



Universidade do Estado do Rio de Janeiro
Centro de Tecnologia e Ciências
Instituto Politécnico

Gisiane Santos Simão Ferreira

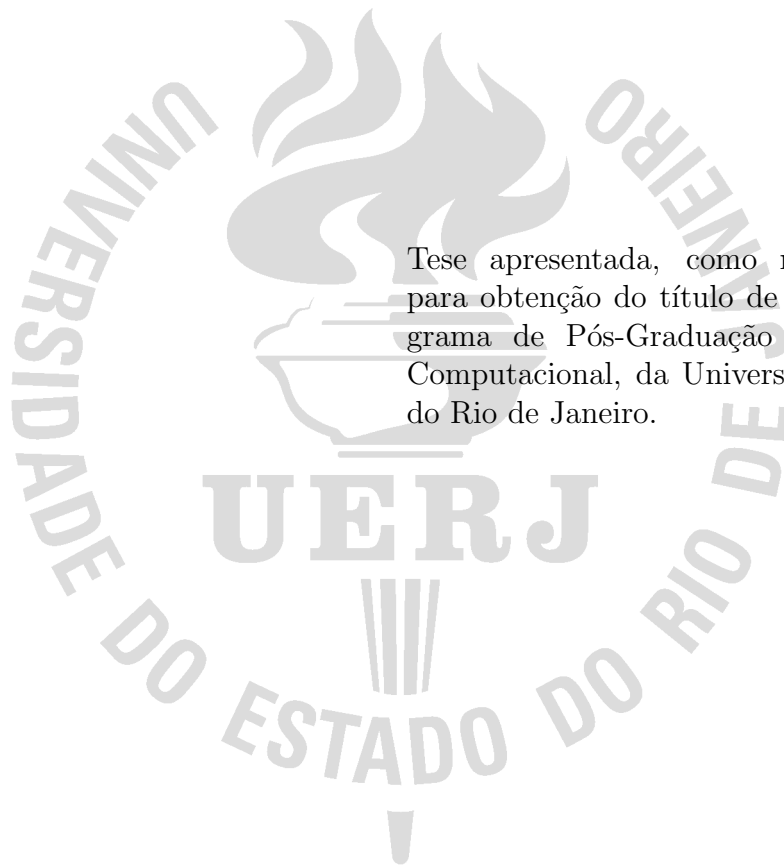
**Simulação computacional do escoamento de fluidos miscíveis e
compressíveis em meios porosos através de técnicas livres de
Jacobiana**

Nova Friburgo

2020

Gisiane Santos Simão Ferreira

**Simulação computacional do escoamento de fluidos miscíveis e compressíveis
em meios porosos através de técnicas livres de Jacobiana**



Tese apresentada, como requisito parcial para obtenção do título de Doutor, ao Programa de Pós-Graduação em Modelagem Computacional, da Universidade do Estado do Rio de Janeiro.

Orientador: Prof. Dr. Luiz Nélio Henderson Guedes de Oliveira

Nova Friburgo

2020

CATALOGAÇÃO NA FONTE
UERJ / REDE SIRIUS / BIBLIOTECA CTC/E

F383 Ferreira, Gisiane Santos Simão.
Simulação computacional do escoamento de fluidos miscíveis e compressíveis em meios porosos através de técnicas livres de Jacobiana / Gisiane Santos Simão Ferreira. - 2020.
138 f. : il.

Orientador: Luiz Nélio Henderson Guedes de Oliveira.
Tese (doutorado) – Universidade do Estado do Rio de Janeiro, Instituto Politécnico.

1. Escoamento em meios porosos – Métodos de simulação – Teses. 2. Escoamento em meios porosos – Modelo matemáticos – Teses. 3. Equações diferenciais parciais – Soluções numéricas – Teses. 4. Permeabilidade - Modelos matemáticos – Teses. I. Oliveira, Luiz Nélio Henderson Guedes de. II. Universidade do Estado do Rio de Janeiro. Instituto Politécnico. III. Título.

CDU 539.217:519.6

Bibliotecária Cleide Sancho CRB7/5843

Autorizo, apenas para fins acadêmicos e científicos, a reprodução total ou parcial desta tese, desde que citada a fonte.

Assinatura

Data

Gisiane Santos Simão Ferreira

**Simulação computacional do escoamento de fluidos miscíveis e compressíveis
em meios porosos através de técnicas livres de Jacobiana**

Tese apresentada, como requisito parcial para obtenção do título de Doutor, ao Programa de Pós-Graduação em Modelagem Computacional, da Universidade do Estado do Rio de Janeiro.

Aprovada em 17 de fevereiro de 2020.

Banca Examinadora:

Prof. Dr. Luiz Nélio Henderson Guedes de Oliveira (Orientador)
Instituto Politécnico – UERJ

Prof. Dra. Daiara Fernandes de Faria
Instituto Politécnico – UERJ

Prof. Dr. Grazione de Souza Boy
Instituto Politécnico – UERJ

Prof. Dr. Maicon Ribeiro Correa
Universidade Estadual de Campinas – UNICAMP

Prof. Dr. Sanderson Lincoln Gonzaga de Oliveira
Universidade Federal de Lavras – UFLA

Nova Friburgo

2020

DEDICATÓRIA

Este trabalho é dedicado a Deus, minha fonte de fé. À minha mãe, Maria de Fátima, sempre presente em minha vida, e a todos que torceram por mim.

AGRADECIMENTOS

Primeiramente, a Deus, pelo dom da vida, por ter me dado força, saúde, disposição e para que continue me iluminando e me guiando para trabalhos futuros.

Ao meu orientador e amigo, Luiz Nélio Henderson, pela dedicação, apoio e orientação; ele que me acompanhou desde o início do mestrado, incentivando-me à pesquisa e influenciando-me com seu olhar positivo diante da vida.

Aos membros da banca examinadora, professores Daiara, Grazione, Sanderson e Maicon, por aceitarem o convite e pela cooperação na conclusão desta tese.

Aos meus pais, Gerson e Maria de Fátima, a quem devo a vida, por todo amor, pelo incentivo constante, pelo exemplo de dignidade e por me ensinarem a nunca perder a fé.

Às minhas irmãs e confidentes, Gilza e Fani, toda minha família, tios, primos e vó, pelo incentivo, pela confiança e por estarem sempre presentes.

Ao meu bem, Luiz, pelo amor, companheirismo, força e por estar comigo me incentivando a nunca desistir, sempre superar e persistir.

Aos meus amigos do LABMACC (Laboratório de Matemática Aplicada e Computação Científica): Adriana, pelo incentivo; Tânia, pela gentileza; Janaína, pelo carisma; Narcisa, pela firmeza; Fábio, por tantos esclarecimentos; Noelle, pelas conversas; Géssica e Sérgio, pela parceria. Aos amigos Taciano, Josiele e tantos outros amigos da vida que contribuíram direta ou indiretamente com apoio e carinho. À amiga Rebeca, pelo apoio, atenção, amizade, cafezinhos, participações em congressos e longas noites de estudo.

Aos meus amigos de Trajano de Moraes: os componentes do Grupo de Oração “Filhos da Luz” que tanto me deram apoio, confiança e motivação; ao C.E. Maria Marina e as amigas Carol, Mi e Roneida que representam todos os meus amigos trajanenses, por toda dedicação, amizade, orações, por vibrarem em todas as minhas vitórias e pelo abraço de conforto nos momentos difíceis. Aos profissionais e amigos do CEDERJ, pólo Cantagalo.

Aos professores, colegas e servidores da comunidade do Campus Regional Instituto Politécnico da UERJ, por todo apoio.

Agradeço ao projeto denominado de *Experimentos e Simulações de Processos de Destilação da Região Centro Norte Fluminense*; projeto esse financiado pela FAPERJ sob o Edital 33/ 2012-DCTR, Apoio ao Desenvolvimento Científico e Tecnológico Regional no Estado do Rio de Janeiro no Processo Número E-26/112.575/2012, pelos computadores que pude utilizar nas simulações.

Muito Obrigada a todos!

O presente trabalho foi realizado com apoio da Coordenação de Aperfeiçoamento de Pessoal Nível Superior - Brasil (CAPES) - Código de Financiamento 001.

Ó Deus de meus pais, eu te louvo e celebro
porque me deste sabedoria e força;
e, agora, me fizeste saber o que te pedimos,
porque nos fizeste saber este assunto do rei.

Daniel 2:23

RESUMO

FERREIRA, G. S. S. *Simulação computacional do escoamento de fluidos miscíveis e compressíveis em meios porosos através de técnicas livres de Jacobiana*. 2020. 138 f. Tese (Doutorado em Modelagem Computacional) – Instituto Politécnico, Universidade do Estado do Rio de Janeiro, Nova Friburgo, 2020.

Este trabalho trata da modelagem e da simulação numérica do escoamento monofásico em meios porosos heterogêneos de natureza fractal, no qual o fluido é considerado miscível e compressível. Os meios porosos são modelados pela Equação de Kozeny-Carman Generalizada a três parâmetros (KCG), a qual relaciona a porosidade com a permeabilidade. Essa equação é capaz de generalizar diferentes modelos existentes na literatura. O *software* livre de Jacobiana, desenvolvido neste trabalho, para a resolução de problemas formulados em termos de equações diferenciais parciais não-lineares é de interesse crescente para simular processos práticos de engenharia. O chamado “Algoritmo espectral livre de derivadas” foi utilizado na solução de equações não-lineares oriundas da modelagem de escoamentos em meios porosos. O modelo, que foi considerado nesta pesquisa, é aquele empregado para descrever o deslocamento de fluido compressível miscível em meios porosos com fontes e sumidouros, no qual a densidade da mistura de fluidos varia exponencialmente com a pressão. O algoritmo espectral utilizado é um método moderno para a solução de sistemas não-lineares de grande porte, não utiliza qualquer informação explícita associada com a matriz Jacobiana. Modelos para escoamentos bidimensionais são apresentados juntamente com os resultados numéricos, comparando o algoritmo espectral com um método de Newton inexato livre de Jacobiana. Os resultados deste trabalho mostram que esse algoritmo espectral moderno é um método confiável e eficiente para a simulação de escoamentos compressíveis em meios porosos. Os resultados mostram que o modelo KCG é capaz de gerar meios porosos heterogêneos, cujas características permitem a captura de fenômenos físicos que são geralmente desafiadores para muitos simuladores em diferenças finitas clássicas, como fenômeno de formação de *fingers* viscosos que ocorre quando a razão de mobilidades é adversa.

Palavras-chave: Escoamento miscível. Fluidos compressíveis. Técnicas livres de Jacobiana. Kozeny-Carman Generalizada.

ABSTRACT

FERREIRA, G. S. S. *Computational simulation of miscible fluids flow in porous media along with Jacobian free techniques*. 2020. 138 f. Tese (Doutorado em Modelagem Computacional) – Instituto Politécnico, Universidade do Estado do Rio de Janeiro, Nova Friburgo, 2020.

This work deals with numerical modeling and simulation of single-phase flow in heterogeneous porous media of a fractal nature, where fluid is considered miscible and compressible. Porous media are modeled by the Generalized Kozeny Carman Equation with three parameters (KCG), which relates porosity to permeability. This equation is able to generalize different models existing in the literature and, therefore, is of very general use. The free Jacobian software developed here for solving problems formulated by nonlinear partial differential equations is of growing interest for similar practical engineering processes. The so-called “Free derivative spectral algorithm” was used for nonlinear equations in the transfer simulation in porous media. The model considered herein is that employed to describe the displacement of miscible compressible fluid in porous media with sources and sinks, where a density of the fluid mixture varies exponentially with pressure. The spectral algorithm used is a modern method for the solution of large nonlinear systems, it does not use any explicit information associated with the Jacobian matrix. The two-dimensional flow models are presented, together with the numerical results comparing the spectral algorithm with the Jacobian free inexact Newton method. The results of this work show that this modern spectral algorithm is a reliable and efficient method for the simulation of compressible porous media flow. The results shown in the KCG model are able to generate heterogeneous means, including features that can be captured from physical phenomena that are generally challenges for to access for classical finite difference simulators, as example the viscous fingering phenomena that occurs when there is an adverse mobility relation.

Keywords: Miscible flows. Compressible fluids. Jacobian free techniques. Generalized Kozeny-Karman Equation.

LISTA DE FIGURAS

Figura 1 - O volume poroso e o volume total de uma amostra representativa. . . .	21
Figura 2 - Escoamento horizontal em um material poroso.	22
Figura 3 - Caminhos seguidos pelo fluido e o comprimento L , em uma dada di- reção.	23
Figura 4 - A geometria do meio poroso	45
Figura 5 - A malha de blocos centrados.	46
Figura 6 - Um poço de formato cilíndrico.	55
Figura 7 - Exemplo 1 para diferentes instantes de injeção de solvente, com $M = 1$. Escoamento Puramente advectivo.	87
Figura 8 - Exemplo 1 para 150 dias de injeção de solvente, com $M = 1$. Escoa- mento Puramente advectivo.	88
Figura 9 - Exemplo 1 para diferentes instantes de injeção de solvente, com $M =$ 100. Escoamento Puramente advectivo.	89
Figura 10 - Exemplo 2 para diferentes instantes de injeção de solvente, com $M = 1$, $\alpha_d = 0,01 \text{ cm}^2/s$. Escoamento do tipo advecção-difusão.	92
Figura 11 - Exemplo 2 para 150 dias de injeção de solvente com $M = 1$, $\alpha_d = 0,01$ cm^2/s . Escoamento do tipo advecção-difusão.	93
Figura 12 - Exemplo 2 para diferentes instantes de injeção de solvente com $M = 80$, $\alpha_d = 0,01 \text{ cm}^2/s$. Escoamento do tipo advecção-difusão.	94
Figura 13 - Exemplo 2 para diferentes instantes de injeção de solvente, com $M = 1$, $\alpha_d = 0,1 \text{ cm}^2/s$. Escoamento do tipo advecção-difusão.	95
Figura 14 - Exemplo 2 para diferentes instantes de injeção de solvente, com $M =$ 80, $\alpha_d = 0,1 \text{ cm}^2/s$. Escoamento do tipo advecção-difusão.	96
Figura 15 - Exemplo 3 para diferentes instantes de injeção de solvente, com $M =$ 80, $\alpha_L = 5,0 \text{ cm}$ e $\alpha_T = 0,5 \text{ cm}$. Caso 1.	99
Figura 16 - Exemplo 3 para diferentes instantes de injeção de solvente, com $M =$ 80, $\alpha_L = 1,0 \text{ cm}$ e $\alpha_T = 0,0 \text{ cm}$. Caso 2.	100
Figura 17 - Exemplo 3 para diferentes instantes de injeção de solvente, $M = 80$, $\alpha_L = 10 \text{ cm}$ e $\alpha_T = 1,0 \text{ cm}$. Caso 3.	101
Figura 18 - Exemplo 3 para diferentes instantes de injeção de solvente, com $M = 1$, $\alpha_L = 1,0 \text{ cm}$ e $\alpha_T = 0,0 \text{ cm}$. Caso 4.	102
Figura 19 - Exemplo 3 para diferentes instantes de injeção de solvente, com $M = 1$, $\alpha_L = 5,0 \text{ cm}$ e $\alpha_T = 0,5 \text{ cm}$. Caso 5.	103
Figura 20 - Exemplo 3 para 150 dias de injeção de solvente, com $M = 1$, $\alpha_L = 5$ cm e $\alpha_T = 0,5 \text{ cm}$. Caso 5.	104

Figura 21 - Exemplo 3 para diferentes instantes de injeção de solvente, com $M = 1$, $\alpha_L = 10$ cm e $\alpha_T = 1$ cm. Caso 6.	105
Figura 22 - Campo de Permeabilidade Fractal do Exemplo Heterogêneo 1.	108
Figura 23 - Formação de <i>fingers</i> viscosos próximos ao poço de injeção para o Exemplo Heterogêneo 1, em 10 dias e 100 dias de injeção de solvente.	109
Figura 24 - Desenvolvimento de <i>fingers</i> viscosos no meio poroso fractal para o Exemplo Heterogêneo 1, em 200 dias e 500 dias de injeção de solvente.	110
Figura 25 - Desenvolvimento de <i>fingers</i> viscosos próximos ao poço de extração para o Exemplo Heterogêneo 1, em 1000 dias e 2000 dias de injeção de solvente.	111
Figura 26 - Proliferação de <i>fingers</i> viscosos ao longo do meio poroso fractal para o Exemplo Heterogêneo 1, em 3000 dias de injeção de solvente.	112
Figura 27 - Campo de Permeabilidade Fractal Heterogêneo 2.	114
Figura 28 - Formação de <i>fingers</i> viscosos miscíveis próximos à região C , para o Exemplo Heterogêneo 2, em 100 dias de injeção de solvente.	115
Figura 29 - <i>Fingers</i> viscosos miscíveis se aproximando rapidamente do poço produtor e um grande bolsão de óleo empoçado, para o Exemplo Heterogêneo 2, em 500 dias de injeção de solvente.	117
Figura 30 - A permanência de um grande bolsão de óleo (com formato oval) empoçado no reservatório, para o Exemplo Heterogêneo 2, em 3000 dias de injeção de solvente.	119

LISTA DE TABELAS

Tabela 1 - As dez mais populares equações do tipo Kozeny-Carman.	29
Tabela 2 - Dados para pressão inicial, taxa de injeção, porosidade, permeabilidade, parâmetros para o modelo de poço e para a equação de estado.	83
Tabela 3 - Dados para análise comparativa dos desempenhos dos métodos DF-SANE e NIG-GC para o Exemplo 1, com $M = 1$. Escoamento puramente advectivo.	86
Tabela 4 - Dados para análise comparativa dos desempenhos dos métodos DF-SANE e NIG-GC para o Exemplo 2, com $M = 1$ e $\alpha_d = 0,01 \text{ cm}^2/s$. Escoamento do tipo advecção-difusão.	91
Tabela 5 - Dados para análise comparativa dos desempenhos dos métodos DF-SANE e NIG-GC para o Exemplo 3, com $M = 80$, $\alpha_L = 5,0 \text{ cm}$ e $\alpha_T = 0,5 \text{ cm}$. Caso 1.	98

LISTA DE ALGORITMOS

Algoritmo 1 - Desacoplamiento	48
Algoritmo 2 - NIG	64
Algoritmo 3 - NIG/GC	70
Algoritmo 4 - DFSANE	79

SUMÁRIO

	INTRODUÇÃO	14
1	CONCEITOS PRELIMINARES	20
1.1	Meios Porosos	20
1.2	Porosidade	20
1.3	Permeabilidade	21
1.4	Tortuosidade	22
1.5	Superfície Específica	23
1.6	Miscibilidade	23
1.6.1	<u>Forma Diferencial da Lei de Darcy para Escoamentos Miscíveis</u>	24
2	A EQUAÇÃO DE KOZENY-CARMAN GENERALIZADA	25
2.1	Equação Clássica de Kozeny-Carman	25
2.2	Conceitos Básicos da Teoria de Fractais	29
2.3	Equação de Kozeny-Carman Generalizada a Três Parâmetros	31
3	MODELAGEM DO ESCOAMENTO MISCÍVEL EM MEIOS POROSOS	37
3.1	Equações governantes do escoamento multicomponente	37
3.2	Um modelo para injeção de solvente em reservatórios de petróleo	40
4	DISCRETIZAÇÃO DAS EQUAÇÕES DO MODELO	46
4.1	Malhas numéricas	46
4.2	Esquema de Desacoplamento	47
4.3	Discretização da Equação da Pressão	48
4.4	Discretização da Equação da Fração Mássica	49
4.5	O tratamento do Termo de Poço	54
5	OS MÉTODOS NUMÉRICOS PARA AS EQUAÇÕES NÃO LINEARES	57
5.1	Aspectos gerais dos métodos numéricos	57
5.2	O Problema Básico	58
5.3	O método de Newton Inexato Globalizado	59
5.4	O Método DFSANE e suas modificações	72
6	RESULTADOS	82
6.1	Meio Poroso Homogêneo	82
6.1.1	<u>Aspectos Gerais</u>	82
6.1.2	<u>Exemplo 1: Escoamento Puramente Advectivo</u>	83
6.1.3	<u>Exemplo 2: Escoamento do Tipo Advecção-Difusão</u>	90
6.1.4	<u>Exemplo 3: Escoamento com Dispersão Mecânica</u>	97
6.2	Meio Poroso Heterogêneo	106

6.2.1	<u>Aspectos Gerais</u>	106
6.2.2	<u>Exemplo 1 para meio heterogêneo</u>	107
6.2.3	<u>Exemplo 2 para meio heterogêneo</u>	113
	CONCLUSÕES E PERSPECTIVAS FUTURAS	120
	REFERÊNCIAS	123
	APÊNDICE A – Discretização espacial do termo $F_x(w^n, P^{n+1})_{i-\frac{1}{2},j}$ de fluxo da Equação (93)	130
	APÊNDICE B – Discretização espacial do termo $F_y(w^n, P^{n+1})_{i,j+\frac{1}{2}}$ de fluxo da Equação (93)	133
	APÊNDICE C – Discretização espacial do termo de fluxo $F_y(w^n, P^{n+1})_{i,j-\frac{1}{2}}$ da Equação (93)	136

INTRODUÇÃO

A modelagem computacional consiste no uso de um modelo matemático capaz de obter uma visão do comportamento de um fenômeno físico, de tal forma que possa ser estudado a fim de obter respostas, utilizando-se recursos computacionais. A transformação do modelo matemático em algoritmos numéricos é uma das atividades em que a resolução pode ser cara computacionalmente, porém vem evoluindo muito com os avanços de *hardware*, técnicas de paralelização, algoritmos otimizados, entre outros. Contudo as equações que constituem o modelo matemático, geralmente são mais complicadas de serem resolvidas analiticamente, e, portanto, aproximações devem ser aplicadas de forma a serem resolvidas por algum método estável, acurado e computacionalmente eficiente para resolver sistemas de equações de grande porte.

A indústria petrolífera procura maximizar o fator de recuperação de um reservatório ao longo de sua vida produtiva, por meios economicamente viáveis. Neste contexto, existem campos com relativa dificuldade de produção de hidrocarbonetos, como aqueles que apresentam óleo altamente viscoso em camadas inconsolidadas, ou campos com baixas pressões internas, onde a partir de um determinado período, o campo pode se tornar inoperante, ou seja, economicamente inviável, sendo necessária nestes casos, a aplicação de técnicas de recuperação por produção de petróleo.

Os processos usados para aumentar a recuperação de hidrocarbonetos utilizam técnicas de injeção de fluidos no reservatório.. Essas técnicas podem ser de recuperação primária, secundária ou terciária. Na recuperação primária a produção se dá naturalmente por diferença de pressão. Nas técnicas de recuperação secundária e terciária alteram-se as condições naturais, utilizando a injeção de fluidos através de poços de injeção, para aumentar a pressão no interior deles e a vazão nos poços produtores. Na recuperação secundária, o escoamento é imiscível, quando o fluido injetado é, por exemplo, a água ou o gás (GREEN; WILLHITE et al., 1998; ROSA; CARVALHO; XAVIER, 2006).

A recuperação terciária são as mais indicadas para a recuperação dos campos maduros - campos que atingiram o pico de produção, estando em um estado de produção em declínio e se aproximando o fim de suas vidas produtivas -, pois busca recuperar reservatórios que apresentam óleos de alta viscosidade e elevadas tensões interfaciais, nesse caso, métodos de recuperação secundária não são suficientes. Os principais tipos de recuperação terciária são modelos térmicos, químicos, microbiológicos e miscíveis (VOS-SOUGH, 2000; ROSA; CARVALHO; XAVIER, 2006).

Os métodos térmicos de recuperação são baseados no fato de que o calor transferido ao reservatório aquece o óleo diminuindo sua viscosidade, facilitando o seu escoamento para o poço produtor. Já com os métodos químicos, o fluido injetado interage quimicamente com o fluido residente no reservatório.

Os modelos microbiológicos consistem em adicionar micro-organismos junto à água de injeção que, quando em contato com o meio aquoso cheio de nutrientes realizam reações metabólicas que incluem a quebra das cadeias mais longas dos hidrocarbonetos, levando a um óleo mais leve (FENG et al., 2002). Por outro lado, os métodos podem ser definidos como processos caracterizados pela ausência de interface entre os fluidos deslocante e deslocado, estando relacionado com a eliminação de forças capilares e interfaciais, favorecendo o deslocamento de óleo do reservatório. Em transformações químicas, no processo de misturas, todos os gases são miscíveis entre si. Entretanto, a miscibilidade entre dois líquidos depende da semelhança química, condições de pressão e temperatura. Os solventes que são miscíveis com o óleo pesado são mais custosos que o gás, portanto a quantidade de solvente injetado deve ser relativamente pequena por razões econômicas, (GREEN; WILLHITE et al., 1998). A modelagem de escoamentos miscíveis é importante para o entendimento e o planejamento de processos industriais. Essa miscibilidade de fluidos é uma propriedade que permite que dois ou mais fluidos se misturem e formem um sistema homogêneo composto por uma única fase. Dois ou mais fluidos formados por substâncias puras, ou não, são miscíveis se, quando misturados, dão origem a um fluido totalmente livre de interfaces e, consequentes tensões interfaciais (HOLM et al., 1986).

Escoamentos de fluidos miscíveis ocorrem em diversos problemas de interesse, como por exemplo, nas ciências e na engenharia, nas quais é possível citar a contaminação de lençóis d'água, decorrente da infiltração de pesticidas usadas na lavoura ou de resíduos químicos e problemas decorrente da invasão de água salgada em lagos e aquíferos próximos do mar (AZEVEDO et al., 2000; FILIZOLA et al., 2002).

Na engenharia química, processos de extração supercrítica são cada vez mais comuns, nos quais um fluido em estado supercrítico, possuindo alta mobilidade e grande poder de solvência, é injetado em meio sólido provocando um escoamento miscível e, em consequência, a extração de uma ou mais substâncias do meio. Cita-se, como exemplo, a extração de cafeína e de óleos medicinais, injetando dióxido de carbono supercrítico em meios vegetais (BECKMAN, 2004; WAI; LAINTZ, 1994).

Duas das mais importantes aplicações na modelagem de escoamentos miscíveis em meios porosos são o transporte de traçadores e a injeção contínua. As técnicas de injeção de traçadores têm se mostrado bastante viáveis na indústria de petróleo, sendo recursos tecnológicos de baixo custo para monitorar o movimento do fluido, a fim de obter dados relevantes sobre os reservatórios de petróleo. Traçadores são elementos radiativos ou não adicionados ao fluido injetado que permitem a obtenção de informações sobre as características do escoamento e as propriedades do reservatório. Sendo um traçador introduzido no poço injetor é possível avaliar seu deslocamento por meio da medida de concentração, em um poço produtor. A concentração do traçador e o tempo de chegada nos poços de produção são importantes para se identificar barreiras ao escoamento, falhas geológicas, caminhos preferenciais de fluxo, propriedades do meio poroso, dentre outras

características que são difíceis de se obter através de técnicas geofísicas convencionais (LOULA et al., 1996; GUERREIRO et al., 1998; NUNEZ et al., 2012; ENGESGAARD et al., 1996; BARTH et al., 2001).

O processo de injeção contínua se caracteriza pela injeção de fluidos no reservatório, com o objetivo de deslocar o fluido residente até o poço produtor, ocupando o espaço deixado por ele. A simulação de injeção contínua envolvendo mobilidade adversa, ou seja, quando o fluido residente possui viscosidade maior que o fluido injetado, é um dos tópicos mais importantes da classe de problemas envolvendo a recuperação terciária. A resolução numérica dos deslocamentos miscíveis, com razão de mobilidade adversa, frequentemente resulta em oscilações espúrias, sensibilidade à orientação da malha e surgimento de *fingers* viscosos, sendo assim nomeados pelo fato de o fluido menos viscoso invadir o óleo, gerando formas similares a longos dedos, que atingem o poço produtor, ficando comprometida a extração do óleo (PEACEMAN, 1977; NUNEZ et al., 2012). Com isso, o surgimento dos *fingers* viscosos podem causar problemas consideráveis para a indústria petrolífera, de forma que simuladores numéricos capazes de capturar essa formação de *fingers* são ferramentas úteis, não só para prevêê-las, mas para auxiliar na discussão de propostas de estabilização do fenômeno de natureza hidrodinâmica.

Geralmente, os escoamentos associado a aplicação de métodos miscíveis são modelados matematicamente por equações diferenciais parciais não lineares (BEAR, 1972; COLLINS, 1961), que podem apresentar soluções com singularidades nos poços de injeção e produção. Assim, a discretização desses problemas leva a sistemas de equações algébricas não lineares de grande dimensão, por exemplo, milhares de incógnitas. Essas equações são comumente resolvidas usando o método de Newton clássico (AZIZ, 1979). A convergência do método de Newton depende da localização do ponto de partida, mas esse método iterativo é atraente porque geralmente apresenta uma taxa de convergência quadrática local (DENNIS; SCHNABEL, 1983). No entanto, para simular a evolução dinâmica do fluxo, a cada passo o método de Newton requer a solução de vários sistemas lineares, nos quais as Jacobianas do sistema não linear avaliadas nos pontos atuais são as matrizes dos coeficientes de grande dimensão e esparsas.

Para minimizar o custo computacional na solução de tais sistemas lineares, nos últimos anos, alguns pesquisadores nessa área usaram métodos inexatos, (BERGAMASCHI et al., 2012; DAWSON et al., 1997; JONES; WOODWARD, 2001). Tais métodos inexatos são variantes do método de Newton, nos quais sistemas lineares são resolvidos apenas aproximadamente, como realizado por Dembo, Eisenstat e Steihaug (1982), Eisenstat e Walker (1994) e Eisenstat e Walker (1996), que se utilizaram de métodos de Krylov (KELLEY, 1996).

O Algoritmo Espectral Livre de Derivadas para Equações Não Lineares (*Derivate Free Spectral Residual for Nonlinear Equation - DFSANE*) é um método moderno para resolver sistemas não lineares de larga escala, desenvolvido a partir do método do gradiente

(BARZILAI; BORWEIN, 1988; RAYDAN, 1993), que não resolve sistemas lineares, nem usa qualquer informação associada à matriz Jacobiana, sendo uma abordagem livre de derivadas (LA CRUZ; MARTÍNEZ; RAYDAN, 2006).

Justificativa

A seguir, apresenta-se alguns trabalhos nesta área de escoamento miscível em reservatórios, a fim de resolver o sistema gerado pela equação da pressão e a equação da concentração, visando, assim, a otimização do processo (MALTA, 1995; GARCIA, 1997; MALTA; LOULA; GARCIA, 1995; NUNEZ et al., 2012).

Christie e Bond (1987) descrevem aplicações de simulações de problemas lineares e não lineares para escoamento de fluidos miscíveis, utilizando diferenças finitas na direção do fluxo e decomposição de Fourier perpendicular ao fluxo, considerando um meio bidimensional para o estudo do *fingers* com variação de viscosidade e parâmetros do coeficiente difusivo.

Um estudo dos *fingers* viscosos no processo de injeção miscível e uma análise da ausência da gravidade em simulações em 2D e 3D em meios homogêneos e heterogêneos, foram feitos em Tchelepi, Jr et al. (1994).

Malta, Loula e Garcia (2000) empregaram o método *Streamline Upwind/Petrov-Glerkin* (SUPG) para a aproximação da concentração e para resolver o sistema de equações diferenciais parciais que modela os processos de injeção dos traçadores em reservatório de petróleo no escoamento de fluidos miscíveis.

Werner, Catabriga e Santos (2010) implementaram também o método de elementos finitos para resolver o problema de escoamento miscível em um reservatório de petróleo, usando o método de estabilização denominado de Difusão Dinâmica na equação de concentração. Esse método é uma metodologia para resolver problemas de transporte, predominantemente advectivo, baseado em uma decomposição multiescala da variável de interesse e do campo de velocidade.

Pesquisas recentes têm sido realizadas, com a finalidade de desenvolver o método livre de derivadas na solução dos sistemas de equações algébricas resultantes da discretização das equações parciais não lineares que constituem problemas de difícil resolução, exigindo o emprego de métodos numéricos robustos. Essa metodologia tem sido utilizada amplamente e com sucesso em vários trabalhos encontrados na comunidade científica (SIMÃO; HENDERSON, 2016; SIMÃO; HENDERSON, 2017; SIMÃO; HENDERSON, 2018; SIMÃO et al., 2019b; SIMÃO et al., 2019a).

Henderson, Brêttas e Sacco (2015), empregaram o método DFSANE para resolver a equação da pressão em uma simulação de reservatórios, sendo considerado o escoamento bifásico em meios porosos heterogêneos de natureza fractal, no qual os fluidos são

considerados imiscíveis e a permeabilidade foi modelada pela equação KCG.

Em Henderson e Pena (2017), tratou-se de simulações de *fingers* viscosos em fluxos bifásicos (óleo-água) através de meios porosos heterogêneos e anisotrópicos, nos quais tanto a heterogeneidade quanto a anisotropia são modeladas pela equação generalizada a três parâmetros do tipo Kozeny-Carman, que foi incluída em um clássico modelo geralmente usado para simular fluxos imiscíveis durante operações de injeção de água.

Ferreira, Kischinhevsky e Henderson (2017), utilizaram uma metodologia fisicamente intuitiva cuja formulação é baseada nos fundamentos teóricos da mecânica dos meios contínuos. Nesse trabalho foi utilizado o método DFSANE na resolução dos sistemas lineares resultantes da discretização das equações de Navier-Stokes através do método Tubo de Trajetórias.

Tarzanagh, Nazari e Peyghami (2017), propuseram um novo gradiente conjugado pré-condicionado livre de derivadas para resolver sistemas não lineares e sub-determinados em grande escala de equações, com uma técnica de busca não-monótona relaxada. Trata-se, portanto, de um método decorrente do DFSANE.

No trabalho de Silva (2017), vê-se o estudo da teoria de lubrificação, em que películas finas constituídas de fluidos viscosos, deslocam-se em contato com superfícies sólidas, com as implementações dos esquemas numéricos para uma classe de problemas modelados por equações diferenciais parciais parabólicas de alta ordem, as quais são não lineares. Assim, tem-se um sistema não linear, que foi resolvido com sucesso, através do método DFSANE.

Pesquisas mostram que o método espectral livre de Jacobiana foi aplicado com êxito em diferentes áreas da ciência. Em Gomes (2017), considera-se simuladores voltados para a previsão da produção futura de reservatórios, bem como no gerenciamento em produção, tornando-se ferramentas indispensáveis na prospecção de petróleo, tendo sido empregada uma técnica implícita ao problema de Buckley-Leverett para o escoamento em meios porosos heterogêneos de natureza fractal e as equações de conservação, sendo resolvidas através do método DFSANE. No trabalho de Silva (2018) foi desenvolvido um simulador computacional, possibilitando uma descrição acurada do fluxo de água em zonas subsaturadas, na resolução do sistema não linear resultante da discretização da equação de Richards, também com o uso do método DFSANE.

Objetivos

Esta tese, tem objetivo principal a modelagem e simulação computacional do escoamento miscível e levemente compressível em meios porosos. Para isso, parte do modelo será descrito por equações diferenciais parciais do tipo advecção-difusão, as quais, para tal, representam a conservação de massa dos constituintes químicos da mistura fluida.

Almejamos desenvolver um simulador numérico, SEMD - Simulador para o Escoamento Miscível sem Derivadas -, usando o método de Newton Inexato Globalizado com Gradiente Conjugado (NIG/GC) e o método DFSANE para a resolução da equação da pressão. Essa é uma equação diferencial parabólica não linear de segunda ordem, munida com condições de contorno de Neumann.

Ainda como objetivo deste trabalho, busca-se analisar a equação de Kozeny-Carman generalizada (KCG) proposta por Henderson, Brêttas e Sacco (2010), no estudo numérico do escoamento de dois fluidos miscíveis com razão de viscosidade adversa. Para isso, considera-se um meio poroso retangular bidimensional, com valores de porosidade uniformemente distribuídos em um determinado intervalo. Então, a permeabilidade absoluta do material poroso será modelada em função da porosidade, usando a equação de KCG. Essa abordagem gera um campo heterogêneo de permeabilidade, cuja natureza fractal será descrita pelo modelo matemático equipado com três parâmetros fixos.

Estruturação da tese

Para apresentar o problema de interesse, as formulações a serem utilizadas e os resultados obtidos, esta tese será organizada em sete capítulos e três apêndices.

No primeiro capítulo será realizada uma apresentação teórica das leis e propriedades básicas que definem meios porosos e escoamento miscível.

O Capítulo 2 mostrará os detalhes da modelagem na caracterização de meios porosos fractais, a equação de Kozeny-Carman generalizada. Já no Capítulo 3 serão descritas as equações diferenciais que modelam o escoamento miscível em meios porosos.

No Capítulo 4 serão discretizadas as equações do modelo físico-matemático, sendo a equação da pressão de forma implícita no tempo e a equação de advecção-difusão por um esquema explícito. Nesse capítulo também será apresentado o caso particular referente ao escoamento de um fluido ligeiramente compressível formado por uma mistura com apenas dois componentes químicos, um dos quais será o traçador injetado no meio poroso e o outro constitui o fluido residente.

Os métodos numéricos para as equações não lineares, NIG/CG e DFSANE e suas modificações, serão descritos no Capítulo 5. Os resultados do simulador numérico para o meio poroso homogêneo e meio poroso heterogêneo estarão no Capítulo 6.

Posteriormente, serão apresentadas as principais conclusões e perspectivas futuras. Logo em seguida serão listados todos os trabalhos pesquisados e citados no texto.

Finalmente, os três apêndices serão apresentados, referentes ao capítulo das discretizações das equações do modelo.

1 CONCEITOS PRELIMINARES

1.1 Meios Porosos

Em um sentido mais geral, um meio poroso é um material sólido contendo orifícios no seu interior. No entanto, como observado por Bear (1972), um cilindro de metal oco, por exemplo, não é usualmente considerado um material poroso. Assim, de imediato, é necessário especificar mais precisamente o que se entende por meio poroso. Seguindo Bear (1972), um sólido contendo orifícios dispersos no seu interior (de forma regular ou aleatória) é um meio poroso, se tais orifícios ocorrem de uma forma relativamente frequente no interior do sólido. A parte sólida de um meio poroso é denominada matriz porosa e é formada pelos grãos de rocha. Os orifícios são chamados de espaços vazios ou espaços porosos (ou simplesmente poros).

Uma grande variedade de materiais, naturais ou artificiais, são meios porosos. Por exemplo, pedra-pomes, esponjas naturais, espumas sintéticas, algodão, grãos vegetais como o feijão e o milho, madeiras, órgãos como o pulmão e o rim, um pacote de areia, um tubo cheio de bolas de gude, filtros caseiros (como o coador de café), filtros para equipamentos mecânicos (como os filtros de automóveis e os industriais), reservatórios de petróleo e aquíferos (BEAR, 1972)

O estudo dos meios porosos está intimamente relacionado com a compreensão das diversas escalas envolvidas no objeto de estudo. De fato, um meio poroso como um reservatório de petróleo, por exemplo, pode possuir comprimento na ordem de quilômetros, espessuras na ordem de metros ou centímetros e espaço poroso com dimensões na ordem de apenas alguns Angstroms. A escala relacionada com as dimensões do espaço poro é denominada de escala microscópica. Em geral, uma escala que se encontra na ordem de quilômetros, metros ou centímetros é denominada de escala macroscópica ou escala do observador.

Qualquer propriedade do material poroso medida em uma escala macroscópica é denominada de propriedade macroscópica do material. Do ponto de vista matemático, uma propriedade macroscópica deve ser vista como uma média tomada com relação a uma amostra representativa do meio poroso Bear (1972).

1.2 Porosidade

A porosidade, denotada por ϕ , é uma propriedade macroscópica básica de um meio poroso, a qual define a razão entre o espaço poroso e o volume total de uma amostra representativa do material. Assim, de acordo com a Figura 1, temos

Figura 1 - O volume poroso e o volume total de uma amostra representativa.



Fonte: Adaptado de BRÊTTAS, 2013.

$$\phi = \frac{\text{Volume Poroso}}{\text{Volume Total da Amostra}} = \frac{V_p}{V_t}. \quad (1)$$

1.3 Permeabilidade

A permeabilidade é a propriedade macroscópica do meio poroso que caracteriza a facilidade com que fluidos podem escoar através do material sólido. O conceito de permeabilidade foi estabelecido experimentalmente por Darcy (1856), o qual mostrou que a permeabilidade está relacionada com propriedades associadas ao escoamento. A equação básica que define a permeabilidade em termos de quantidades mensuráveis é chamada lei de Darcy, a qual, para um escoamento na direção horizontal, pode ser enunciada como segue.

Lei de Darcy: Se um escoamento horizontal de um fluido incompressível é realizado através de uma amostra de um material poroso de comprimento L medido na direção do escoamento (Figura 2), possuindo área da seção transversal uniforme igual a A , então a permeabilidade do material, denotada por k , fica definida por

$$k = \frac{q\mu}{A(\Delta P/L)}. \quad (2)$$

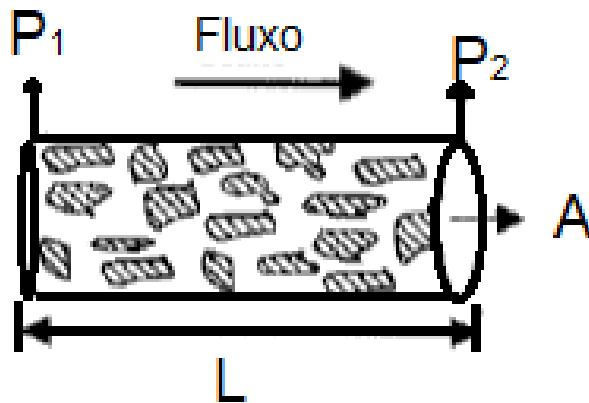
Na Equação (2) o parâmetro q (denominado de vazão) é o volume do fluido que atravessa a seção transversal de área A por unidade de tempo ($q = V_f/\Delta t$), $\Delta P = P_1 - P_2$ é a diferença de pressão tomada nas extremidades da amostra (na forma ilustrada na Figura 2) e μ é a viscosidade do fluido.

A unidade costumeiramente empregada para medir a permeabilidade é o darcy.

