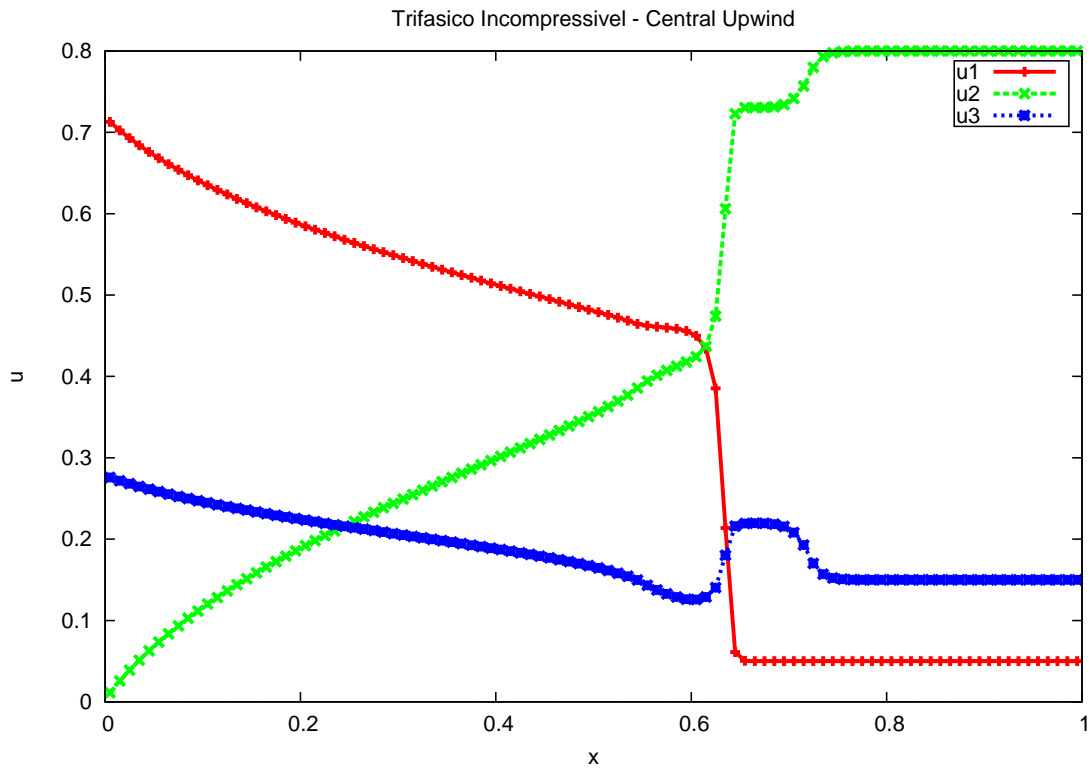


Figura 5.32: Solução do escoamento trifásico - CUp - $Cr = 0,4$

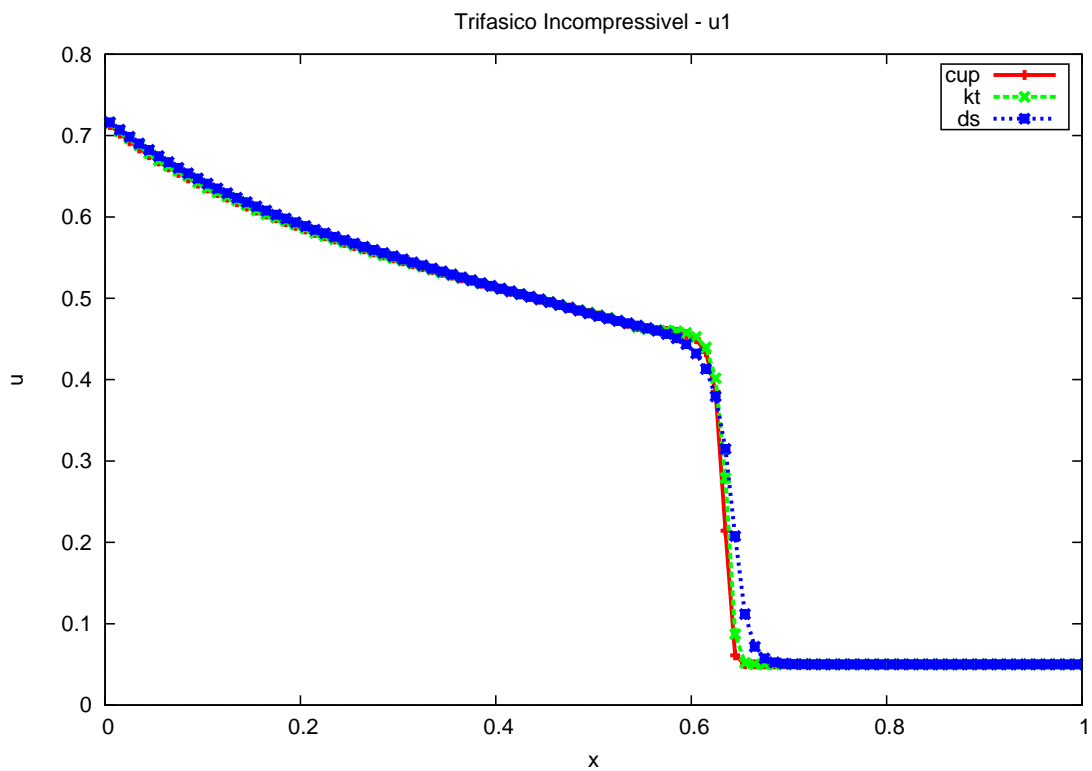


Figura 5.33: Solução do escoamento trifásico - fase u_1 , $Cr = 0,2$

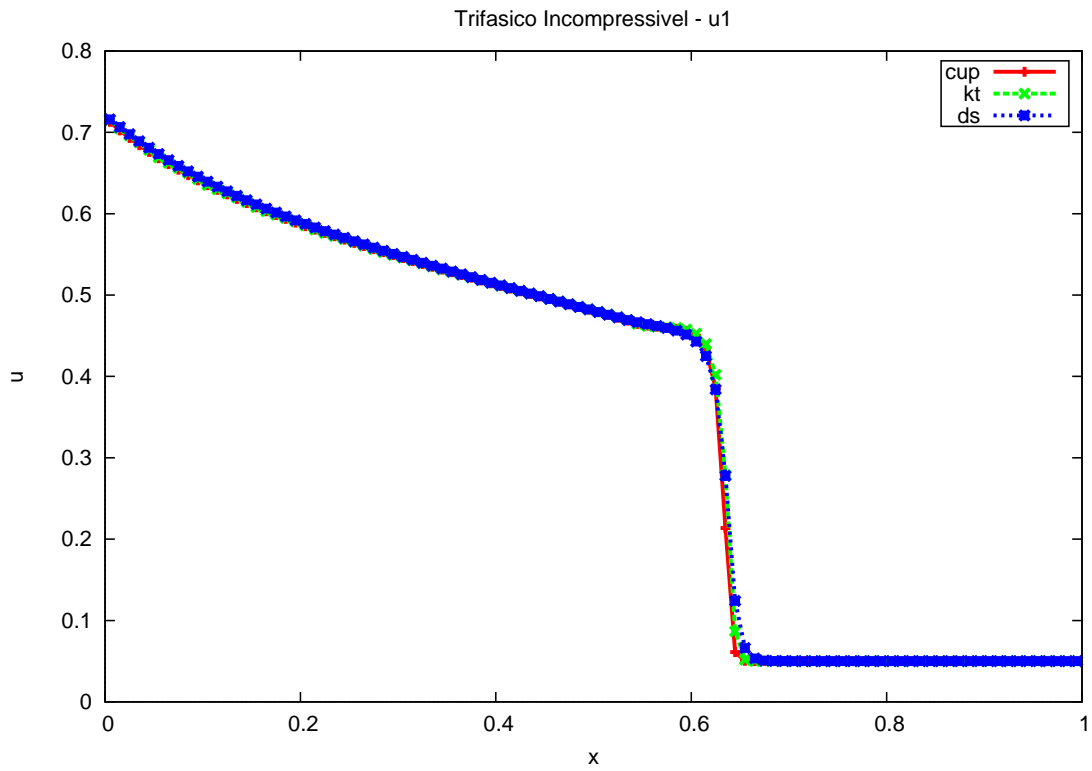


Figura 5.34: Solução do escoamento trifásico - fase u_1 , $Cr = 0,4$

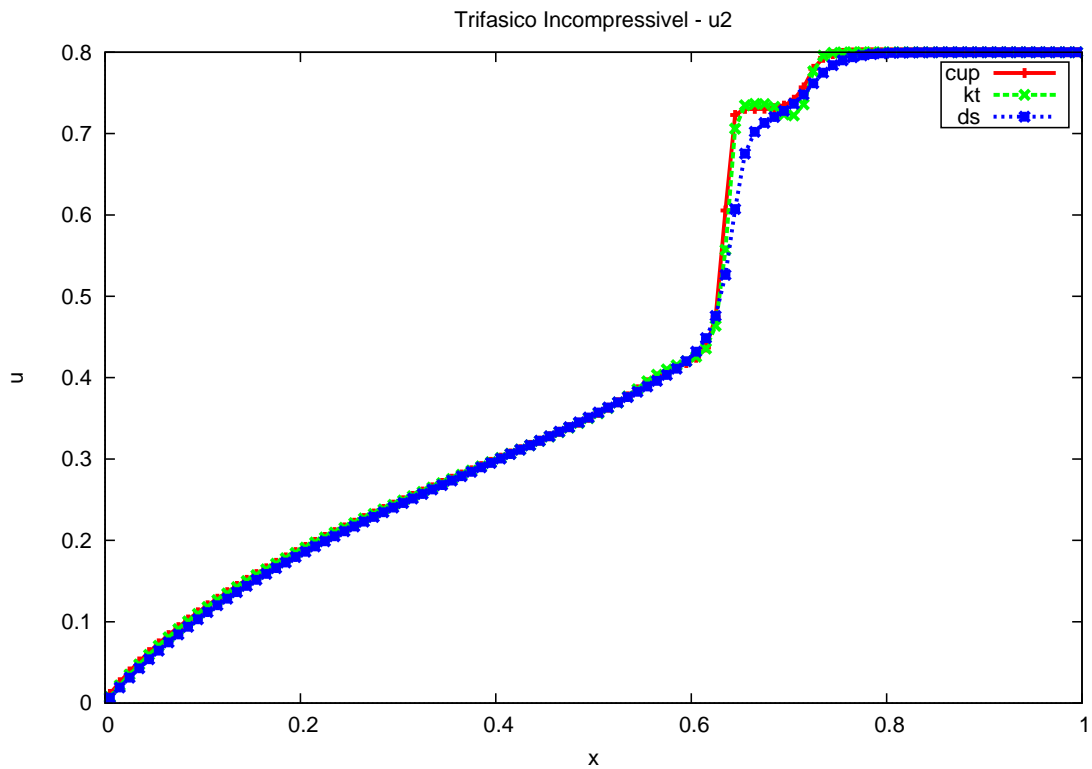


Figura 5.35: Solução do escoamento trifásico - fase u_2 , $Cr = 0,2$

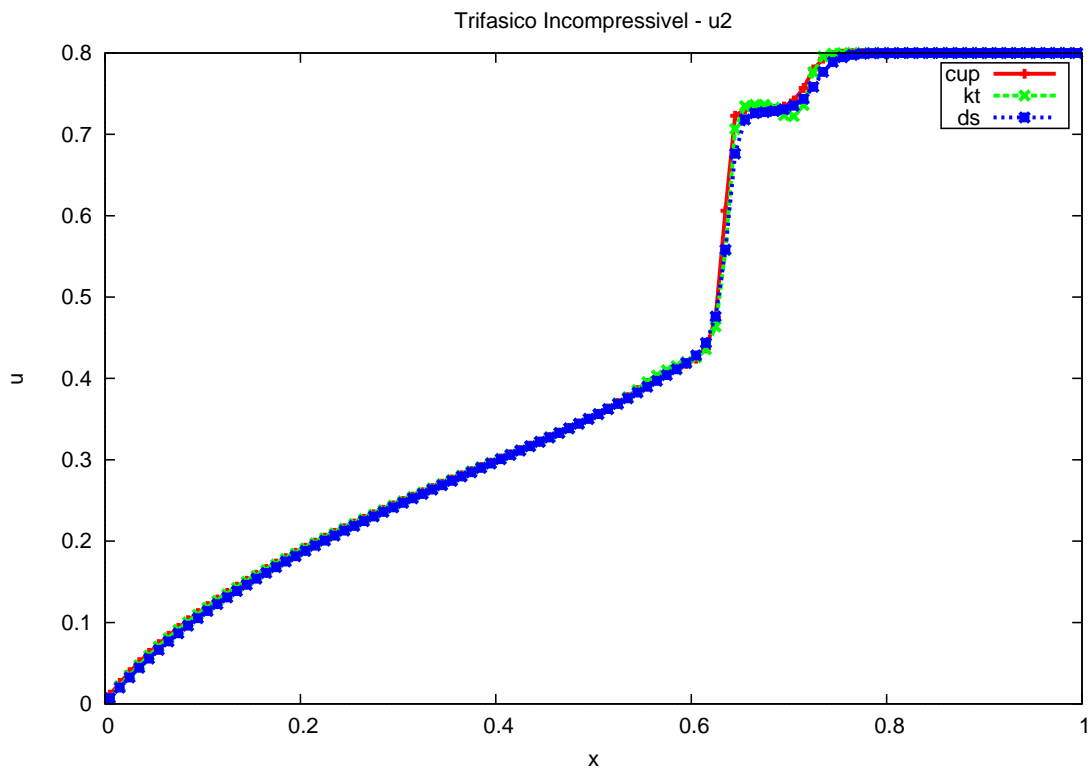