Esta unidade é definida em função da Equação (2). Assim, para um material poroso de 1 darcy de permeabilidade, uma diferença de pressão de 1 *atm* deve produzir uma vazão igual a 1 cm^3/s de um fluido com 1 *cp* (um centipoise) de viscosidade, através de uma amostra de 1 *cm* de comprimento, ou seja,

$$1 \text{darcy} = \frac{(cm^3/s)(1cp)}{(1cm^2)(1atm/cm)}. \quad (3)$$

Figura 2 - Escoamento horizontal em um material poroso.



Fonte: Adaptado de BRÊTTAS, 2013.

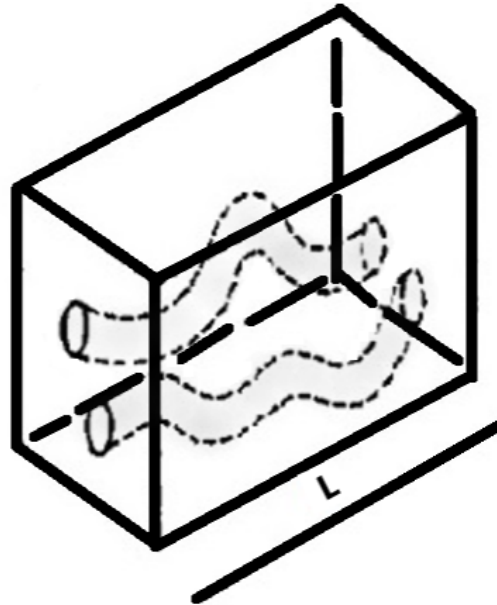
Se a permeabilidade, k , é constante em função da posição, diz-se que o meio poroso é homogêneo. Caso contrário, o material poroso é considerado heterogêneo.

1.4 Tortuosidade

A tortuosidade é outra propriedade macroscópica dos meios porosos. Ela é definida como a razão entre os comprimentos L_t e L , onde L_t é o comprimento (médio) dos caminhos tortuosos seguidos pelo fluido e L é o comprimento do meio poroso (Figura 3), em uma dada direção. Assim, denotando a tortuosidade por τ , tem-se

$$\tau = \frac{L_t}{L}. \quad (4)$$

Figura 3 - Caminhos seguidos pelo fluido e o comprimento L , em uma dada direção.



Fonte: Adaptado de BEAR, 1972.

1.5 Superfície Específica

A superfície específica de um material poroso, aqui indicada por M_b , é uma propriedade macroscópica definida como a área superficial intersticial, A_s , dos poros por unidade de volume total, V_t , de uma amostra representativa,

$$M_b = \frac{A_s}{V_t}. \quad (5)$$

1.6 Miscibilidade

Fluidos escoam no interior de meios porosos. Na modelagem desse tipo de escoamento é importante observar o conceito de miscibilidade. Em físico-química, miscibilidade entre componentes é definida como a habilidade de duas ou mais espécies químicas formarem uma fase simples, ou seja, totalmente homogênea. Quando se trata de misturas de fases fluidas multicomponentes, como ocorre no interior de um reservatório de petróleo, miscibilidade é a propriedade física existente entre duas ou mais fases a qual permite que elas se misturem. Assim, fases fluidas em contato apresentando superfícies de interface

são ditos imiscíveis. Caso contrário são chamadas miscíveis.

Costuma-se dizer que um escoamento é miscível se fluido considerado não apresenta interfaces ao longo do escoamento. Se não for o caso, o escoamento é dito imiscível. Um exemplo clássico de escoamento imiscível é aquele que ocorre durante a injeção de água em reservatórios de petróleo, enquanto que a injeção de agentes químicos denominados de traçadores (muitas vezes solventes) em um reservatórios de óleo são, geralmente, escoamentos miscíveis.

1.6.1 Forma Diferencial da Lei de Darcy para Escoamentos Miscíveis

A forma diferencial da lei de Darcy, para escoamentos miscíveis de fluidos incompressíveis em meios porosos, classicamente empregada na área de simulação de reservatórios de petróleo e em estudos de problemas de hidrologia é dada por (BEAR, 1972):

$$\mathbf{u} = -\frac{k}{\mu}(\nabla P - \rho g \nabla z). \quad (6)$$

Na Equação (6) \mathbf{u} representa a razão da vazão volumétrica pela área de seção transversal ao escoamento. Assim, \mathbf{u} tem dimensão de velocidade, sendo denominada de velocidade de Darcy do escoamento miscível no meio poroso. Como antes, P denota a pressão e μ a viscosidade. Aqui, ρ é a chamada massa específica do fluido. O parâmetro g é a aceleração da gravidade local e z mede a profundidade do material poroso.

2 A EQUAÇÃO DE KOZENY-CARMAN GENERALIZADA

2.1 Equação Clássica de Kozeny-Carman

A caracterização de um meio poroso usando uma relação entre a permeabilidade e a porosidade nem sempre é possível, para um meio poroso arbitrário. No entanto, muitos materiais porosos admitem correlações da forma $k = F(\phi)$, onde F é uma relação funcional típica associada com meio considerado.

Possivelmente, Kozeny (1927) e Carman (1937) foram os primeiros a desenvolverem um modelo para a permeabilidade em função da porosidade. Tal modelo foi derivado a partir da analogia existente entre o escoamento em um meio poroso e o escoamento através de um feixe de tubos capilares (MCGREGOR, 1965).

Esses autores consideraram um meio poroso de comprimento L constituído de n tubos capilares cilíndricos. A seção transversal de cada tubo é circular com diâmetro hidráulico (médio) igual a D_h . Enfatiza-se que o diâmetro hidráulico é a razão entre a área da seção transversal molhada e o perímetro molhado, onde a seção transversal molhada é a parte da seção transversal que é efetivamente ocupada pelo fluido, enquanto que o perímetro molhado é o comprimento associado à curva determinada pelo contato do fluido com o tubo. O comprimento (médio) dos tubos é denotado por L_h .

Assim, na analogia de Kozeny e Carman, o volume poroso é escrito em termos do volume total dos tubos capilares circulares, como segue:

$$V_p = V_t \phi = n \frac{\pi D_h^2}{4} L_h \quad (7)$$

Nessa analogia, a área da superfície intersticial (total) é representada por

$$A_s = n \pi D_h L_h \quad (8)$$

Da Equação (7) segue que

$$n \pi D_h L_h = \frac{V_t \phi}{D_h/4} \quad (9)$$

Substituindo a Equação (9) na Equação (8), chega-se à relação

$$D_h = \frac{4\phi}{A_s/V_t} = \frac{4\phi}{M_b} \quad (10)$$

em que $M_b = A_s/V_t$ é a superfície específica do material poroso.

A Equação (10) pode ser reescrita na forma

$$D_h = \frac{4}{M_s} \left(\frac{\phi}{1 - \phi} \right), \quad (11)$$

$M_s = M_b/(1 - \phi)$ é a superfície intersticial (total) por unidade de volume da matriz sólida, dado por $(1 - \phi)$.

Considerando que os grãos que formam o material poroso são esféricos, com diâmetros iguais a D_g , então,

$$M_s = \frac{\phi D_g^2}{(1/6)\phi D_g^3} = \left(\frac{6}{D_g} \right). \quad (12)$$

Em seguida, considera-se que o escoamento no material poroso satisfaz a lei de Darcy, dada por

$$q = \frac{kA \Delta P}{\mu L}. \quad (13)$$

Por outro lado, explorando um pouco mais a analogia proposta por Kozeny e Carman, supõem-se que a vazão q é a mesma que ocorre no feixe de tubos capilares circulares. Assim, para um escoamento laminar em regime permanente, usando a lei de Hagen-Poiseuille, como presente em Whitaker (1994) escreve-se

$$q = n \frac{\phi D_h^4 \Delta P}{128\mu L_h}. \quad (14)$$

Igualando as Equações (13) e (14), tem-se

$$\frac{A}{n\phi D_h^2} k \frac{L_h}{L} = \frac{D_h^2}{128}. \quad (15)$$

A área da secção transversal do material poroso aberta para o escoamento, A_p , está relacionada com a área da secção transversal molhado (total) pela seguinte expressão,

$$A_p = A\phi = n\phi D_h^2/4. \quad (16)$$

Da Equação (16) segue que

$$\frac{A_p}{n\phi D_h^2} = \frac{1}{4\phi}. \quad (17)$$

A tortuosidade desse meio poroso constituído de tubos capilares circulares é

$$\tau = \frac{L_h}{L}. \quad (18)$$

Substituindo as Equações (16) e (18) na Equação (15), observa-se que o diâmetro hidráulico de um tal tubo capilar obedece a relação

$$D_h = 4\sqrt{2\tau}\sqrt{k\phi}. \quad (19)$$

Finalmente, substituindo a Equação (11) no lado da Equação (19), obtém-se a equação de Kozeny-Carman, na forma proposta por Amaefule et al. (1993),

$$\sqrt{\frac{k}{\phi}} = \frac{1}{\sqrt{2\tau}} \frac{1}{M_s} \left(\frac{\phi}{1-\phi} \right). \quad (20)$$

Em vista do exposto acima, pode-se resumir a equação de Kozeny-Carman como segue:

$$\sqrt{\frac{k}{\phi}} = \gamma \left(\frac{\phi}{1-\phi} \right), \quad (21)$$

em que

$$\gamma = \frac{1}{\sqrt{2\tau}M_s} = \frac{D_g}{6\sqrt{2\tau}}. \quad (22)$$

Comumente, a equação de Kozeny-Carman (Equação (21)) é escrita na forma mais simples

$$k = c \frac{\phi^3}{(1-\phi)^2}, \quad (23)$$

onde na Equação (23) $c = \gamma^2 = \frac{D_g^2}{72\tau} > 0$ é chamado coeficiente de Kozeny-Carman, cujo valor é característico de cada meio poroso.

A equação de Kozeny-Carman é um modelo clássico, tradicionalmente usado na descrição de relações do tipo permeabilidade versus porosidade. Apesar disso, algumas limitações dessa equação têm sido observadas e documentadas na literatura. Dentre elas, pode-se notar que o modelo de Kozeny-Carman não é capaz de descrever a permeabilidade nula de um meio poroso impermeável, uma vez que o parâmetro c mostrado na Equação (23) nunca assume o valor zero. Certamente isso pode dificultar a descrição da permeabilidade em regiões onde $k \rightarrow 0$.

Motivados por tais limitações, nas últimas décadas diferentes pesquisadores realizaram amplos e profícuos trabalhos que têm resultado no desenvolvimento de diferentes versões dessa equação, muitas delas especializadas para meios porosos com determinadas características.

Dentre o grupo de diversos artigos disponíveis na literatura especializada sobre equações do tipo Kozeny-Carman, aqui citaremos os trabalhos de McGregor (1965), Bourbié, Coussy e Zinszner (1987), Bayles, Klinzing e Chiang (1989), Koponen, Kataja e Timonen (1997), Mavko e Nur (1997), Shih e Lee (1998), Panda e Lake (1994), Revil e Ili (1999), Pape, Clauser e Iffland (2000), Rodriguez, Giacomelli e Vazquez (2004), Costa (2006), Xu e Yu (2008), Henderson, Brêttas e Sacco (2010) Correa e Borges (2013) e Xiao et al. (2019). Tais referências foram selecionadas por importâncias históricas e metodológicas, ou por apresentarem boas aplicabilidades a meios porosos específicos de interesse prático. De fato, em uma publicação recente (no prestigiado periódico denominado *Transport in Porous Media*), Karimpouli e Tahmasebi (2017) selecionaram as dez mais populares equações do tipo Kozeny-Carman, as quais incluem as citadas aqui. Tais equações são mostradas na Tabela 1 que reproduz a tabela utilizada por Karimpouli e Tahmasebi (2017) para destacar as equações selecionadas por eles.

No presente trabalho, simulações numéricas de escoamentos miscíveis em meios porosos serão realizadas considerando-se meios homogêneos e também heterogêneos. Para meios homogêneos serão usados valores de k e ϕ típicos de reservatórios de petróleo, os quais são independentes de qualquer correlação *a priori*. Por outro lado, nas simulações de escoamentos em meios heterogêneos, a equação de Kozeny-Carman generalizada a três parâmetros proposta por Henderson, Brêttas e Sacco (2010) é o modelo adotado aqui. Tal generalização encontra-se entre as dez mais populares equações do tipo Kozeny-Carman selecionadas por Karimpouli e Tahmasebi (2017) (ver Tabela 1).

Assim, na Seção 2.3 é apresentada uma dedução dessa equação de Kozeny-Carman generalizada a três parâmetros, a qual é apropriada para a descrição de meios porosos de natureza fractal, sendo deduzida com ajuda de conceitos básicos da teoria de fractais, os quais são resumidos na Seção 2.2.

Tabela 1 - As dez mais populares equações do tipo Kozeny-Carman.

Eq. Permeabilidade	Meios	Referência
$K = \frac{d^2}{16c} \frac{\phi^3}{(1-\phi)^2}$	montagem têxtil	McGregor (1965)
$K = \frac{d^2}{180} \frac{\phi_{eff}^3}{(1-\phi_{eff})^2}$	areia shaly	Revil e Iii (1999)
$K = C\phi^n d^2$	meios porosos	Bourbié, Coussy e Zinszner (1987)
$K = \frac{\phi_{eff}^3}{c\Gamma^2 S^2}$	partículas quadradas	Koponen, Kataja e Timonen (1997)
$K = Cd^2 \frac{(\phi-\phi_c)^3}{(1+\phi_c-\phi)^2}$	carbonato de arenito	Mavko e Nur (1997)
$K = \frac{\phi r^2}{8\Gamma} \left(\frac{2\phi}{3\Gamma^2(1-\phi)} \right)^{\frac{2}{D-1}}$	arenito	Pape, Clauser e Iffland (2000)
$K = \frac{\phi^{n+1}}{C(1-\phi)^n}$	vidro e fibra	Shih e Lee (1998), Rodriguez et al.(2004)
$K = C \frac{\phi^n}{1-\phi}$	fibra e rocha vesicular	Costa (2006)
$K = C_f \delta_{max}^2 \left(\frac{\phi}{(1-\phi)} \right)^{\frac{1+D_t}{2}}$	meios porosos	Xu e Yu (2008) (Generalizada)
$\sqrt{\frac{K}{\phi}} = \xi \frac{\phi^{\frac{\zeta+2}{2}}}{(1-\phi)^\eta}$	meios porosos	Henderson et al.(2010) (Generalizada)

C fator de permeabilidade; ϕ_{eff} porosidade efetiva; Γ parâmetro de interconectividade; S área específica da superfície; ϕ_c limiar de percolação; r raio do grão; D_f dimensão fractal da área do poro; D_t dimensão fractal da tortuosidade; $C_f = \frac{(\pi D_f)^{\frac{1-D_t}{2}} [4(2-D_f)]^{\frac{1+D_t}{2}}}{128(3+D_t-D_f)}$ o coeficiente; ξ , ζ e η são coeficientes de compatibilidade com cada equação derivada de KC .

Fonte: Adaptada de Karimpouli e Tahmasebi (2017).

2.2 Conceitos Básicos da Teoria de Fractais

O comportamento de uma variedade de fenômenos complexos de interesse da ciência e tecnologia tem sido caracterizado usando-se conceitos da teoria de fractais, a qual aborda sistemas (ou objetos) com estruturas desordenadas que possuem simetria escalar, ou seja, mantêm uma forma semelhante quando observado sob diferentes escalas. Uma tal estrutura geométrica é chamada de auto-similar e o sistema (ou objeto) estudado é dito possuir geometria fractal, sendo, assim, denominado de fractal, (MANDÉLBROT, 1982). Deve-se enfatizar que um sistema pode ser um fractal apenas para um dado intervalo de valores escalares.

Se um sistema não é um fractal para qualquer intervalo de valores escalares, então diremos que ele é Euclidiano. Por exemplo, objetos geométricos como a reta, um quadrado e a esfera são Euclidianos, e suas efetivas dimensões são dadas por d , a dimensão do espaço no qual estão mergulhados.

A característica fundamental de um fractal é a sua dimensão fractal. Para defini-la, considere inicialmente o intervalo da reta dado por $[0, 1]$ e, sobre esse intervalo, uma grade constituída de subintervalos (denominados caixas da grade) de lados de comprimento iguais a $1/n$. Neste caso, observamos que existem n caixas unidimensionais não sobrepostas cobrindo totalmente o intervalo $[0, 1]$. Se tomarmos o intervalo $[0, 8]$, nota-

mos que dessa vez, para realizar a mesma tarefa, serão necessárias $8n$ caixas disjuntos de comprimento $1/n$. Assim, de forma geral, podemos dizer que o número de caixas unidimensionais (subintervalos) de comprimento r requerido para cobrir um intervalo da reta não é maior do que $C(1/r)$, em que C é uma constante que depende do comprimento do intervalo. Essa proporcionalidade é frequentemente expressada dizendo-se que o número de caixas de tamanho r está escalado por $1/r$. Isso significa que existem constantes C_1 e C_2 , que não dependem r , tal que o número de caixas encontra-se entre C_1/r e C_2/r .

Por outro lado, se considerarmos no plano um quadrado de lados unitários, dado por $[0, 1]^2 \equiv [0, 1] \times [0, 1]$, notamos que ele pode ser totalmente coberto por n^2 caixas bidimensionais não sobrepostas (subquadrados) com lados de comprimento $1/n$. Logo, observamos que, quantitativamente, esse exemplo difere do exemplo unidimensional anterior pelo aparecimento do expoente 2 na potência que representa o número de caixas. Qualquer retângulo no plano pode ser coberto por $C(1/r)^2$ caixas não sobrepostas de lados de tamanho r . De modo geral, existe uma constante C , tal que qualquer hiper-retângulo no espaço Euclidiano m -dimensional pode ser coberto por $C(1/r)^m$ caixas m -dimensionais (hiperquadrados) com lados de comprimento r .

Será denotado por $N(r)$ o número de caixas não sobrepostas de lados com comprimento r requeridas para cobrir um dado conjunto. Assim, diz-se que um conjunto limitado do espaço Euclidiano m -dimensional é um conjunto de dimensão d , se ele pode ser coberto por

$$N(r) = C(1/r)^d. \quad (24)$$

caixas de lados com comprimento r , para a algum r suficientemente pequeno. Observe que essa definição não exige que a dimensão d seja um número inteiro.

A relação descrita na Equação (24) é dita uma lei de escala. Resolvendo essa lei de escala em função de d , pode-se escrever

$$d = \frac{\ln N(r) - \ln C}{\ln(1/r)}. \quad (25)$$

Para r suficientemente pequeno, a contribuição do termo $\ln C$ pode ser negligenciada e a Equação (25) fica aproximada por

$$d = \frac{\ln N(r)}{\ln(1/r)}. \quad (26)$$

O exposto acima justifica a seguinte definição de dimensão fractal.

Definição 2.1 Se $N(r)$ é o número mínimo de caixas não sobrepostas requeridas

para cobrir totalmente um objeto fractal, então a dimensão fractal desse objeto é o número real D que satisfaz a seguinte equação

$$D = \lim_{r \rightarrow 0} \frac{\ln N(r)}{\ln(1/r)}, \quad (27)$$

quando esse limite existe. Em vista da Equação (24), a expressão que define a dimensão fractal (Equação (27)) pode ser escrita em uma forma típica, que caracteriza os sistemas fractais,

$$N(r) \sim r^{-D}. \quad (28)$$

Deve-se observar que a relação de proporcionalidade denotada por “ \sim ” na Equação (28) é assintótica, ou seja, é válida somente para $r > 0$ suficientemente pequeno.

Em geral, considera-se que propriedades fundamentais de um sistema fractal admitem representação através de leis de escalas (de natureza fractal) que possuem representações semelhantes àquela mostrada na Equação (28).

Definição 2.2 Se \mathcal{P} é uma propriedade fundamental de um sistema fractal, então existe $\delta > 0$, suficientemente pequeno, tal que \mathcal{P} pode ser escrito na forma

$$\mathcal{P} = C_{(\mathcal{P})} \delta^{-D_{(\mathcal{P})}}, \quad (29)$$

em que os escalares não negativos $C_{(\mathcal{P})}$ e $D_{(\mathcal{P})}$ são chamados, respectivamente, de coeficiente fractal e expoente fractal da propriedade \mathcal{P} .

2.3 Equação de Kozeny-Carman Generalizada a Três Parâmetros

Deve-se a Pfeifer e Avnir (1983) o trabalho pioneiro que utilizou argumentos fractais para estudar e caracterizar propriedades de meios porosos. Como vários materiais, incluindo rochas que constituem reservatórios de petróleo, apresentam estruturas fractais, o emprego dessa teoria ao estudo de meios porosos cresceu substancialmente em pouco tempo como discutido por (SAHIMI, 1995), por exemplo.

Para estabelecer a equação de Kozeny-Carman generalizada a três parâmetros, inicialmente será observado que a tortuosidade de meios porosos e a recíproca de sua superfície específica admitem descrições através de leis de escala da forma mostrada na Equação (29), de uma geometria de natureza fractal. Tais identificações fazem parte das contribuições de Henderson, Brêttas e Sacco (2010).

Considere um meio poroso de porosidade ϕ , constituído de um pacote de esferas de raios iguais a r . Suponha que o volume total desse pacote de esferas é V_t . Se, inicialmente, o pacote só contém uma esfera, então o volume dessa esfera é igual a $(1 - \phi)V_t$. Dai segue que $V_t = (4/3)\phi r^3/(1 - \phi)$. Nesse caso, a área da superfície intersticial total é $A_s = 4\phi r^2$. Portanto, para esse exemplo simples, a superfície específica $M_b = A_s/V_t$ (área da superfície intersticial total por unidade de volume total) é

$$M_b = \frac{3}{r}(1 - \phi). \quad (30)$$

Assim, para um caso um pouco mais geral, onde o pacote de esfera possui N esferas idênticas, pode-se escrever

$$M_b = \frac{3N}{r}(1 - \phi). \quad (31)$$

Em seguida, considerando um exemplo mostrado por Bear (1972), suponha que o meio poroso de porosidade ϕ é um material granular consistindo de uma mistura de m frações, em que a fração granular i ($= 1, \dots, m$) é constituída de N_i esferas idênticas de raios iguais a r_i . Nesse caso, tem-se que $A_s = \sum_{i=1}^m 4\pi r_i^2 N_i$ e $V_t = [\sum_{i=1}^m (4/3)\pi r_i^3 N_i]/(1 - \phi)$. Portanto, para esse material granular a superfície específica ($M_b = A_s/V_t$) é dada por

$$M_b = 3(1 - \phi) \sum_{i=1}^m (f_i/r_i), \quad (32)$$

no qual a quantidade

$$f_i = \frac{4/3\phi r_i^3 N_i}{\sum_{i=1}^m 4/3\phi r_i^3 N_i}, \quad (33)$$

é a fração volumétrica da i -ésima fração granular.

Assim, a Equação (32), pode ser escrita na seguinte forma simplificada

$$M_b = \frac{3}{\tilde{r}}(1 - \phi) \quad (34)$$

em que

$$\tilde{r} = \frac{1}{\sum_{i=1}^m f_i/r_i} \quad (35)$$

é a média harmônica dos raios das esferas.

De uma maneira mais geral, as relações ilustradas nas Equações (30), (31) e (34) sugerem a existência de meios porosos fractais, onde a recíproca da superfície específica satisfaz uma lei de escala semelhante aquela mostrada na Equação (29), com a forma

$$\frac{1}{M_b} = C_{(1/M_b)}(1 - \phi)^{-D_{(1/M_b)}}, \quad (36)$$

em que $C_{(1/M_b)}$ e $D_{(1/M_b)}$ são respectivamente, o coeficiente fractal e a dimensão fractal associados com a recíproca da superfície específica do meio poroso.

Por outro lado, para meios porosos de interesse prático, observa-se que informações experimentais têm mostrado que a tortuosidade está relacionada com a porosidade através de leis de potência. De fato, Liu e Masliyah (1996b), Liu e Masliyah (1996a) recomendam a correlação

$$\tau = \phi^{-0,5} \quad (37)$$

para meios com porosidade $\phi > 0,2$, constituídos de pacotes com grãos de formatos aleatórios. Para meios porosos consolidados com $\phi < 0,45$, esses mesmos autores recomendam a chamada equação de Humble,

$$\tau = \frac{1}{1,61} \phi^{-1,15}. \quad (38)$$

As Equações (37) e (38) sugerem a existência de meios porosos fractais, em que a tortuosidade satisfaz uma lei de escala similar aquela mostrada na Equação (29), resumida pela relação

$$\tau = C_{(\tau)} \phi^{-D_{(\tau)}}, \quad (39)$$

em que $C_{(\tau)}$ e $D_{(\tau)}$ são, respectivamente, o coeficiente fractal e a dimensão fractal relacionados com a tortuosidade.

Para deduzir a equação de Kozeny-Carman generalizada a três parâmetros, considere-se as seguintes hipóteses:

- (i) A natureza do meio poroso é fractal.
- (ii) A recíproca da superfície específica e a tortuosidade do meio porosos satisfazem, respectivamente, as relações mostradas nas Equação (36) e (38).
- (iii) O meio poroso é idealizado como um feixe de n tubos capilares tortuosos.

(iv) Seguindo Bear (1972), considera-se que o raio hidráulico (médio) dos tubos capilares, definido por $R_h = D_h/2$, é determinado pela razão entre a porosidade e a superfície específica do material poroso, ou seja,

$$R_h = \frac{\phi}{M_b}. \quad (40)$$

(v) Os tubos capilares não são necessariamente circulares, de tal forma que a vazão no meio poroso satisfaz uma generalização da equação de Hagen-Poiseuille, dada por

$$q = n f_v \frac{R_h^4}{\mu}, \quad (41)$$

em que L_h é o comprimento (médio) das tortuosidades e f_v é um fator de forma relacionado com o volume dos canais hidráulicos tortuosos, não necessariamente circulares.

Comparando a Equação (41) com a lei de Darcy (Equação (13)) e usando a definição de tortuosidade ($\tau = L_h/L$), pode-se escrever

$$\frac{A}{R_h^2} k \tau = n f_v R_h^2, \quad (42)$$

Semelhante à Equação (16), considera-se que a área da seção transversal do material poroso aberta para o escoamento (A_p) está relacionada com a área da seção transversal molhada (total) pela expressão

$$A_p = A \phi = n f_s R_h^2, \quad (43)$$

onde na Equação (43) f_s é um fator de forma relacionado com a área da seção transversal de um canal tortuoso. Assim, da Equação (43) pode-se escrever

$$\frac{A}{R_h^2} = \frac{n f_v}{\phi}. \quad (44)$$

A partir das Equações (42) e (44), obtém-se

$$\frac{A}{R_h^2} = \frac{k}{\phi} \tau \frac{f_s}{f_v}. \quad (45)$$

A Equação (45) pode ser escrita como

$$R_h = f\tau^{1/2} \sqrt{\frac{k}{\phi}}. \quad (46)$$

em que $f = \sqrt{f_s/f_v}$.

Substituindo-se a Equação (40) no lado esquerdo da Equação (46), pode-se escrever

$$\sqrt{\frac{k}{\phi}} = \frac{\phi}{f} \tau^{-1/2} \frac{1}{M_b}. \quad (47)$$

Substituímos as Equações (36) e (39) na Equação (47), obtém-se

$$\sqrt{\frac{k}{\phi}} = \frac{C_{(\tau)}^{-1/2} C_{(1/M_b)}}{f} \frac{\phi^{(D_{\tau}+2)/2}}{(1-\phi)^{D_{(1/M_b)}}}. \quad (48)$$

Fazendo $\varsigma = D_{(\tau)}$, $\eta = D_{(1/M_b)}$ $\xi = C_{(\tau)}^{-1/2} C_{(1/M_b)}/f$, chega-se, a partir da Equação (48), ao resultado procurado, ou seja, obtém-se a equação de Kozeny-Carman generalizada a três parâmetros não negativos, ζ , η e ξ dada por

$$\sqrt{\frac{k}{\phi}} = \xi \frac{\phi^{(\zeta+2)/2}}{(1-\phi)^{\eta}}. \quad (49)$$

A fim de explicitar a permeabilidade em função da porosidade, a equação de Kozeny-Carman generalizada a três parâmetros será escrita na seguinte forma equivalente:

$$k = \xi^2 \frac{\phi^{(\zeta+3)}}{(1-\phi)^{2\eta}}. \quad (50)$$

Note que na Equação (50) os parâmetros ζ e η são adimensionais, enquanto que ξ possui dimensão de comprimento, uma vez que k tem dimensão de comprimento ao quadrado (COLLINS, 1961).

Fazendo-se na Equação (50) $\xi^2 = c$, $\zeta = 0$ e $\eta = 1$ recupera-se a forma da equação de Kozeny-Carman mostrada na Equação (23), onde agora pode ocorrer $c = \xi^2 = 0$.

Assim, a expressão resumida na Equação (50) representa de fato uma generalização da equação de Kozeny-Carman, sendo desenvolvida para caracterizar meios porosos que satisfazem as leis de escala consideradas nas Equações (36) e (39).

Na realidade, a Equação (50) generaliza uma grande família de equações (existentes

na literatura) do tipo Kozeny-Carman, incluído aquelas mostradas na Tabela 1, como discutido em Henderson, Brêttas e Sacco (2010).

Como mostrado por Henderson, Brêttas e Sacco (2010), ζ , η e ξ podem ser determinados utilizando-se técnicas numéricas de estimação de parâmetros, as quais exigem dados de permeabilidade versus porosidade do meio poroso que se quer efetivamente caracterizar empregando-se a Equação (50).

3 MODELAGEM DO ESCOAMENTO MISCÍVEL EM MEIOS POROSOS

3.1 Equações governantes do escoamento multicomponente

Neste capítulo descreveremos as equações diferenciais que modelam o problema do escoamento miscível em meios porosos.

Inicialmente, consideraremos um fluido multicomponente constituído de n_c espécies químicas. Suporemos que tal mistura desloca-se no interior de um meio poroso de porosidade ϕ e permeabilidade k , e que esse escoamento ocorre em condições de completa miscibilidade. Isso significa que em qualquer posição do meio poroso a mistura fluida não mostra interfaces, se apresentando durante todo tempo como um fluido monofásico.

Denotando por c_i a densidade mássica (também chamada de concentração) da espécie $i = 1, \dots, n_c$, a qual tem dimensão de massa da espécie i por unidade de volume. A equação de conservação de massa desse componente químico presente na mistura pode ser escrita na forma

$$\frac{\partial(\phi c_i)}{\partial t} + \nabla \cdot (c_i \mathbf{u}_i) = q_i, \text{ para todo } i = 1, \dots, n_c. \quad (51)$$

Na Equação (51), t representa o tempo e q_i é a taxa de extração ou de injeção da espécie i no meio poroso, a qual tem dimensão de massa desse componente por unidade de volume, por unidade de tempo. O vetor \mathbf{u}_i denota o campo de velocidades do corpo fluido constituído somente pela espécie química i , (BEAR, 1972).

Seja \mathbf{u} o vetor que representa a velocidade do fluido (mistura multicomponente) no meio poroso. Suporemos que essa velocidade pode ser descrita pela lei de Darcy (BEAR, 1972)

$$\mathbf{u} = -\frac{k}{\mu} \nabla P, \quad (52)$$

onde na Equação (52) P representa a pressão e μ denota a viscosidade da mistura. Na descrição da Equação (52) desprezamos os efeitos de gravidade, procedimento típico de escoamentos horizontais de interesse no presente trabalho.

Usando a velocidade da mistura, podemos escrever a Equação (51) na seguinte forma equivalente

$$\frac{\partial(\phi c_i)}{\partial t} + \nabla \cdot (c_i \mathbf{u}) + \nabla [c_i (\mathbf{u}_i - \mathbf{u})] = q_i. \quad (53)$$

Em seguida, consideraremos o vetor \mathbf{J}_i definido por

$$\mathbf{J}_i = c_i(\mathbf{u}_i - \mathbf{u}), \text{ para todo } i = 1, \dots, n_c, \quad (54)$$

o qual é denominado de vetor do fluxo difusivo da espécie i . Tal fluxo está associado ao fenômeno de difusão de massa desse componente ao longo do meio poroso preenchido pela mistura multicomponente, (BEAR, 1972).

Combinando-se as Equações (53) e (54), obtemos a equação de conservação de massa da espécie i na forma

$$\frac{\partial(\phi c_i)}{\partial t} + \nabla \cdot (c_i \mathbf{u}) + \nabla \cdot (\mathbf{J}_i) = q_i, \text{ para todo } i = 1, n_c. \quad (55)$$

Como enfatizado por Bird, Stewart e Lightfoot (1960), a equação de conservação de massa de uma espécie química em uma mistura pode ser escrita em termos da sua fração mássica.

Para obter essa descrição, considere inicialmente ρ , a densidade mássica total da mistura, definida como

$$\rho = \sum_{i=1}^{n_c} c_i. \quad (56)$$

Em seguida, seja ω_i a fração mássica do componente i na mistura multicomponente, dada por

$$\omega_i = \frac{c_i}{\sum_{i=1}^{n_c} c_i}. \quad (57)$$

Note que a fração mássica ω_i referida na Equação (57) é uma quantidade adimensional, ou seja, um número entre 0 e 1 que essencialmente expressa o percentual de massa da espécie i na mistura.

Finalmente, combinando-se as Equações (55) e (57), obtemos a equação de conservação de massa do componente i descrita em função de ω_i ,

$$\frac{\partial(\phi \rho \omega_i)}{\partial t} + \nabla \cdot (\rho \omega_i \mathbf{u}) + \nabla \cdot J_i = q_i, \text{ para todo } i = 1, n_c. \quad (58)$$

Na modelagem de escoamentos multicomponente em meios porosos, é útil conside-

rar uma equação que forneça o balanço total de massa da mistura. Tal equação pode ser obtida simplesmente somando-se ambos os lados da Equação (58) com relação ao índice i . Assim, notando-se que

$$\sum_{i=1}^{n_c} \omega_i = 1 \quad (59)$$

a partir da referida soma obtemos

$$\frac{\partial(\phi\rho)}{\partial t} + \nabla \cdot (\rho\mathbf{u}) + \nabla \cdot \left(\sum_{i=1}^{n_c} \mathbf{J}_i \right) = q, \quad (60)$$

onde na Equação (60) q , dado por

$$q = \sum_{i=1}^{n_c} q_i, \quad (61)$$

é a taxa total de massa da mistura extraída ou injetada no meio poroso.

Segundo Bird, Stewart e Lightfoot (1960), é possível supor que a velocidade \mathbf{u} (dada pela lei de Darcy, Equação (52)) coincide com a velocidade do centro de massa da mistura, ou seja,

$$\mathbf{u} \equiv \frac{\sum_{i=1}^{n_c} c_i \mathbf{u}_i}{\sum_{i=1}^{n_c} c_i} = \frac{\sum_{i=1}^{n_c} c_i \mathbf{u}_i}{\rho}. \quad (62)$$

Por outro lado, tendo-se em vista a Equação (56), somando-se ambos os lados da Equação (54) com relação a i , obtemos

$$\sum_{i=1}^{n_c} \mathbf{J}_i = \sum_{i=1}^{n_c} c_i \mathbf{u}_i - \rho \mathbf{u}. \quad (63)$$

Logo, combinando-se as Equações (62) e (63), chega-se à relação entre os fluxos difusivos de cada espécie na mistura,

$$\sum_{i=1}^{n_c} \mathbf{J}_i = 0. \quad (64)$$

Considerando a relação descrita na Equação (64), a equação que descreve o balanço

total de massa total da mistura (Equação (60)) é possível escrever

$$\frac{\partial(\phi\rho)}{\partial t} + \nabla \cdot (\rho\mathbf{u}) = q. \quad (65)$$

Note que a Equação (65) juntamente com os n_c balanços de massa descritos na Equação (58) formam um conjunto de equações dependentes. Portanto, para efeito de solução, a utilização da Equação (65) requer a exclusão de uma das equações de balanço de massa das espécies químicas indicadas na Equação (58).

3.2 Um modelo para injeção de solvente em reservatórios de petróleo

Nesta seção, as equações apresentadas na Seção 3.1 serão usadas como o ponto de partida para descrever as equações de um modelo miscível empregado em simulação de reservatórios. Esse modelo (objeto central do presente estudo) é comumente usado para simular o processo de recuperação de petróleo decorrente da injeção de um solvente em um reservatório de óleo.

Para efeito de simplificação, pressupõe-se que o óleo residente no reservatório é constituído de apenas uma espécie química, a qual será denominada simplesmente de óleo. Esse, possivelmente muito viscoso, fará o papel do soluto em um mistura binária do tipo solvente-soluto, que por hipótese é totalmente miscível ao longo do escoamento no meio poroso.

Basicamente, o modelo referido acima pode ser formulado utilizando a equação que descreve a conservação de massa do solvente e a equação de conservação de massa total da mistura binária (solvente-óleo), juntamente com Lei de Darcy. Aqui, essas equações do chamado modelo miscível serão resumidas como seguem:

$$\frac{\partial(\phi\rho\omega)}{\partial t} + \nabla \cdot (\rho\omega\mathbf{u}) + \nabla\mathbf{J} = \omega q, \quad (66)$$

$$\frac{\partial(\phi\rho)}{\partial t} + \nabla \cdot (\rho\mathbf{u}) = q \quad (67)$$

e

$$\mathbf{u} = -\frac{k}{\mu}\nabla P. \quad (68)$$

A Equação (66) descreve o balanço de massa do solvente, onde na Equação (66) ω e \mathbf{J} denotam a fração mássica e o vetor do fluxo difusivo do solvente, respectivamente. Nesta equação de balanço de massa, consideramos que a taxa de injeção (ou eventualmente de extração) de solvente no meio poroso é dada pela quantidade ωq , a qual representa um percentual da taxa total do fluido injetado (ou extraído) no reservatório, proporcional à fração mássica do solvente presente no local. Como antes, a Equação (67) modela o balanço de massa total do fluido miscível, constituído pelas espécies químicas denominadas de solvente e óleo, e a Equação (68) resume a lei de Darcy para escoamentos monofásicos, com a ausência do termo de gravidade, onde se supõe que a viscosidade da mistura é uma função da fração mássica do solvente, isto é, $\mu = \mu(\omega)$.

Para completar a formulação, se faz necessário uma relação para \mathbf{J} , a fim de modelar o fenômeno de difusão de massa do solvente no escoamento que ocorre no interior do meio poroso. E, é requerida uma equação de estado para ρ , a massa específica do fluido binário e, finalmente, um modelo apropriado para representar a maneira pela qual a viscosidade da mistura varia com relação à fração molar do solvente.

A densidade da mistura será descrita por uma equação de estado que satisfaz uma relação simples, dada por

$$\beta_T = \frac{1}{\rho} \frac{\partial \rho}{\partial P}, \quad (69)$$

onde na Equação (69) β_T (chamada compressibilidade isotérmica do fluido) é supostamente constante.

Assim, supondo que ρ depende somente da pressão, podemos integrar a Equação (69) entre dois estados, obtendo-se a seguinte equação de estado:

$$\rho(P) = \rho_r \times \exp[\beta_T(P - P_r)], \quad (70)$$

Na Equação (70), P_r denota a pressão da mistura em um dado estado de referência e ρ_r é o valor da massa específica do fluido nesse mesmo estado, ou seja, $\rho_r = \rho(P_r)$.

A viscosidade da mistura binária será modelada pela correlação empírica proposta por Todd, Longstaff et al. (1972),

$$\mu(\omega) = \frac{\mu_o}{\left[(1 - \omega) + \omega M^{\frac{1}{4}} \right]^4}. \quad (71)$$

Na Equação (71), o parâmetro M (chamado de razão de viscosidades ou razão de

mobilidade) é dado por

$$M = \frac{\mu_o}{\mu_s}, \quad (72)$$

onde na Equação (72) μ_s é a viscosidade do solvente injetado e μ_o é a viscosidade do óleo residente. A partir da Equação (72), notamos que $\mu(\omega) = \mu_o$, se $\omega = 0$ e $\mu(\omega) = \mu_s$, se $\omega = 1$.

A razão de viscosidade tem um papel importante no processo de recuperação de óleo, pois determina o padrão do escoamento miscível no reservatório de petróleo. Assim, um óleo residente com um valor de viscosidade relativamente elevado deve contribuir para uma razão de viscosidade $M > 1$, o que dificultará a mobilidade do óleo no meio poroso (TARDY; PEARSON, 2006).

Para descrever o vetor do fluxo difusivo do solvente mostrado na Equação (66), o modelo clássico usado na modelagem de escoamentos miscíveis em reservatórios de petróleo emprega uma lei de Fick generalizada, escrita na forma

$$\mathbf{J} = -\rho \mathbf{D} \nabla \omega. \quad (73)$$

na Equação (73) o termo \mathbf{D} representa um tensor de segunda ordem, denominado de tensor de difusão-dispersão do solvente na mistura (solvente-óleo) em meios porosos.

Em escoamentos miscíveis em reservatórios de petróleo, experiências mostram que o solvente injetado se espalha como uma espécie de traçador, procurando sempre ocupar uma porção cada vez maior do domínio poroso. Esse fenômeno de espalhamento de massa é denominado, de forma geral, de dispersão hidrodinâmica em meios porosos. A modelagem dessa dispersão hidrodinâmica é baseada em uma descrição macroscópica do que efetivamente acontece quando as partículas de um traçador individualmente percorrem o interior da estrutura porosa, submetidas a vários fenômenos de origem física e química, que ocorrem na escala dos poros. Nesse contexto, devemos observar (i) a ação de forças externas, (ii) a intrincada geometria do sistema de poros, (iii) variações nas propriedades do fluido, tal como a viscosidade da mistura, (iv) difusão molecular causada pelo gradiente da fração mássica do traçador, (v) interação entre o fluido e a fase sólida, etc. (BEAR, 1972).

Para efeito de modelagem e simulação, considera-se que a dispersão hidrodinâmica é essencialmente dominada por dois aspectos físicos, a difusão molecular e fenômenos puramente advectivos. Esses últimos incluem os efeitos do complicado sistema de passagens interconectadas que constituem os canais no meio poroso, os quais causam a subdivisão da massa do traçador ao longo das extremidades de bifurcações, muitas vezes agudas.