Figura 5.36: Solução do escoamento trifásico - fase u_2 , $Cr = 0,4$

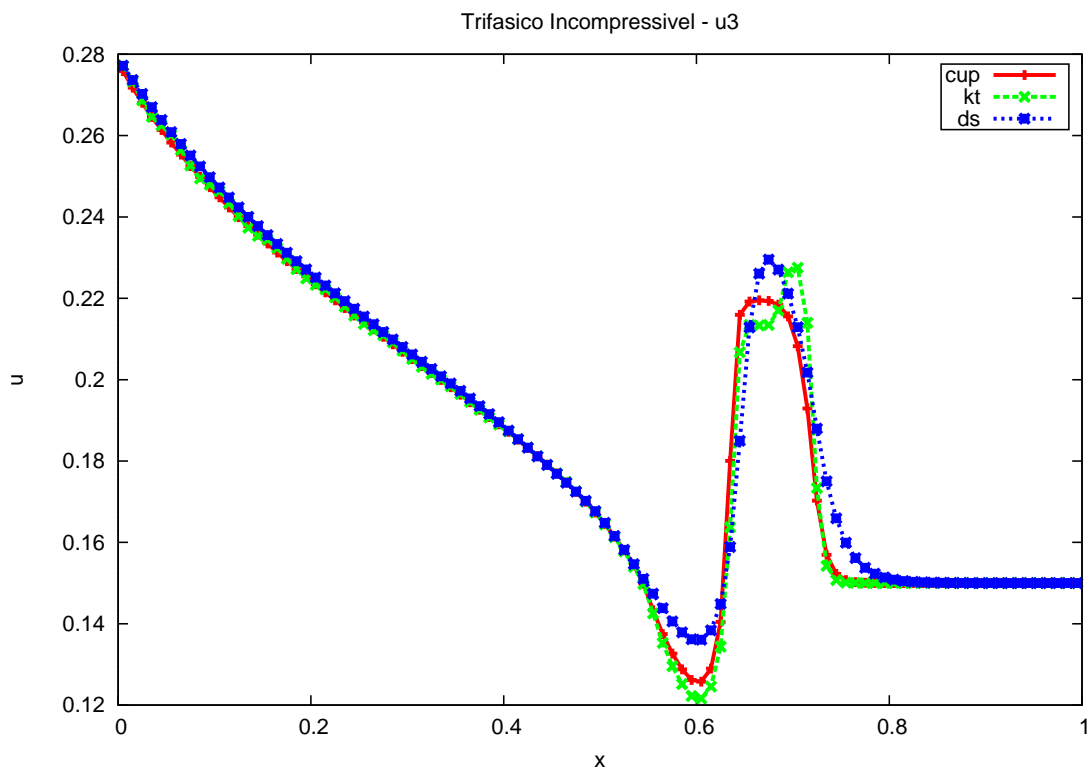


Figura 5.37: Solução do escoamento trifásico - fase u_3 , $Cr = 0,2$

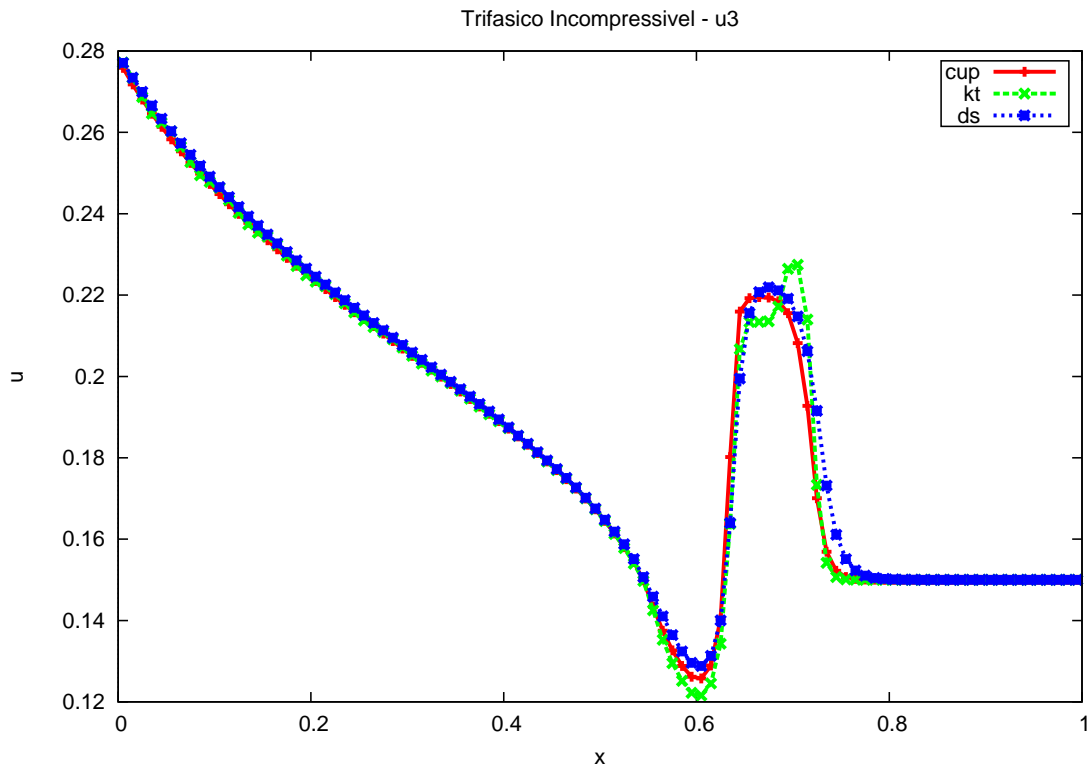


Figura 5.38: Solução do escoamento trifásico - fase u_3 , $Cr = 0,4$

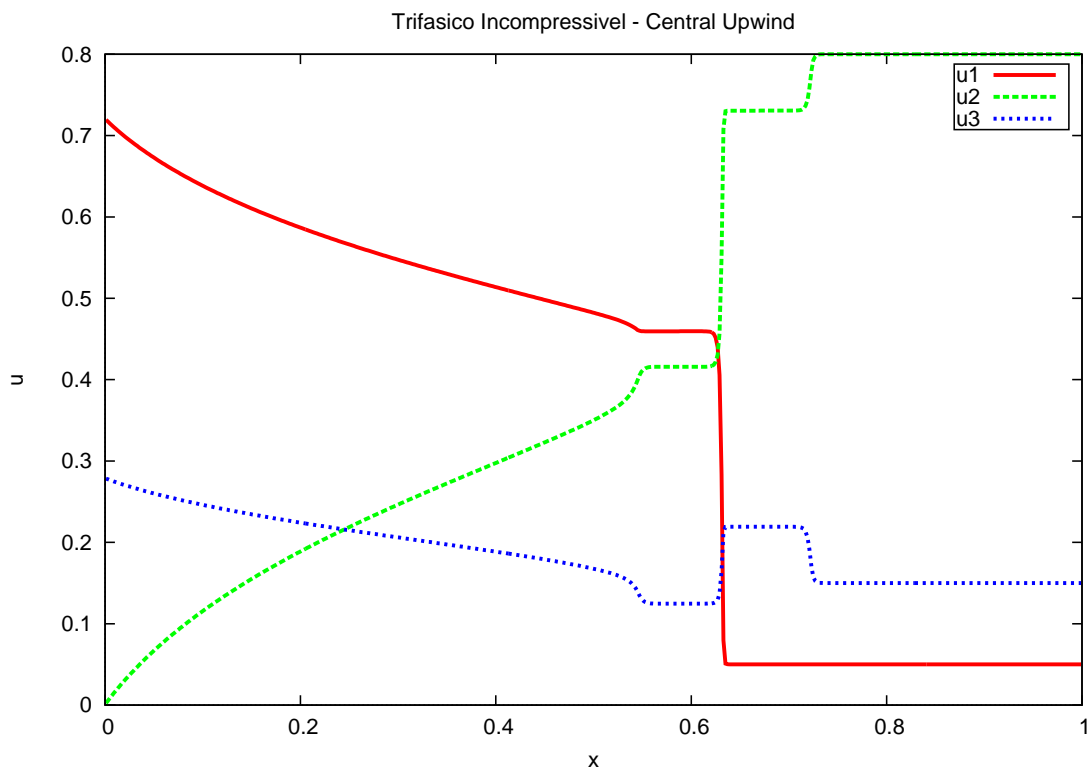


Figura 5.39: Solução do escoamento trifásico - CU_p - 500 volumes e $Cr = 0,1$

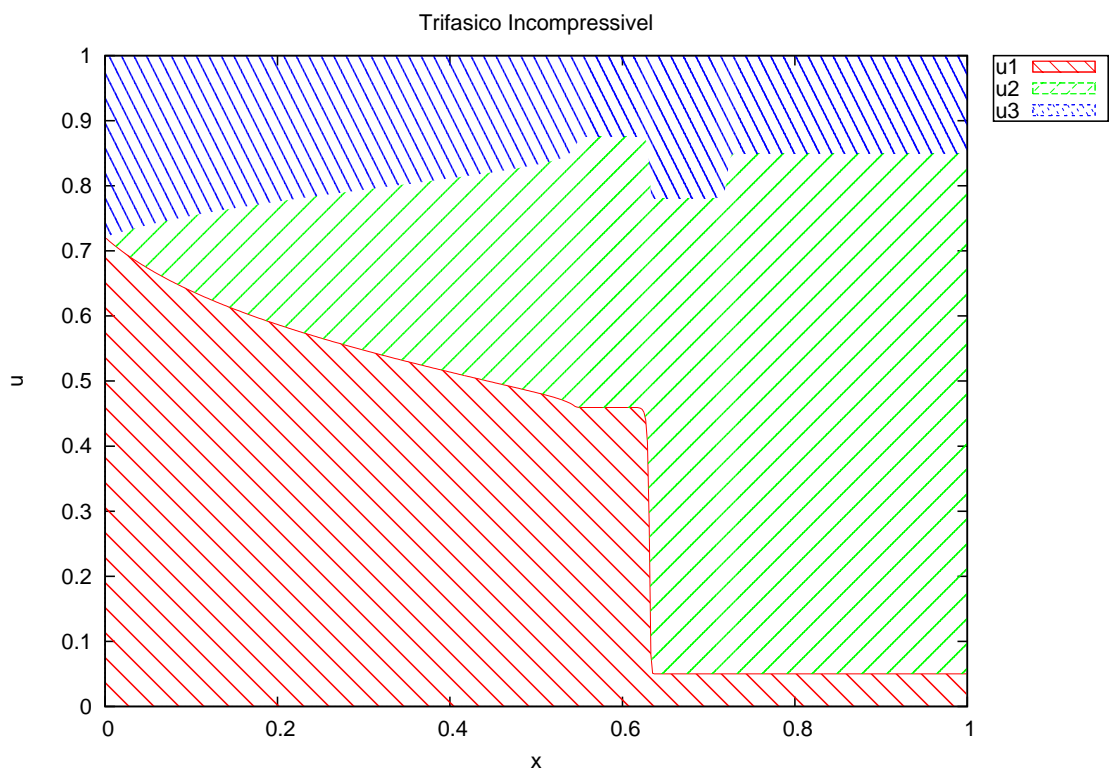