Tal fato provoca uma substancial variação na velocidade local do escoamento, tanto em magnitude como em direção, ao longo dos caminhos tortuosos disponíveis para o fluido escoar, colaborando ainda mais para o efetivo espalhamento de massa e para a ocupação do traçador no interior da matriz porosa. Esses fenômenos hidrodinâmicos, de caráter advectivo, são modelados usando-se um termo que se costuma denominar de dispersão mecânica.

Peaceman (1986), o modelo usado aqui postula que o tensor de difusão-dispersão é a soma duas parcelas,

$$\mathbf{D} = \mathbf{D}_{mol} + \mathbf{D}_{mec} \quad (74)$$

A primeira parcela refere-se à difusão molecular, a qual é dada por

$$\mathbf{D}_{mol} = \phi d_M \mathbf{I} \quad (75)$$

onde na Equação (75) o escalar d_M (o qual tem dimensão de área por unidade de tempo) é o coeficiente de difusão molecular do solvente no fluido e I é a matriz identidade.

A segunda parcela, que modela o fenômeno de dispersão mecânica, possui a forma

$$\mathbf{D}_{mec} = |\mathbf{u}| (\alpha_L \mathbf{E}(\mathbf{u}) + \alpha_T \mathbf{E}^\perp(\mathbf{u})) \quad (76)$$

Tal relação indica que o tensor de dispersão mecânica \mathbf{D}_{mec} depende da magnitude da velocidade de Darcy, sendo também função dos parâmetros α_L e α_T , denominados de coeficiente de dispersão longitudinal e coeficiente de dispersão transversal, respectivamente, os quais são números positivos possuindo dimensão de comprimento. Para um campo de velocidades bidimensional do tipo $\mathbf{u} = u_1 \mathbf{i} + u_2 \mathbf{j}$ (onde \mathbf{i} e \mathbf{j} são os vetores unitários nas direções dos eixos coordenados x e y , respectivamente), os tensores $\mathbf{E} = \mathbf{E}(\mathbf{u})$ e $\mathbf{E}^\perp = \mathbf{E}^\perp(\mathbf{u})$ são definidos por

$$\left\{ \begin{array}{l} E_{i,j} = \frac{1}{|u|^2} u_i u_j, \text{ para todo } i, j = 1, 2 \\ \mathbf{E}^\perp = I - \mathbf{E}. \end{array} \right. \quad (77)$$

Combinando-se as Equações (74) - (77), podemos escrever o tensor de difusão-

dispersão na seguinte forma matricial:

$$\begin{pmatrix} D_{11} & D_{12} \\ D_{21} & D_{22} \end{pmatrix} = \phi d_M \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1 \end{pmatrix} + \alpha_T \sqrt{u_1^2 + u_2^2} \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1 \end{pmatrix} + \frac{(\alpha_L - \alpha_T)}{\sqrt{u_1^2 + u_2^2}} \begin{pmatrix} u_1^2 & u_1 u_2 \\ u_1 u_2 & u_2^2 \end{pmatrix} \quad (78)$$

e pela Equação (68), temos que

$$\begin{cases} u_1 = -\frac{k}{\mu(\omega)} \frac{\partial P}{\partial x}, \\ u_2 = -\frac{k}{\mu(\omega)} \frac{\partial P}{\partial y}. \end{cases} \quad (79)$$

Agora, de forma resumida, podemos reescrever a Equação (66) como

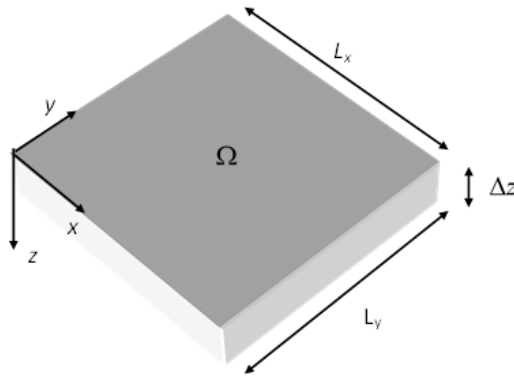
$$\frac{\partial(\phi\rho\omega)}{\partial t} + \nabla \cdot (\rho\omega\mathbf{u}) - \nabla \cdot (\rho\mathbf{D}\nabla\omega) = \omega q. \quad (80)$$

Considerando que o valor de \mathbf{u} na Equação (68) pode ser substituído diretamente nas Equações (67) e (80), notamos que as equações diferenciais do modelo miscível descrito na presente seção formam essencialmente um sistema de duas equações diferenciais parciais com duas variáveis, dadas pelas funções P e ω , que dependem da posição e do tempo. Para finalizar a descrição matemática do problema modelado por essas duas equações diferenciais parciais, é necessário descrever o domínio de interesse, o qual está associado com o meio poroso que constitui o reservatório de petróleo. Além disso, são também necessárias as especificações das condições iniciais e de contorno relativas ao problema tratado aqui. Conforme a Figura 4, consideramos que o reservatório de petróleo é um domínio retangular denotado por Ω , que se encontra em uma posição horizontal, em que L_x e L_y são as magnitudes dos lados desse domínio, medidas nas direções dos eixos coordenados x e y , respectivamente.

Conforme a Figura 4, suporemos também a geometria do meio poroso é essencialmente bidimensional. Na prática, isso significa que a espessura Δz é muito pequena, quando comparada com as medidas de L_x e L_y . Assim, o campo de velocidades e a pressão da mistura, juntamente com a concentração do solvente, serão tratados como funções apenas das variáveis x e y , além da variável t que denota o tempo.

Para a Equação (80) usa-se uma condição de contorno a qual indica que o fluxo total de massa do solvente é nulo na fronteira do reservatório. Assim, denotando por $\partial\Omega$ a fronteira de Ω e por \mathbf{n} o vetor unitário normal à $\partial\Omega$, essa condição de contorno pode

Figura 4 - A geometria do meio poroso



Fonte: FLORES, 2003.

ser escrita na seguinte forma

$$(\rho\omega\mathbf{u} - \rho\mathbf{D}\nabla\omega) \cdot \mathbf{n} = 0, \quad \partial\Omega, \quad \text{para todo } t \geq 0, \quad (81)$$

em que o símbolo (\cdot) representa o produto escalar entre dois vetores.

De forma semelhante, a condição de contorno empregada na resolução da Equação (67) descreve a ausência do fluxo de massa total da mistura (solvente-óleo) na fronteira do reservatório:

$$\rho\mathbf{u} \cdot \mathbf{n} = 0, \quad \text{em } \partial\Omega, \quad \text{para todo } t \geq 0. \quad (82)$$

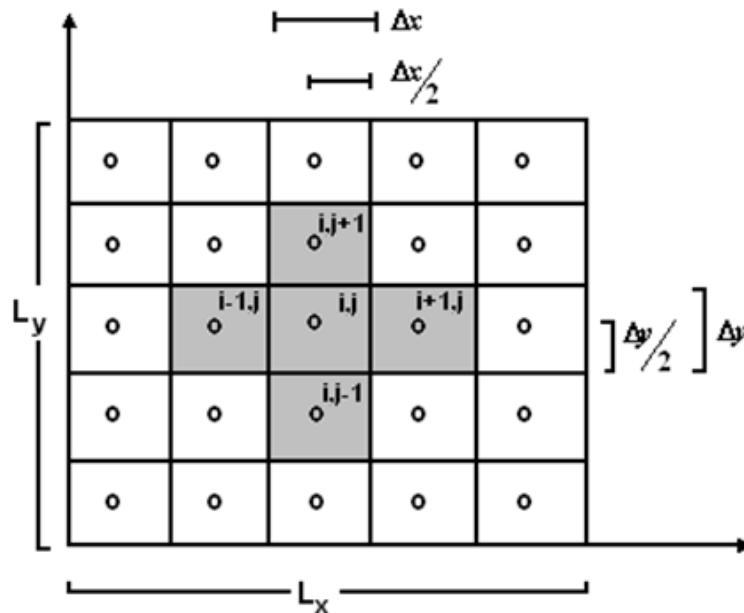
Como condições iniciais, suporemos que no instante inicial a pressão do fluido e a fração mássica do solvente são conhecidas em todos os pontos do domínio Ω .

4 DISCRETIZAÇÃO DAS EQUAÇÕES DO MODELO

4.1 Malhas numéricas

Como mostrado na Figura 5, o domínio espacial $\Omega = [0, L_x] \times [0, L_y]$ será discretizado utilizando uma malha de blocos centrados, denotada por $\hat{\Omega} = \{(x_i, y_i) \in \mathbb{R}^2; i, \dots, n_x \text{ e } j = 1, \dots, n_y\}$, de modo que $x_i = (i - 1/2)\Delta x$, para todo $i = 1, \dots, n_x$, com $\Delta x = L_x/n_x$ e $y_i = (j - 1/2)\Delta y$, para todo $j = 1, \dots, n_y$, com $\Delta y = L_y/n_y$.

Figura 5 - A malha de blocos centrados.



Fonte: HENDERSON; SAMPAIO; PENA, 2011.

Cada ponto $(x_i, y_i) \in \hat{\Omega}$ representará um nó da malha $\hat{\Omega}$, onde os valores das funções incógnitas do problema em questão serão efetivamente calculados. O conjunto $\hat{\Omega}_{ij} = [x_{i+\frac{1}{2}}, x_{i-\frac{1}{2}}] \times [y_{j+\frac{1}{2}}, y_{j-\frac{1}{2}}]$ é chamado o bloco ij (ou célula ij) da malha $\hat{\Omega}$, cujo centro (ou nó) é representado pelo ponto (x_i, y_j) . Assim, observe que $x_{i+\frac{1}{2}} = x_i + \frac{\Delta x}{2}$, $y_{j+\frac{1}{2}} = y_j + \frac{\Delta y}{2}$, etc.

A escolha dos números inteiros n_x e n_y define as quantidades de blocos na grade espacial, nas respectivas direções x e y . Dessa forma, dados n_x e n_y , tem-se um total de $n_x \times n_y$ blocos de discretização.

O domínio temporal será representado pelo intervalo fechado $[t_0, t_f]$, onde t_f denotará o instante final e t_0 o instante inicial, considerado como sendo o tempo zero. Esse intervalo será particionado na forma $0 = t_0 < t_1 < \dots < t_n < \dots < t_{n_t} = t_f$, dando origem a uma grade temporal. Aqui, n_t representará um dado número inteiro que define

a quantidade de níveis de tempo utilizados. Assim, pode-se escrever $[t_0, t_f] = \bigcup_{n=1}^{n_t} I_n$, em que $I_n = [t_{n-1}, t_n]$, para todo $n = 1, \dots, n_t$. Cada subintervalo de tempo $[t_{n-1}, t_n]$ terá comprimento uniforme, denotado por $\Delta t = t_n - t_{n-1}$.

O valor $f(x_i, y_j, t_n)$, de uma dada função f em um ponto (x_i, y_j) da grade $\hat{\Omega}$, em certo nível de tempo t_n , será representado por $f_{i,j}^n$.

4.2 Esquema de Desacoplamento

Substituindo-se a Equação (52) na Equação (65), obtemos a chamada equação da pressão, a qual para o nó de um bloco $\hat{\Omega}_{i,j}$ toma a seguinte forma,

$$\phi \left[\frac{\partial \rho(P)}{\partial t} \right]_{i,j} - \left[\frac{\partial}{\partial x} \left(\frac{\rho(P)k}{\mu(\omega)} \frac{\partial P}{\partial x} \right) \right]_{i,j} - \left[\frac{\partial}{\partial y} \left(\frac{\rho(P)k}{\mu(\omega)} \frac{\partial P}{\partial y} \right) \right]_{i,j} - q_{i,j} = 0. \quad (83)$$

De maneira análoga, substituindo a Equação (52) na Equação (80), obtemos a equação da fração mássica, que para o nó de um bloco $\hat{\Omega}_{i,j}$ pode ser escrita como:

$$\phi \left[\frac{\partial (\rho(P)\omega)}{\partial t} \right]_{i,j} + \left(\frac{\partial F_x}{\partial x} \right)_{i,j} + \left(\frac{\partial F_y}{\partial y} \right)_{i,j} - \omega_{i,j} q_{i,j} = 0, \quad (84)$$

onde na Equação (84) F_x e F_y são os fluxos totais nas, respectivas, direções x e y , dados por:

$$F_x = -\omega \frac{\rho(P)k}{\mu(\omega)} \frac{\partial P}{\partial x} - \rho D_{11} \frac{\partial \omega}{\partial x} - \rho D_{12} \frac{\partial \omega}{\partial y} \quad (85)$$

$$F_y = -\omega \frac{\rho(P)k}{\mu(\omega)} \frac{\partial P}{\partial y} - \rho D_{21} \frac{\partial \omega}{\partial x} - \rho D_{22} \frac{\partial \omega}{\partial y} \quad (86)$$

As evoluções temporais das soluções numéricas das equações acima serão feitas de forma iterativa, usando-se incrementos de passos de tempo iguais a Δt . Esse processo iterativo será a chave para desacoplar as equações do modelo miscível, facilitando sua resolução numérica. Isso será feito a partir de um procedimento de separação de operadores semelhante ao esquema conhecido como IMPES, descrito em detalhes no livro de Aziz e Settari (1979), por exemplo. Tal procedimento de desacoplamento é resumido no Algoritmo 1.

Algoritmo 1 - Desacoplamento

DOCUMENTAÇÃO

TÍTULO

Desacoplamento

ENTRADAS

$P_{i,j}^0$ e $\omega_{i,j}^0$

declarar n **Inteiro** ($n = 0$)

declarar i **Inteiro** ($i = 1, \dots, n_x$)

declarar j **Inteiro** ($j = 1, \dots, n_y$)

..... {Passo 1}
 Utilizados os valores $P_{i,j}^n$ e $\omega_{i,j}^n, \forall i = 1, \dots, n_x$ e $j = 1, \dots, n_y$, resolva a Equação (83)
 a fim de obter $P_{i,j}^{n+1}, \forall i = 1, \dots, n_x$ e $j = 1, \dots, n_y$.

..... {Passo 2}
 Utilizados os valores $P_{i,j}^n, \omega_{i,j}^n$ e $P_{i,j}^{n+1}, \forall i = 1, \dots, n_x$ e $ter j = 1, \dots, n_y$, resolva a
 Equação (84) a fim de obter $\omega_{i,j}^{n+1}, \forall i = 1, \dots, n_x$ e $j = 1, \dots, n_y$.

..... {Passo 3}
enquanto ($n \neq n_f$), **fazer**
 | $n = n + 1$ e voltar para o Passo 1

fim enquanto

FIM ALGORITMO

FIM DOCUMENTAÇÃO

4.3 Discretização da Equação da Pressão

Para a realização do Passo 2 do Algoritmo 1, consideraremos a equação da pressão (Equação (83)) discretizada implicitamente no tempo, uma equação diferencial parcial parabólica de segunda ordem, com relação a P , mas com valores de ω obtidos em um nível de tempo passado,

$$\phi \frac{\rho_{i,j}(P^{n+1}) - \rho_{i,j}(P^n)}{\Delta t} - \left[\frac{\partial}{\partial x} \left(\frac{\rho(P^{n+1})k}{\mu(\omega^n)} \frac{\partial P^{n+1}}{\partial x} \right) \right]_{i,j} - \left[\frac{\partial}{\partial y} \left(\frac{\rho(P^{n+1})k}{\mu(\omega^n)} \frac{\partial P^{n+1}}{\partial y} \right) \right]_{i,j} - q_{i,j}^n = 0 \quad (87)$$

Para efetuar a discretização espacial, as derivadas parciais indicadas na Equação

(87) são aproximadas por diferenças finitas centradas, dadas por

$$\begin{aligned} & \phi \frac{\rho_{i,j}(P^{n+1}) - \rho_{i,j}(P^n)}{\Delta t} - \frac{1}{\Delta x} \left[\left(\frac{\rho(P^{n+1})k}{\mu(\omega^n)} \frac{\partial P^{n+1}}{\partial x} \right) \right]_{i+\frac{1}{2},j} - \left[\left(\frac{\rho(P^{n+1})k}{\mu(\omega^n)} \frac{\partial P^{n+1}}{\partial x} \right) \right]_{i-\frac{1}{2},j} \\ & - \frac{1}{\Delta y} \left[\left(\frac{\rho(P^{n+1})k}{\mu(\omega^n)} \frac{\partial P^{n+1}}{\partial y} \right) \right]_{i,j+\frac{1}{2}} - \left[\left(\frac{\rho(P^{n+1})k}{\mu(\omega^n)} \frac{\partial P^{n+1}}{\partial y} \right) \right]_{i,j-\frac{1}{2}} - q_{i,j}^n = 0 \end{aligned} \quad (88)$$

As condições de contorno indicadas na Equação (82) nos permitem considerar as seguintes condições nas faces dos blocos de fronteira, as quais ocorrem para todos os níveis de tempo:

$$\left\{ \begin{array}{l} \left[\frac{\rho(P^{n+1})k}{\mu(\omega^n)} \frac{\partial P^{n+1}}{\partial x} \right]_{i+\frac{1}{2},j} = 0, \text{ se } i = n_x, \\ \left[\frac{\rho(P^{n+1})k}{\mu(\omega^n)} \frac{\partial P^{n+1}}{\partial x} \right]_{i-\frac{1}{2},j} = 0, \text{ se } i = 1, \\ \left[\frac{\rho(P^{n+1})k}{\mu(\omega^n)} \frac{\partial P^{n+1}}{\partial y} \right]_{i,j+\frac{1}{2}} = 0, \text{ se } j = n_y, \\ \left[\left(\frac{\rho(P^{n+1})k}{\mu(\omega^n)} \frac{\partial P^{n+1}}{\partial y} \right) \right]_{i,j-\frac{1}{2}} = 0, \text{ se } j = 1. \end{array} \right. \quad (89)$$

Em seguida, aproximando-se novamente as derivadas parciais restantes na Equação (88) por diferenças centradas, obtemos a forma discreta da equação da pressão:

$$\begin{aligned} & \phi \frac{\rho_{i,j}(P^{n+1}) - \rho_{i,j}(P^n)}{\Delta t} - \frac{1}{\Delta x} \left\{ \left[\frac{\rho(P^{n+1})k}{\mu(\omega^n)} \right]_{i+\frac{1}{2},j} \frac{P_{i+1,j}^{n+1} - P_{i,j}^{n+1}}{\Delta x} - \left[\frac{\rho(P^{n+1})k}{\mu(\omega^n)} \right]_{i-\frac{1}{2},j} \frac{P_{i,j}^{n+1} - P_{i-1,j}^{n+1}}{\Delta x} \right\} \\ & - \frac{1}{\Delta y} \left\{ \left[\frac{\rho(P^{n+1})k}{\mu(\omega^n)} \right]_{i,j+\frac{1}{2}} \frac{P_{i,j+1}^{n+1} - P_{i,j}^{n+1}}{\Delta y} - \left[\frac{\rho(P^{n+1})k}{\mu(\omega^n)} \right]_{i,j-\frac{1}{2}} \frac{P_{i,j}^{n+1} - P_{i,j-1}^{n+1}}{\Delta y} \right\} - q_{i,j}^n = 0 \end{aligned} \quad (90)$$

Na Equação (90), os valores de $\frac{\rho(P^{n+1})k}{\mu\omega^n}$ nos pontos localizados nas faces do bloco $\hat{\Omega}_{i,j}$ serão aproximados por médias harmônicas dos respectivos valores definidos nos blocos vizinhos. Assim, por exemplo, temos que

$$\left[\frac{\rho(P^{n+1})k}{\mu(\omega^n)} \right]_{i+\frac{1}{2},j} = \frac{2 \left[\frac{\rho(P^{n+1})k}{\mu(\omega^n)} \right]_{i,j} \left[\frac{\rho(P^{n+1})k}{\mu(\omega^n)} \right]_{i+1,j}}{\left[\frac{\rho(P^{n+1})k}{\mu(\omega^n)} \right]_{i,j} + \left[\frac{\rho(P^{n+1})k}{\mu(\omega^n)} \right]_{i+1,j}}. \quad (91)$$

4.4 Discretização da Equação da Fração Mássica

Para a realização do Passo 2 do Algoritmo 1, a equação da fração mássica (Equação 84) será discretizada no tempo de forma explícita em ω , mas com valores de P tomados

no nível de tempo $n + 1$,

$$\begin{aligned} \phi \left[\frac{\rho(P^{n+1})\omega^{n+1} - \rho(P^n)\omega^n}{\Delta t} \right]_{i,j} + \left(\frac{\partial F_x(\omega^n, P^{n+1})}{\partial x} \right)_{i,j} \\ + \left(\frac{\partial F_y(\omega^n, P^{n+1})}{\partial y} \right)_{i,j} - \omega_{i,j}^n q_{i,j}^n = 0 \end{aligned} \quad (92)$$

Usando diferenças finitas centradas para aproximar as derivadas parciais que aparecem na Equação (92), obtemos

$$\begin{aligned} \phi \left[\frac{\rho(P^{n+1})\omega^{n+1} - \rho(P^n)\omega^n}{\Delta t} \right]_{i,j} + \frac{1}{\Delta x} \left[F_x(\omega^n, P^{n+1})_{i+\frac{1}{2},j} - F_x(\omega^n, P^{n+1})_{i-\frac{1}{2},j} \right] \\ + \frac{1}{\Delta y} \left[F_y(\omega^n, P^{n+1})_{i,j+\frac{1}{2}} - F_y(\omega^n, P^{n+1})_{i,j-\frac{1}{2}} \right] - \omega_{i,j}^n q_{i,j}^n = 0 \end{aligned} \quad (93)$$

Utilizando as condições de contorno descritas na Equação (81), consideraremos que

$$\begin{cases} F_x(\omega^n, P^{n+1})_{i+\frac{1}{2},j} = 0, & \text{se } i = n_x, \\ F_x(\omega^n, P^{n+1})_{i-\frac{1}{2},j} = 0, & \text{se } i = 1, \\ F_y(\omega^n, P^{n+1})_{i,j+\frac{1}{2}} = 0, & \text{se } j = n_y, \\ F_y(\omega^n, P^{n+1})_{i,j-\frac{1}{2}} = 0, & \text{se } j = 1. \end{cases} \quad (94)$$

No que segue, a discretização espacial do termo de fluxo $F_x(\omega^n, P^{n+1})_{i+\frac{1}{2},j}$, será feito supondo que $i \neq n_x$, pois caso contrário tal termo é zero.

Assim, a partir da Equação (85), podemos escrever

$$\begin{aligned} F_x(\omega^n, P^{n+1})_{i+\frac{1}{2},j} = -\omega_{i+\frac{1}{2},j}^n \left[\frac{\rho(P^{n+1})k}{\mu(\omega^n)} \right]_{i+\frac{1}{2},j} \left(\frac{\partial P^{n+1}}{\partial x} \right)_{i+\frac{1}{2},j} \\ - [\rho(P^{n+1}) D_{11}(\omega^n, P^{n+1})]_{i+\frac{1}{2},j} \left(\frac{\partial \omega^n}{\partial x} \right)_{i+\frac{1}{2},j} \\ - [\rho(P^{n+1}) D_{12}(\omega^n, P^{n+1})]_{i+\frac{1}{2},j} \left(\frac{\partial \omega^n}{\partial y} \right)_{i+\frac{1}{2},j}. \end{aligned} \quad (95)$$

Para contornar a dificuldade natural de se determinar a derivada parcial de ω com relação à y no ponto $(x_{i+\frac{1}{2}}, y_j)$, aqui aproximaremos a última derivada que aparece no lado direito da Equação (95) pela média aritmética dos valores dessa derivada definidos nos respectivos pontos vizinhos, ou seja, consideraremos

$$\left(\frac{\partial \omega^n}{\partial y} \right)_{i+\frac{1}{2},j} = \frac{1}{2} \left[\left(\frac{\partial \omega^n}{\partial y} \right)_{i,j} + \left(\frac{\partial \omega^n}{\partial y} \right)_{i+1,j} \right]. \quad (96)$$

Em seguida, as duas derivadas que aparecem no lado direito da Equação (96) são aproximadas por diferenças finitas centradas, resultando em

$$\left(\frac{\partial \omega^n}{\partial y}\right)_{i+\frac{1}{2},j} = \frac{1}{2} \left(\frac{\omega_{i,j+1}^n - \omega_{i,j-1}^n}{2\Delta y} + \frac{\omega_{i+1,j+1}^n - \omega_{i+1,j-1}^n}{2\Delta y} \right). \quad (97)$$

Substituindo a Equação (97) na Equação (95) e discretizando as duas derivadas parciais restantes na Equação (95) por diferenças finitas centradas, obtemos

$$\begin{aligned} F_x(\omega^n, P^{n+1})_{i+\frac{1}{2},j} &= -\omega_{i+\frac{1}{2},j}^n \left[\frac{\rho(P^{n+1})k}{\mu(\omega^n)} \right]_{i+\frac{1}{2},j} \frac{P_{i+\frac{1}{2},j}^{n+1} - P_{i,j}^{n+1}}{\Delta x} \\ &- [\rho(P^{n+1}) D_{11}(\omega^n, P^{n+1})]_{i+\frac{1}{2},j} \frac{\omega_{i+1,j}^n - \omega_{i,j}^n}{\Delta x} \\ &- [\rho(P^{n+1}) D_{12}(\omega^n, P^{n+1})]_{i+\frac{1}{2},j} \frac{1}{2} \left(\frac{\omega_{i,j+1}^n - \omega_{i,j-1}^n}{2\Delta y} + \frac{\omega_{i+1,j+1}^n - \omega_{i+1,j-1}^n}{2\Delta y} \right). \end{aligned} \quad (98)$$

Note que a discretização indicada na Equação (96) não está definida para $j = 1$ e $j = n_y$. Em tais blocos de fronteira consideraremos aproximações de primeira ordem dadas, respectivamente, pelas seguintes equações

$$\left(\frac{\partial \omega^n}{\partial y}\right)_{i+\frac{1}{2},1} = \frac{1}{2} \left(\frac{\omega_{i,2}^n - \omega_{i,1}^n}{\Delta y} + \frac{\omega_{i+1,2}^n - \omega_{i+1,1}^n}{\Delta y} \right) \quad (99)$$

e

$$\left(\frac{\partial \omega^n}{\partial y}\right)_{i+\frac{1}{2},n_y} = \frac{1}{2} \left(\frac{\omega_{i,n_y}^n - \omega_{i,n_y-1}^n}{\Delta y} + \frac{\omega_{i+1,n_y}^n - \omega_{i+1,n_y-1}^n}{\Delta y} \right). \quad (100)$$

Devido ao processo de injeção de solvente, e pelo fato do reservatório estar inicialmente preenchido apenas com óleo, a fração mássica do solvente, $\omega = \omega(x, y, t)$, apresentará grandes variações localizadas nas frentes que se deslocam nas direções dos poços de produção. Para evitar possíveis oscilações espúrias, típicas de aproximações em diferenças finitas centradas de segunda ordem, que geralmente surgem em tais frentes de avanço de solvente, aqui a fração mássica $\omega_{i+\frac{1}{2},j}^n$ (que aparece na parcela advectiva do fluxo mostrado na Equação (98)) será aproximada por um esquema do tipo limitador de fluxo, (THOMAS, 1999) e (LEVEQUE, 2002).

Assim, consideraremos a seguinte aproximação baseada em uma expansão em série

de Taylor,

$$\omega_{i+\frac{1}{2},j}^n = \begin{cases} \omega_{i,j}^n + \frac{\varphi_{i+\frac{1}{2},j}^n}{2} (\omega_{i+1,j}^n - \omega_{i,j}^n), & \text{se } u_{i+\frac{1}{2},j}^{n+1} \geq 0 \\ \omega_{i+1,j}^n + \frac{\varphi_{i+\frac{1}{2},j}^n}{2} (\omega_{i+1,j}^n - \omega_{i,j}^n), & \text{se } u_{i+\frac{1}{2},j}^{n+1} < 0. \end{cases} \quad (101)$$

onde na Equação (101) $\varphi_{i+\frac{1}{2},j}^n = \varphi_{i+\frac{1}{2},j}^n \left(r_{i+\frac{1}{2},j}^n \right)$ representa uma função limitador de fluxo, a qual depende de $r_{i+\frac{1}{2},j}^n$, a chamada razão de inclinação de ω^n no ponto $(x_{i+\frac{1}{2}}, y_j)$. Tal razão de inclinação funciona como um sensor de descontinuidades, aqui definido por

$$r_{i+\frac{1}{2},j}^n = \begin{cases} \frac{\omega_{i,j}^n - \omega_{i-1,j}^n}{(\omega_{i+1,j}^n - \omega_{i,j}^n) + \delta}, & i \neq 1 \\ 0, & i = 1. \end{cases} \quad (102)$$

onde na Equação (102) $\delta > 0$ é um número suficientemente pequeno, usado para evitar possíveis divisões por zero. Utilizaremos $\delta = 10^{-9}$.

No presente trabalho, empregaremos o limitador de fluxo denominado de superbee (BLUNT; RUBIN, 1992):

$$\varphi(r) = \max \{0, \min \{1, 2r\}, \min \{2, r\}\} \quad (103)$$

O termo $\left[\frac{\rho(P^{n+1})k}{\mu(\omega^n)} \right]_{i+\frac{1}{2},j}$ que aparece na primeira parcela do lado direito da Equação (98) é aproximado pela média harmônica descrita na Equação (91).

Para finalizar a discretização do fluxo mostrado na Equação (98), a seguir aproximaremos os termos difusivos $[\rho(P^{n+1}) D_{11}(\omega^n, P^{n+1})]_{i+\frac{1}{2},j}$ e $[\rho(P^{n+1}) D_{12}(\omega^n, P^{n+1})]_{i+\frac{1}{2},j}$. Para isso, usando a definição do chamado tensor de difusão, o tensor \mathbf{D} descrita na Equação (78), podemos escrever

$$\begin{aligned} [\rho(P^{n+1}) D_{11}(\omega^n, P^{n+1})]_{i+\frac{1}{2},j} &= \phi d_M \rho(P^{n+1})_{i+\frac{1}{2},j} \\ &+ \alpha_T \sqrt{\left[\sigma_x(\omega^n, P^{n+1})_{i+\frac{1}{2},j} \right]^2 + \left[\sigma_y(\omega^n, P^{n+1})_{i+\frac{1}{2},j} \right]^2} \\ &+ \frac{(\alpha_L - \alpha_T) \left[\sigma_x(\omega^n, P^{n+1})_{i+\frac{1}{2},j} \right]^2}{\sqrt{\left[\sigma_x(\omega^n, P^{n+1})_{i+\frac{1}{2},j} \right]^2 + \left[\sigma_y(\omega^n, P^{n+1})_{i+\frac{1}{2},j} \right]^2}} \end{aligned} \quad (104)$$

e

$$[\rho(P^{n+1}) D_{12}(\omega^n, P^{n+1})]_{i+\frac{1}{2},j} = \frac{(\alpha_L - \alpha_T) \sigma_x(\omega^n, P^{n+1})_{i+\frac{1}{2},j} \sigma_y(\omega^n, P^{n+1})_{i+\frac{1}{2},j}}{\sqrt{[\sigma_x(\omega^n, P^{n+1})_{i+\frac{1}{2},j}]^2 + [\sigma_y(\omega^n, P^{n+1})_{i+\frac{1}{2},j}]^2}} \quad (105)$$

onde na Equação (105)

$$\begin{aligned} \sigma_x(\omega^n, P^{n+1})_{i+\frac{1}{2},j} &\equiv - \left[\frac{\rho(P^{n+1})k}{\mu(\omega^n)} \right]_{i+\frac{1}{2},j} \left(\frac{\partial P^{n+1}}{\partial x} \right)_{i+\frac{1}{2},j} \cong \\ &- \left[\frac{\rho(P^{n+1})k}{\mu(\omega^n)} \right]_{i+\frac{1}{2},j} \frac{P_{i+1,j}^{n+1} - P_{i,j}^{n+1}}{\Delta x} \end{aligned} \quad (106)$$

e

$$\begin{aligned} \sigma_y(\omega^n, P^{n+1})_{i+\frac{1}{2},j} &\equiv - \left[\frac{\rho(P^{n+1})k}{\mu(\omega^n)} \right]_{i+\frac{1}{2},j} \left(\frac{\partial P^{n+1}}{\partial y} \right)_{i+\frac{1}{2},j} \cong \\ &- \left[\frac{\rho(P^{n+1})k}{\mu(\omega^n)} \right]_{i+\frac{1}{2},j} \frac{1}{2} \left(\frac{P_{i,j+1}^n - P_{i,j-1}^n}{2\Delta y} + \frac{P_{i+1,j+1}^n - P_{i+1,j-1}^n}{2\Delta y} \right). \end{aligned} \quad (107)$$

Nas Equações (106) e (107) foram usadas aproximações em diferenças finitas inteiramente análogas aquelas previamente empregadas na discretização de outros termos da Equação (98). Dessa maneira, note que os últimos dois termos entre parênteses, que aparecem na Equação (107), admitem correções semelhantes às mostradas nas Equações (99) e (100). Novamente, a quantidade $\left[\frac{\rho(P^{n+1})k}{\mu(\omega^n)} \right]_{i+\frac{1}{2},j}$ é aproximada pela média harmônica mostrada na Equação (91). Por outro lado, o termo $\rho(P^{n+1})_{i+\frac{1}{2},j}$ que aparece na primeira parcela do lado direito da Equação (104) é aproximado por média aritmética dos respectivos valores definidos nos blocos vizinhos. Isto conclui a discretização do termo de fluxo $F_x(\omega^n, P^{n+1})_{i+\frac{1}{2},j}$ que aparece na Equação (93).

Os demais termos de fluxo mostrados na Equação (93), dados por $F_x(\omega^n, P^{n+1})_{i-\frac{1}{2},j}$, $F_y(\omega^n, P^{n+1})_{i,j+\frac{1}{2}}$ e $F_y(\omega^n, P^{n+1})_{i,j-\frac{1}{2}}$, são discretizados de maneira totalmente análoga e se encontram no anexo A, anexo B e anexo C respectivamente.

Feito isso, a partir da Equação (93), os valores da fração mássica do solvente no nível de tempo $n + 1$ são calculado de forma explícita, utilizando os valores de pressão previamente determinados nesse mesmo nível, como segue

$$\begin{aligned} \omega_{i,j}^{n+1} &= \frac{[\rho(P^n)]_{i,j} \omega_{i,j}^n}{[\rho(P^{n+1})]_{i,j}} - \frac{\Delta t}{\phi[\rho(P^{n+1})]_{i,j}} \left\{ \frac{1}{\Delta x} \left[F_x(\omega^n, P^{n+1})_{i+\frac{1}{2},j} - F_x(\omega^n, P^{n+1})_{i-\frac{1}{2},j} \right] \right. \\ &\left. \frac{1}{\Delta y} \left[F_y(\omega^n, P^{n+1})_{i,j+\frac{1}{2}} - F_y(\omega^n, P^{n+1})_{i,j-\frac{1}{2}} \right] - \omega_{i,j}^n q_{i,j}^n \right\}. \end{aligned} \quad (108)$$

4.5 O tratamento do Termo de Poço

Como enfatizado antes, nas Equações (92) e (108), o termo $q_{i,j}^n$ descreve a taxa mássica (massa por unidade de tempo, por unidade de volume) do fluido injetado ou extraído no meio poroso, no ponto (x_i, y_j) e instante $t_n = n\Delta t$.

Para efeito de simulação, os valores de $q_{i,j}$ são especificados informando-se as localizações dos nós da grade onde se encontram as representações pontuais dos poços de injeção e de extração, e os respectivos valores numéricos de $q_{i,j}$, os quais podem variar com o passar do tempo. Por convenção, o termo de poço $q_{i,j}^n$ será considerado positivo em um ponto de injeção e negativo em um ponto de extração.

Por razões de interesse prático, pode ser preferível a especificação da taxa volumétrica (volume por unidade de tempo) do fluido injetado ou extraído em um poço do reservatório. Neste trabalho, a taxa volumétrica, denotada aqui por $Q_{i,j}^n$, será a taxa efetivamente especificada. Para lidar com esse tipo de especificação, a taxa mássica $q_{i,j}^n$ será relacionada com $Q_{i,j}^n$ utilizando a seguinte equação (AZIZ, 1979):

$$q_{i,j}^n = \frac{1}{(v_b)_{i,j}} \rho_{i,j}^n Q_{i,j}^n. \quad (109)$$

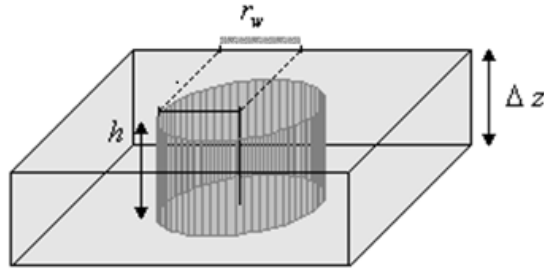
Na Equação (109) $(v_b)_{i,j} = \Delta x \Delta y \Delta z$ é o volume do bloco $\hat{\Omega}_{i,j}$, onde se encontra a representação de um poço de injeção ou de extração. A quantidade Δz é a espessura do meio poroso (reservatório de petróleo) na direção do eixo coordenado z .

Nos blocos onde estão os poços destinados às injeções de solvente, usaremos a relação mostrada na Equação (109), e simplesmente especificaremos os valores de $\rho_{i,j}^n$ e $Q_{i,j}^n$. Tais especificações são viáveis, pois na prática pode-se determinar a densidade mássica do solvente injetado e a taxa volumétrica nos poços de injeção, em cada instante de tempo. Por outro lado, como o fluido binário (solvente-óleo) não é incompressível, a magnitude da taxa volumétrica do fluido produzido não é necessariamente igual à magnitude da taxa volumétrica do solvente injetado. Assim, em geral, não conhecemos previamente os valores de $Q_{i,j}^n$ nos poços de extração.

A modelagem matemática da vazão em um bloco $\hat{\Omega}_{i,j}$, que contém um poço de extração, é baseada na geometria ilustrada na Figura 6. Nessa figura, o bloco retangular de altura Δz representa um típico bloco onde se encontra um poço de extração. Por hipótese, tal poço possui o formato de um cilindro reto de altura $h(\leq \Delta z)$ e raio igual a r_w .

Para empregar também a relação indicada na Equação (109) em um poço de extração, o cálculo da taxa volumétrica de produção será feito usando-se um modelo de poço baseado na lei de Darcy, (AZIZ, 1979). Tal modelo utiliza um valor de pressão (em geral constante) medido no poço de extração. Esse valor de pressão constante é referido como

Figura 6 - Um poço de formato cilíndrico.



Fonte: ELINE FLORES, 2003.p.42.

a pressão no fundo do poço, denotada por P_ω .

Para obter o modelo de poço usado aqui, seguindo Aziz (1979), inicialmente observamos que a taxa volumétrica na direção radial (r) de um escoamento em um meio poroso com formato cilíndrico pode ser representada pela Lei de Darcy (em coordenadas cilíndricas), fazendo

$$Q = -2\pi r h \frac{k}{\mu} \frac{dP}{dr}. \quad (110)$$

Considere que a pressão no interior do poço possui o valor constante P_ω , igual à pressão no fundo do poço. Por outro lado, a pressão no bloco, na parte exterior ao poço, tem valor $P_{i,j}^n$. Suponha também que o escoamento em torno do poço é essencialmente radial (apontando na direção e sentido do centro do poço). Então, a uma distância $r_0 (> r_\omega)$ do centro do poço, a vazão média através de uma superfície cilíndrica de área lateral igual a $2\pi r h$ pode ser estimada integrando-se a Lei de Darcy, Equação (110), como segue

$$\int_{r_\omega}^{r_0} \frac{dr}{r} = -\frac{2\pi h k}{Q_{i,j}^n \mu_{i,j}^n} \int_{P_\omega}^{P_{i,j}^n} dp. \quad (111)$$

Assim, a partir da Equação (111) obtemos o seguinte modelo para a vazão de fluido em um poço de extração

$$Q_{i,j}^n = -\frac{2\pi h k}{\mu_{i,j}^n \ln\left(\frac{r_0}{r_\omega}\right)} (P_{i,j}^n - P_\omega) \quad (112)$$

em que

$$P_{i,j}^n > P_\omega \text{ e } \mu_{i,j}^n = \mu(\omega_{i,j}^n).$$

O modelo resumido na Equação (112) exige a especificação de r_0 , denominado de raio equivalente. Seguindo o trabalho de Peaceman (1986) dedicado à representação de poços em simuladores de reservatório de petróleo, aqui consideraremos que o raio de equivalência é estimado por

$$r_0 = 0,14\sqrt{(\Delta x)^2 + (\Delta y)^2}. \quad (113)$$

5 OS MÉTODOS NUMÉRICOS PARA AS EQUAÇÕES NÃO LINEARES

5.1 Aspectos gerais dos métodos numéricos

Ao se considerar a Equação (88) ao longo de todos os nós da grade mostrada na Figura 5, se obtém um sistema não linear com $n_x \times n_y$ equações, cujas $n_x \times n_y$ variáveis são os valores da pressão em cada nó da grade de blocos centrados, usada na discretização espacial. Assim, durante a evolução temporal, para obter-se o campo de pressão, a resolução numérica de um sistema não linear é exigida a cada passo de tempo Δt que separa o nível de tempo n do nível futuro $n + 1$.

As sucessivas resoluções numéricas desse sistema não linear, oriundo do esquema temporal implícito usado na discretização da chamada equação da pressão, consomem grande parte do tempo de CPU (*Central Processing Unit*) dedicado à execução dos procedimentos computacionais. A fim de se obter um simulador que seja eficiente para o escoamento miscível em meios porosos, onde a pressão é tratada implicitamente e a fração molar de forma explícita, se faz necessário o emprego de um método numérico que consuma pouco tempo de CPU. Nota-se também que tempos de CPU relativamente pequenos não são os únicos aspectos desejados. De fato, além disso, espera-se que o método numérico usado seja suficientemente robusto, de modo que o seu processo iterativo não divirja, ou convirja para um ponto inapropriado, o que pode ocorrer com o método de Newton clássico, um método iterativo cuja convergência depende fortemente da estimativa inicial, (KELLEY, 1996).

No presente trabalho, empregaremos dois métodos desenhados para serem robustos e eficientes. O primeiro é um método de Newton Inexato (DEMBO; EISENSTAT; STEIHAUG, 1982) e (EISENSTAT; WALKER, 1996) equipado com uma estratégia de busca linear com decréscimo suficiente, a qual lhe atribui uma propriedade de convergência global (EISENSTAT; WALKER, 1994). Esse método é o que se costuma denominar de um método de Newton Inexato Globalizado.

Métodos de Newton são métodos iterativos que exigem, a cada iteração, a resolução de sistemas lineares, cujas matrizes dos coeficientes são as Jacobianas do sistema não linear avaliadas nos pontos correntes. Essas etapas de linearização do método de Newton Inexato Globalizado usado aqui serão realizadas pelo método do Gradiente Conjugado, destinado à resolução de sistemas lineares simétricos positivos definidos (HESTENES; STIEFEL, 1952; KELLEY, 1996). Neste contexto, o método do Gradiente Conjugado será tratado como um método iterativo, o qual resolverá cada sistema linear apenas de forma inexata, como sugerido por (DEMBO; EISENSTAT; STEIHAUG, 1982). Além disso, explorando a estrutura do algoritmo do Gradiente Conjugado, o método de Newton Inexato Globalizado resultante dessa abordagem será livre do cálculo das derivadas parciais associadas com a

matriz Jacobiana. De fato, neste trabalho, o efeito da matriz Jacobiana sobre um vetor (a efetiva ação dessa matriz exigida nos passos do método do Gradiente Conjugado) será descrito por uma aproximação em diferenças finitas de primeira ordem (KELLEY, 1996). Assim, o primeiro método considerado aqui é na realidade um método de Newton Inexato Globalizado com Gradiente Conjugado livre da matriz Jacobiana.

O outro método considerado é o algoritmo desenvolvido por La Cruz, Martínez e Raydan (2006) para a resolução de sistemas não lineares, o qual, ao contrário do método de Newton, não usa a matriz Jacobiana ou qualquer aproximação dela. De fato, tal método, denominado de DFSANE (*Derivative-Free Spectral Algorithm for Nonlinear Equations*) nem sequer emprega resoluções de sistemas lineares, sendo um método de busca direta que essencialmente utiliza, a cada iteração, o valor da aplicação que define o sistema não linear no ponto corrente.

A formulação original do DFSANE é equipada com uma busca linear inexata que satisfaz uma condição de não monotonicidade baseado na conhecida condição de Grippo, Lampariello e Lucidi (1986), a fim de proporcionar convergência global. Como mostrado por Cheng e Li (2008), uma outra condição de não monotonicidade pode também ser incorporada à estrutura do método DFSANE.

Durante o desenvolvimento deste trabalho, observamos que nenhuma das condições de não monotonicidade desenvolvidas para o DFSANE em sua forma original são suficientes para tornar esse algoritmo capaz de resolver o sistema mal condicionado considerado aqui. Observamos também que para superar essas dificuldades impostas pela natureza desse sistema, se faz necessário utilização de uma busca linear inexata gerada a partir de uma condição altamente não monótona. Para contemplar essa exigência, modificamos o algoritmo DFSANE. Isso foi feito adaptando a condição proposta por Cheng e Li (2008), a fim de torná-la altamente não monótona.

5.2 O Problema Básico

Note que o sistema não linear indicado na Equação (88) pode ser escrito na seguinte forma

$$\mathbf{F}(\mathbf{P}) = \mathbf{0}, \tag{114}$$

onde na Equação (114)

$$\mathbf{F} : \mathbb{R}^{n_x n_y} \longrightarrow \mathbb{R}^{n_x n_y}, \tag{115}$$

é a aplicação não linear definida pela expressão que se encontra no lado esquerdo da Equação (88), cujas variáveis são os $n_x \times n_y$ valores de pressão, definidos em cada bloco da grade de discretização, representados acima pelos componentes do vetor $\mathbf{P} \in \mathbb{R}^{n_x n_y}$.

A fim de simplificar a notação usada neste capítulo, denotaremos esse vetor \mathbf{P} simplesmente por $\mathbf{x} \in \mathbb{R}^N$, onde $N = n_x \times n_y$.

Assim, dado a aplicação não linear $\mathbf{F} : \mathbb{R}^N \rightarrow \mathbb{R}^N$, o problema mostrado na Equação (114) se resume em encontrar $\mathbf{x}^* \in \mathbb{R}^N$ tal que

$$\mathbf{F}(\mathbf{x}^*) = \mathbf{0}, \quad (116)$$

onde na Equação (116) a aplicação de \mathbf{F} é, por hipótese, diferenciável em \mathbb{R}^N . Observamos que no presente trabalho o símbolo $\|\cdot\|$ denotará a norma Euclidiana, ou seja, $\|\mathbf{y}\| = \sqrt{\mathbf{y}^T \mathbf{y}}$, para todo $\mathbf{y} \in \mathbb{R}^N$, de modo que $\|\mathbf{y}\|^2 = \mathbf{y}^T \mathbf{y}$.

5.3 O método de Newton Inexato Globalizado

O método de Newton é um método iterativo. Assim, partindo de um dado inicial $\mathbf{x}_0 \in \mathbb{R}^N$, esse método gera uma sequência de pontos em \mathbb{R}^N , $\{\mathbf{x}_k\}$, a qual (na presença de condições apropriadas) deve convergir para um ponto \mathbf{x}^* , uma solução do sistema não linear $\mathbf{F}(\mathbf{x}) = \mathbf{0}$.

Como a aplicação \mathbf{F} é diferenciável, se $\mathbf{F}'(\mathbf{x}_k)$ representa a matriz Jacobiana de \mathbf{F} em \mathbf{x}_k , então, dado $\mathbf{0} \neq \mathbf{d}_k \in \mathbb{R}^N$ suficientemente pequeno, temos que

$$\mathbf{F}(\mathbf{x}_k + \mathbf{d}_k) = \mathbf{F}(\mathbf{x}_k) + \mathbf{F}'(\mathbf{x}_k) \mathbf{d}_k + \mathbf{r}(\mathbf{d}_k), \quad (117)$$

onde na Equação (117) $\mathbf{r}(\mathbf{d}_k)$, chamado de resíduo, é tal que

$$\lim_{\mathbf{d}_k \rightarrow \mathbf{0}} \frac{\mathbf{r}(\mathbf{d}_k)}{\|\mathbf{d}_k\|} = \mathbf{0}, \quad (118)$$

Definido \mathbf{x}_{k+1} como sendo:

$$\mathbf{x}_{k+1} = \mathbf{x}_k + \mathbf{d}_k, \quad (119)$$

então, para $\mathbf{d}_k = \mathbf{x}_{k+1} - \mathbf{x}_k$ suficientemente pequeno, segue da Equação (117) a apro-

ximação linear

$$\mathbf{F}(\mathbf{x}_{k+1}) \approx \mathbf{M}_k(\mathbf{d}_k) = \mathbf{F}(\mathbf{x}_k) + \mathbf{F}'(\mathbf{x}_k)\mathbf{d}_k, \quad (120)$$

onde na Equação (120) $\mathbf{M}_k(\mathbf{d}_k)$ é o chamado “modelo linear” que aproxima \mathbf{F} na vizinhança do ponto corrente \mathbf{x}_k .

Supondo que a matriz $\mathbf{F}'(\mathbf{x}_k)$ é inversível, a sequência gerada pelo método de Newton determina o ponto futuro \mathbf{x}_{k+1} usando a expressão mostrado na Equação (119), no qual o vetor $\mathbf{d}_k \in \mathbb{R}^N$ (que define a direção de busca desse método) é a raiz do modelo linear $\mathbf{M}_k(\mathbf{d}_k) = \mathbf{F}(\mathbf{x}_k) + \mathbf{F}'(\mathbf{x}_k)\mathbf{d}_k$, ou seja, o vetor \mathbf{d}_k é a solução do seguinte sistema de equações lineares

$$\mathbf{F}'(\mathbf{x}_k)\mathbf{d}_k = -\mathbf{F}(\mathbf{x}_k), \quad (121)$$

denominadas de equações de Newton.

Apesar da convergência do método de Newton depender da localização do dado inicial \mathbf{x}_0 , ele é bastante atrativo. De fato, para \mathbf{x}_0 suficientemente próximo de uma solução \mathbf{x}^* , em condições apropriadas, o método de Newton converge rapidamente (KELLEY, 1996).

Uma das desvantagens do método de Newton é ter de resolver as equações de Newton (Equação (121)) em cada etapa, fato que se agrava quando lidamos com grandes valores de N . Computar uma solução exata em cada iteração usando-se um método direto, como o método de Gauss, pode exigir muito esforço computacional, principalmente se N for um número muito grande, como geralmente ocorre quando o sistema não linear em questão decorre da discretização de equações diferenciais. Tal procedimento se torna ainda mais injustificável quando \mathbf{x}_k se encontra relativamente distante de \mathbf{x}^* . Assim, como observado por Dembo, Eisenstat e Steihaug (1982), parece mais razoável usar um método iterativo para resolver a Equação (121) somente de forma aproximada. Em outras palavras, considerando que o vetor \mathbf{r}_k (chamado de termo residual do sistema linear mostrado na Equação (121)), aqui convenientemente definido por

$$\mathbf{r}_k = -\mathbf{F}(\mathbf{x}_k) - \mathbf{F}'(\mathbf{x}_k)\mathbf{d}_k. \quad (122)$$

não é (necessariamente) zerado em cada iteração.

Dembo, Eisenstat e Steihaug (1982) introduziram uma classe de métodos chamados de métodos de Newton Inexatos. Em cada iteração de um método de Newton Inexato o sistema mostrado na Equação (121) é resolvido de forma iterativa, de modo

que tais iterações (chamadas de iterações internas) terminam quando o residual relativo $\|\mathbf{r}_k\|/\|\mathbf{F}(\mathbf{x}_k)\|$ atingir certa tolerância previamente estabelecida. Mais precisamente, Dembo, Eisenstat e Steihaug (1982) sugerem critérios de parada para as iterações internas descritos na forma

$$\frac{\|\mathbf{r}_k\|}{\|\mathbf{F}(\mathbf{x}_k)\|} \leq \eta_k, \quad (123)$$

onde na Equação (123) a sequência de números reais não negativos $\{\eta_k\}$, denominada de sequência dos termos forçantes, deve ser escolhida de modo apropriado para evitar cálculos excessivos nas etapas relativas às resoluções das equações de Newton.

As propriedades de convergência local de um método de Newton Inexato, incluindo sua velocidade de convergência, dependem da escolha da sequência dos termos forçantes. De fato, Dembo, Eisenstat e Steihaug (1982) mostraram que, sob certas condições, se $0 \leq \eta_k \leq \eta_{max} < 1$, para todo $k \geq 0$, $\lim_{k \rightarrow \infty} \eta_k = 0$ e $\eta_k = (\|\mathbf{F}(\mathbf{x}_k)\|)$, então $\{\mathbf{x}_k\}$ converge quadraticamente para \mathbf{x}^* , desde que \mathbf{x}_0 esteja suficientemente próximo de \mathbf{x}^* .

Eisenstat e Walker (1996) desenvolveram e analisaram diferentes procedimentos para a escolha dos termos forçantes em um método de Newton Inexato. Tais procedimentos são motivados pelo desejo de evitar o que se denomina de *over solving*. O uso do termo *over solving* significa que o sistema linear mostrado na Equação (121) foi resolvido com uma precisão muito além daquela necessária para corrigir a iteração não linear do método de Newton.

Seguindo Eisenstat e Walker (1996) e Kelley (1996), uma medida do grau de aproximação à solução \mathbf{x}^* , realizada na iteração não linear k , pode ser estimada por

$$\eta_k^A = \gamma \frac{\|\mathbf{F}(\mathbf{x}_k)\|^2}{\|\mathbf{F}(\mathbf{x}_{k+1})\|^2}, \quad (124)$$

onde na Equação (124) $\gamma \in (0, 1]$ é um dado parâmetro. Se a sequência $\{\eta_k^A\}$ é uniformemente limitada por 1, então tomando-se $\eta_k = \eta_k^A$, para todo $k > 0$, sob certas condições pode-se garantir as boas propriedades de convergência local referidas antes (EISENSTAT; WALKER, 1996). A fim de se especificar a escolha de η_0 e, ao mesmo tempo, garantir a limitação uniforme mencionada acima, toma-se

$$\eta_k^B = \begin{cases} \eta_{max} & \text{se } k > 0 \\ \min(\eta_{max}, \eta_k^A) & \text{se } k > 0 \end{cases} \quad (125)$$

Na Equação (125) o parâmetro η_{max} é um limite superior para a sequência $\{\eta_k^B\}$. De acordo com Eisenstat e Walker (1996), usaremos $\eta_{max} = 0,9999$ e $\gamma = 0,9$. Infeliz-

mente, pode ocorrer que o valor de η_k^B seja muito pequeno em uma ou mais iterações nas quais \mathbf{x}_k esteja relativamente distante de \mathbf{x}^* , o que acarretará em *over solving*. Para evitar possíveis volatilidades no decrescimento de η_k^B , Eisenstat e Walker (1996) sugeriram uma estratégia de salvaguarda. A ideia por trás de tal estratégia consiste em observar que se η_{k-1} é suficientemente grande, então não se deve deixar η_k decrescer além de um fator de η_{k-1} . Isso é materializado na seguinte escolha mais refinada:

$$\eta_k^C = \begin{cases} \eta_{max} & \text{se } k = 0 \\ \min(\eta_{max}, \eta_k^A) & \text{se } k > 0 \text{ e } \eta_{k-1}^2 < 0, 1 \\ \min(\eta_{max}, \max(\eta_k^A, \gamma\eta_{k-1}^2)) & \text{se } k > 0 \text{ e } \eta_{k-1}^2 < 0, 1 \end{cases} \quad (126)$$

Como enfatizado por Kelley (1996), existe uma chance da iteração final provocar uma redução na norma de \mathbf{F} além do nível necessário. Assim, o custo para obter-se a solução das equações de Newton na última iteração pode ser desproporcional à precisão desejada. Esse *over solving*, que tende a ocorrer na iteração final, pode ser controlado comparando-se a norma $\|\mathbf{F}(\mathbf{x}_k)\|$, que representa o residual da iteração não linear corrente, com a estimativa final para essa quantidade, descrita pela tolerância que aparece no critério de parada usado no método de Newton. Portanto, supondo um critério de interrupção para as iterações do método de Newton dado por

$$\|\mathbf{F}(\mathbf{x}_k)\| \leq \tau_t, \quad (127)$$

onde na Equação (127) τ_t , suficientemente pequeno, é a tolerância desejada, Kelley (1996) propõe a seguinte escolha final para a sequência dos termos forçantes:

$$\eta_k = \min\left(\eta_{max}, \max\left(\eta_k^C, \frac{0,5\tau_t}{\|\mathbf{F}(\mathbf{x}_k)\|}\right)\right) \quad \text{para todo } k \geq 0. \quad (128)$$

Neste trabalho, para efeito de comparação com o método DFSANE, empregamos no método de Newton Inexato o mesmo critério de parada sugerido por La Cruz, Martínez e Raydan (2006), dado por

$$\frac{\|\mathbf{F}(\mathbf{x}_k)\|}{\sqrt{N}} \leq e_a + e_r \frac{\|\mathbf{F}(\mathbf{x}_0)\|}{\sqrt{N}}, \quad (129)$$

onde na Equação (129) $e_a = 10^{-5}$ e $e_r = 10^{-4}$. Assim, comparando-se as Equações (127) e (129), notamos que a tolerância τ_t efetivamente usada aqui no método de Newton Inexato

é da forma

$$\tau_t = e_a \sqrt{N} + e_r \|\mathbf{F}(x_0)\|. \quad (130)$$

Métodos de Newton Inexatos são variantes do método de Newton clássico. Assim, a exemplo deste, a convergência de um método de Newton Inexato depende da localização do dado inicial \mathbf{x}_0 . A fim de melhorar a convergência de sequências inicializadas em pontos arbitrários, Eisenstat e Walker (1994) incorporaram as chamadas estratégias de “globalização”, que buscam tornar um método de Newton Inexato mais robusto. Esses autores lidam com diferentes técnicas de globalização, as quais essencialmente procuram garantir um decréscimo suficiente no valor de $\|\mathbf{F}(\mathbf{x}_{k+1})\|$, a cada iteração k (≥ 1), provocando dessa forma a convergência para a solução desejada, a qual certamente dependerá da natureza do sistema não linear considerado.

Empregando uma técnica de decréscimo suficiente descrita por Kelley (1996), os passos do método de Newton Inexato Globalizado são mostrados no Algoritmo 2.

Algoritmo 2 - NIG

DOCUMENTAÇÃO

TÍTULO

NIG/GC - Newton Inexato Globalizado

PROPÓSITO

Determinar $\mathbf{x} \in \mathbb{R}^n$, tal que $\left\{ \begin{array}{l} \text{Min } f(\mathbf{x}) = \|\mathbf{F}(\mathbf{x})\|^2 \\ \mathbf{x} \in \mathbb{R} \end{array} \right\}$

ENTRADAS

$\mathbf{x}_0 \in \mathbb{R}^n$: dado inicial

Escalares prefixados:

$$\alpha = 10^{-4},$$

$$e_a = 10^{-5},$$

$$e_r = 10^{-4},$$

$$0 < \sigma_0 < \sigma_1 < 1.$$

SAÍDAS

\mathbf{x} : solução do sistema linear

declarar τ_t **Real** ($\tau_t = e_a \sqrt{N} + e_r \|\mathbf{F}(\mathbf{x}_0)\|$)

declarar k **Inteiro** ($k = 0$)

declarar e_a, e_r **Real**

enquanto ($\|\mathbf{F}(\mathbf{x}_k)\| > \tau_t$), **fazer** {Passo 1}
 | Gerar $\eta_k > 0$ como na Equação (128). {Passo 2}
 | {Passo 3}
 | Calcular \mathbf{d}_k , satisfazendo $\|\mathbf{F}'(\mathbf{x}_k)\mathbf{d}_k + \mathbf{F}(\mathbf{x}_k)\| \leq \eta_k \|\mathbf{F}(\mathbf{x}_k)\|$.
 | $\lambda_k = 1$ {Passo 4}
 | $\mathbf{x}_t = \mathbf{x}_k + \lambda_k \mathbf{d}_k$ {Passo 5}
 | **se** ($\|\mathbf{F}(\mathbf{x}_t)\| \leq (1 - \alpha) \|\mathbf{F}(\mathbf{x}_t)\|$), **então** {Passo 6}
 | | $\mathbf{x}_{k+1} = \mathbf{x}_t$, $k = k + 1$ e vá para Passo 2.
 | **senão**
 | | escolha $\sigma \in [\sigma_0, \sigma_1]$,
 | | $\lambda_k = \sigma \lambda_k$ e vá para o Passo 5,
 | **fim se**
fim enquanto

FIM ALGORITMO

FIM DOCUMENTAÇÃO

O Passo 6 do Algoritmo 2 refere-se à estratégia de globalização considerada, a qual só aceita \mathbf{x}_{k+1} se tal ponto provocar um decréscimo suficiente na norma de \mathbf{F} , dado por $\|\mathbf{F}(\mathbf{x}_{k+1})\| < (1 - \alpha) \|\mathbf{F}(\mathbf{x}_k)\|$, em que $\alpha \in (0, 1)$. Como indicado no Algoritmo 2, seguindo uma sugestão de Kelley (1996) tomamos $\alpha = 10^{-4}$. Nessa estratégia, para se determinar o referido ponto \mathbf{x}_{k+1} , realiza-se uma busca linear a partir de \mathbf{x}_k na direção do vetor \mathbf{d}_k , chamado de direção de Newton. Assim, para permitir uma boa velocidade de convergência local, inicialmente tenta-se o tamanho de passo $\lambda_k = 1$, tipicamente usado no método de Newton clássico. Se esse tamanho de passo unitário se mostrar muito grande, a ponto de não conduzir a um decréscimo suficiente na norma de \mathbf{F} , então o tamanho do passo é reduzido por um fator σ entre 0 e 1. Este procedimento é repetido até que λ_k se torne suficientemente pequeno, de modo que $\mathbf{x}_{k+1} = \mathbf{x}_k + \lambda_k \mathbf{d}_k$ satisfaça a condição de decréscimo suficiente $\|\mathbf{F}(\mathbf{x}_{k+1})\| < (1 - \alpha) \|\mathbf{F}(\mathbf{x}_k)\|$.

Observe que o Algoritmo 2 não especifica como a busca linear é feita na direção de Newton. De fato, a escolha $\sigma \in [\sigma_0, \sigma_1]$ é muito geral, podendo ser realizada de várias maneiras. Uma maneira simples, mas não necessariamente mais apropriada, é aquela onde se considera σ com um valor fixado, por exemplo, $\sigma = 0,5$.

Seguindo Kelley (1996), neste trabalho essa busca linear é feita empregando-se um eficiente procedimento de “*backtracking*” baseado em uma interpolação quadrática da função $g(\lambda) = \|\mathbf{F}(\mathbf{x}_k + \lambda \mathbf{d}_k)\|^2$ em dois pontos, semelhante a um procedimento usado em alguns modernos métodos de Newton com busca linear destinados à otimização sem restrição (DENNIS; SCHNABEL, 1983).

Para isso, suponhamos que o tamanho de passo λ_c (chamado de tamanho do passo corrente) tenha sido rejeitado por não satisfazer o decréscimo suficiente. Para obtermos o próximo valor de λ , denotado por λ_+ , consideramos um polinômio do segundo grau $p = p(\lambda)$, tal que $p(0) = g(0)$, $p'(\lambda_c) = g'(\lambda_c)$ e $p(\lambda_c) = g(\lambda_c)$.

Pode-se mostrar que esse polinômio interpolador é dado por

$$p(\lambda) = g(0) + g'(\lambda_c) \lambda + \left[\frac{g(\lambda_c) - g(0) - g'(\lambda_c) \lambda_c}{\lambda_c^2} \right] \lambda^2, \quad (131)$$

onde na Equação (131) $g(0) = \|\mathbf{F}(\mathbf{x}_k)\|^2$, $g(\lambda_c) = \|\mathbf{F}(\mathbf{x}_k + \lambda_c \mathbf{d}_k)\|^2$ e

$$g'(\lambda_c) = 2\mathbf{F}(\mathbf{x}_k)^T (\mathbf{F}'(\mathbf{x}_k) \mathbf{d}_k). \quad (132)$$

Se $g'(\lambda_c) < 0$ e $g(\lambda_c) > g(0)$, então o coeficiente do termo quadrático do polinômio descrito na Equação (131) é positivo. Em tais condições, o ponto crítico de $p(\lambda)$ é um minimizador de $p(\lambda)$ localizado no intervalo $(0, +\infty)$, o qual pode ser calculado analítica-

mente usando

$$\lambda_t = \frac{-g'(0) \lambda_c^2}{2(g(\lambda_c) - g(0) - g'(0) \lambda_c)}. \quad (133)$$

Portanto, se $g'(0) < 0$ e $g(\lambda_c) > g(0)$, então o novo valor de λ é atualizado fazendo λ_+ igual ao valor do minimizador de $p(\lambda)$ que aproxima a função $g(\lambda)$ no intervalo entre 0 e λ_c . Mais precisamente, consideramos

$$\lambda_+ = \begin{cases} \sigma_0 \lambda_c, & \text{se } \lambda_t < \sigma_0 \lambda_c \\ \sigma_1 \lambda_c, & \text{se } \lambda_t > \sigma_1 \lambda_c \\ \lambda_t, & \text{caso contrário} \end{cases} \quad (134)$$

As duas primeiras sentenças indicadas na Equação (134) são salvaguardas, as quais garantem que λ_+ é sempre da forma $\lambda_+ = \sigma \lambda_c$, para algum $\sigma \in [\sigma_0, \sigma_1]$, como requerido no Passo 6 do Algoritmo 2. Tais salvaguardas são usadas para evitar que λ_+ se torne excessivamente grande ou muito pequeno. Aqui, usamos $\sigma_0 = 0,1$ e $\sigma_1 = 0,5$.

Após o cálculo de λ_+ , verificamos novamente se λ_+ satisfaz ou não a condição de decréscimo suficiente $\|\mathbf{F}(x_k + \lambda_+ \mathbf{d}_k)\| < (1 - \alpha) \|\mathbf{F}(\mathbf{x}_k)\|$. Em caso afirmativo, tomamos $\lambda_k = \lambda_+$. Se não, fazemos $\lambda_c = \lambda_+$ e repetimos processo de busca linear.

Para efeito de análise, abaixo mostraremos que as condições $g'(0) < 0$ e $g(\lambda_c) > g(0)$, assumidas para se obter a atualização mostrada na Equação (134), podem ser substituídas pela seguinte hipótese mais genérica.

Hipótese 5.1: $\mathbf{F}(\mathbf{x}_k)^T \mathbf{r}_k \geq 0$, para todo $k \geq 0$.

Combinando-se as Equações (122) e (132), podemos escrever $g'(0)$ na forma equivalente

$$g'(0) = -2\|\mathbf{F}(\mathbf{x}_k)\|^2 - 2\mathbf{F}(\mathbf{x}_k)^T \mathbf{r}_k \quad (135)$$

Assim, como a primeira consequência da Hipótese 5.1, notamos que (a partir da Equação (135)) ocorre $g'(0) < 0$, para todas as iterações do método de Newton Inexato.

Como a segunda consequência da Hipótese 5.1, notamos que o coeficiente do termo quadrático do polinômio interpolador mostrado na Equação (131) se mantém positivo, em todas as iterações. De fato, suponha (por contradição) que $g(\lambda_c) \leq g(0) + g'(0)\lambda_c$. Como λ_c foi rejeitado por não satisfazer o critério de decréscimo suficiente, temos também que $g(\lambda_c) \geq (1 - \alpha)^2 g(0) = g(0) - \alpha(2 - \alpha)g(0)$. Combinando-se essas duas desigualdades, chega-se às relações $-\alpha(2 - \alpha)g(0) \leq g(\lambda_c) - g(0) \leq g'(0)\lambda_c$. Assim, usando a identidade mostrada na Equação (135) e $g(0) = \|\mathbf{F}(\mathbf{x}_k)\|^2$, a relação $-\alpha(2 - \alpha)g(0) \leq g'(0)\lambda_c$ pode

ser reescrita na forma

$$\left[1 - \frac{\alpha(2-\alpha)}{2\lambda_c}\right] \|\mathbf{F}(\mathbf{x}_k)\|^2 \leq -\mathbf{F}(\mathbf{x}_k)^T \mathbf{r}_k. \quad (136)$$

Como $\alpha = 10^{-4}$ e $0,1 = \sigma_0 \leq \lambda_c$, então segue que $\left[\frac{1-\alpha(2-\alpha)}{2\lambda_c}\right] > 0$. Logo, da desigualdade resumida em (136) obtemos que $\mathbf{F}(\mathbf{x}_k)^T \mathbf{r}_k < 0$, o que contradiz a Hipótese 5.1. Portanto, na presença da Hipótese 5.1, temos que o coeficiente do termo quadrático do polinômio $p(\lambda)$ se mantém positivo, em todas as iterações do método de Newton inexato.

Se θ_k denota o ângulo entre os vetores $\mathbf{F}(\mathbf{x}_k)$ e \mathbf{r}_k , como $\mathbf{F}(\mathbf{x}_k)^T \mathbf{r}_k = \|\mathbf{F}(\mathbf{x}_k)\| \|\mathbf{r}_k\| \cos\theta_k$, então a Hipótese 5.1 exige que $\cos\theta_k > 0$, para todo $k \geq 0$. Logo, do ponto de vista geométrico, essa hipótese mais genérica requer que os vetores $\mathbf{F}(\mathbf{x}_k)$ e \mathbf{r}_k formem sempre um ângulo agudo.

Se a Hipótese 5.1 for violada, o coeficiente do termo quadrático do polinômio descrito na Eq. (131) pode se tornar negativo. Neste caso, a atualização indicada na Eq. (134) escolherá $\lambda_+ = \sigma_0\lambda_c$, se $g'(0) < 0$. A mesma escolha ocorrerá se esse coeficiente for positivo e $g'(0) > 0$. Finalmente, na ausência dessa hipótese, resta-nos ainda analisar a possibilidade de ocorrer o caso mais desfavorável, onde o coeficiente do termo quadrático de $p(\lambda)$ é negativo e $g'(0) > 0$. Em tal caso, a atualização mostrada na Equação (134) pode escolher $\lambda_+ = \lambda_t$, o maximizador de $p(\lambda)$, ou fazer $\lambda_t = \sigma_1\lambda_c$, se $\lambda_t > \sigma_1\lambda_c$. Assim, quando isso acontecer, somente para evitar uma possível escolha do maximizador de $p(\lambda)$, aqui consideramos simplesmente $\lambda_+ = \sigma_1\lambda_c$.

Para finalizar a descrição do método de Newton Inexato usado aqui, necessitamos indicar o método empregado no Passo 3 do Algoritmo 2, para resolver (de forma inexata) as equações de Newton.

A discretização espacial da equação da pressão foi realizada com um esquema de diferenças finitas centradas, juntamente com uma grade de blocos centrados. Assim, pode-se mostrar que a discretização da equação da pressão conduz a um sistema de equações não lineares cuja matriz Jacobina é simétrica e diagonalmente dominante, sendo, conseqüentemente, simétrica positiva definida, (AZIZ, 1979)).

Este fato permite o emprego de diferentes métodos iterativos destinados à resolução de sistemas lineares de grande porte, cuja matriz dos coeficientes do sistema possui essa boa propriedade (KELLEY, 1996). Neste trabalho usamos o Método do Gradiente Conjugado (GC), o qual foi inventado nos anos 50 por Hestenes e Stiefel (1952) para ser um método direto. Devido à aritmética finita dos computadores, nos últimos 40 anos o GC sido tratado como um método iterativo. O método do Gradiente Conjugado é um método consagrado na área de resolução numérica de equações diferenciais parciais, sendo comprovadamente superior ao conhecido método de Gauss-Seidel e à família de métodos do tipo SSOR (KELLEY, 1996). No que segue, o método do Gradiente Conjugado será descrito

de uma maneira pragmática (HESTENES; STIEFEL, 1952; KELLEY, 1996; GLOUB; LOAN, 1996).

Os passos do método de Newton Inexato Globalizado com Gradiente Conjugado (NIG-GC), equipado com a técnica de busca linear descrita acima, são mostrados no Algoritmo 3. Nesse algoritmo, nota-se que o Gradiente Conjugado foi adaptado para resolver (de forma aproximada) o sistema linear $\mathbf{F}'(\mathbf{x}_k)\mathbf{d}_k = -\mathbf{F}(\mathbf{x}_k)$, a cada iteração k , usando um critério de parada que satisfaz $\|\mathbf{r}_k\| \leq \|\eta_k\| \|\mathbf{F}(\mathbf{x}_k)\|$. Observa-se também que foi considerado (como dado inicial para o algoritmo do Gradiente Conjugado) $\mathbf{d}_k = 0$, de forma que na primeira linha do Passo 3 do Algoritmo 3 o residual $\mathbf{r}_k = -\mathbf{F}(\mathbf{x}_k) - \mathbf{F}'(\mathbf{x}_k)\mathbf{d}_k$ se apresenta na forma simplificada $\mathbf{r}_k = -\mathbf{F}(\mathbf{x}_k)$, evitando desse modo o cálculo do produto $\mathbf{F}'(\mathbf{x}_k)\mathbf{d}_k$. Essa escolha para o dado inicial do algoritmo GC é uma escolha razoável comumente usada na literatura, pois o método do Gradiente Conjugado, quando visto como um método direto, deve convergir no máximo após N etapas, independentemente da localização do ponto de partida tomado em \mathbb{R}^N .

Cada etapa do método GC exige o cálculo de $\boldsymbol{\omega} = \mathbf{F}'(\mathbf{x}_k)\mathbf{s}$, o produto da matriz Jacobina $\mathbf{F}'(\mathbf{x}_k)$ por um vetor $\mathbf{s} \in \mathbb{R}^N$. No presente trabalho, a matriz Jacobiana $\mathbf{F}'(\mathbf{x}_k)$ requerida em tal produto não é calculada analiticamente. Também não usamos diferenciação numérica para estimar as derivadas parciais que constituem essa matriz. De fato, observando que $\boldsymbol{\omega} = \mathbf{F}'(\mathbf{x}_k)\mathbf{s}$ efetivamente requer apenas o efeito da matriz $\mathbf{F}'(\mathbf{x}_k)$ sobre o vetor \mathbf{s} , e empregando um escalar $\delta > 0$ suficientemente pequeno, usamos uma estimativa em diferenças finitas (de primeira ordem) para $\boldsymbol{\omega}$, a qual decorre da seguinte aproximação linear $\mathbf{F}(\mathbf{x}_k + \delta\mathbf{s}) \approx \mathbf{F}(\mathbf{x}_k) + \delta\mathbf{F}'(\mathbf{x}_k)\mathbf{s}$ (KELLEY, 1996). Mais precisamente, como descrito no Passo 3 do Algoritmo 3, aqui consideramos

$$\boldsymbol{\omega} = \mathbf{F}'(\mathbf{x}_k)\mathbf{s} \approx \frac{\mathbf{F}(\mathbf{x}_k + \delta\mathbf{s}) - \mathbf{F}(\mathbf{x}_k)}{\delta}, \quad (137)$$

com $\delta = 10^{-7}$.

A cada etapa do método GC, a aproximação mostrada na Equação (137) exige uma avaliação extra da aplicação \mathbf{F} no ponto $\mathbf{x}_k + \delta\mathbf{s}$.

Note que no Passo 4 do Algoritmo 3, a derivada $f'(0)$ é calculada pela fórmula mostrada na Equação (135). Assim, novamente evitamos o produto $\mathbf{F}'(\mathbf{x}_k)\mathbf{d}_k$, exigido inicialmente na Equação (132). Dessa forma, o método de Newton Inexato descrito no Algoritmo 3 torna-se um método livre do cálculo de derivadas.

Observamos que o Algoritmo 3 requer $x_0 \in \mathbb{R}^N$, um vetor de dados iniciais. Como no presente trabalho tal algoritmo é usado para se determinar os valores do campo de pressão no nível de tempo futuro $n + 1$, então, naturalmente, esse vetor (de dados iniciais) deve ser constituído pelos respectivos valores de pressão conhecidos no nível de tempo n , para todo $n \geq 0$.

Como no presente trabalho uma matriz \mathbf{F}' é sempre simétrica positiva definida, então, seus autovalores são números reais positivos. Usando a norma Euclidiana, o chamado número de condição de uma tal Jacobiana \mathbf{F}' , denotado por $k_2(\mathbf{F}')$, é determinado por

$$k_2(\mathbf{F}') = \frac{\mu_{max}}{\mu_{min}}, \quad (138)$$

onde $\mu_{max} > 0$ e $\mu_{min} > 0$ denotam, respectivamente, o maior e o menor autovalor de \mathbf{F}' , de modo que $k_2(\mathbf{F}') \geq 1$ (KELLEY, 1996).

Se o número de condição $k_2(\mathbf{F}')$ tem um valor muito grande, com relação a 1, diz-se que a matriz Jacobina \mathbf{F}' é mal condicionada. Um método de Newton, incluindo métodos de Newton Inexatos, pode falhar ao tentar encontrar uma direção de Newton \mathbf{d}_k . Isso geralmente acontece quando, em uma iteração k , a Jacobiana é mal condicionada, possivelmente pelo fato de $\mathbf{F}'(\mathbf{x}_k)$ se encontrar muito próxima desta matriz, o que efetivamente ocorre quando o seu menor autovalor se aproxima de 0.

Usando um resultado destacado por Vorst e Dekker (1988), pode-se mostrar que no Passo 3 do Algoritmo 3, após i iterações do método do Gradiente Conjugado, o residual relativo $\|\mathbf{r}_k\| / \|\mathbf{F}(\mathbf{x}_k)\|$ é aproximadamente

$$\frac{\|\mathbf{r}_k\|}{\|\mathbf{F}(\mathbf{x}_k)\|} \approx \left(1 - 2\sqrt{\frac{1}{k_2(\mathbf{F}'(x_k))}}\right)^i. \quad (139)$$

onde na Equação (139) i é o contador de iterações o método Gradiente Conjugado.

Assim, a partir dessa estimativa, notamos que para um sistema não linear muito mal condicionado, o método do Gradiente Conjugado terá dificuldade para decrescer o residual relativo além da unidade, o que dificultará a ocorrência do critério de interrupção $\|\mathbf{r}_k\| / \|\mathbf{F}(\mathbf{x}_k)\| \leq \eta_k$, pelo menos em um número razoável de iterações. Portanto, para Jacobianas mal condicionadas, o critério de interrupção adotado no Passo 4 do Algoritmo 3 pode não ser satisfeito. Neste caso, diz-se que ocorreu um *breakdown*.

Na implementação prática do Passo 3 do Algoritmo 3, consideramos que i (o contador de iterações do GC) não pode superar $imax$, um dado inteiro suficientemente grande que representa o número máximo de iterações permitido para o GC. Assim, se eventualmente ocorrer $i = imax$, imprimimos uma mensagem para informar a ocorrência de um *breakdown* e em seguida encerramos definitivamente todos os processos iterativos, tanto o linear interno quanto o não linear externo.

Algoritmo 3 - NIG/GC

DOCUMENTAÇÃO

TÍTULO

NIG/GC - Newton Inexato Globalizado com Gradiente Conjugado

PROPÓSITO

Determinar $\mathbf{x} \in \mathbb{R}^n$, tal que $\left\{ \begin{array}{l} \text{Min } f(\mathbf{x}) = \|\mathbf{F}(\mathbf{x})\|^2 \\ \mathbf{x} \in \mathbb{R} \end{array} \right\}$

ENTRADAS

 $\mathbf{x}_0 \in \mathbb{R}^n$: dado inicial

Escalaes prefixados:

 $e_a = 10^{-5}$, $e_r = 10^{-4}$, $\gamma = 0,9$, $\eta_{max} = 0,9999$, $\alpha = 10^{-4}$, $\sigma_0 = 0,1$, $\sigma_1 = 0,5$ e $\delta = 10^{-7}$.

SAÍDAS

 \mathbf{x} : solução do sistema linear**declarar** τ_t Real ($\tau_t = e_a \sqrt{N} + e_r \|\mathbf{F}(\mathbf{x}_0)\|$)**declarar** i Inteiro ($i = 1$)**declarar** k Inteiro ($k = 0$)**declarar** e_a, e_r Real

{Inicializa o processo iterativo}

enquanto ($\|\mathbf{F}(\mathbf{x}_k)\| > \tau_t$), **fazer** {Passo 1}
| $g(0) = \|\mathbf{F}(\mathbf{x}_k)\|^2$

{Gerando o termo forçante}

| {Passo 2}
| $\eta_k^C \left\{ \begin{array}{ll} \eta_{max}, & \text{se } k = 0 \\ \min \left(\eta_{max}, \gamma \frac{\|\mathbf{F}(\mathbf{x}_k)\|^2}{\|\mathbf{F}(\mathbf{x}_{k-1})\|^2} \right), & \text{se } k > 0 \text{ e } \eta_{k-1}^2 < 0,1 \\ \min \left(\eta_{max}, \max \left(\gamma \frac{\|\mathbf{F}(\mathbf{x}_k)\|^2}{\|\mathbf{F}(\mathbf{x}_{k-1})\|^2}, \gamma \eta_{k-1}^2 \right) \right), & \text{se } k > 0 \text{ e } \eta_{k-1}^2 > 0,1 \end{array} \right\}$
 $\eta_k = \min \left(\eta_{max}, \max \left(\eta_k^C, \frac{0,5\tau_t}{\|\mathbf{F}(\mathbf{x}_k)\|} \right) \right)$.

{Gradiente Conjugado livre de derivadas}

| {Passo 3}

| $\mathbf{r}_k = -\mathbf{F}(\mathbf{x}_k)$,
| $\varrho_0 = \|\mathbf{r}_k\|^2$,
| $i = 1$,

— continua —

Algoritmo 3 - NIG/GC (continuação)

— *continuação* —

```

| enquanto ( $\| \mathbf{r}_k \| > \eta_k \| \mathbf{F}(\mathbf{x}_k) \|$ ), fazer
|   se ( $i = 1$ ), então
|      $\mathbf{s} = \mathbf{r}_k$ 
|     senão
|        $\beta = \frac{\varrho_{i-1}}{\varrho_{i-2}}$  e  $\mathbf{s} = \mathbf{r}_k + \beta \mathbf{s}$ ,
|     fim se
|      $\omega = \frac{(\mathbf{F}(\mathbf{x}_k + \delta \mathbf{s}) - \mathbf{F}(\mathbf{x}_k))}{\delta}$ 
|      $\varphi = \frac{\varrho_{i-1}}{\mathbf{s}^T \omega}$ 
|      $\mathbf{d}_k = \mathbf{d}_k + \varphi \mathbf{s}$ ,
|      $\mathbf{r}_k = \mathbf{r}_k - \varphi \omega$ ,
|      $\varrho_i = \| \mathbf{r}_k \|^2$ ,
|      $i = i + 1$ ,
|   fim enquanto

|    $\lambda_k = 1$ . ..... {Passo 4}
|    $\mathbf{x}_t = \mathbf{x}_k + \lambda_k \mathbf{d}_k$ . ..... {Passo 5}

| {Etapa de buscar linear}
| ..... {Passo 6}

| se ( $\| \mathbf{F}(\mathbf{x}_t) \| < (1 - \alpha) \| \mathbf{F}(\mathbf{x}_k) \|$ ), então
|    $\mathbf{x}_{k+1} = \mathbf{x}_t$ ,  $k = k + 1$  e vá para Passo 1,
|   senão
|      $\lambda_t = \frac{-g'(0)\lambda_k^2}{2(g(\lambda_k) - g(0) - g'(0)\lambda_k)}$ 
|     se ( $\lambda_t > 0$  e  $g' > 0$ ), então
|        $\lambda_t = \sigma_1 \lambda_k$ ,
|        $\lambda_k = \begin{cases} \sigma_0 \lambda_k, & \text{se } \lambda_t < \sigma_0 \lambda_k \\ \sigma_1 \lambda_k, & \text{se } \lambda_t > \sigma_1 \lambda_k \\ \lambda_t, & \text{caso contrário} \end{cases}$ 
|       e vá para o Passo 5,
|     fim se
|   fim se

```

FIM ALGORITMO

FIM DOCUMENTAÇÃO

5.4 O Método DFSANE e suas modificações

O problema em questão trata da resolução de um sistema não linear de grande porte o qual pode ser sumarizado como:

Determinar $\mathbf{x} \in \mathbb{R}^N$, tal que

$$\mathbf{F}(\mathbf{x}) = \mathbf{0}, \quad (140)$$

onde na Equação (140) $\mathbf{F}: \mathbb{R}^N \rightarrow \mathbb{R}^N$ é uma dada aplicação não linear suficientemente diferenciável.