Figura 5.40: Solução do escoamento trifásico - $CUp = 500$ volumes e $Cr = 0,1$

Capítulo 6

Conclusões

Esta dissertação teve como foco um estudo sobre esquemas centrais de alta ordem para a solução de leis de conservação presentes em modelos de escoamento em meios porosos.

Como esperado, e observado nos experimentos realizados, os métodos de 1a. ordem apresentaram maior difusão numérica em relação aos métodos de alta ordem, destacando a deterioração da solução no esquema clássico de Lax-Friedrichs na medida em que passos de tempo cada vez menores são empregados.

Essa deterioração está de acordo com o esperado para esquemas totalmente discretos, enquanto as formulações semidiscretas mostraram menos sensibilidade ao refinamento do passo de tempo, justificando o melhor resultado em termos de dissipação numérica.

De forma geral, o esquema Central-Upwind conduziu a resultados mais precisos do que o esquema KT. Isto representa um forte indicativo de que a incorporação de conceitos upwind, utilizados na construção de estimativas mais precisas da espessura dos leques de Riemann, efetivamente reduz a dissipação numérica.

Os esquemas centrais de alta ordem apresentaram soluções com melhor representação das ondas de choque e de rarefação. Dentre os esquemas apresentados, o esquema Central-Upwind alcançou maior precisão. Isto ficou ainda mais destacado na resolução do sistema hiperbólico não-linear, utilizado como modelo para o escoamento trifásico incompressível.

A aplicação do esquema Central-Upwind conduziu a soluções precisas e estáveis, enquanto o esquema KT forneceu soluções com oscilações, para os parâmetros utilizados. Comentamos também que o esquema DS apresentado de forma *ad-hoc* conduziu a soluções não entrópicas. Apesar dos resultados difusivos, os métodos de 1a. ordem são indicados nos casos onde os métodos de 2a. ordem apresentarem oscilações.