O método DFSANE, proposto por La Cruz, Martínez e Raydan (2006), é um método para a resolução de sistemas não lineares desse tipo, o qual procura resolver o problema de mínimos quadrados não lineares dado por

$$\begin{cases} \text{Min } f(\mathbf{x}) = \|\mathbf{F}(\mathbf{x})\|^2 \\ \mathbf{x} \in \mathbb{R} \end{cases} \quad (141)$$

Para isso, o método de La Cruz, Martínez e Raydan (2006) usa uma busca linear que emprega o chamado coeficiente espectral sugerido por Barzilai e Borwein (1988). Note que $\mathbf{x} \in \mathbb{R}^N$ é uma solução do problema (140) se, e somente se, \mathbf{x} é um minimizador (global) do problema (141)

Dada uma função diferenciável $f: \mathbb{R}^N \rightarrow \mathbb{R}$, existem vários métodos iterativos desenvolvidos para resolver o problema de otimização

$$\begin{cases} \text{Min } f(x) \\ \mathbf{x} \in \mathbb{R}, \end{cases} \quad (142)$$

os quais buscam determinar \mathbf{x}^* , tal que

$$\nabla f(\mathbf{x}^*) = \mathbf{0}, \quad (143)$$

onde na Equação (143) ∇f denota o vetor Gradiente de f . Dentre os métodos utilizados para resolver o problema mostrado na Equação (142), há uma classe de métodos iterativos que se valem de baixa estocagem, sendo, dessa maneira, convenientes para problemas de grande porte. Segundo Dennis e Schnabel (1983), nessa classe está o chamado método do gradiente (*steepest descent method*), o qual realiza buscas por uma solução do problema mostrado na Equação (142) ao longo da direção de máxima descida de f , definida por $-\nabla f$ (DENNIS; SCHNABEL, 1983).

Assim, dado \mathbf{x}_0 , um método do tipo gradiente, gera uma sequência da forma $\{\mathbf{x}_k\}$,

tal que

$$\mathbf{x}_{k+1} = \mathbf{x}_k - \nabla f(\mathbf{x}_k). \quad (144)$$

Apesar de apropriado para problemas de grande porte, como verificado na solução de muitos problemas práticos, métodos do tipo gradiente costumam convergir lentamente Dennis e Schnabel (1983). Com o objetivo de acelerar a convergência da sequência descrita na Equação (144), Barzilai e Borwein (1988) propuseram um outro método do tipo gradiente, definido por

$$\mathbf{x}_{k+1} = \mathbf{x}_k - \frac{1}{\alpha_k} \nabla f(\mathbf{x}_k), \quad (145)$$

onde na Equação (145), para todo $k \geq 1$, o escalar α_k é o argumento que minimiza a função de uma variável α definida por $\| \alpha \mathbf{s}_{k-1} - \mathbf{y}_{k-1} \|^2$, com $\mathbf{s}_{k-1} = \mathbf{x}_k - \mathbf{x}_{k-1}$ e $\mathbf{y}_{k-1} = \nabla f(\mathbf{x}_k) - \nabla f(\mathbf{x}_{k+1})$, onde pode-se ver que o minimizador dessa função auxiliar é:

$$\alpha_k = \frac{\mathbf{s}_{k-1}^T \mathbf{y}_{k-1}}{\mathbf{s}_{k-1}^T \mathbf{s}_{k-1}}. \quad (146)$$

O parâmetro α_k definido na Equação (146) é denominado de coeficiente espectral e o método de Barzilai e Borwein (1988) é, frequentemente, chamado de método do Gradiente Espectral (RAYDAN, 1993). Como enfatizado por Barzilai e Borwein (1988), o método do Gradiente Espectral não gera uma sequência monótona, no sentido de que não ocorre $f(\mathbf{x}_{k-1}) \leq f(\mathbf{x}_k)$, para todo k .

Note que a função objetivo $f(\mathbf{x}) = \| \mathbf{F}(\mathbf{x}_k) \|^2$ do problema de norma mínima descrito na Equação (141) possui o seguinte vetor gradiente

$$\nabla f(\mathbf{x}) = 2\mathbf{F}'(\mathbf{x})^T \mathbf{F}(\mathbf{x}) \quad (147)$$

onde na Equação (147) $\mathbf{F}'(\mathbf{x})$ é a matriz Jacobiana da aplicação $\mathbf{F}(\mathbf{x})$.

Seguindo uma proposta formulada inicialmente por La Cruz e Raydan (2003), nota-se que em vez de usar a direção do gradiente de $f(x) = \| \mathbf{F}(\mathbf{x}_k) \|^2$, a qual exige o cálculo da matriz Jacobiana $\mathbf{F}'(\mathbf{x}_k)$ em cada passo de iteração, pode-se definir um método

espectral fazendo-se simplesmente:

$$\mathbf{x}_{k+1} = \mathbf{x}_k \pm \frac{1}{\alpha_k} \mathbf{F}(\mathbf{x}_k), \quad (148)$$

onde na Equação (148) o coeficiente espectral é calculado pela mesma fórmula mostrada na Equação (146), mas agora com \mathbf{s}_{k-1} e \mathbf{y}_{k-1} dados por:

$$\mathbf{s}_{k-1} = \mathbf{x}_k - \mathbf{x}_{k-1}, \quad (149)$$

$$\mathbf{y}_{k-1} = \mathbf{F}(\mathbf{x}_k) - \mathbf{F}(\mathbf{x}_{k-1}). \quad (150)$$

Na Equação (149), a opção dos sinais \pm vem do fato de que o vetor de busca inicial $-(\frac{1}{\alpha_k})\mathbf{F}(\mathbf{x}_k)$, pode não ser necessariamente uma direção de descida de $f(\mathbf{x}) = \|\mathbf{F}(\mathbf{x}_k)\|^2$, a partir do ponto \mathbf{x}_k , isto é, em geral:

$$\nabla f(\mathbf{x}_k)^T \left[-\frac{1}{\alpha_k} \mathbf{F}(\mathbf{x}_k) \right] = -\frac{2}{\alpha_k} \mathbf{F}(\mathbf{x}_k)^T \mathbf{F}'(\mathbf{x}_k) \mathbf{F}(\mathbf{x}_k) \quad (151)$$

não é necessariamente um número negativo. Assim, quando isso ocorrer, escolhe-se $+(\frac{1}{\alpha_k})\mathbf{F}(\mathbf{x}_k)$ como sendo a direção de descida a ser utilizada na Equação 148.

Observe que o uso de $\mathbf{F}(\mathbf{x}_k)$ na Equação (148), em vez de $\nabla f(\mathbf{x}) = 2\mathbf{F}(\mathbf{x})^T \mathbf{F}(\mathbf{x})$, equivale á seguinte aproximação:

$$\mathbf{F}'(\mathbf{x}) \approx \frac{1}{2} \mathbf{I}, \quad (152)$$

onde na Equação (152) \mathbf{I} é a matriz identidade de ordem N .

Como resultado da utilização do coeficiente espectral, a sequência gerada pelo método mostrado na Equação (148) também não é monótona. Assim, sua convergência pode depender da localização do dado inicial.

Para tratar essa questão de convergência, as iterações do algoritmo DFSANE proposto por La Cruz, Martínez e Raydan (2006) são da forma:

$$\mathbf{x}_{k+1} = \mathbf{x}_k + \lambda_k \underbrace{\left(\pm \frac{1}{\alpha_k} \mathbf{F}(\mathbf{x}_k) \right)}_{\mathbf{d}_k} \quad (153)$$

onde na Equação (153), $\lambda_k > 0$ é o tamanho do passo tomado na direção de busca $\mathbf{d}_k = \pm(1/\alpha_k)\mathbf{F}(\mathbf{x}_k)$, o qual é determinado usando-se uma busca linear inexata. Desse modo, procura-se agregar ao método DFSANE boas propriedades de convergência global provenientes de escolhas criteriosas para λ_k .

A busca linear inexata originalmente empregada no algoritmo DFSANE foi desenvolvida para satisfazer uma condição baseada na clássica condição de não monotonicidade de Grippo, Lampariello e Lucidi (1986). Mais precisamente, no algoritmo apresentado por La Cruz, Martínez e Raydan (2006), o tamanho de passo λ_k só é aceito se satisfazer a seguinte condição:

$$f(\mathbf{x}_k + \lambda_k \mathbf{d}_k) \leq \max_{0 \leq j \leq M-1} f(\mathbf{x}_{k-j}) + \epsilon_k - \gamma \lambda_k^2 f(\mathbf{x}_k), \quad (154)$$

onde na Equação (154) $\{\epsilon_k\}$ é uma sequência (de número reais não negativos) convergente, M é um inteiro não negativo e $0 < \gamma < 1$.

A condição mostrada na Equação (154) é de não monotonicidade porque ela permite a geração de uma sequência $f(x_k)$, onde não ocorre, necessariamente, a relação de decrescimento $f(\mathbf{x}_{k+1}) < f(\mathbf{x}_k)$, para todo k . Desse modo, em uma vizinhança do dado inicial \mathbf{x}_0 , o algoritmo DFSANE pode aceitar pontos da forma $\mathbf{x}_{k+1} = \mathbf{x}_k + \lambda_k \mathbf{d}_k$, onde a função objetivo $f(\mathbf{x}) = \|\mathbf{F}(\mathbf{x})\|^2$ cresce de valor.

Ao contrário da condição de não monotonicidade clássica de Grippo, Lampariello e Lucidi (1986), dada por

$$f(\mathbf{x}_k + \lambda_k \mathbf{d}_k) \leq \max_{0 \leq j \leq M-1} f(\mathbf{x}_{k-j}) + \gamma \lambda_k \nabla f(\mathbf{x}_k)^T \mathbf{d}_k, \quad (155)$$

a qual foi usada em uma proposta inicial formulada por La Cruz e Raydan (2003) que originou um método semelhante ao DFSANE, chamado simplesmente de SANE, deve-se notar que a condição definida na Equação (154) não depende do gradiente $\nabla f(x) = 2\mathbf{F}'(x)^T \mathbf{F}(x)$ que aparece na Equação (155). Assim, o DFSANE é um método espectral totalmente livre do cálculo de derivadas, as quais geralmente são empregadas na construção da matriz Jacobiana $\mathbf{F}'(\mathbf{x})$.

Na busca inexata, o método DFSANE, inicia com $\lambda_k = 1$. Se esse tamanho de passo unitário não satisfazer a condição (154), o DFSANE usa uma técnica de *backtracking* semelhante àquela descrita por (DENNIS; SCHNABEL, 1983) e (KELLEY, 1996), a qual emprega $p(\lambda)$, um polinômio quadrático obtido por uma interpolação em dois pontos.

Para isso, considerando $\mathbf{d}_k = \pm(1/\alpha_k)\mathbf{F}(\mathbf{x}_k)$, La Cruz, Martínez e Raydan (2006) construíram o polinômio interpolador exigindo que $p(0) = f(\mathbf{x}_k) \equiv \|\mathbf{F}\mathbf{x}_k\|^2$, $p'(0) = -2f(\mathbf{x}_k) \equiv -2\|\mathbf{F}\mathbf{x}_k\|^2$ e $p(\lambda_c) = f(\mathbf{x}_k) + \lambda_c \mathbf{d}_k \equiv \|\mathbf{F}(\mathbf{x}_k) + \lambda_c \mathbf{d}_k\|^2$, onde λ_c denota

o tamanho do passo corrente que foi rejeitado, por não satisfazer a condição de não monotonicidade mostrada na Equação (154). Desse modo, para $\mathbf{d}_k = \pm \left(\frac{1}{\alpha_k}\right) \mathbf{F}(\mathbf{x}_k)$, obtém-se o seguinte polinômio quadrático:

$$p(\lambda) = f(\mathbf{x}_k) - 2f(\mathbf{x}_k)\lambda + \left[\frac{(\mathbf{x}_k + \lambda_c \mathbf{d}_k) - f(\mathbf{x}_k) + 2f(\mathbf{x}_k)\lambda_c}{\lambda_c^2} \right] \lambda^2. \quad (156)$$

Devido a escolha $p'(0) = -2 \|\mathbf{F}(\mathbf{x})\|^2$, a derivada de $p(\lambda)$ no ponto $\lambda = 0$ é sempre negativa. Tal escolha é coerente, pois no DFSANE o sinal de $\mathbf{d}_k = \pm (1/\alpha_k) \mathbf{F}(\mathbf{x}_k)$ é selecionado para obrigar o vetor \mathbf{d}_k ser sempre uma direção de descida de f em \mathbf{x}_k , ou seja, sempre se tem $\nabla f(\mathbf{x}_k)^T \mathbf{d}_k < 0$.

O ponto crítico do polinômio mostrado na Equação (156) é determinado analiticamente por

$$\lambda_t = \frac{\lambda_c^2 f(\mathbf{x}_k)}{f(\mathbf{x}_k + \lambda_c \mathbf{d}_k) + (2\lambda_c - 1)f(\mathbf{x}_k)}, \quad (157)$$

o qual é um minimizador de $p(\lambda)$, se $f(\mathbf{x}_k + \lambda_c \mathbf{d}_k) < f(\mathbf{x}_k)$.

Considerando-se o mesmo procedimento de salvaguarda usado por (KELLEY, 1996), no DFSANE o tamanho do passo futuro é determinado por

$$\lambda_{\pm} = \begin{cases} \sigma_0 \lambda_c, & \text{se } \lambda_t < \sigma_0 \lambda_c \\ \sigma_1 \lambda_c, & \text{se } \lambda_t < \sigma_1 \lambda_c \\ \lambda_t, & \text{caso contrário} \end{cases} \quad (158)$$

onde a Equação (158) $0 < \sigma_0 < \sigma_1$ são escalares prefixados. Observe que a condição de salvaguarda mostrada na Equação (158) procura evitar que o tamanho do passo se torne muito grande ou muito pequeno.

Após esse cálculo, para prosseguir com a determinação do tamanho do passo de busca na iteração k verifica-se novamente se o candidato λ_{\pm} satisfaz ou não a condição mostrada na Equação (154). Em caso afirmativo, aceita-se o tamanho de passo como sendo $\lambda_k = \lambda_{\pm}$. Caso contrário, faz-se a atualização $\lambda_c = \lambda_{\pm}$ e repete-se novamente esse processo de busca linear inexata ao longo de $\mathbf{d}_k = \pm (1/\alpha_k) \mathbf{F}(\mathbf{x}_k)$ até que a condição (154) seja finalmente satisfeita.

Influenciada pela condição de não monotonicidade de Grippo, Lampariello e Lucidi (1986), observa-se que a condição de não monotonicidade livre de derivadas mostrada na Equação (154) depende da escolha do parâmetro $M > 0$, cujo valor pode estar fortemente associado as características do sistema não linear considerado e da dimensão desse tal sistema.

Para contornar esse problema, mais recentemente, Cheng e Li (2008) modificaram o método DFSANE. Para isso, esses autores trocaram a condição (154) por outra condição de não monotonicidade que não depende do parâmetro M . Essa condição, que também é livre de derivadas tem se mostrado mais adequada para a busca linear não monótona, associada com a etapa de globalização do algoritmo DFSANE. Essa condição, que também é livre de derivadas, é dada por:

$$f(\mathbf{x}_k + \lambda_k \mathbf{d}_k) \leq C_k + \epsilon_k - \gamma \lambda_k^2 f(\mathbf{x}_k), \quad (159)$$

onde na Equação (159) ϵ_k é uma sequência (de números reais não negativos) convergente, $C_0 = f(\mathbf{x}_0)$ e C_k é atualizado pelas seguintes regras:

$$Q_{k+1} = \beta_k Q_k + 1, \quad (160)$$

$$C_k = \frac{\beta_k Q_k (C_k + \epsilon_k) + f(\mathbf{x}_{k+1})}{Q_{k+1}}, \quad (161)$$

com $Q_0 = 1$ e $\beta_k \in [0, 1]$, para todo k .

Durante o desenvolvimento deste trabalho, notamos que a condição de não monotonicidade de (CHENG; LI, 2008) e também aquela proposta originalmente por La Cruz, Martínez e Raydan (2006), Equação (154), não são totalmente apropriadas para resolver o sistema definido pela equação da pressão do modelo miscível.

De fato, após vários testes computacionais, verificamos que o mal condicionamento desse sistema impõe restrições a realização da busca linear inexata. Mais precisamente, tal mal condicionamento cria severas dificuldades para a determinação de um valor $\lambda_k > 0$ que satisfaça a Equação (154), ou a Equação (159), após um número de tentativas razoável. Consequentemente, tais condições tornam o DFSANE extremamente lento, quando empregado para resolver o sistema considerado.

Com isso, observamos que a utilização do método DFSANE na resolução de um sistema mal condicionado exige uma condição de não monotonicidade que tenha a propriedade de relaxar as exigências impostas pelas condições descritas nas Equações (154) e (159), as quais são muito severas para um tal sistema não linear. Isso implica na utilização de uma condição apropriada para aceitar tamanhos de passos que, possivelmente, produzirão uma sequência $f(\mathbf{x}_k)$ altamente não monótona.

Para satisfazer essa exigência imposta pelo mal condicionamento do sistema, aqui modificaremos o método DFSANE. Para isso, utilizaremos uma condição de não monotonicidade livre de derivadas, a qual é capaz de aceitar tamanhos de passos após poucas

tentativas e em um intervalo de tempo de computação razoável, produzindo uma sequência $f(\mathbf{x}_k)$ altamente não monótona.

Usaremos a condição de Cheng e Li (2008), descrita na Equação (159). No entanto, em vez da atualização mostrada na Equação (161), a fim de gerar uma sequência altamente não monótona, consideraremos a seguinte atualização para o parâmetro C_k :

$$C_k = \frac{\beta_k Q_k (C_k + \omega_k) + f(\mathbf{x}_{k+1})}{Q_{k+1}} \quad (162)$$

onde na Equação (162) agora $\{\omega_k\}$ é uma sequência (de número reais não negativos) ligeiramente crescente, em vez de convergente.

O Algoritmo 4 descreve em detalhes os passos do método DFSANE modificado usado aqui, onde consideramos:

$$\gamma = 10^{-4},$$

$$\beta_k = 0,85,$$

$$\omega_k = (k + 1)^{1,3}e$$

$$\epsilon_k = \frac{\|\mathbf{F}(\mathbf{x}_0)\|}{\omega_k}$$

para todo $k \geq 0$.

No Passo 6 do Algoritmo 4 encontra-se um procedimento prático proposto por La Cruz, Martínez e Raydan (2006), usado para evitar que a magnitude de $1/\alpha_{k+1}$ se torne muito grande, ou muito pequena.

A condição de interrupção do processo iterativo gerado pelo método DFSANE é definida no Passo 2 do Algoritmo 4, a qual é exatamente a mesma proposta por La Cruz, Martínez e Raydan (2006), onde e_a e e_r são as, respectivas, tolerâncias absoluta e relativa.

A menos que seja dito explicitamente ao contrário, nos exemplos considerados aqui utilizaremos (a princípio) $e_a = 10^{-5}$ e $e_r = 10^{-4}$.

Comparando-se o método DFSANE com o método de Newton Inexato Globalizado com Gradiente Conjugado (NIG/GC), mostrado no Algoritmo 3, observa-se que o DFSANE não é apenas livre de derivadas. De fato, ao contrário do NIG/GC, o DFSANE é também um método livre de resoluções de sistemas lineares.

Algoritmo 4 - DFSANE

DOCUMENTAÇÃO

TÍTULO

DFSANE - Derivative-Free Spectral Algorithm for Nonlinear Equations

PROPÓSITO

Determinar $\mathbf{x} \in \mathbb{R}^n$, tal que $\left\{ \begin{array}{l} \text{Min } f(\mathbf{x}) = \|\mathbf{F}(\mathbf{x})\|^2 \\ \mathbf{x} \in \mathbb{R} \end{array} \right\}$

ENTRADAS

$\mathbf{x}_0 \in \mathbb{R}^n$: dado inicial

Escalares prefixados:

σ_0, σ_1 e γ .

SAÍDAS

\mathbf{x} : solução do sistema linear

declarar C_0 **Real** ($C_0 = f(\mathbf{x}_0)$)

declarar Q_0 **Real** ($Q_0 = 1$)

declarar e_0 **Real** ($e_0 = \|\mathbf{F}(\mathbf{x}_0)\|$)

declarar $\left(\frac{1}{\alpha_0}\right) = 1$

declarar k **Inteiro** ($k = 0$)

declarar λ_+, λ_- **Real**

declarar e_a, e_r **Real**

{Inicializa o processo iterativo}

enquanto $\left(\frac{\|\mathbf{F}(\mathbf{x}_k)\|}{\sqrt{N}} > e_a + e_r \frac{\|\mathbf{F}(\mathbf{x}_0)\|}{\sqrt{N}}\right)$, **fazer** {Passo 1}

| $\mathbf{d}_k = -\left(\frac{1}{\alpha_k}\right)\mathbf{F}(\mathbf{x}_k)$, $\lambda_+ = 1$, $\lambda_- = 1$ {Passo 2}

| **se** $(f(\mathbf{x}_k + \lambda_+\mathbf{d}_k) \leq C_k + e_k - \gamma\lambda_+^2 f(\mathbf{x}_k))$, **então** {Passo 3}

| | $\lambda_k = \lambda_+$ e $\mathbf{x}_{k+1} = \mathbf{x}_k + \lambda_k\mathbf{d}_k$

| **senão**

| | **se** $(f(\mathbf{x}_k - \lambda_-\mathbf{d}_k) \leq C_k + e_k - \gamma\lambda_-^2 f(\mathbf{x}_k))$, **então**

| | | $\lambda_k = \lambda_-$, e $\mathbf{x}_{k+1} = \mathbf{x}_k - \lambda_k\mathbf{d}_k$

| | **senão**

| | | $\lambda_t^+ = \frac{\lambda_+^2 f(\mathbf{x}_k)}{f(\mathbf{x}_k + \lambda_+\mathbf{d}_k) + (2\lambda_+ - 1)f(\mathbf{x}_k)}$

| | | $\lambda_t^- = \frac{\lambda_-^2 f(\mathbf{x}_k)}{f(\mathbf{x}_k - \lambda_-\mathbf{d}_k) + (2\lambda_- - 1)f(\mathbf{x}_k)}$

| | | $\lambda_+ = \begin{cases} \sigma_0\lambda_+, & \text{se } \lambda_t^+ < \sigma_0\lambda_+ \\ \sigma_1\lambda_+, & \text{se } \lambda_t^+ > \sigma_1\lambda_+ \\ \sigma_t^+, & \text{caso contrário} \end{cases}$

— continua —

Algoritmo 4 - DFSANE (continuação)

— *continuação* —

```

|   |   |   λ- = { σ0λ-,   se λt- < σ0λ-
|   |   |   σ1λ-,   se λt- > σ1λ-
|   |   |   σt-,     caso contrário
|   |   |   E vá para o início do passo 3.
|   |   |   fim se
|   |   |   fim se
|   |   |   ..... {Passo 4}
|   |   |   Qk+1 = 0,85Qk + 1, ωk = (k + 1)1,3   e   Ck+1 =  $\frac{0,85Q_k(C_k + \omega_k) + f(\mathbf{x}_{k+1})}{Q_{k+1}}$ 
|   |   |   ..... {Passo 5}
|   |   |   sk+1 = xk+1 - xk, yk+1 = F(xk+1) - F(xk)   e    $\frac{1}{\alpha_{k+1}} = \frac{\mathbf{s}_{k+1}^T \mathbf{s}_{k+1}}{\mathbf{s}_{k+1}^T \mathbf{y}_{k+1}}$ 
|   |   |   se (|1/αk+1| ∉ [10-10, 10+10]), então
|   |   |    $\frac{1}{\alpha_{k+1}} = \begin{cases} 1 & , \text{ se } \|\mathbf{F}(\mathbf{x}_k)\| > 1 \\ \|\mathbf{F}(\mathbf{x}_k)\|^{-1} & , \text{ se } 10^{-5} \leq \|\mathbf{F}(\mathbf{x}_k)\| \leq 1 \\ 10^5 & , \text{ se } \|\mathbf{F}(\mathbf{x}_k)\| < 10^{-5} \end{cases}$ 
|   |   |   fim se
|   |   |   εk+1 =  $\frac{\|\mathbf{F}(\mathbf{x}_0)\|}{\omega_k}$  ..... {Passo 6}
|   |   |   k = k + 1 e volte para o passo 2 ..... {Passo 7}

```

fim enquanto

FIM ALGORITMO

FIM DOCUMENTAÇÃO

Nossos extensivos experimentos computacionais mostram que, para o problema de interesse no presente trabalho, o método DFSANE descrito no Algoritmo 4 nunca seleciona a direção de busca dada por $\mathbf{d}_k = (1/\alpha_k)\mathbf{F}(\mathbf{x}_k)$, ou seja, só emprega a direção $\mathbf{d}_k = (-1/\alpha_k)\mathbf{F}(\mathbf{x}_k)$. Talvez, isso se justifica pelo fato da matriz jacobiana $\mathbf{F}'(\mathbf{x}_k)$ associada com a equação da pressão ser simétrica definida positiva, o que, por sua vez, é uma consequência do uso do esquema de diferenças finitas centrada de segunda ordem.

Assim, no código usado para gerar todos os resultados mostrados aqui, trocamos o Passo 3 do Algoritmo 4 pelo seguinte passo:

Passo 3'. Se $f(\mathbf{x}_k + \lambda_+ \mathbf{d}_k) \leq C_k + e_k - \gamma \lambda_+^2 f(\mathbf{x}_k)$ então

$$\text{faça } \lambda_k = \lambda_+ \quad e \quad \mathbf{x}_{k+1} = \mathbf{x}_k + \lambda_k \mathbf{d}_k$$

Se não faça

$$\lambda_t^+ = \frac{\lambda_+^2 f(\mathbf{x}_k)}{f(\mathbf{x}_k + \lambda_+ \mathbf{d}_k) + (2\lambda_+ - 1)f(\mathbf{x}_k)}$$

$$\lambda_+ = \begin{cases} \sigma_0 \lambda_+, & \text{se } \lambda_t^+ < \sigma_0 \lambda_+ \\ \sigma_1 \lambda_+, & \text{se } \lambda_t^+ > \sigma_1 \lambda_+ \\ \sigma_t^+, & \text{caso contrário} \end{cases}$$

e volte para o Passo 3.

Essa modificação resulta em uma implementação computacional mais econômica (em termos de tempo de CPU) do Algoritmo 4, própria para o problema considerado aqui.

6 RESULTADOS

6.1 Meio Poroso Homogêneo

6.1.1 Aspectos Gerais

Nesta seção, serão apresentados os resultados do simulador numérico para o escoamento miscível e compressível em meios porosos denominado de SEMD (Simulador para o Escoamento Miscível sem Derivadas), o qual foi desenvolvido neste trabalho usando os modelos e métodos descritos anteriormente.

Assim, a equação da pressão para fluidos compressíveis (uma equação diferencial parcial parabólica não linear de segunda ordem) foi discretizada através de diferenças finitas centradas, conforme descrito no capítulo 4 classicamente usada na simulação de reservatórios de petróleo (AZIZ, 1979). A discretização da equação da fração mássica do solvente (uma equação diferencial parcial do tipo advecção-difusão) foi feita por diferenças finitas centradas com limitadores de fluxo como apresentado no capítulo 4

O passo de tempo segue o desacoplamento determinado pela metodologia IMPES, onde a equação da pressão é resolvida implicitamente e, em sequência, a equação da fração mássica do solvente é tratada de forma explícita, (AZIZ, 1979).

A equação não linear que governa a variação do campo de pressão é resolvida numericamente usando-se o algoritmo DFSANE, proposto por La Cruz, Martínez e Raydan (2006), o qual é um método espectral totalmente livre de derivadas, destinado à resolução de sistemas não lineares de grande porte. Para esta mesma tarefa, o SEMD foi também equipado com outra rotina, a qual implementa o método de Newton Inexato com Gradiente Conjugado livre de derivadas.

A comparação do desempenho do DFSANE com relação ao método de Newton Inexato é um dos objetivos do presente capítulo. Para isso, usamos os Algoritmos 3 e 4, onde o Algoritmo 4 foi implementado com a simplificação descrita na Seção 5.4.

As grandezas físicas associadas a todos os exemplos considerados a seguir são medidas nas unidades do sistema híbrido de Darcy, onde a permeabilidade é dada em darcy, o tempo em segundo, o comprimento em centímetro, a pressão em atmosfera e a viscosidade em centipoise (*cp*) (COLLINS, 1961). Assim, a velocidade fica determinada em centímetro por segundo e a taxa volumétrica de injeção (ou produção) é dada em centímetros cúbicos por segundo (ERTEKIN; ABOU-KASSEM; KING, 2001).

No que segue, consideraremos três exemplos distintos. Em todos eles, o meio poroso retangular Ω é discretizado usando-se uma grade com 100×100 blocos, onde $\Delta x = \Delta y = 10 \text{ cm}$, o que resulta em um reservatório de 100 metros quadrados de área. O passo de tempo usado é $\Delta t = 100 \text{ s}$, o qual foi selecionado após intensivos

testes computacionais. Aqui, consideraremos que o meio poroso tem espessura constante $\Delta z = 10 \text{ cm}$.

O regime trata-se de um arranjo de poços de produção do reservatório usado é do tipo *five-spot*. Isso significa que o solvente é injetado em um poço localizado em um bloco que se encontra em um dos *cornes* do domínio retangular, enquanto o óleo é extraído em outro poço que está localizado no bloco de canto diametralmente oposto ao poço de injeção.

Os três exemplos dessa subseção foram simulados com os dados mostrados na Tabela 2, onde nessa tabela P_0 denota o valor da pressão inicial em todos os pontos do reservatório. No poço de injeção, consideramos $w(t) = 1$, para todo $t \geq 0$. Nesses três exemplos o meio poroso é considerado homogêneo.

Tabela 2 - Dados para pressão inicial, taxa de injeção, porosidade, permeabilidade, parâmetros para o modelo de poço e para a equação de estado.

P_0 (<i>atm</i>)	Q cm^3/s	ϕ	k (<i>darcy</i>)	r_w (<i>cm</i>)	P_w (<i>atm</i>)	ρ_r (<i>g/cm</i>)	P_r (<i>atm</i>)	β_T (atm^{-1})
30	0,2	0,2	0,05	0,5	20	0,9	1,0	1×10^{-7}

Fonte: A autora, 2020.

Os valores de μ_0 , μ_s , d_M , α_L e α_T , referentes à modelagem da mobilidade do escoamento e ao fenômeno de dispersão, variam de acordo com os exemplos tratados aqui. Com exceção do bloco onde está o poço de injeção, os valores iniciais de w são considerados nulos em todos os nós da grade.

Todos os resultados numéricos mostrados aqui foram obtidos usando-se um computador equipado com 2 processadores Intel Xeon E5-2420 Hexa-Core, com 1.9 GHz e 10 MB de memória cache LGA. Os códigos foram compilados na linguagem FORTRAN 77, usando-se o *software* Intel Parallel Studio XE 2013.

6.1.2 Exemplo 1: Escoamento Puramente Advectivo

Neste exemplo, consideraremos um escoamento miscível puramente advectivo, onde o coeficiente difusão molecular e os coeficientes de dispersão longitudinal e transversal assumem, por hipótese, o valor zero, ou seja, $d_M = 0,0 \text{ cm}^2/\text{s}$ e $\alpha_L = \alpha_T = 0,0 \text{ cm}$. Suporemos neste exemplo dois casos particulares: no primeiro caso o óleo e o solvente possuem a mesma viscosidade, μ_o e μ_s , respectivamente dadas por $\mu_o = \mu_s = 1,0 \text{ cp}$, o que caracteriza um escoamento com razão de mobilidade ($M = \mu_o/\mu_s$) unitária. No segundo caso, o óleo possui viscosidade maior que a viscosidade do solvente, dadas por $\mu_o = 100 \text{ cp}$ e $\mu_s = 1,0 \text{ cp}$, caracterizando um escoamento com razão de mobilidade

adversa ($M = 100$).

Para este exemplo, os desempenhos dos métodos NIG-GC e DFSANE estão quantificados (para o primeiro caso) na Tabela 3 seguinte.

A Tabela 3 mostra, para cada método, o número total de avaliações de F (a aplicação não linear associada com o sistema que representa a equação da pressão discretizada), o tempo total de CPU despendido na execução da simulação do escoamento miscível compressível em meios porosos, o número total de iterações realizadas na resolução de todos os sistemas não lineares, o número total de etapas de globalização requeridas por cada metodologia, o valor final de $\| F \|^2$ no último passo de tempo e o tempo médio de CPU por passo de tempo. Tais quantificadores mostrados na Tabela 3 foram medidos para 10 diferentes instantes, os quais se encontram em intervalos de tempo que variam de 5 horas até 100 dias de injeção de solvente.

A partir dos resultados mostrados na Tabela 3, podemos afirmar que, apesar do método DFSANE exigir um número maior de iterações, em geral tal método realiza menor número de avaliações de F , quando comparado com o NIG-GC. Conseqüentemente o DFSANE consome em geral menos tempo de CPU, sendo dessa forma mais eficiente para a simulação do escoamento miscível compressível em meios porosos. Por outro lado, nota-se que o NIG-GC é mais acurado do que o DFSANE, o que é esperado, pois o método de Newton geralmente apresenta convergência quadrática.

Deve-se também notar que, para o tamanho do passo de tempo utilizado neste trabalho, o método NIG-GC não necessitou lançar mão da sua estratégia de globalização, o mesmo não ocorreu com o DFSANE, o qual realizou no início da simulação (até 5 horas de injeção) um total de 47 etapas de globalização, total este que se manteve constante até 100 dias de injeção de solvente.

Deve-se também destacar que, apesar da eficiência do método DFSANE, esse algoritmo destinado à resolução de sistemas não lineares de grande porte requereu no início da simulação (até 10 horas de injeção) um maior esforço computacional (indicado pelo tempo total de CPU), quando comparado com o método NIG-GC.

Os resultados das simulações usando-se o método DFSANE são apresentados nas figuras deste exemplo, em que ilustram-se as superfícies de fração mássica do solvente, suas curvas de nível e o campo de pressão do escoamento miscível para diferentes instantes de injeção de solvente. Consideramos 2 dias, 50 dias e 100 dias como instantes de referência nas Figuras 7 e 9, e 150 dias na Figura 8.

Ainda sobre as Figuras 7 e 8 deste exemplo, nas condições consideradas, podemos notar que os gráficos das superfícies de fração mássica gerados pelo SEMD não exibem oscilações espúrias ou excessivas difusões numéricas, sendo suas curvas de nível típicas de um escoamento com mobilidade favorável à recuperação de petróleo. Enfatizamos que tais critérios não são apenas desejados no ambiente de um simulador acadêmico, mas também são de grande importância para a qualificação dos resultados de simuladores usados na

indústria.

Nas Figuras 7b e 7d, respectivamente, para 2 dias e 50 dias de injeção do solvente, as curvas de nível da frente de fração mássica do fluido injetado apresentam um comportamento comedido, ou seja, visualmente são curvas de nível extremamente próximas, como consequência do escoamento puramente advectivo.

Após 100 dias de injeção é notável a frente aguda formada nas curvas de nível em direção ao poço de extração. A superfície de fração mássica do solvente para diferentes tempos são típicas de fenômenos puramente advectivos e não exibem efeitos de instabilidades numéricas. Esse fenômeno é intensificado após 150 dias, Figura 8b. A Figura 8a ilustra o campo de pressão avançando no reservatório após o processo de injeção de solvente. Observando a evolução mostrada na Figura 9, nota-se que o escoamento com razão de mobilidade adversa ($M = 100$) não apresenta diferença significativa em relação a geometria, no entanto há um retardamento no processo de extração do óleo.

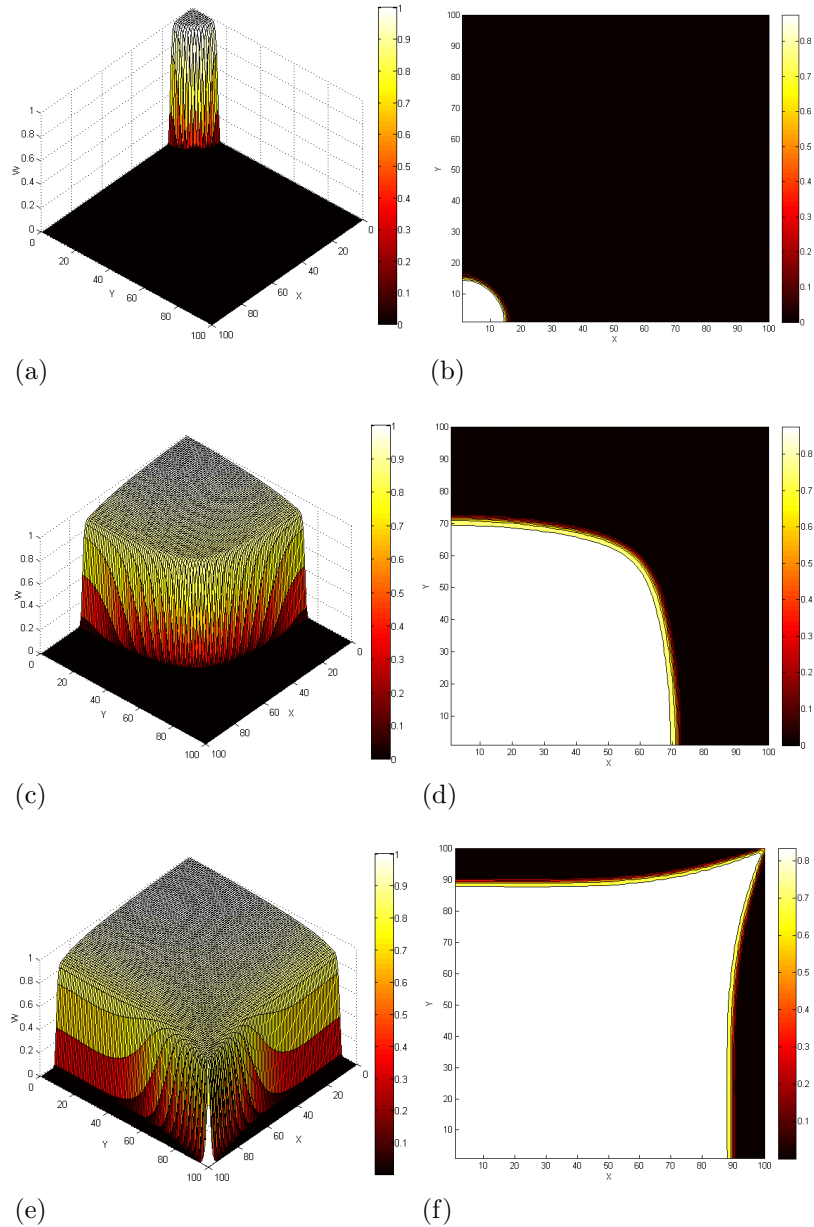
Finalmente, para este primeiro exemplo, notamos que, com os equipamentos computacionais usados aqui, a simulação de 100 dias de injeção de solvente consumiu em torno de 30,63 minutos de CPU para o DFSANE e 32,80 minutos para o NIG-GC. Esses são tempos relativamente pequenos, que qualificam o SEMD como um eficiente simulador para o estudo do escoamento miscível compressível em meios porosos.

Tabela 3 - Dados para análise comparativa dos desempenhos dos métodos DFSANE e NIG-GC para o Exemplo 1, com $M = 1$. Escoamento puramente advectivo.

T (dia)	Métodos	Avaliações de F	Tempo de CPU (min)	Iterações	Etapas de Globalização	$\ F \ ^2$	CPU/ Passo de Tempo (s)
5/24	DFSANE	3144	0,125	3097	47	$3,321 \times 10^{-7}$	$2,422 \times 10^{-3}$
	N. INEXATO-CG	3142	0,080	208	0	$3,808 \times 10^{-9}$	$2,313 \times 10^{-2}$
5/12	DFSANE	3504	0,182	3457	47	$3,297 \times 10^{-7}$	$3,159 \times 10^{-3}$
	N. INEXATO-GC	1882	0,147	388	0	$2,028 \times 10^{-9}$	$2,273 \times 10^{-2}$
5/6	DFSANE	4944	0,437	4897	47	$3,199 \times 10^{-7}$	$2,923 \times 10^{-2}$
	N. INEXATO-GC	4887	0,442	1108	0	$7,690 \times 10^{-22}$	$2,394 \times 10^{-2}$
5/2	DFSANE	7104	0,821	7057	47	$3,058 \times 10^{-7}$	$6,980 \times 10^{-3}$
	N. INEXATO-GC	8376	0,856	2188	0	$1,183 \times 10^{-25}$	$2,347 \times 10^{-2}$
5	DFSANE	11424	1,595	11377	47	$2,795 \times 10^{-7}$	$8,412 \times 10^{-3}$
	N. INEXATO-GC	14856	1,694	4348	0	$8,660 \times 10^{-26}$	$2,338 \times 10^{-2}$
10	DFSANE	20064	3,107	20017	47	$2,335 \times 10^{-7}$	$9,313 \times 10^{-3}$
	N. INEXATO-GC	27816	3,314	8668	0	$8,031 \times 10^{-26}$	$2,294 \times 10^{-2}$
30	DFSANE	54624	9,215	54577	47	$1,136 \times 10^{-7}$	$1,013 \times 10^{-2}$
	N. INEXATO-GC	79656	9,877	25948	0	$6,685 \times 10^{-26}$	$2,284 \times 10^{-2}$
50	DFSANE	89184	15,334	89137	47	$5,527 \times 10^{-8}$	$5,161 \times 10^{-3}$
	N. INEXATO-GC	131496	16,454	43228	0	$5,988 \times 10^{-26}$	$1,142 \times 10^{-2}$
70	DFSANE	123744	21,420	123697	47	$2,689 \times 10^{-8}$	$5,195 \times 10^{-3}$
	N. INEXATO-GC	183336	22,969	60508	0	$5,171 \times 10^{-26}$	$1,140 \times 10^{-2}$
100	DFSANE	175584	30,628	175537	47	$9,129 \times 10^{-8}$	$2,216 \times 10^{-2}$
	N. INEXATO-GC	261096	32,803	86428	0	$5,073 \times 10^{-26}$	$2,277 \times 10^{-2}$

Fonte: A autora, 2020.

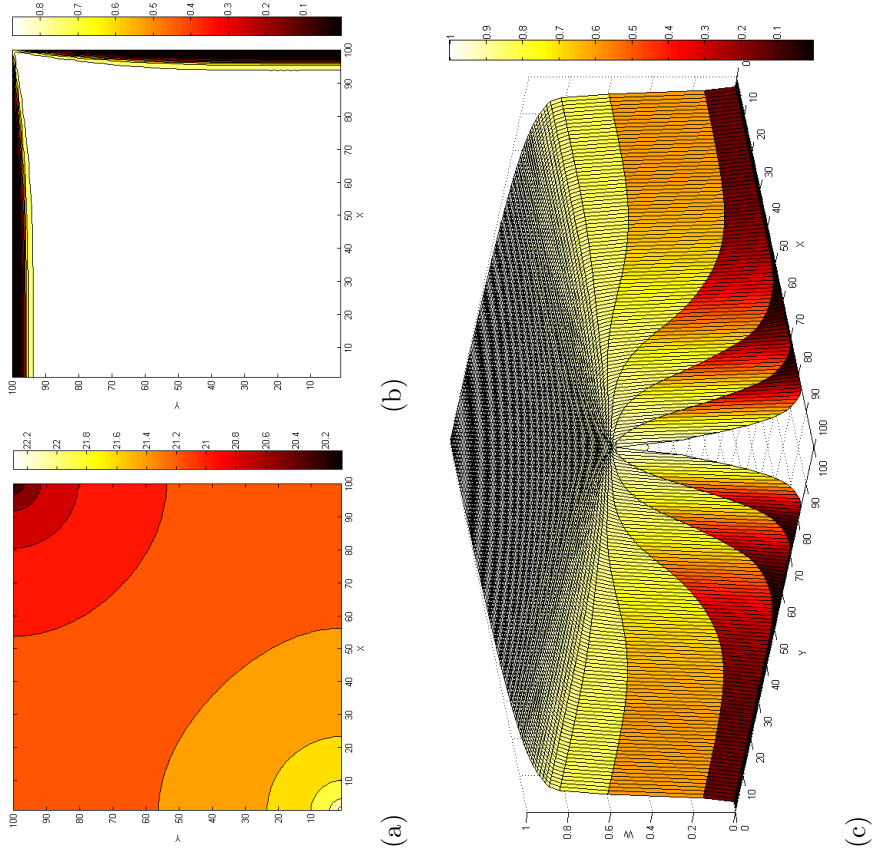
Figura 7 - Exemplo 1 para diferentes instantes de injeção de solvente, com $M = 1$. Escoamento Puramente advectivo.



Legenda: (a) Superfície de fração mássica do solvente em 2 dias. (b) Curvas de nível da fração mássica do solvente em 2 dias. (c) Superfície de fração mássica do solvente em 50 dias. (d) Curvas de nível da fração mássica do solvente em 50 dias. (e) Superfície de fração mássica do solvente em 100 dias. (f) Curvas de nível da fração mássica do solvente em 100 dias.

Fonte: A autora, 2020.

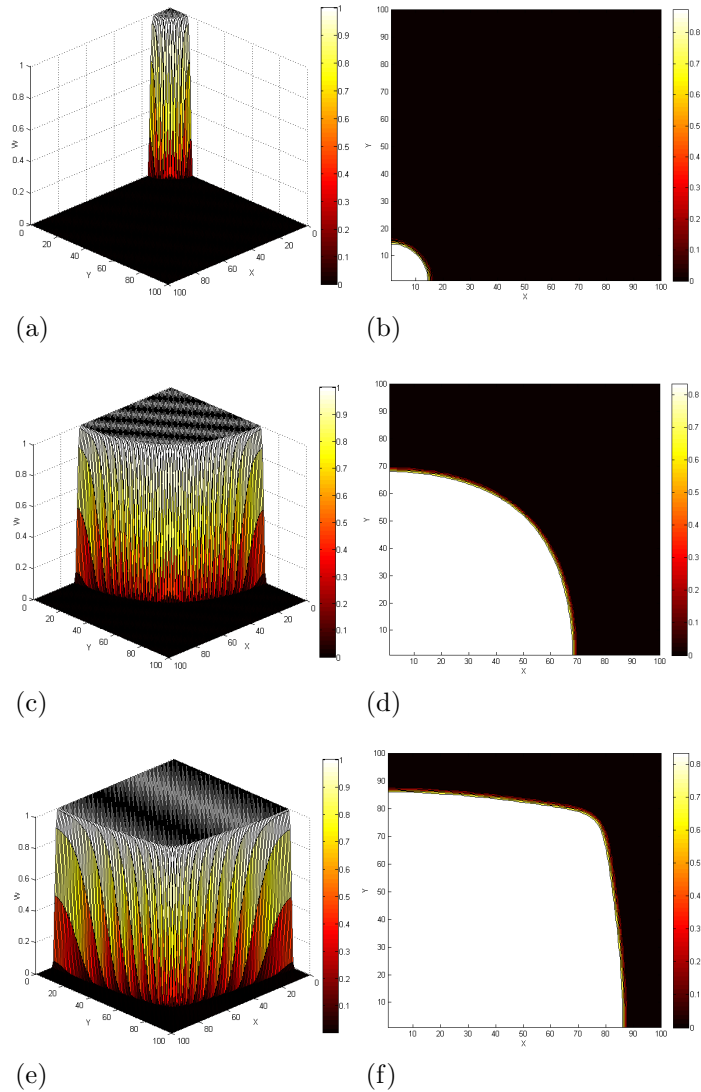
Figura 8 - Exemplo 1 para 150 dias de injeção de solvente, com $M = 1$. Escoamento Puramente Advectivo.



Legenda: (a) Curvas de nível para o campo de pressão. (b) Curvas de nível da fração mássica do solvente. (c) Superfície de fração mássica do solvente.

Fonte: A autora, 2020.

Figura 9 - Exemplo 1 para diferentes instantes de injeção de solvente, com $M = 100$.
Escoamento Puramente advectivo.



Legenda: (a) Superfície de fração mássica do solvente em 2 dias. (b) Curvas de nível da fração mássica do solvente em 2 dias. (c) Superfície de fração mássica do solvente em 50 dias. (d) Curvas de nível da fração mássica do solvente em 50 dias. (e) Superfície de fração mássica do solvente em 100 dias. (f) Curvas de nível da fração mássica do solvente em 100 dias.

Fonte: A autora, 2020.

6.1.3 Exemplo 2: Escoamento do Tipo Advecção-Difusão

Para observar os efeitos de difusão molecular, neste exemplo, consideraremos $d_M = 0,01 \text{ cm}^2/s$ e desprezaremos os efeitos da dispersão mecânica, $\alpha_L = \alpha_T = 0,0 \text{ cm}$. Suporremos neste exemplo dois casos particulares: no primeiro caso o óleo e o solvente possuem a mesma viscosidade, dadas por $\mu_o = \mu_s = 1,0 \text{ cp}$, o que caracteriza um escoamento com razão de mobilidade unitária. No segundo caso, o óleo possui viscosidade maior que a viscosidade do solvente, dadas por $\mu_o = 80 \text{ cp}$ e $\mu_s = 1,0 \text{ cp}$, caracterizando um escoamento com razão de mobilidade adversa ($M = 80$). Realizamos uma variação no parâmetro difusão molecular em que a mesma assume o valor $d_M = 0,1 \text{ cm}^2/s$.

Para este segundo exemplo, os quantificadores para a análise do desempenho entre os métodos DFSANE e NIG-GC (e influências de tais metodologias na eficiência do SEMD) estão descritos na Tabela 4, para instantes que variam de 5 horas ou até 100 dias de injeção de solvente. Novamente, apesar de ser o método que apresenta o maior número de iterações por passo de tempo, neste exemplo o DFSANE confirmou ser também o mais eficiente, ou seja, realizando o menor número de avaliações de F e que requereu menor tempo de CPU. No entanto, desta vez, como se pode notar a partir da Tabela 4 essa maior eficiência só foi estabelecida após 2 dias de injeção de solvente. Tal fato comprova mais uma vez que, para tempos de injeção relativamente pequenos, em vez do DFSANE, o NIG-GC deve ser (em alguns casos) o método selecionado para a simulação do escoamento compressível em meios porosos. No entanto, nota-se que, para simular 100 dias de injeção, o NIG-GC consumiu cerca de 33,1 minutos de CPU, enquanto o DFSANE utilizou cerca de 30,7 minutos.

Notamos também que o NIG-GC não utilizou etapas de globalização, enquanto que o DFSANE requereu 47 dessas etapas, as quais foram exigidas para simular a primeira hora de injeção de solvente. Como antes, o NIG-GC foi o método que exibiu maior acurácia.

Os resultados das simulações usando-se o método DFSANE são apresentados nas figuras deste exemplo, em que ilustram-se as superfícies de fração mássica do solvente, suas curvas de nível e o campo de pressão do escoamento miscível para diferentes instantes de injeção de solvente. Consideramos 2 dias, 50 dias e 100 dias como instantes de referência nas Figuras 10, 12 e 13, e 150 dias na Figura 11.

Nas condições consideradas neste exemplo, podemos notar que os gráficos das superfícies de fração mássica gerados pelo simulador não exibem oscilações espúrias ou excessivas difusões numéricas.

Analisando o efeito da difusão molecular em que a razão de mobilidade é unitária (Figura 10), visualmente há espalhamento das curvas de nível da frente de fração mássica do fluido injetado nos diferentes tempos de injeção. A superfície deste exemplo são totalmente arredondadas e suaves, uma geometria diferenciada do exemplo puramente advec-

tivo. Na Figura 12, podemos ver que esse processo é intensificado após 150 dias de injeção de solvente. A Figura 11a ilustra o campo de pressão no reservatório após o processo de injeção de solvente em um tempo avançado.

Observando a evolução na Figura 12, nota-se que o escoamento com razão de mobilidade adversa ($M = 80$) apresenta uma diferença significativa, pois suas curvas de nível da frente de fração mássica do solvente são visualmente arredondadas. Na Figura 12f, pode-se ver a estratificação dessas curvas de nível próximo ao poço de extração.

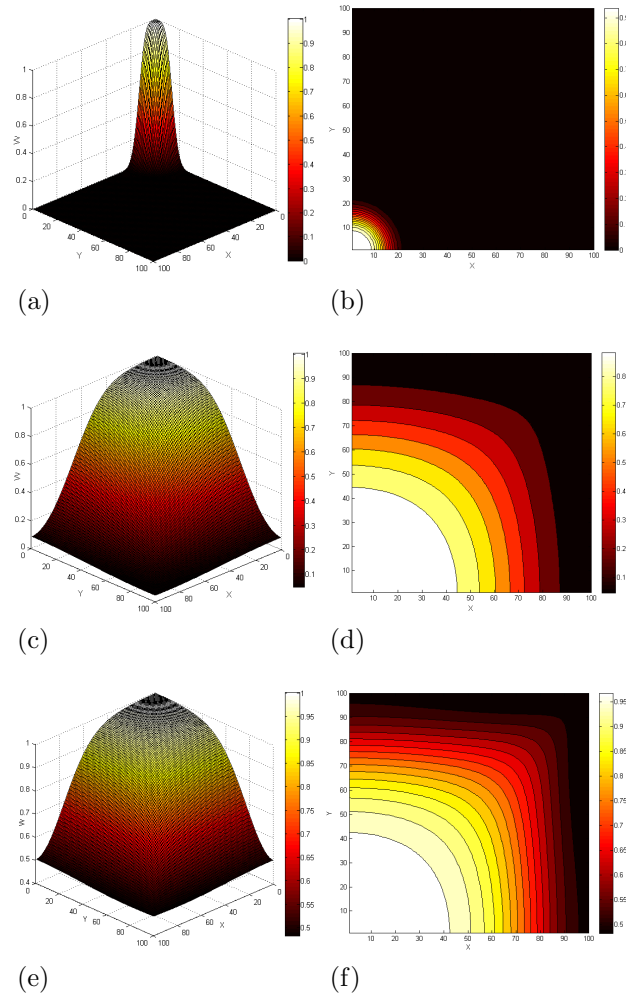
As Figuras 13 e 14, com razão de mobilidade unitária e adversa, respectivamente, apresentam os efeitos da intensificação no aumento da difusão molecular ($d_M = 0,1 \text{ cm}^2/s$). Estas figuras mostram diferenças significativas ocorrendo em relação a geometria do escoamento.

Tabela 4 - Dados para análise comparativa dos desempenhos dos métodos DFSANE e NIG-GC para o Exemplo 2, com $M = 1$ e $\alpha_d = 0,01 \text{ cm}^2/s$. Escoamento do tipo advecção-difusão.

T (dias)	Métodos	Avaliações de F	Tempo de CPU (min)	Iterações	Etapas de Globalização	$\ F \ ^2$	CPU/ Passo de Tempo (s)
5/24	DFSANE	3144	0,125	3097	47	$3,321 \times 10^{-7}$	$2,422 \times 10^{-2}$
	N. INEXATO-CG	1342	0,083	208	0	$3,88 \times 10^{-9}$	$2,385 \times 10^{-2}$
5/12	DFSANE	3504	0,191	3457	47	$3,297 \times 10^{-7}$	$3,315 \times 10^{-3}$
	N. INEXATO-GC	1882	0,152	388	0	$2,028 \times 10^{-9}$	$2,350 \times 10^{-3}$
5/6	DFSANE	4944	0,444	4897	47	$3,199 \times 10^{-7}$	$5,440 \times 10^{-3}$
	N. INEXATO-GC	4887	0,444	1108	0	$7,690 \times 10^{-22}$	$2,404 \times 10^{-2}$
2	DFSANE	7104	0,824	7057	47	$3,058 \times 10^{-7}$	$7,006 \times 10^{-3}$
	N. INEXATO-GC	8376	0,859	2188	0	$1,180 \times 10^{-25}$	$2,356 \times 10^{-2}$
5	DFSANE	11424	1,590	11377	47	$2,795 \times 10^{-7}$	$8,385 \times 10^{-3}$
	N. INEXATO-GC	14856	1,678	4348	0	$8,660 \times 10^{-26}$	$2,316 \times 10^{-2}$
10	DFSANE	20064	3,137	20017	47	$2,334 \times 10^{-7}$	$9,403 \times 10^{-3}$
	N. INEXATO-GC	27816	3,322	8668	0	$8,031 \times 10^{-26}$	$2,299 \times 10^{-2}$
30	DFSANE	54624	9,302	54577	47	$1,136 \times 10^{-7}$	$1,023 \times 10^{-2}$
	N. INEXATO-GC	79656	9,888	25948	0	$6,685 \times 10^{-26}$	$2,286 \times 10^{-2}$
50	DFSANE	89184	15,851	89137	47	$5,527 \times 10^{-8}$	$5,335 \times 10^{-3}$
	N. INEXATO-GC	131496	16,538	43228	0	$5,988 \times 10^{-26}$	$1,148 \times 10^{-2}$
70	DFSANE	123744	21,526	123697	47	$2,689 \times 10^{-8}$	$5,221 \times 10^{-3}$
	N. INEXATO-GC	183336	23,019	60508	0	$5,171 \times 10^{-26}$	$1,142 \times 10^{-3}$
100	DFSANE	175584	30,670	175537	47	$9,129 \times 10^{-9}$	$5,242 \times 10^{-3}$
	N. INEXATO-GC	261096	33,077	86428	0	$5,073 \times 10^{-26}$	$1,148 \times 10^{-2}$

Fonte: A autora, 2020.

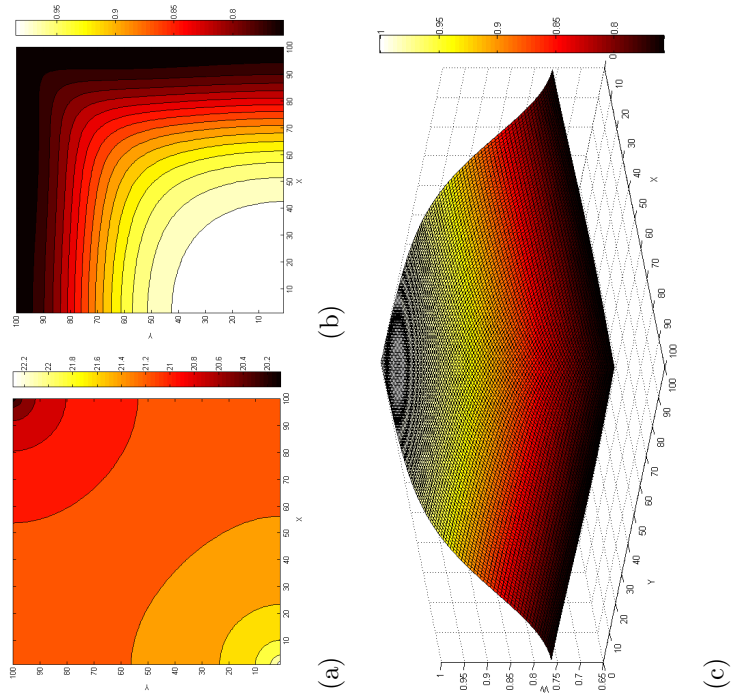
Figura 10 - Exemplo 2 para diferentes instantes de injeção de solvente, com $M = 1$, $\alpha_d = 0,01 \text{ cm}^2/\text{s}$. Escoamento do tipo advecção-difusão.



Legenda: (a) Superfície de fração mássica do solvente em 2 dias. (b) Curvas de nível da fração mássica do solvente em 2 dias. (c) Superfície de fração mássica do solvente em 50 dias. (d) Curvas de nível da fração mássica do solvente em 50 dias. (e) Superfície de fração mássica do solvente em 100 dias. (f) Curvas de nível da fração mássica do solvente em 100 dias.

Fonte: A autora, 2020.

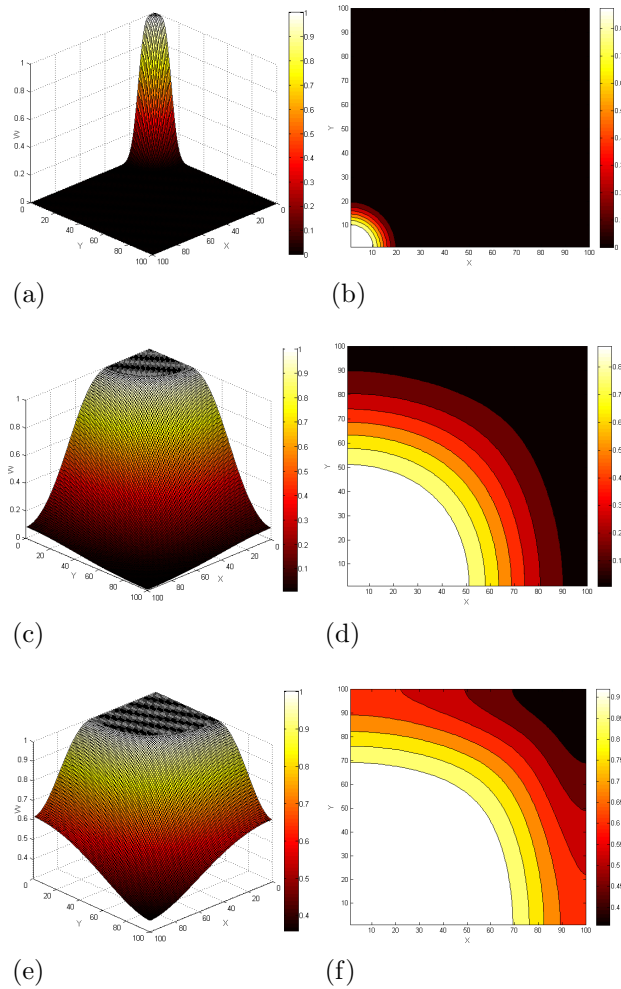
Figura 11 - Exemplo 2 para 150 dias de injeção de solvente com $M = 1$, $\alpha_d = 0,01 \text{ cm}^2/s$. Escoamento do tipo advecção-difusão.



Legenda: (a) Curvas de nível para o campo de pressão. (b) Curvas de nível da fração mássica do solvente. (c) Superfície de fração mássica do solvente.

Fonte: A autora, 2020.

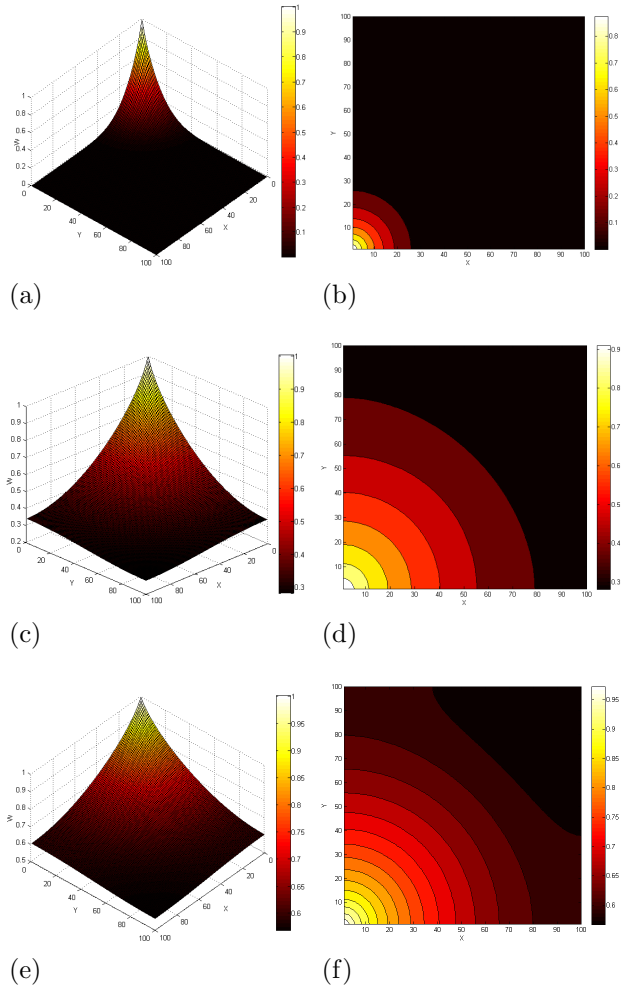
Figura 12 - Exemplo 2 para diferentes instantes de injeção de solvente com $M = 80$, $\alpha_d = 0,01 \text{ cm}^2/\text{s}$. Escoamento do tipo advecção-difusão.



Legenda: (a) Superfície de fração mássica do solvente em 2 dias. (b) Curvas de nível da fração mássica do solvente em 2 dias. (c) Superfície de fração mássica do solvente em 50 dias. (d) Curvas de nível da fração mássica do solvente em 50 dias. (e) Superfície de fração mássica do solvente em 100 dias. (f) Curvas de nível da fração mássica do solvente em 100 dias.

Fonte: A autora, 2020.

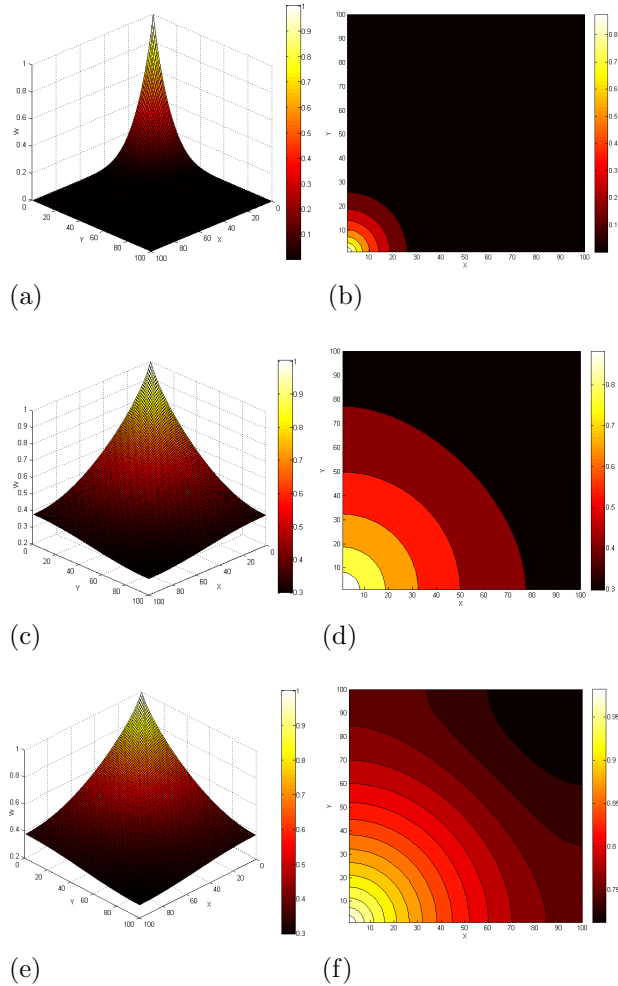
Figura 13 - Exemplo 2 para diferentes instantes de injeção de solvente, com $M = 1$, $\alpha_d = 0,1\text{cm}^2/\text{s}$. Escoamento do tipo advecção-difusão.



Legenda: (a) Superfície de fração mássica do solvente em 2 dias. (b) Curvas de nível da fração mássica do solvente em 2 dias. (c) Superfície de fração mássica do solvente em 50 dias. (d) Curvas de nível da fração mássica do solvente em 50 dias. (e) Superfície de fração mássica do solvente em 100 dias. (f) Curvas de nível da fração mássica do solvente em 100 dias.

Fonte: A autora, 2020.

Figura 14 - Exemplo 2 para diferentes instantes de injeção de solvente, com $M = 80$, $\alpha_d = 0,1 \text{ cm}^2/\text{s}$. Escoamento do tipo advecção-difusão.



Legenda: (a) Superfície de fração mássica do solvente em 2 dias. (b) Curvas de nível da fração mássica do solvente em 2 dias. (c) Superfície de fração mássica do solvente em 50 dias. (d) Curvas de nível da fração mássica do solvente em 50 dias. (e) Superfície de fração mássica do solvente em 100 dias. (f) Curvas de nível da fração mássica do solvente em 100 dias.

Fonte: A autora, 2020.

6.1.4 Exemplo 3: Escoamento com Dispersão Mecânica

Neste terceiro exemplo, incorporaremos efeitos de dispersão mecânica, nas direções longitudinais e transversais ao campo de velocidade, por outro lado desprezaremos os efeitos da difusão molecular, para isso consideraremos seis casos.

Caso 1: $\mu_o = 80$ cp, $\mu_s = 1$ cp, $M = 80$, $\alpha_T = 0,5$ cm, $\alpha_L = 5,0$ cm e $d_M = 0,0$ cm²/s.

Caso 2: $\mu_o = 80$ cp, $\mu_s = 1$ cp, $M = 80$, $\alpha_T = 0,0$ cm, $\alpha_L = 1,0$ cm e $d_M = 0,0$ cm²/s.

Caso 3: $\mu_o = 80$ cp, $\mu_s = 1$ cp, $M = 80$, $\alpha_T = 1,0$, $\alpha_L = 10,0$ cm e $d_M = 0,0$ cm²/s

Caso 4: $\mu_o = 1$ cp, $\mu_s = 1$ cp, $M = 1$, $\alpha_T = 0,0$ cm, $\alpha_L = 1,0$ cm e $d_M = 0,0$ cm²/s.

Caso 5: $\mu_o = 1$ cp, $\mu_s = 1$ cp, $M = 1$, $\alpha_T = 0,5$ cm, $\alpha_L = 5,0$ cm e $d_M = 0,0$ cm²/s.

Caso 6: $\mu_o = 1$ cp, $\mu_s = 1$ cp, $M = 1$, $\alpha_T = 1,0$ cm, $\alpha_L = 10,0$ cm e $d_M = 0,0$ cm²/s.

A comparação dos desempenhos dos métodos DFSANE e NIG-GC, usando os dados do Caso 1, são mostrados na Tabela 5 para diferentes intervalos de tempo, com limite máximo de 100 dias de injeção de solvente.

Outra vez o DFSANE foi o método que consumiu menor tempo total de CPU, apesar de realizar o maior número de iterações por passo de tempo, sendo dessa forma mais eficiente do que o método NIG-GC. Diferente dos casos anteriores, neste exemplo de escoamento miscível com mobilidade adversa o DFSANE foi mais eficiente do que o NIG-GC em todos os instantes de tempo considerados na Tabela 5. Para simular 100 dias de injeção, o NIG-GC consumiu cerca de 36 minutos de tempo de CPU, enquanto o DFSANE utilizou cerca de 32,7 minutos, uma diferença de 3,3 minutos de computação. Novamente o NIG-GC não necessitou efetuar etapas de globalização. Enquanto que para simular a primeira hora de injeção de solvente o DFSANE realizou 28 dessas etapas, e mais 8 etapas adicionais até a segunda hora de injeção de solvente.

Em todos os casos deste exemplo, os resultados das simulações são apresentados usando-se o método DFSANE, em que ilustram-se as superfícies de fração mássica do solvente, suas curvas de nível e o campo de pressão do escoamento miscível para diferentes instantes de injeção de solvente. Consideramos 2 dias, 50 dias e 100 dias como instantes de referência nas Figuras 15, 16, 17,18, 19 e 21 e 150 dias na Figura 20.

Analisando os efeitos de dispersão mecânica, caso 1, nas direções longitudinais e transversais ao campo de velocidade, Figura 15, nota-se que as curvas de nível da frente de fração mássica do solvente são relativamente próximas e apresentam uma frente levemente aguda, consequência da mobilidade ser adversa.

Na Figura 16 apresentamos os resultados do caso 2 em que consideramos apenas a dispersão mecânica na direção longitudinal. Portanto as curvas de nível da frente de fração mássica do solvente são próximas. Observa-se que estas curvas de nível não apresentam o mesmo comportamento do fenômeno puramente convectivo.

Observando a Figura 17, caso 3, aumentando os valores dos coeficientes de dispersão mecânica nas direções longitudinais e transversais enfatiza o efeitos destes nas curvas de nível, mais alongadas e relativamente aguda próxima ao poço de produção.

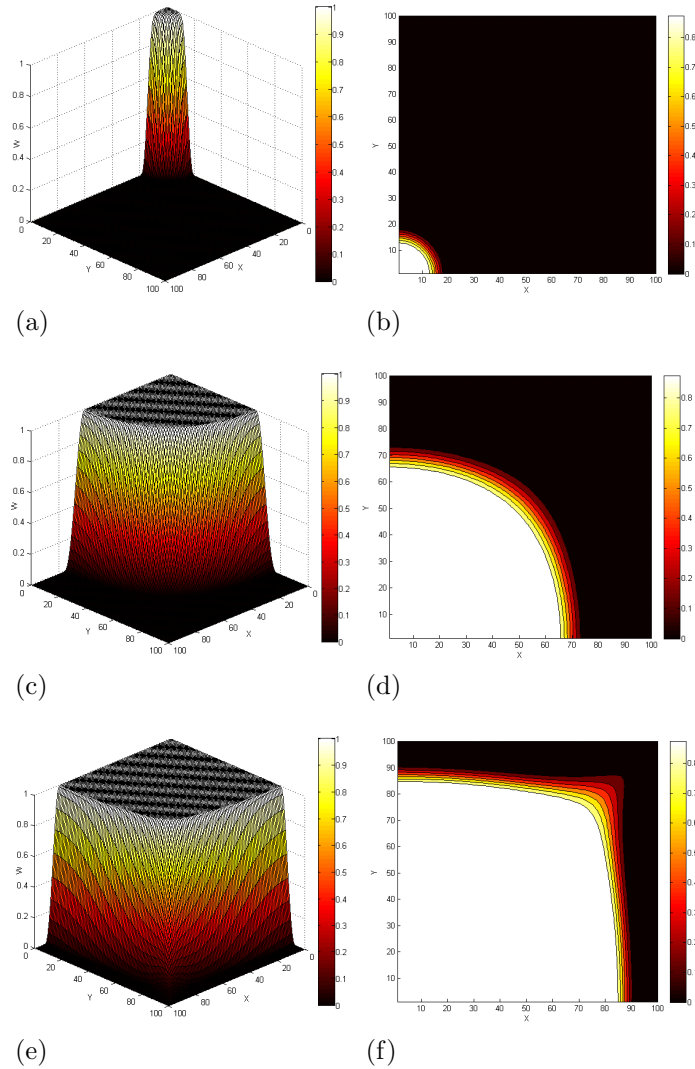
As Figuras 18 e 19, casos 4 e 5, respectivamente, apresentam razão de mobilidade unitária, portanto ilustram uma frente aguda próxima ao poço de produção. E as curvas de nível da frente de fração mássica do fluido injetado se estratificam no reservatório a medida que aumenta o parâmetro na direção longitudinal(transversal). Constatamos na Figura 20a há aumento de valores no campo de pressão no reservatório após o processo de injeção de solvente. Já o caso 6, com resultados ilustrados na Figura 21 exibe uma frente aguda com curvas de nível alongadas próxima ao poço de extração, consequência das dispersões longitudinal e transversal.

Tabela 5 - Dados para análise comparativa dos desempenhos dos métodos DFSANE e NIG-GC para o Exemplo 3, com $M = 80$, $\alpha_L = 5,0$ cm e $\alpha_T = 0,5$ cm. Caso 1.

T (dias)	Métodos	Avaliações de F	Tempo de CPU (min)	Iterações	Etapas de Globalização	$\ F \ ^2$	CPU/ Passo de Tempo (s)
5/24	DFSANE	2349	0,120	2321	28	$5,860 \times 10^{-7}$	$3,102 \times 10^{-3}$
	N. INEXATO-CG	3773	0,157	197	0	$9,219 \times 10^{-16}$	$4,782 \times 10^{-2}$
5/12	DFSANE	3141	0,200	3105	36	$9,911 \times 10^{-7}$	$3,865 \times 10^{-3}$
	N. INEXATO-GC	6307	0,283	377	0	$7,999 \times 10^{-23}$	$4,504 \times 10^{-2}$
5/6	DFSANE	4581	0,480	4545	36	$9,781 \times 10^{-7}$	$6,337 \times 10^{-3}$
	N. INEXATO-GC	9923	0,619	1097	0	$5,059 \times 10^{-28}$	$3,397 \times 10^{-3}$
2	DFSANE	6741	0,895	6705	36	$9,589 \times 10^{-7}$	$8,009 \times 10^{-3}$
	N. INEXATO-GC	13163	1069	2177	0	$4,644 \times 10^{-28}$	$2,946 \times 10^{-2}$
5	DFSANE	11061	1,731	11025	36	$9,217 \times 10^{-7}$	$9,420 \times 10^{-3}$
	N. INEXATO-GC	19643	1,966	4337	0	$4,577 \times 10^{-28}$	$2,720 \times 10^{-2}$
10	DFSANE	19701	3,408	19665	36	$8,15 \times 10^{-7}$	$1,040 \times 10^{-2}$
	N. INEXATO-GC	32603	3,774	8657	0	$4,289 \times 10^{-28}$	$2,616 \times 10^{-2}$
30	DFSANE	54261	9,981	54225	36	$6,202 \times 10^{-7}$	$1,104 \times 10^{-2}$
	N. INEXATO-GC	8443	10,937	25937	0	$3,365 \times 10^{-28}$	$2,530 \times 10^{-2}$
50	DFSANE	88821	16,581	88785	36	$4,518 \times 10^{-7}$	$5,603 \times 10^{-2}$
	N. INEXATO-GC	136283	18,040	43217	0	$2,971 \times 10^{-28}$	$1,252 \times 10^{-2}$
70	DFSANE	123381	23,118	123345	36	$3,292 \times 10^{-7}$	$5,623 \times 10^{-3}$
	N. INEXATO-GC	188123	25,140	60497	0	$2,573 \times 10^{-28}$	$1,247 \times 10^{-2}$
100	DFSANE	175221	32,735	175185	36	$2,049 \times 10^{-7}$	$1,21 \times 10^{-2}$
	N. INEXATO-GC	265883	36,067	86417	0	$2,233 \times 10^{-28}$	$2,504 \times 10^{-2}$

Fonte: A autora, 2020.

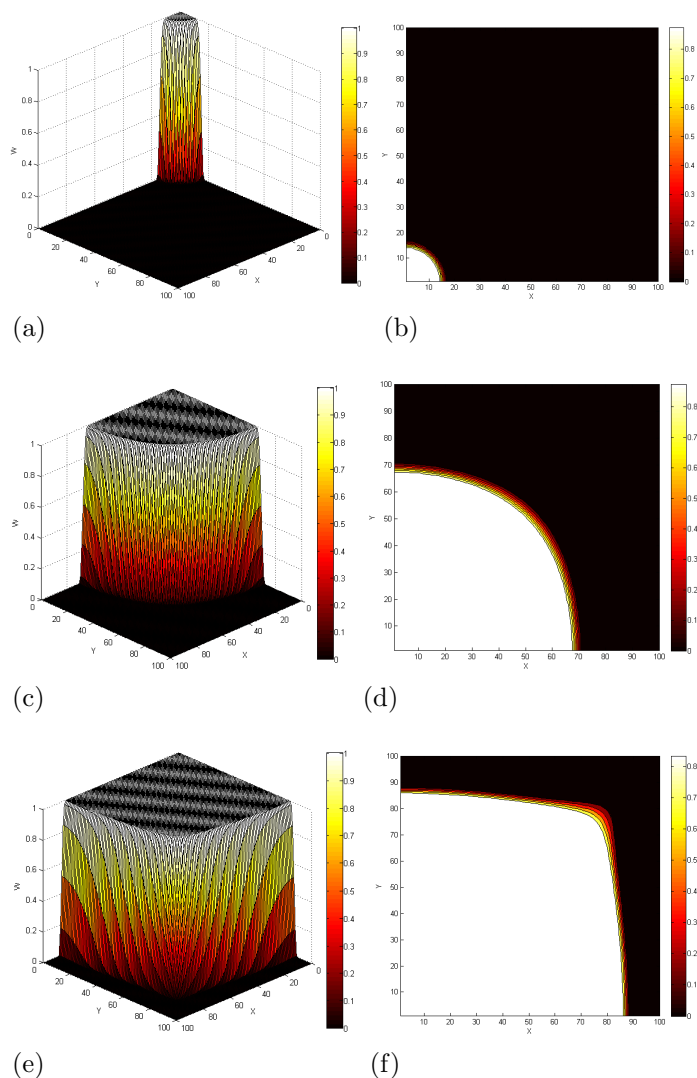
Figura 15 - Exemplo 3 para diferentes instantes de injeção de solvente, com $M = 80$, $\alpha_L = 5,0$ cm e $\alpha_T = 0,5$ cm. Caso 1.



Legenda: (a) Superfície de fração mássica do solvente em 2 dias. (b) Curvas de nível da fração mássica do solvente em 2 dias. (c) Superfície de fração mássica do solvente em 50 dias. (d) Curvas de nível da fração mássica do solvente em 50 dias. (e) Superfície de fração mássica do solvente em 100 dias. (f) Curvas de nível da fração mássica do solvente em 100 dias.

Fonte: A autora, 2020.

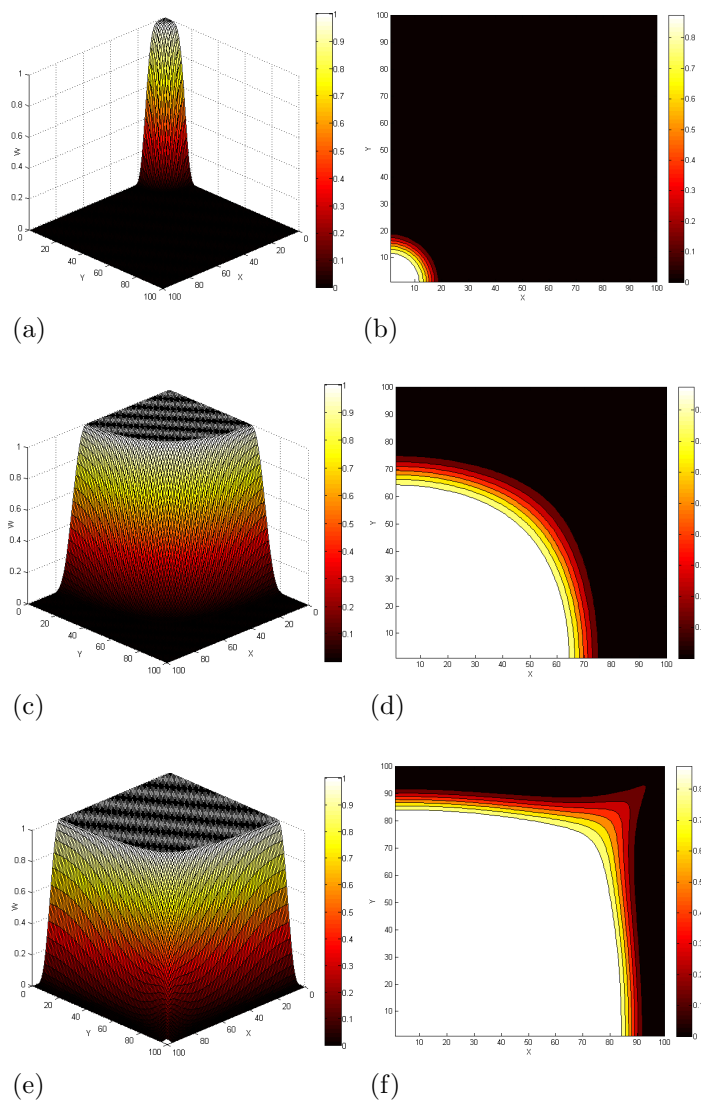
Figura 16 - Exemplo 3 para diferentes instantes de injeção de solvente, com $M = 80$, $\alpha_L = 1,0$ cm e $\alpha_T = 0,0$ cm. Caso 2.