REFERÊNCIAS

- [1] BEAR, J., *Hydraulics of Groundwater. McGraw-Hill Series in Water Resources and Environmental Engineering*, McGraw-Hill, Inc., 1979.
- [2] MALTA, S. M. C., LOULA, A. F. D., GARCIA, E. L. M., “Numerical analysis of a stabilized finite element method for tracer injection simulations”, *Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering*, v. 187, pp. 119–136, 2000.
- [3] CORREA, M. R., LOULA, A. F. D., GARCIA, E. L. M., “Métodos de Diferenças Finitas de Direções Alternadas Implícitos para Modelagem de Águas Subterrâneas”, In: *TEMA - Tendências em Matemática Aplicada Computacional*, v. 5, pp. 65–76, SBMAC - Sociedade Brasileira de Matemática Aplicada e Computacional, 2004.
- [4] PEACEMAN, D. W., *Fundamentals of numerical reservoir simulation*. Elsevier, 1977.
- [5] MURAD, M. A., OBREGÓN, J. A. L., BORGES, M. R., CORREA, M. R., “A New Locally Conservative Numerical Method for Two-Phase Flow in Heterogeneous Poroelastic Media”, *Computers and Geotechnics*, 2012.
- [6] DARCY, H., *Les Fontaines Publiques de la Ville de Dijon*. Dalmont, Paris, 1856.
- [7] CHEN, Z., HUAN, G., MA, Y., *Computational Methods for Multiphase Flows in Porous Media*. Siam, 2006.
- [8] LIMA COUTO, P. R., *Modelagem Computacional do Transporte de Contaminantes com Processos de Biodegradação e Sorção Física em um Meio Poroso Saturado*, Tese de doutorado, Laboratório Nacional de Computação Científica, LNCC, 2006.
- [9] MAUS, V. W., *Modelagem Computacional aplicada ao Transporte de Contaminantes em águas subterrâneas*, Dissertação de mestrado, Modelagem Computacional, UFJF, 2011.
- [10] ALLEN.III, M. B., *Multiphase Flow in Porous Media*. N. 34, *Lecture Notes in Engineering*, New York Springer-Verlag, 1988.

- [11] BENNETT, M. A., WILLIAMS, R. A., “Monitoring the operation of an oil/water separator using impedance tomography”, *Minerals Engineering*, v. 17, n. 5, pp. 605–614, 2004, Hydrocyclones 2003 Meeting SEP, 2003 Cape Town, South Africa.
- [12] RIAZ, A., TCHELEPI, H. A., “Dynamics of Vertical Displacement in Saline Aquifers Associated with CO₂ Sequestration”, *SPE Journal*, v. 13, pp. 305–, 2008.
- [13] RIBEIRO, S. S., *Novos Esquemas Centrais de Diferenças Finitas para a Simulação de escoamentos Multifásicos em Reservatórios de Petróleo*, Tese de doutorado, Modelagem Computacional, UERJ, 2007.
- [14] TEIXEIRA, G. M., *Métodos numéricos para a solução de escoamentos bifásicos de fluidos incompressíveis em meios porosos*, Dissertação de mestrado, Modelagem Computacional, UFJF, 2011.
- [15] LEVEQUE, R. J., *Numerical Methods for Conservation Laws. Lectures in mathematics: ETH Zurich*, Birkhauser, 1992.
- [16] LEVEQUE, R. J., *Finite-Volume Methods for Hyperbolic Problems*. Cambridge University Press, 2002.
- [17] NESSYAHU, H., TADMOR, E., “Non-oscillatory central differencing for hyperbolic conservation laws”, *J. Comput. Phys*, pp. 408–463, 1990.
- [18] KURGANOV, A., TADMOR, E., “New High-Resolution Central Schemes for Nonlinear Conservation Laws and Convection-Diffusion Equations”, *Journal of Computational Physics*, v. 160, n. 1, pp. 241–282, 2000.
- [19] KURGANOV, A., NOELLE, S., PETROVA, G., “Semi-Discrete Central-Upwind Schemes for Hyperbolic Conservation Laws and Hamilton-Jacobi Equations”, *SIAM J. Sci. Comput*, v. 23, pp. 707–740, 2000.
- [20] LAX, P. D., “Weak solutions of non-linear hyperbolic equations and their numerical computation”, *Communications on Pure and Applied Mathematics*, v. 7, pp. 159–193, 1954.