Legenda: (a) Superfície de fração mássica do solvente em 2 dias. (b) Curvas de nível da fração mássica do solvente em 2 dias. (c) Superfície de fração mássica do solvente em 50 dias. (d) Curvas de nível da fração mássica do solvente em 50 dias. (e) Superfície de fração mássica do solvente em 100 dias. (f) Curvas de nível da fração mássica do solvente em 100 dias.

Fonte: A autora, 2020.

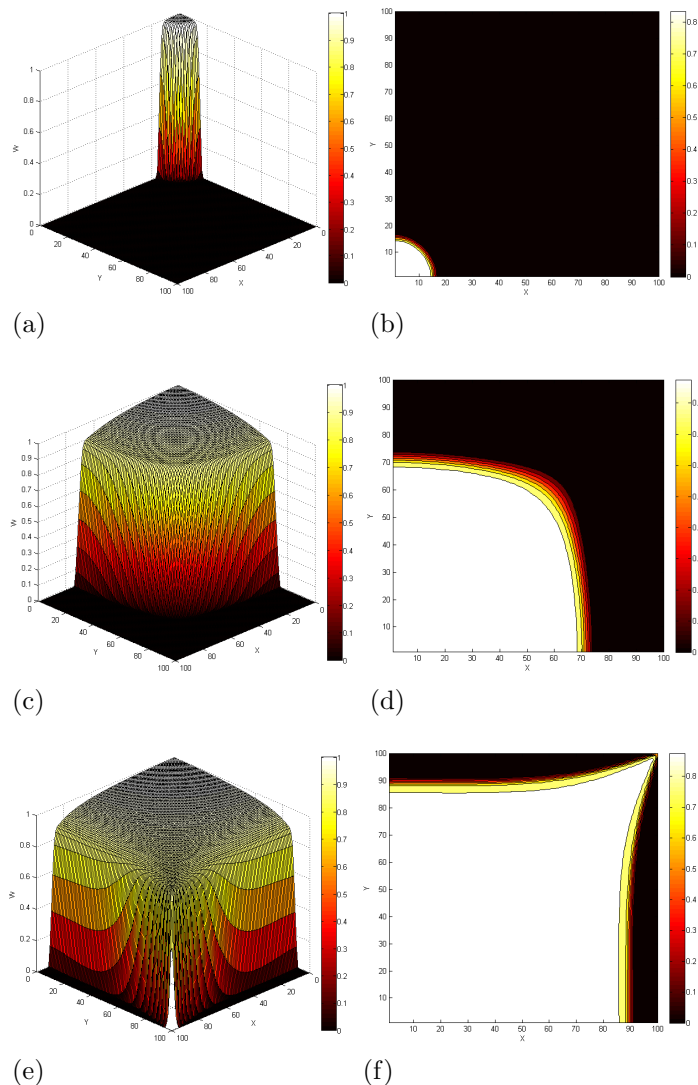
Figura 17 - Exemplo 3 para diferentes instantes de injeção de solvente, $M = 80$, $\alpha_L = 10$ cm e $\alpha_T = 1,0$ cm. Caso 3.



Legenda: (a) Superfície de fração mássica do solvente em 2 dias. (b) Curvas de nível da fração mássica do solvente em 2 dias. (c) Superfície de fração mássica do solvente em 50 dias. (d) Curvas de nível da fração mássica do solvente em 50 dias. (e) Superfície de fração mássica do solvente em 100 dias. (f) Curvas de nível da fração mássica do solvente em 100 dias.

Fonte: A autora, 2020.

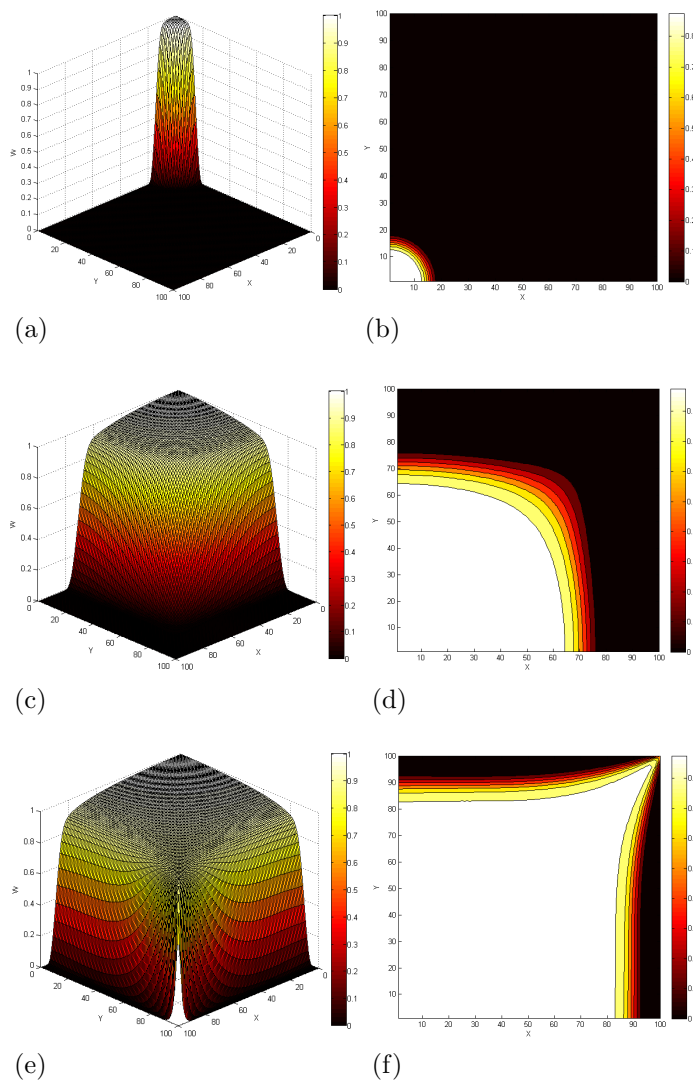
Figura 18 - Exemplo 3 para diferentes instantes de injeção de solvente, com $M = 1$, $\alpha_L = 1,0$ cm e $\alpha_T = 0,0$ cm. Caso 4.



Legenda: (a) Superfície de fração mássica do solvente em 2 dias. (b) Curvas de nível da fração mássica do solvente em 2 dias. (c) Superfície de fração mássica do solvente em 50 dias. (d) Curvas de nível da fração mássica do solvente em 50 dias. (e) Superfície de fração mássica do solvente em 100 dias. (f) Curvas de nível da fração mássica do solvente em 100 dias.

Fonte: A autora, 2020.

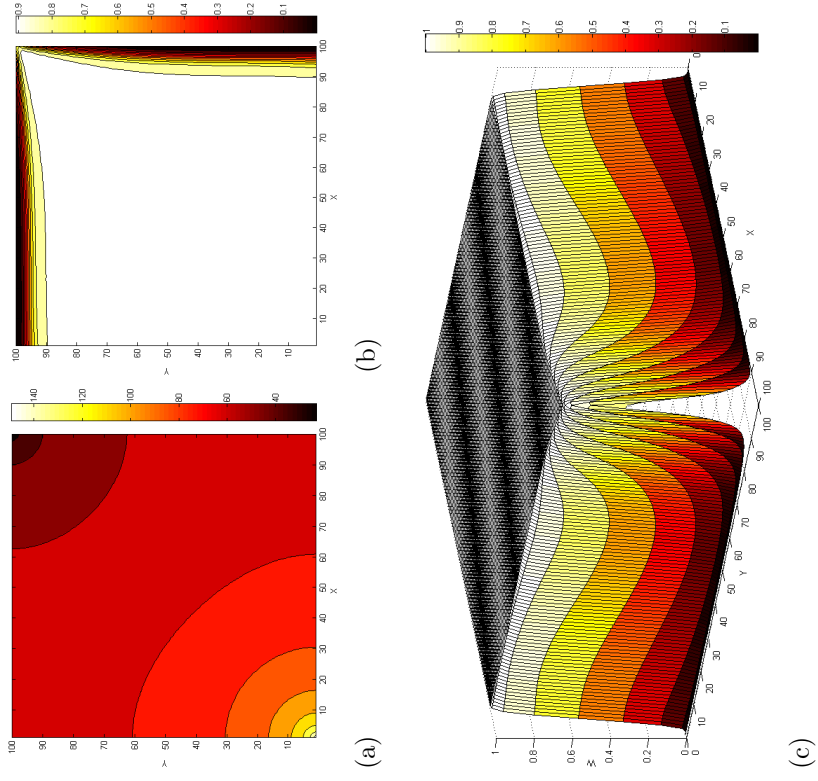
Figura 19 - Exemplo 3 para diferentes instantes de injeção de solvente, com $M = 1$, $\alpha_L = 5,0$ cm e $\alpha_T = 0,5$ cm. Caso 5.



Legenda: (a) Superfície de fração mássica do solvente em 2 dias. (b) Curvas de nível da fração mássica do solvente em 2 dias. (c) Superfície de fração mássica do solvente em 50 dias. (d) Curvas de nível da fração mássica do solvente em 50 dias. (e) Superfície de fração mássica do solvente em 100 dias. (f) Curvas de nível da fração mássica do solvente em 100 dias.

Fonte: A autora, 2020.

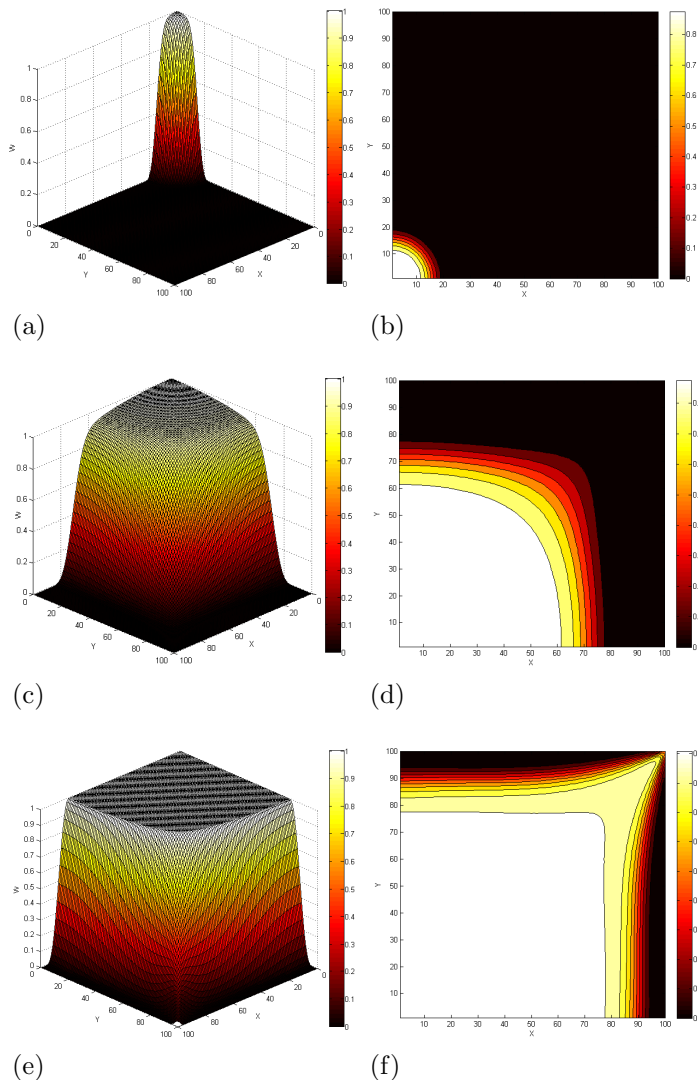
Figura 20 - Exemplo 3 para 150 dias de injeção de solvente, com $M = 1$, $\alpha_L = 5$ cm e $\alpha_T = 0,5$ cm. Caso 5.



Legenda: (a) Curvas de nível para o campo de pressão. (b) Curvas de nível da fração mássica do solvente. (c) Superfície de fração mássica do solvente.

Fonte: A autora, 2020.

Figura 21 - Exemplo 3 para diferentes instantes de injeção de solvente, com $M = 1$, $\alpha_L = 10$ cm e $\alpha_T = 1$ cm. Caso 6.



Legenda: (a) Superfície de fração mássica do solvente em 2 dias. (b) Curvas de nível da fração mássica do solvente em 2 dias. (c) Superfície de fração mássica do solvente em 50 dias. (d) Curvas de nível da fração mássica do solvente em 50 dias. (e) Superfície de fração mássica do solvente em 100 dias. (f) Curvas de nível da fração mássica do solvente em 100 dias.

Fonte: A autora, 2020.

6.2 Meio Poroso Heterogêneo

6.2.1 Aspectos Gerais

Durante processos de injeção de solvente em um reservatório de petróleo, a formação de dedilhamento (*fingering*) viscoso miscível no interior do reservatório é o resultado de um fenômeno de instabilidade hidrodinâmica, que ocorre em meios porosos quando o óleo (o fluido de alta viscosidade) é deslocado pelo solvente (o fluido de baixa viscosidade).

Na presença desse fenômeno de instabilidade, parte do solvente injetado avança através do meio poroso a uma velocidade muito superior, contornando o óleo e se aproximando rapidamente dos poços de produção. Assim, o aparecimento de tais dedos viscosos miscíveis pode causar problemas consideráveis para a indústria de petróleo, devido à pobre recuperação de hidrocarbonetos durante um tal processo de injeção de solvente em um reservatório de óleo pesado.

Duas propriedades são necessárias para o surgimento de *fingers* viscosos miscíveis em meios porosos. Uma é a mobilidade adversa ($M \gg 1$) existente entre o solvente e o soluto, referida acima. A outra é a presença de heterogeneidades ao longo do meio poroso.

Em vista do exposto acima, esta seção considera a aplicabilidade da equação de Kozeny-Carman generalizada a três parâmetros, proposta por Henderson, Brêttas e Sacco (2010), ao desencadeamento, formação e desenvolvimento de *fingers* viscosos miscíveis em meios porosos fractais.

Considere a equação de Kozeny-Carman generalizada a três parâmetros, estudada no Capítulo 2, dada por

$$k = \xi^2 \frac{\phi^{(\varsigma+3)}}{(1 - \phi)^{2\eta}} \quad (164)$$

onde os três parâmetros ξ , η e ς são supostamente conhecidos. Para gerar um meio poroso heterogêneo usando a Equação (164), suporemos conhecido o intervalo de variação da porosidade desse material de interesse. Em outras palavras, suporemos que são conhecidos dois valores ϕ_{min} e ϕ_{max} , tal que a porosidade ϕ em qualquer posição do meio poroso satisfaz o seguinte: $\phi_{min} \leq \phi \leq \phi_{max}$. Consideramos também que ϕ varia de maneira aleatória nesse intervalo, sendo (dessa forma) a própria porosidade um campo heterogêneo estocástico.

Assim, conhecidos ϕ_{min} e ϕ_{max} , para efeito de caracterização numérica, tomaremos sobre o domínio poroso uma grade regular suficientemente fina e computaremos $\phi = random[\phi_{min}, \phi_{max}]$, para cada bloco da grade, onde $random[\phi_{min}, \phi_{max}]$ é uma função numérica que determina a distribuição aleatória uniforme de ϕ sobre o intervalo $[\phi_{min}, \phi_{max}]$. Em seguida, estes valores de porosidade são substituídos na Equação (164),

para se calcular os correspondentes valores de k . Tal procedimento gera um campo de permeabilidade fractal heterogêneo, onde k varia no intervalo $[k_{min}, k_{max}]$, sendo k_{min} e k_{max} calculados pela Equação (164) usando, respectivamente, os valores ϕ_{min} e ϕ_{max} .

Como o objetivo da presente seção é o de estudar a formação e desenvolvimento de *fingers* viscosos miscíveis, utilizando a equação de Kozeny-Carman generalizada a três parâmetros, então todos os resultados mostrados a seguir serão calculados empregando-se o método DFSANE, para resolver o sistema não linear resultante da discretização da equação da pressão. Essa escolha se deu pelo fato desse método ter se mostrado (na seção anterior) o mais eficiente. Nesta seção, as grandezas físicas associadas aos exemplos considerados são também medidas nas unidades do sistema híbrido de Darcy. Os meios porosos (retangulares) são discretizados usando-se grades de blocos centrados com 100×100 blocos, sendo $\Delta x = \Delta y = 10$ cm e $\Delta z = 10$ cm.

Em todos os exemplos, a seguir, a razão de mobilidade é adversa, dada por $M = \mu_0/\mu_s = 100$, a taxa de injeção é $Q = 0,2$ cm, o passo de tempo é $\Delta t = 100$ s e os valores dos parâmetros r_w , P_w , ρ_r , P_r e β_T são os mesmos mostrados na Tabela 1. Além disso, será considerado que o escoamento é puramente advectivo, ou seja, $d_M = 0$ cm²/s e $\alpha_L = \alpha_T = 0,0$ cm. E nos blocos que contém poços de injeção de solvente será considerado $w(t) = 1$, para todo $t \geq 0$.

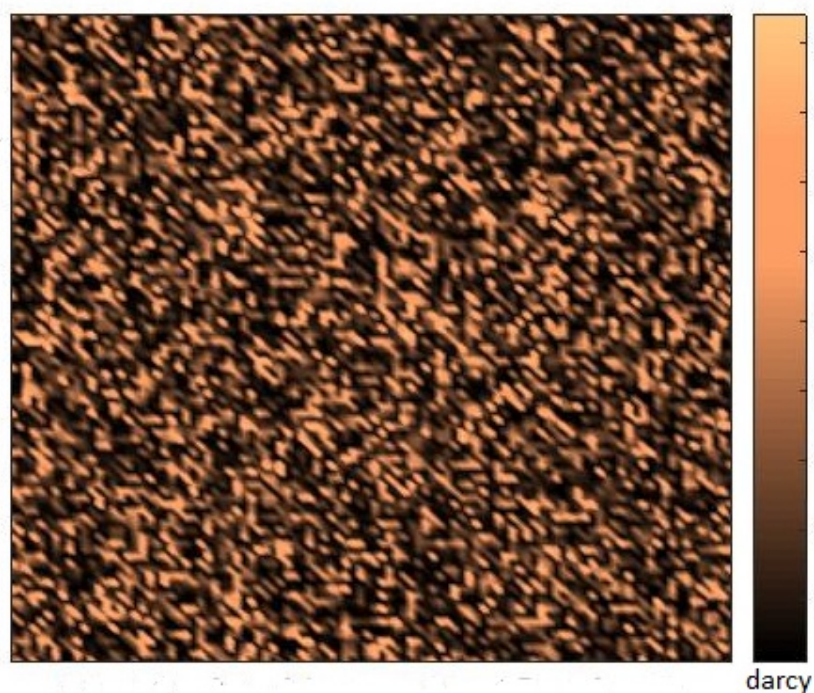
6.2.2 Exemplo 1 para meio heterogêneo

O material poroso é um meio heterogêneo fractal caracterizado numericamente pela equação de Kozeny-Carman generalizada com os seguintes parâmetros: $\xi^2 = 9,7$ darcy, $\varsigma = 0,0019$ e $\eta = 0,82$. A porosidade varia no intervalo $[\phi_{min}, \phi_{max}]$, onde $\phi_{min} = 0,2$ e $\phi_{max} = 0,6$. Este campo de permeabilidade fractal é ilustrado na Figura 22, onde tem-se a seguinte variação de k : $0,1116$ darcy $< k < 9,4052$ darcy.

O arranjo de poços segue o padrão *five-spot*, onde o solvente é injetado no bloco que contém o *corner* inferior esquerdo da Figura 22 e o óleo é produzido no bloco diametralmente oposto a esse, localizado no *corner* superior direito dessa mesma figura. A Figura 23 ilustra as superfícies e as curvas de nível da fração mássica de solvente geradas pelo nosso simulador, para 10 dias e 100 dias de injeção de solvente no reservatório de óleo pesado. Observando a Figura 23, fica claro o surgimento de *fingers* viscosos no meio poroso fractal heterogêneo nas proximidades do poço de injeção.

A Figura 24 mostra o desenvolvimento dos *fingers* viscosos desencadeados pelo meio heterogêneo gerado pela equação de Kozeny-Carman generalizada a três parâmetros, para os tempos de 200 dias e 500 dias de injeção de solvente. A partir da Figura 24 podemos notar que o fluido menos viscoso (solvente) invade o reservatório, contornando o óleo pesado através de caminhos preferenciais e gerando, de fato, regiões de baixa viscosidade

Figura 22 - Campo de Permeabilidade Fractal do Exemplo Heterogêneo 1.



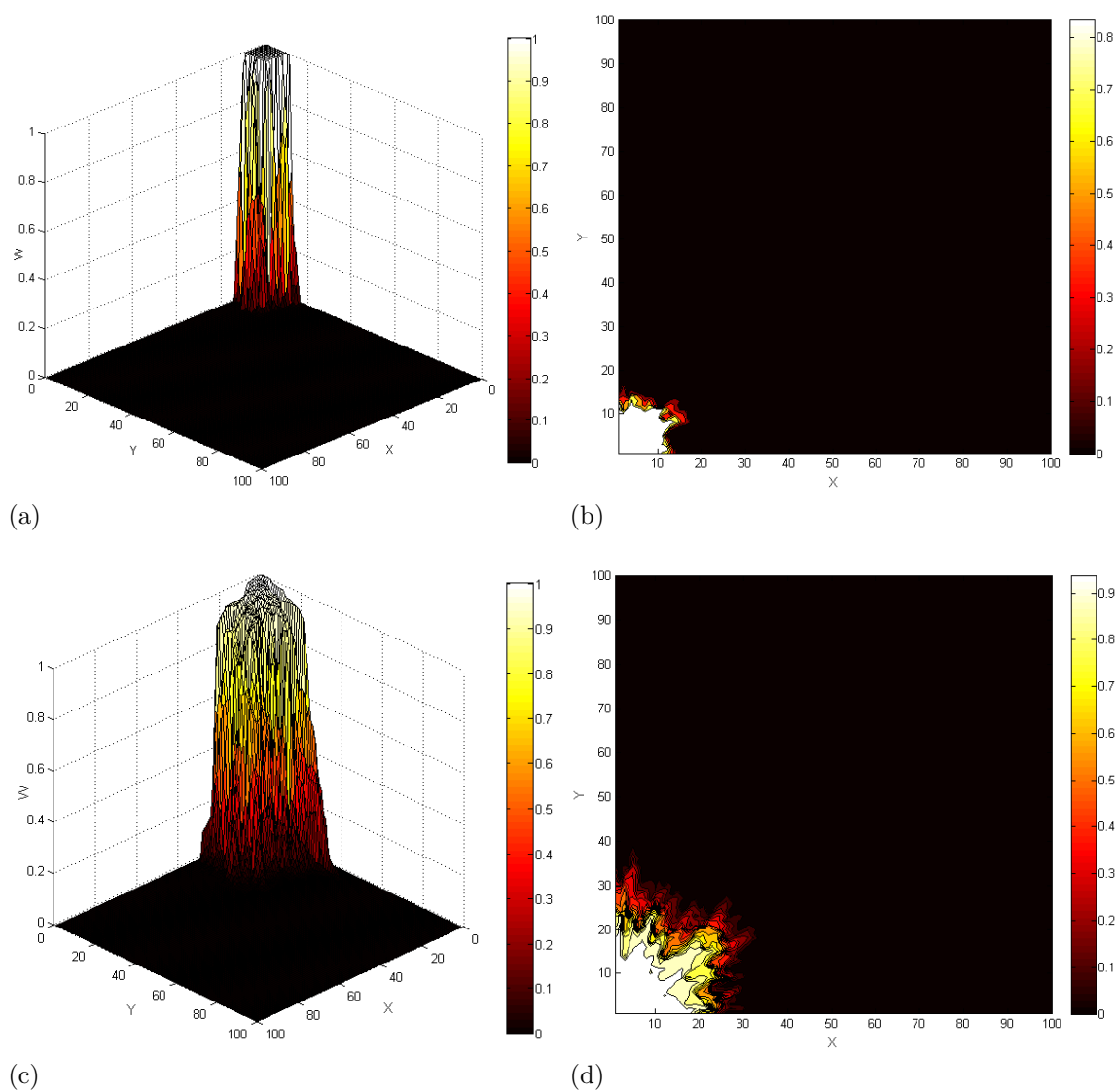
Fonte: A autora, 2020.

com formas semelhantes a longos dedos.

A Figura 25 exibe as superfícies e as curvas de nível da fração mássica de solvente em 1000 dias e 2000 dias de injeção de solvente. Observando a Figura 25 podemos verificar o instante em que o solvente injetado atinge (de maneira prematura) o poço de produção, em quantidades significativas. Nessa figura podemos ver também longos *fingers* de regiões de baixa viscosidade apontando na direção desse poço produtor. Essas regiões de solvente deixam para trás grandes quantidades de óleo em locais do meio poroso onde o processo de exploração se mostra ineficiente. De fato, pode-se notar que o óleo fica “empoçado” formando ilhas em diferentes localizações do reservatório, enquanto o solvente injetado avança na direção do poço de produção de óleo.

A Figura 26 mostra a proliferação de *fingers* viscosos ao longo de (praticamente) todo o reservatório de petróleo, no instante de tempo referente a 3000 dias de injeção de solvente, onde tais *fingers* foram desencadeados pelas propriedades do meio heterogêneo fractal construído com o emprego da equação de Kozeny-Carman generalizada a três parâmetros. Esse fato comprova a capacidade dessa equação modela o desencadeamento, formação, desenvolvimento e proliferação dos *fingers* viscosos em meios heterogêneos em simulações de escoamentos miscíveis com razão de mobilidade adversa.

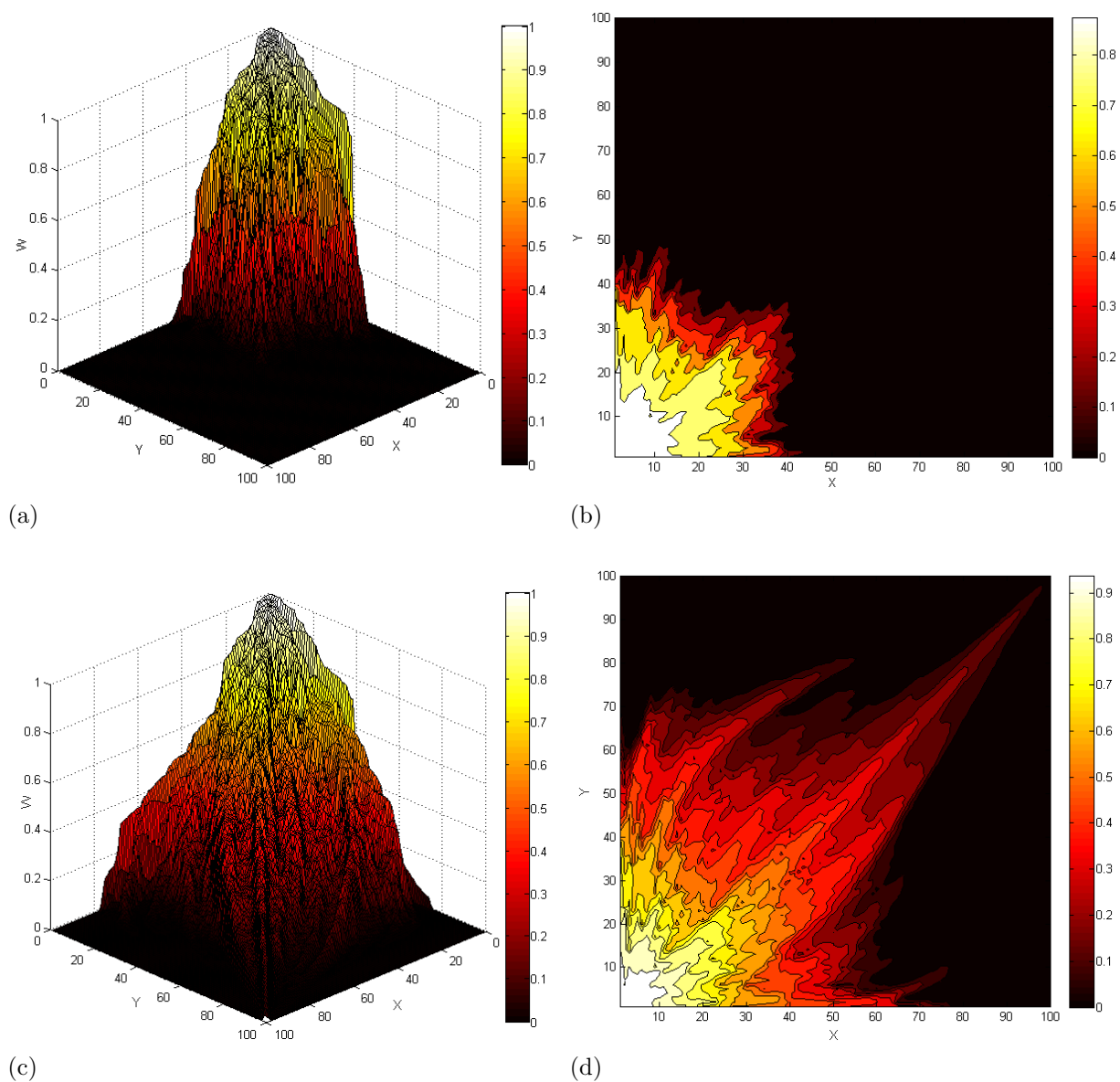
Figura 23 - Formação de *fingers* viscosos próximos ao poço de injeção para o Exemplo Heterogêneo 1, em 10 dias e 100 dias de injeção de solvente.



Legenda: (a) Superfície de fração mássica do solvente em 10 dias. (b) Curvas de nível da fração mássica do solvente em 10 dias. (c) Superfície de fração mássica do solvente em 100 dias. (d) Curvas de nível da fração mássica do solvente em 100 dias.

Fonte: A autora, 2020.

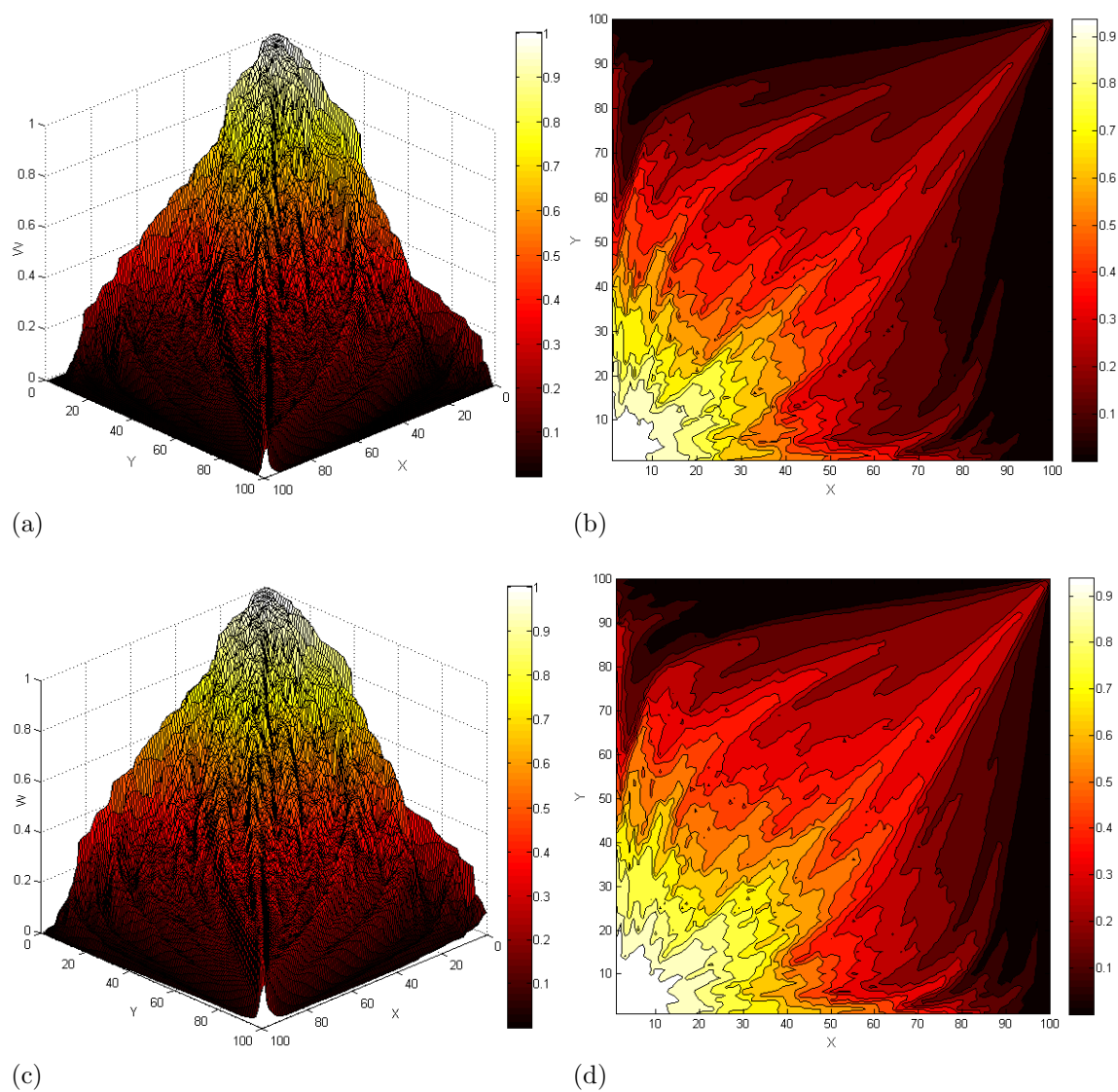
Figura 24 - Desenvolvimento de *fingers* viscosos no meio porosos fractal para o Exemplo Heterogêneo 1, em 200 dias e 500 dias de injeção de solvente.



Legenda: (a) Superfície de fração mássica do solvente em 200 dias. (b) Curvas de nível da fração mássica do solvente em 200 dias. (c) Superfície de fração mássica do solvente em 500 dias. (d) Curvas de nível da fração mássica do solvente em 500 dias.

Fonte: A autora, 2020.

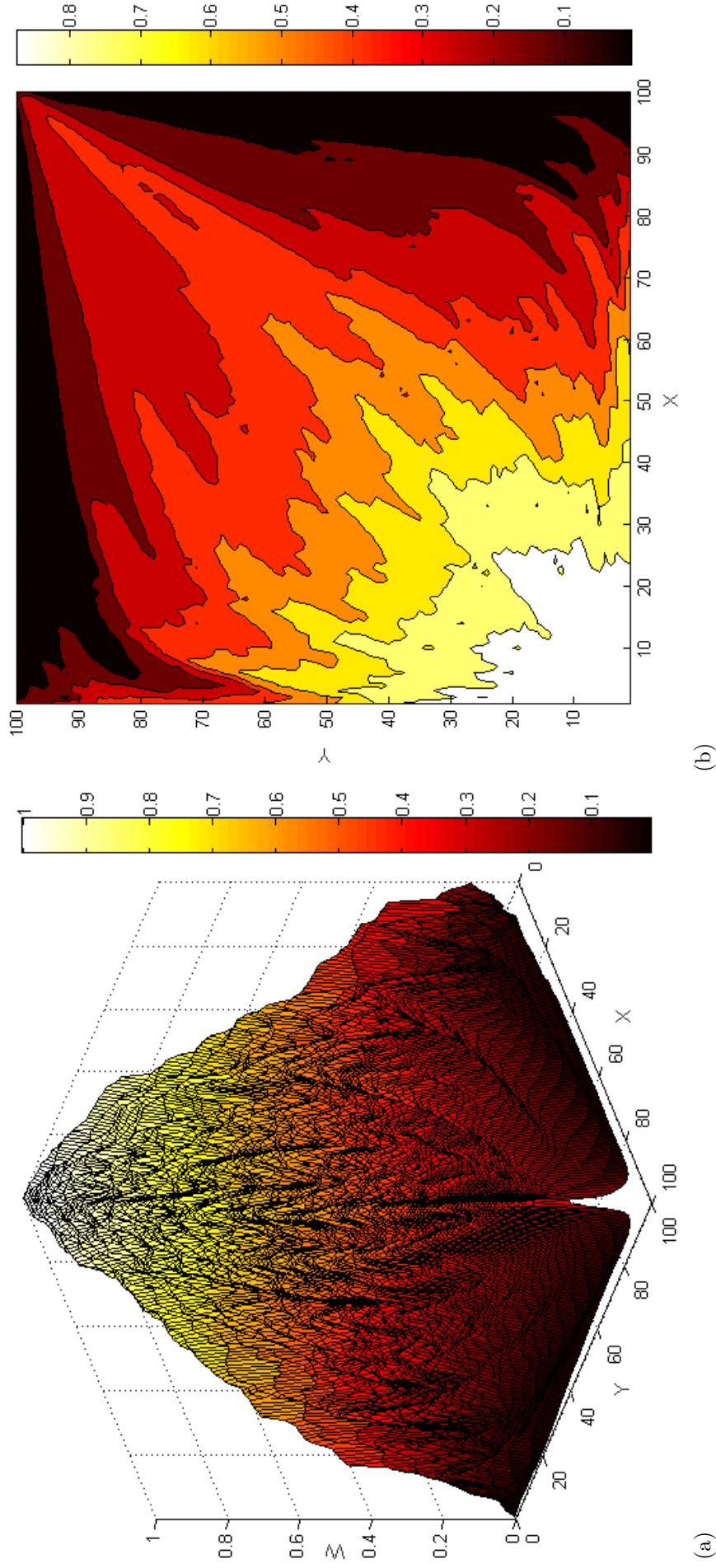
Figura 25 - Desenvolvimento de fingers viscosos próximos ao poço de extração para o Exemplo Heterogêneo 1, em 1000 dias e 2000 dias de injeção de solvente.



Legenda: (a) Superfície de fração mássica do solvente em 1000 dias. (b) Curvas de nível da fração mássica do solvente em 1000 dias. (c) Superfície de fração mássica do solvente em 2000 dias. (d) Curvas de nível da fração mássica do solvente em 2000 dias.

Fonte: A autora, 2020.

Figura 26 - Proliferação de *fingers* viscosos ao longo do meio poroso fractal para o Exemplo Heterogêneo 1, em 3000 dias de injeção de solvente.



Legenda: (a) Superfície de fração mássica do solvente. (b) Curvas de nível da fração mássica do solvente.

Fonte: A autora, 2020.

6.2.3 Exemplo 2 para meio heterogêneo

O domínio poroso retangular $\Omega = [0, 1000] \times [0, 1000]$ (com lados medidos em centímetros) é descrito como a união $\Omega = A \cup B$ de duas sub-regiões planas:

$$A = \{(x, y) \in \mathbb{R}^2; 350 \leq x \leq 650 \text{ e } 350 \leq y \leq 650\}, \quad (165)$$

$$B = \Omega - A, \quad (166)$$

em que os valores numéricos mostrados na Equação (165) são também medidos em centímetros.

Ambas sub-regiões A e B são meios porosos fractais heterogêneos, cujos campos de permeabilidade serão descritos pela equação de Kozeny-Carman generalizada a três parâmetros (Equação (164)), mas com parâmetros distintos, os quais são dados seguir:

- parâmetros da sub-região A: $\xi^2 = 8$ darcy, $\varsigma = 1,5$ e $\eta = 0,002$. A porosidade varia no intervalo $[\phi_{min}, \phi_{max}]$, onde $\phi_{min} = 0,2$ e $\phi_{max} = 0,3$.
- parâmetros da sub-região B: $\xi^2 = 9,7$ darcy, $\varsigma = 0,0019$ e $\eta = 0,82$. A porosidade varia no intervalo $[\phi_{min}, \phi_{max}]$, onde $\phi_{min} = 0,2$ e $\phi_{max} = 0,6$.

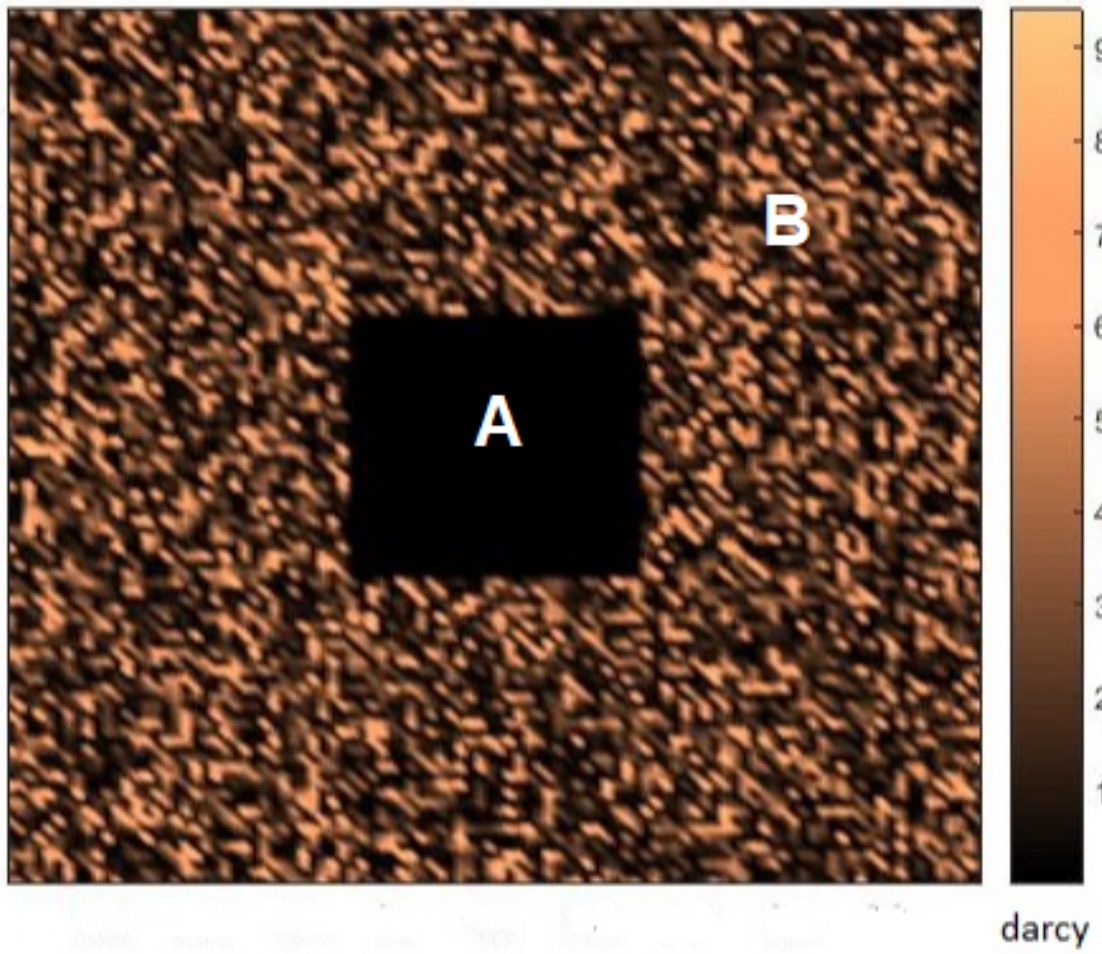
Estes campos de permeabilidade são mostrados na Figura 27. Podemos notar que A é um meio poroso heterogêneo com formato de um quadrado centrado em Ω , onde a distribuição de k assume valores pequenos. De fato, nessa sub-região de baixa permeabilidade temos $0,00573$ darcy $< k < 0,03554$ darcy. Na sub-região complementar $B = \Omega - A$ (de alta permeabilidade), o campo de permeabilidade heterogêneo é exatamente o mesmo considerado na Subseção 6.2.2, onde $0,1116$ darcy $< k < 9,4052$ darcy.