- [21] LEER, B. V., “Towards the Ultimate Conservative Difference Scheme V.A. Second-Order Sequel to Godunov’s Method”, *J. Comp. Phys.*, v. 32, pp. 101–136, 1979.
- [22] ABREU, E., PEREIRA, F., RIBEIRO, S., “Central schemes for porous media flows”, *Computational and Applied Mathematics*, v. 28, n. 1, pp. 87–110, 2009.
- [23] CORREA, M., BORGES, M., “A semi-discrete central scheme for scalar hyperbolic conservation laws with heterogeneous storage coefficient and its application to porous media flow”, *International Journal for Numerical Methods in Fluids*, v. 73, n. 3, pp. 205–224, 2013.
- [24] KURGANOV, A., LIN, C. T., “On the reduction of numerical dissipation in central-upwind schemes”, *Computer Physics Communications*, 2007.
- [25] WHITAKER, S., *The Method of Volume Averaging*. v. 13. *Theory and Applications of transport in Porous Media*, Kluwer Academic Publishers, 1999.
- [26] MURAD, M. A., THOMÉE, V., LOULA, A. F. D., “Asymptotic behavior of semi-discrete finite-element approximations of Biot’s consolidation problem”, *SIAM J. Numer. Anal.*, v. 33, n. 3, pp. 1065–1083, 1996.
- [27] MURAD, M. A., MOYNE, C., “A Two-Scale Model for Coupled Electro-Chemo-Mechanical Phenomena and Onsager’s Reciprocity Relations in Expansive Clays: I Homogenization Analysis”, *Transport in Porous Media*, v. 62, n. 3, pp. 333–380, 2006.
- [28] DE MARSILY, G., *Quantitative Hydrology*. Academic Press, Inc., 1986.
- [29] ZHENG, C., BENNETT, G., *Applied Contaminant Transport Modeling*. Van Nostrand Reinhold, 1995.
- [30] CHAVENT, G., JAFFRÉ, J., *Mathematical Models and Finite Elements for Reservoir Simulation: Single Phase, Multiphase and Multicomponent Flows through Porous Media. Studies in Mathematics and its Applications*, Elsevier Science, 1986.
- [31] BROOKS, R., COREY, A., *Hydraulic Properties of Porous Media. Colorado State University Hydrology Papers*, Colorado State University, 1964.

- [32] MARCHESIN, D., PLOHR, B., “Theory of Three-Phase Flow Applied to Water-Alternating-Gas Enhanced Oil Recovery”, In: *Hyperbolic Problems: Theory, Numerics, Applications*, v. 141, pp. 693–702, *ISNM International Series of Numerical Mathematics*, Birkhäuser Basel, 2001.
- [33] EDUARDO ABREU, FREDERICO FURTADO, F. P., “On the Numerical Simulation of Three-Phase Reservoir Transport Problems”, *Transport Theory and Statistical Physics*, v. 33, pp. 503–526, 2004.
- [34] ABREU, E., DOUGLAS, J., MARCHESIN, D., FURTADO, F., PEREIRA, F., “Three-Phase Immiscible Displacement in Heterogeneous Petroleum Reservoirs”, *Mathematics and Computers in Simulation*, v. 73, pp. 2–20, 2006.
- [35] ABREU, E. C., *Modelagem e Simulação Computacional de Escoamentos Trifásicos em Reservatórios de Petróleo Heterogêneos*, Ph.D. Thesis, IPRJ-UERJ, 2007.
- [36] EDUARDO ABREU, D. C., “Numerical Modeling of Degenerate Equations in Porous Media Flow”, *Journal of Scientific Computing*, v. 55, pp. 688–717, 2013.
- [37] LOPES, T. V., *Simulação Numérica Tridimensional de Escoamentos em Reservatórios de Petróleo Heterogêneos*, Dissertação de mestrado, Laboratório Nacional de Computação Científica, LNCC, 2012.
- [38] TORO, E. F., *Riemann Solvers and Numerical Methods for Fluid Dynamic*. Springer-Verlag, 2009.
- [39] BOLDRINI, J. L., *Algebra Linear*. Harbra, 1990.
- [40] HUGHES, T., *The Finite Element Method: Linear Static and Dynamic Finite Element Analysis*. *Dover Civil and Mechanical Engineering Series*, Dover Publ., 2000.
- [41] GODUNOV, S. K., “A difference method for numerical calculation of discontinuous solutions of the equations of hydrodynamics”, *Mat. Sb. (N.S.)*, v. 47(89), pp. 271–306, 1959.
- [42] HARTEN, A., LAX, P. D., VAN LEER, B., “On Upstream Differencing and Godunov-Type Schemes for Hyperbolic Conservation Laws”, *SIAM Review*, v. 25, n. 1, pp. 35–61, 1983.

- [43] HIRSCH, C., *Numerical Computation of Internal and External Flows*. John Wiley & Sons: Chichester, England, 1990.
- [44] COURANT, R., FRIEDRICHS, K., LEWY, H., “On the Partial Difference Equations of Mathematical Physics”, *IBM Journal of Research and Development*, v. 11, n. 2, pp. 215–234, March 1967.
- [45] GOTTLIEB, S., SHU, C.-W., “Total-Variation-Diminishing Runge-Kutta Schemes”, *Mathematics of Computation*, v. 67, n. 221, pp. 73–85, 1998.
- [46] ROE, P., “Approximate Riemann solvers, parameter vectors and difference schemes”, *Journal of Computational Physics*, v. 43, pp. 357–372, 1981.
- [47] SHU, C.-W., “Total-Variation-Diminishing Time Discretizations”, *SIAM J. Sci. and Stat. Comput.*, v. 9, n. 6, pp. 1073–1084, 1988.