Como antes, o esquema de produção segue o arranjo five-spot, onde o solvente é injetado no bloco que contém o *corner* inferior esquerdo da Figura 27 e o óleo é produzido no bloco diametralmente oposto a esse, localizado no *corner* superior direito dessa figura.

Para potencializar os efeitos da instabilidade hidrodinâmica, neste exemplo, consideraremos, no tempo inicial, a existência de uma sub-região retangular vizinha ao poço de injeção, definida por $C = [0, 10 \Delta x] \times [0, 10 \Delta y]$, com lados medidos em centímetros, totalmente preenchida por solvente, ou seja, para $C = [0, 10 \Delta x] \times [0, 10 \Delta y]$ suporemos que $w(t_0) = 1,0$, para $t_0 = 0$ s.

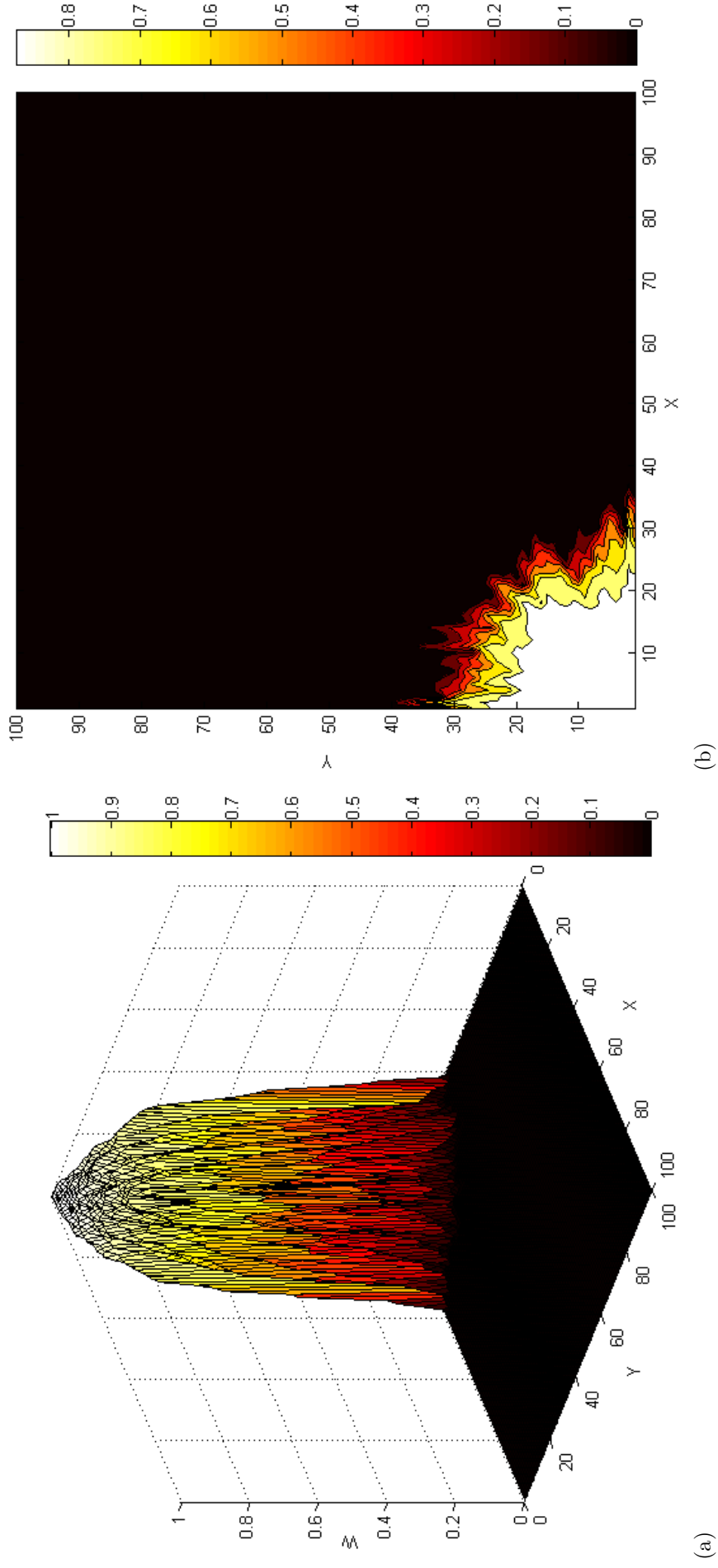
A Figura 28 mostra a superfície e as curvas de nível da fração mássica de solvente, para 100 dias de injeção de solvente. A partir dessa figura, podemos observar *fingers* viscosos agudos se formando nas proximidades da região C .

Figura 27 - Campo de Permeabilidade Fractal Heterogêneo 2 .



Fonte: O autor, 2020.

Figura 28 - Formação de fingers viscosos miscíveis próximos à região C , para o Exemplo Heterogêneo 2, em 100 dias de injeção de solvente.

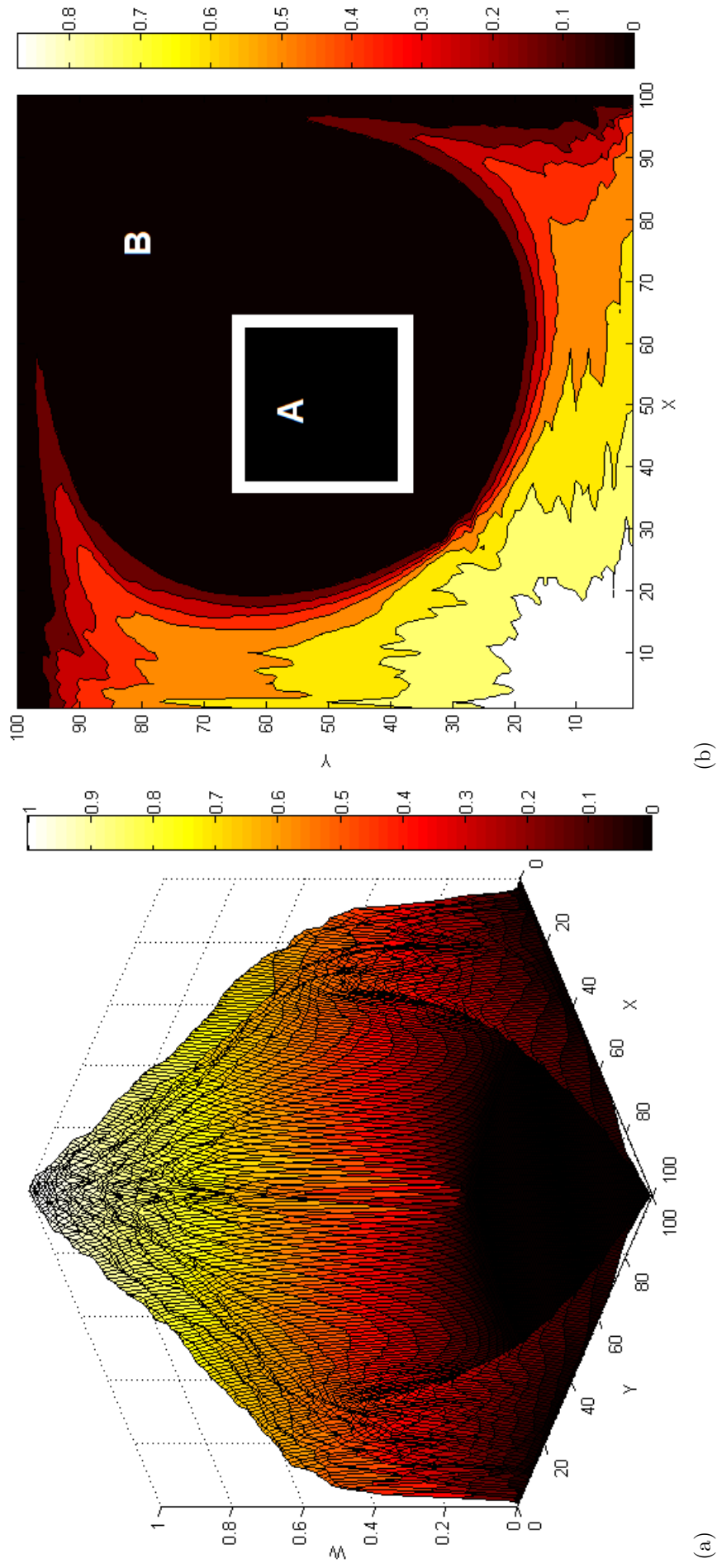


Legenda: (a) Superfície de fração mássica do solvente. (b) Curvas de nível da fração mássica do solvente.

Fonte: A autora, 2020.

Os resultados da simulação numérica para 500 dias de injeção de solvente são mostrados na Figura 29. Observando essa figura, podemos afirmar que, nesse exemplo, os fingers viscosos necessitaram de apenas um tempo de injeção relativamente pequeno para se desenvolverem e se aproximarem do poço de extração. A Figura 29 mostra também que o solvente ultrapassa uma grande quantidade de óleo que, aparentemente, se move com baixa velocidade, quando comparada com a velocidade de deslocamento do solvente injetado. Como esperado, podemos ver que a mistura formada por solvente e óleo residente, que se move na direção do poço produtor, contorna a região *A* de baixa permeabilidade. No entanto, apesar do formato retangular dessa região, podemos notar que o bolsão de óleo empoçado que aparece no centro do reservatório apresenta, surpreendentemente, uma forma circular, possivelmente decorrente da disposição dos sucessivos caminhos preferenciais ao desenvolvimento de fingers viscosos miscíveis que existem nesse meio heterogêneo, construído numericamente pela equação de Kozeny-Carman generalizada a três parâmetros.

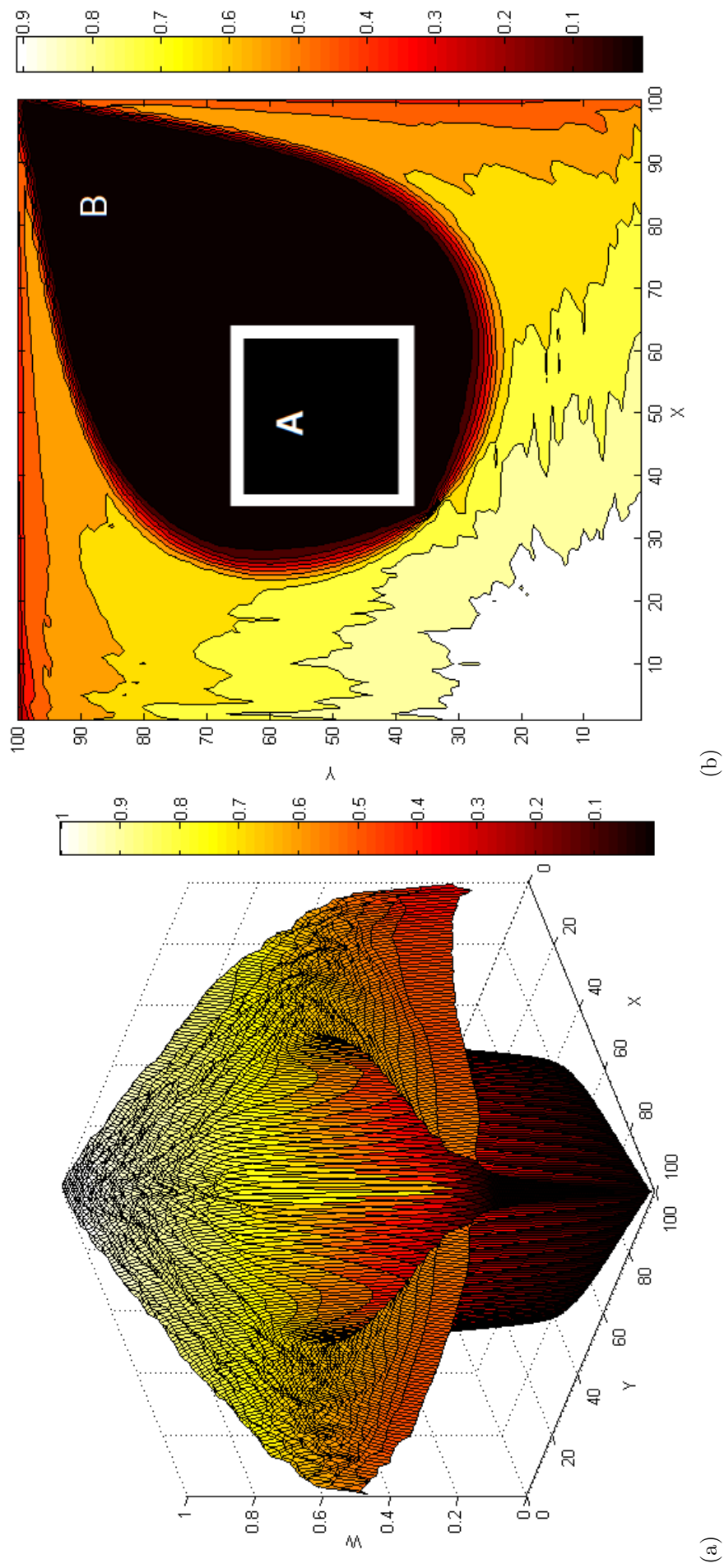
Figura 29 - Fingers viscosos miscíveis se aproximando rapidamente do poço produtor e um grande bolsão de óleo empoeado, para o Exemplo Heterogêneo 2, em 500 dias de injeção de solvente.



Legenda: (a) Superfície de fração mássica do solvente. (b) Curvas de nível da fração mássica do solvente.
 Fonte: A autora, 2020.

A Figura 30 mostra a superfície e as curvas de nível do solvente, que foram gerados pelo simulador numérico desenvolvido no presente trabalho, para 3000 dias de injeção de solvente. No instante associado a essa figura, podemos notar que o solvente injetado já atingiu o poço produtor. No entanto, o processo de extração se mostrou ineficiente. De fato, o desencadeamento, formação e desenvolvimento de *fingers* miscíveis nesse meio poroso heterogêneo de natureza fractal, descrito pela equação de Kozeny-Carman generalizada usada aqui, juntamente com a existência de uma região retangular de baixa permeabilidade, localizada no centro do reservatório, proporcionaram a permanência de um grande bolsão de óleo empoçado, com formato oval, que aparece de maneira muito destacada na Figura 30.

Figura 30 - A permanência de um grande bolsão de óleo (com formato oval) empoeado no reservatório, para o Exemplo Heterogêneo 2, em 3000 dias de injeção de solvente.



Legenda: (a) Superfície de fração mássica do solvente. (b) Curvas de nível da fração mássica do solvente.
 Fonte: A autora, 2020.

CONCLUSÕES E PERSPECTIVAS FUTURAS

Ao longo deste trabalho foi apresentada uma metodologia numérica para simulação de reservatórios de petróleo. O problema estudado considera o escoamento miscível, simulando o processo de recuperação de petróleo decorrente da injeção de um solvente em um reservatório de óleo, adotando aspectos básicos da análise matemática relativa aos sistemas fractais, e partindo-se do princípio de que alguns meios porosos se caracterizam por admitirem relações funcionais entre a porosidade e a permeabilidade, através da Equação de Kozeny-Carman generalizada, a qual correlaciona a permeabilidade com a porosidade de meios porosos com estruturas tipicamente encontradas na natureza (HENDERSON; BRÊTTAS; SACCO, 2010).

O DFSANE constitui uma abordagem livre de Jacobiana, recentemente desenvolvida para resolução de sistemas não lineares de grande porte, que não resolve sistemas lineares e nem usa qualquer informação explícita associada com a matriz Jacobiana. Neste trabalho, aplicamos com sucesso o método DFSANE para resolver a forma discretizada da equação da pressão, uma equação diferencial parcial não linear que rege a distribuição do campo de pressão na simulação de escoamentos miscíveis compressíveis em meios porosos.

As formas de discretização da equação diferencial deram origem a sistemas não lineares com 10 mil variáveis que foram abordadas várias vezes, ao longo de muitos passos de tempo dos processos transitórios considerados. Utilizamos um arranjo de poços do tipo de *five-spot* em geometrias bidimensionais, para meios porosos homogêneos e heterogêneos.

No meio poroso homogêneo, foram simulados três principais deslocamentos diferentes de fluidos compressíveis, incluindo fluxos com razão de mobilidade altamente adverso, em que a viscosidade do fluido residente é significativamente mais elevada do que a do fluido injetado. Foi comparado o desempenho do DFSANE com um método de Newton Inexato livre de Jacobiana, para tempos de 100 dias de injeção de fluido. Nos testes realizados, o DFSANE foi capaz de simular esse processo usando menos tempo de CPU, sem a introdução de fenômenos não-físicos para soluções numéricas. Para os exemplos em que a viscosidade do óleo foi maior que a do solvente, o DFSANE obteve o menor tempo de CPU em todos os intervalos de tempo.

Analisamos os efeitos da mobilidade no escoamento, juntamente com os fenômenos de dispersão nos meios porosos homogêneos, simulando diferentes tempos de injeção do solvente e parâmetros de análise que podem ser aplicados de acordo com as exigências no reservatório. Assim, como resultado, podemos afirmar que o DFSANE é um método confiável e eficiente para a simulação de escoamento compressíveis em meios porosos.

Muitos materiais porosos, nos quais a permeabilidade é apresentada como função da porosidade sendo caracterizada pela equação de Kozeny-Carman (KOZENY, 1927; CARMAN, 1956). Para superar algumas limitações desse modelo clássico, recentemente

foi desenvolvida a equação Kozeny-Carman generalizada, a qual correlaciona a permeabilidade com a porosidade de meios porosos com estruturas tipicamente encontradas na natureza, incluindo reservatório de petróleo.

Fingers viscosos são fenômenos de instabilidade hidrodinâmica que ocorrem em meios porosos, quando o fluido residente possui maior viscosidade do que o fluido injetado; assim, o menos viscoso invade o meio poroso, gerando esses *fingers* que atingem o poço produtor em um tempo menor, causando danos consideráveis à indústria de petróleo. Neste trabalho, a equação de Kozeny-Carman Generalizada a três parâmetros foi usada para desencadear *fingers* viscosos miscíveis e descrevê-los em um meio poroso fractal, durante a simulação. Assim, usamos, com sucesso, pela primeira vez, a equação KCG que foi incorporada a um modelo que descreve fluxos miscíveis de fluidos compressíveis, formado por equações diferenciais não lineares.

Os resultados numéricos foram gerados a partir de simulações custosas, com estudo do arranjo de poços do tipo *five-spot*. Os resultados mostraram que a equação KCG é um modelo matemático capaz de descrever os *fingers* viscosos na simulação do escoamento miscível de fluidos compressíveis em meio poroso heterogêneo.

A condição de não monotonicidade original do DFSANE e da proposta por Cheng e Li (2008) não foram capazes de resolver o sistema da equação da pressão em sua forma discreta. No entanto, a modificação usada aqui foi capaz de resolver o sistema não linear, o que é comprovado pelos resultados obtidos.

Assim, o bom desempenho da presente metodologia na resolução do problema do escoamento miscível, simulando um processo de recuperação de petróleo, proporciona excelente perspectiva futura para a continuação desta tese. Apontamos como sugestões de trabalhos futuros:

- utilizar o padrão *line-drive*. Nesse padrão o solvente será injetado através dos poços localizados nos nós de todos os blocos que estão em um lado do domínio retangular, enquanto os poços de extração encontram-se nos nós dos blocos do lado oposto;
- utilizar o padrão *five-spot* invertido, no qual o solvente é injetado no centro do meio poroso e extraído em quatro poços, um em cada vértice do domínio retangular;
- aplicar paralelismo aos métodos utilizados;
- melhorar ainda mais a condição de não monotocidade utilizada no método DFSANE para tornar o simulador ainda mais robusto e eficiente;
- analisar outros limitadores de fluxo como, por exemplo, o MUSCL *Monotonic Upstream-centered Scheme for Conservation Laws* (LEER, 1979);
- realizar um estudo da contaminação de aquíferos com modelos de métodos estudados neste trabalho;

- aplicar a equação de Kozeny-Carman generalizada para a caracterização e modelagem de outros meios porosos, como (por exemplo) meios tridimensionais.

REFERÊNCIAS

- AMAEFULE, J. O.; ALTUNBAY, M.; TIAB, D.; KERSEY, D. G.; KEELAN, D. K. et al. Enhanced reservoir description: using core and log data to identify hydraulic (flow) units and predict permeability in uncored intervals/wells. In: SOCIETY OF PETROLEUM ENGINEERS. *SPE annual technical conference and exhibition*. [S.l.], 1993.
- AZEVEDO, D. de A.; LACORTE, S.; VINHAS, T.; VIANA, P.; BARCELÓ, D. Monitoring of priority pesticides and other organic pollutants in river water from Portugal by gas chromatography–mass spectrometry and liquid chromatography–atmospheric pressure chemical ionization mass spectrometry. *Journal of chromatography A*, Elsevier, v. 879, n. 1, p. 13–26, 2000.
- AZIZ, K. settari, a. *Petroleum reservoir simulation*, 1979.
- BARTH, G. R.; ILLANGASEKARE, T. H.; HILL, M. C.; RAJARAM, H. A new tracer-density criterion for heterogeneous porous media. *Water Resources Research*, Wiley Online Library, v. 37, n. 1, p. 21–31, 2001.
- BARZILAI, J.; BORWEIN, J. M. Two-point step size gradient methods. *IMA journal of numerical analysis*, Oxford University Press, v. 8, n. 1, p. 141–148, 1988.
- BAYLES, G. A.; KLINZING, G. E.; CHIANG, S.-H. Fractal mathematics applied to flow in porous systems. *Particle & Particle Systems Characterization*, Wiley Online Library, v. 6, n. 1-4, p. 168–175, 1989.
- BEAR, J. *Dynamics of fluids in porous media*. [S.l.]: Courier Corporation, 1972.
- BECKMAN, E. J. Supercritical and near-critical CO₂ in green chemical synthesis and processing. *The Journal of Supercritical Fluids*, Elsevier, v. 28, n. 2-3, p. 121–191, 2004.
- BERGAMASCHI, L.; BRU, R.; MARTI, A.; PUTTI, M. Quasi-Newton acceleration of ilu preconditioners for nonlinear two-phase flow equations in porous media. *Advances in Engineering Software*, Elsevier, v. 46, n. 1, p. 63–68, 2012.
- BIRD, R. B.; STEWART, W. E.; LIGHTFOOT, E. N. Transport phenomena. 1960. *Madison, USA*, 1960.
- BLUNT, M.; RUBIN, B. Implicit flux limiting schemes for petroleum reservoir simulation. *Journal of Computational Physics*, Elsevier, v. 102, n. 1, p. 194–210, 1992.
- BOURBIÉ, T.; COUSSY, O.; ZINSZNER, B. Acoustics of porous media: Gulf publ. Co., translated by N. Marshall from French, *Acoustique des Milieux Poreux*, 1987.
- BRÊTTAS, J. D. C. *Modelagem e simulação do escoamento imiscível em meios porosos fractais descritos pela equação de Kozeny-Carman Generalizada*. 2013. 106 f. Dissertação (Mestrado em Modelagem Computacional) — Instituto Politécnico, Nova Friburgo, 2013.
- CARMAN, P. C. Fluid flow through granular beds. *Trans. Inst. Chem. Eng.*, v. 15, p. 150–166, 1937.

_____. Flow of gases through porous media. Academic, 1956.

CHENG, W.; LI, D.-H. A derivative-free nonmonotone line search and its application to the spectral residual method. *IMA Journal of Numerical Analysis*, Oxford University Press, v. 29, n. 3, p. 814–825, 2008.

CHRISTIE, M. A.; BOND, D. J. Detailed simulation of unstable processes in miscible flooding. *SPE Reservoir Engineering*, Society of Petroleum Engineers, v. 2, n. 04, p. 514–522, 1987.

COLLINS, R. E. Flow of fluids through porous materials. *Reinhold, New York*, v. 270, 1961.

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*, Wiley Online Library, v. 73, n. 3, p. 205–224, 2013.

COSTA, A. Permeability-porosity relationship: A reexamination of the kozeny-carman equation based on a fractal pore-space geometry assumption. *Geophysical research letters*, Wiley Online Library, v. 33, n. 2, 2006.

DARCY, H. *Les fontaines publiques de la ville de Dijon: exposition et application*. [S.l.]: Victor Dalmont, 1856.

DAWSON, C. N.; KLÍE, H.; WHEELER, M. F.; WOODWARD, C. S. A parallel, implicit, cell-centered method for two-phase flow with a preconditioned newton–krylov solver. *Computational Geosciences*, Springer, v. 1, n. 3-4, p. 215–249, 1997.

DEMBO, R. S.; EISENSTAT, S. C.; STEIHAUG, T. Inexact newton methods. *SIAM Journal on Numerical analysis*, SIAM, v. 19, n. 2, p. 400–408, 1982.

DENNIS, J. E.; SCHNABEL, R. B. *Numerical methods for unconstrained minimization*. [S.l.]: Prentice-Hall, Englewood Cliffs, 1983.

EISENSTAT, S. C.; WALKER, H. F. Globally convergent inexact newton methods. *SIAM Journal on Optimization*, SIAM, v. 4, n. 2, p. 393–422, 1994.

_____. Choosing the forcing terms in an inexact newton method. *SIAM Journal on Scientific Computing*, SIAM, v. 17, n. 1, p. 16–32, 1996.

ENGESGAARD, P.; JENSEN, K. H.; MOLSON, J.; FRIND, E. O.; OLSEN, H. Large-scale dispersion in a sandy aquifer: Simulation of subsurface transport of environmental tritium. *Water Resources Research*, Wiley Online Library, v. 32, n. 11, p. 3253–3266, 1996.

ERTEKIN, T.; ABOU-KASSEM, J. H.; KING, G. R. *Basic applied reservoir simulation*. [S.l.: s.n.], 2001.

FENG, Q.-x.; ZHOU, J.-x.; CHEN, Z.-y.; WANG, X.-l.; NI, F.-t.; YANG, H.-j. et al. Study on eor mechanisms by microbial flooding. In: SOCIETY OF PETROLEUM ENGINEERS. *Annual International Conference and Exhibition*. [S.l.], 2002.

- FERREIRA, F.; KISCHINHEVSKY, M.; HENDERSON, N. Application of the path tubes method to the navier-stokes equations. *Procedia Computer Science*, Elsevier, v. 108, p. 1963–1972, 2017.
- FILIZOLA, H. F.; FERRACINI, V. L.; SANS, L. M. A.; GOMES, M. A. F.; FERREIRA, C. J. A. Monitoramento e avaliação do risco de contaminação por pesticidas em água superficial e subterrânea na região de guaíra. *Pesquisa agropecuária brasileira*, SciELO Brasil, v. 37, n. 5, p. 659–667, 2002.
- FLORES, E. *Escoamento Supercrítico em Meios Porosos*. 2003. 88 f. Dissertação (Mestrado em Modelagem Computacional) — Instituto Politécnico, Nova Friburgo, 2003.
- GARCIA, E. Formulações de elementos finitos bi e tridimensionais para simulação em paralelo de escoamentos em reservatórios de petróleo. *Universidade Federal do Rio de Janeiro-Tese de Doutorado*, 1997.
- GLOUB, G. H.; LOAN, C. F. V. Matrix computations. *Hopkins Fulfillment Service, 3th editions*. Baltimore, The Johns Hopkins University Press, 1996.
- GOMES, A. A. *Aplicação de uma técnica semi-implícita de simulação de reservatório ao problema de Buckley-Leverett para meios porosos heterogêneos de natureza fractal*. Tese (Doutorado) — Universidade do Estado do Rio de Janeiro, 2017.
- GREEN, D. W.; WILLHITE, G. P. et al. *Enhanced oil recovery*. [S.l.]: Henry L. Doherty Memorial Fund of AIME, Society of Petroleum Engineers Richardson, TX, 1998. v. 6.
- GRIPPO, L.; LAMPARIELLO, F.; LUCIDI, S. A nonmonotone line search technique for newton's method. *SIAM Journal on Numerical Analysis*, SIAM, v. 23, n. 4, p. 707–716, 1986.
- GUERREIRO, J. N. C.; BARBOSA, H. J. C.; GARCIA, E. L. M.; LOULA, A. F. D.; MALTA, S. M. C. Identification of reservoir heterogeneities using tracer breakthrough profiles and genetic algorithms. *SPE Reservoir Evaluation & Engineering*, Society of Petroleum Engineers, v. 1, n. 03, p. 218–223, 1998.
- HENDERSON, N.; BRÊTTAS, J. C.; SACCO, W. F. A three-parameter kozeny-carman generalized equation for fractal porous media. *Chemical Engineering Science*, Elsevier, v. 65, n. 15, p. 4432–4442, 2010.
- _____. Applicability of the three-parameter Kozeny-Carman generalized equation to the description of viscous fingering in simulations of waterflood in heterogeneous porous media. *Advances in Engineering Software*, Elsevier, v. 85, p. 73–80, 2015.
- HENDERSON, N.; PENA, L. Simulating effects of the permeability anisotropy on the formation of viscous fingers during waterflood operations. *Journal of Petroleum Science and Engineering*, Elsevier, v. 153, p. 178–186, 2017.
- HENDERSON, N.; SAMPAIO, M.; PENA, L. Developing new approaches for the path tubes method. *Applied Mathematical Modelling*, Elsevier, v. 35, n. 1, p. 285–302, 2011.
- HESTENES, M. R.; STIEFEL, E. *Methods of conjugate gradients for solving linear systems*. [S.l.]: NBS Washington, DC, 1952. v. 49.

- HOLM, L. et al. Miscibility and miscible displacement. *Journal of Petroleum Technology*, Society of Petroleum Engineers, v. 38, n. 08, p. 817–818, 1986.
- JONES, J. E.; WOODWARD, C. S. Newton-Krylov-multigrid solvers for large-scale, highly heterogeneous, variably saturated flow problems. *Advances in Water Resources*, Elsevier, v. 24, n. 7, p. 763–774, 2001.
- KARIMPOULI, S.; TAHMASEBI, P. A hierarchical sampling for capturing permeability trend in rock physics. *Transport in Porous Media*, Springer, v. 116, n. 3, p. 1057–1072, 2017.
- KELLEY, C. Iterative methods for linear and nonlinear equations. *Frontiers in applied mathematics*, v. 16, p. 575–601, 1996.
- KOPONEN, A.; KATAJA, M.; TIMONEN, J. Permeability and effective porosity of porous media. *Physical Review E*, APS, v. 56, n. 3, p. 3319, 1997.
- KOZENY, J. Uber kapillare leitung der wasser in boden. *Royal Academy of Science, Vienna, Proc. Class I*, v. 136, p. 271–306, 1927.
- LA CRUZ, W.; MARTÍNEZ, J.; RAYDAN, M. Spectral residual method without gradient information for solving large-scale nonlinear systems of equations. *Mathematics of Computation*, v. 75, p. 1429–1448, 2006.
- LA CRUZ, W.; RAYDAN, M. Nonmonotone spectral methods for large-scale nonlinear systems. *Optimization Methods and Software*, Taylor & Francis, v. 18, n. 5, p. 583–599, 2003.
- LEER, B. V. Towards the ultimate conservative difference scheme. v. a second-order sequel to godunov's method. *Journal of computational Physics*, Elsevier, v. 32, n. 1, p. 101–136, 1979.
- LEVEQUE, R. J. *Finite volume methods for hyperbolic problems*. [S.l.]: Cambridge university press, 2002. v. 31.
- LIU, S.; MASLIYAH, J. Steady developing laminar flow in helical pipes with finite pitch. *International Journal of Computational Fluid Dynamics*, Taylor & Francis, v. 6, n. 3, p. 209–224, 1996.
- LIU, S.; MASLIYAH, J. H. Single fluid flow in porous media. *Chemical Engineering Communications*, Taylor & Francis, v. 148, n. 1, p. 653–732, 1996.
- LOULA, A.; GUERREIRO, J.; RIBEIRO, F.; LANDAU, L. et al. Tracer injection simulations by finite element methods. *SPE Advanced Technology Series*, Society of Petroleum Engineers, v. 4, n. 01, p. 150–156, 1996.
- MALTA, S. Análise numérica de métodos de elementos finitos para escoamentos miscíveis. *Universidade Federal do Rio de Janeiro-Tese de Doutorado*, 1995.
- MALTA, S.; LOULA, A.; GARCIA, E. A post-processing technique to approximate the velocity field in miscible displacement simulations. *Matemática contemporânea*, v. 8, p. 239–268, 1995.

- MALTA, S. M.; LOULA, A. F.; GARCIA, E. L. Numerical analysis of a stabilized finite element method for tracer injection simulations. *Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering*, Elsevier, v. 187, n. 1-2, p. 119–136, 2000.
- MANDELBROT, B. B. *The fractal geometry of nature*. [S.l.]: WH freeman New York, 1982. v. 1.
- MAVKO, G.; NUR, A. The effect of a percolation threshold in the kozeny-carman relation. *Geophysics*, Society of Exploration Geophysicists, v. 62, n. 5, p. 1480–1482, 1997.
- MCGREGOR, R. The effect of rate of flow on rate of dyeing ii—the mechanism of fluid flow through textiles and its significance in dyeing. *Journal of the Society of Dyers and Colourists*, Wiley Online Library, v. 81, n. 10, p. 429–438, 1965.
- NUNEZ, Y. R.; FARIA, C. O.; LOULA, A. F.; MALTA, S. M. A mixed-hybrid finite element method applied to tracer injection processes. *International Journal of Modeling and Simulation for the Petroleum Industry*, v. 6, n. 1, 2012.
- PANDA, M. N.; LAKE, L. W. Estimation of single-phase permeability from parameters of particle-size distribution. *AAPG bulletin*, American Association of Petroleum Geologists (AAPG), v. 78, n. 7, p. 1028–1039, 1994.
- PAPE, H.; CLAUSER, C.; IFFLAND, J. Variation of permeability with porosity in sandstone diagenesis interpreted with a fractal pore space model. In: *Fractals and dynamic systems in geoscience*. [S.l.]: Springer, 2000. p. 603–619.
- PEACEMAN, D. W. *Fundamentals of numerical reservoir simulation*. [S.l.]: Elsevier, 1977. v. 6.
- _____. Survey of problems in numerical reservoir simulation. *SIAM, Philadelphia*, 1986.
- PFEIFER, P.; AVNIR, D. Chemistry in noninteger dimensions between two and three. i. fractal theory of heterogeneous surfaces. *The Journal of chemical physics*, American Institute of Physics, v. 79, n. 7, p. 3558–3565, 1983.
- RAYDAN, M. On the barzilai and borwein choice of steplength for the gradient method. *IMA Journal of Numerical Analysis*, Oxford University Press, v. 13, n. 3, p. 321–326, 1993.
- REVIL, A.; III, L. C. Permeability of shaly sands. *Water Resources Research*, Wiley Online Library, v. 35, n. 3, p. 651–662, 1999.
- RODRIGUEZ, E.; GIACOMELLI, F.; VAZQUEZ, A. Permeability-porosity relationship in rtm for different fiberglass and natural reinforcements. *Journal of composite materials*, Sage Publications Sage CA: Thousand Oaks, CA, v. 38, n. 3, p. 259–268, 2004.
- ROSA, A.; CARVALHO, R.; XAVIER, J. Engenharia de reservatório de poços. *Editores Interciência, Rio de Janeiro*, 2006.
- SAHIMI, M. Effect of long-range correlations on transport phenomena in disordered media. *AIChE Journal*, Wiley Online Library, v. 41, n. 2, p. 229–240, 1995.

SHIH, C.-H.; LEE, L. J. Effect of fiber architecture on permeability in liquid composite molding. *Polymer Composites*, Wiley Online Library, v. 19, n. 5, p. 626–639, 1998.

SILVA, A. d. R. *Simulação numérica da infiltração da água em zona subsaturada*. Tese (Doutorado) — Universidade do Estado do Rio de Janeiro, 2018.

SILVA, N. C. d. *Métodos numéricos para equações parabólicas não lineares: um estudo visando o escoamento de películas finas aderidas a superfícies sólidas*. Tese (Doutorado) — Universidade do Estado do Rio de Janeiro, 2017.

SIMÃO, G.; HENDERSON, L. N. Abordagens do tipo livre de jacobiana na simulação do escoamento de fluidos compressíveis em meios porosos. *XIX ENMC/Encontro Nacional de Modelagem Computacional*, 2016.

_____. Simulação para o escoamento de fluidos compressíveis em meios porosos. *Proceeding Series of the Brazilian Society of Computational and Applied Mathematics*, v. 6, n. 1, 2017.

_____. Modeling and simulation of miscellaneous scan in porous media. *XXI ENMC/Encontro Nacional de Modelagem Computacional*, 2018.

SIMÃO, G.; HENDERSON, L. N.; FERREIRA, G. S. F.; SOUZA, A. L. R. Modelagem e simulação do escoamento miscível em meios porosos. *XXIII Simpósio Brasileiro de Recursos Hídricos*, 2019.

_____. Simulação computacional do escoamento de fluidos miscíveis em meios porosos através de técnicas livre de jacobiana. *XL Ibero-Latin-American Congress on Computational Methods in Engineering*, 2019.

TARDY, P.; PEARSON, J. A 1d-averaged model for stable and unstable miscible flows in porous media with varying pecelet numbers and aspect ratios. *Transport in porous media*, Springer, v. 62, n. 2, p. 205–232, 2006.

TARZANAGH, D. A.; NAZARI, P.; PEYGHAMI, M. R. A nonmonotone prp conjugate gradient method for solving square and under-determined systems of equations. *Computers & Mathematics with Applications*, Elsevier, v. 73, n. 2, p. 339–354, 2017.

TCHELEPI, H.; JR, F. O. et al. Interaction of viscous fingering, permeability heterogeneity, and gravity segregation in three dimensions. *SPE Reservoir Engineering*, Society of Petroleum Engineers, v. 9, n. 04, p. 266–271, 1994.

THOMAS, J. W. *Numerical partial differential equations: conservation laws and elliptic equations*. [S.l.]: Springer Science & Business Media, 1999. v. 33.

TODD, M.; LONGSTAFF, W. et al. The development, testing, and application of a numerical simulator for predicting miscible flood performance. *Journal of Petroleum Technology*, Society of Petroleum Engineers, v. 24, n. 07, p. 874–882, 1972.

VORST, H. A. Van der; DEKKER, K. Conjugate gradient type methods and preconditioning. *Journal of Computational and Applied Mathematics*, North-Holland, v. 24, n. 1-2, p. 73–87, 1988.

- VOSSOUGH, S. Profile modification using in situ gelation technology—a review. *Journal of Petroleum Science and Engineering*, Elsevier, v. 26, n. 1-4, p. 199–209, 2000.
- WAI, C. M.; LAINTZ, K. *Supercritical fluid extraction*. [S.l.]: Google Patents, 1994. US Patent 5,356,538.
- WERNER, S. L.; CATABRIGA, L.; SANTOS, I. P. Método de estabilização submalha difusão dinâmica aplicada na simulação de escoamento miscível. *Mecânica Computacional*, v. 29, n. 39, p. 4039–4053, 2010.
- WHITAKER, S. Introduction to fluid mechanics. 1994.
- XIAO, B.; WANG, W.; ZHANG, X.; LONG, G.; FAN, J.; CHEN, H.; DENG, L. A novel fractal solution for permeability and kozeny-carman constant of fibrous porous media made up of solid particles and porous fibers. *Powder technology*, Elsevier, v. 349, p. 92–98, 2019.
- XU, P.; YU, B. Developing a new form of permeability and kozeny–carman constant for homogeneous porous media by means of fractal geometry. *Advances in water resources*, Elsevier, v. 31, n. 1, p. 74–81, 2008.

APÊNDICE A – Discretização espacial do termo $F_x(w^n, P^{n+1})_{i-\frac{1}{2},j}$ de fluxo da Equação (93)

Neste apêndice será considerada a equação da fração mássica conforme descrito na seção 4.4.

Segundo a Equação (93) e Equação (94), necessitamos da discretização espacial do termo de fluxo $F_x(w^n, P^{n+1})_{i-\frac{1}{2},j}$. Isso será feito supondo $i \neq 1$, pois caso contrário tal termo é zero.

Assim, podemos escrever

$$\begin{aligned} F_x(w^n, P^{n+1})_{i-\frac{1}{2},j} &= -w^n_{i-\frac{1}{2},j} \left[\frac{\rho(P^{n+1})k}{\mu(w^n)} \right]_{i-\frac{1}{2},j} \left(\frac{\partial P^{n+1}}{\partial x} \right)_{i-\frac{1}{2},j} \\ &- [\rho(P^{n+1}) D_{11}(w^n, P^{n+1})]_{i-\frac{1}{2},j} \left(\frac{\partial w^n}{\partial x} \right)_{i-\frac{1}{2},j} \\ &- [\rho(P^{n+1}) D_{12}(w^n, P^{n+1})]_{i-\frac{1}{2},j} \left(\frac{\partial w^n}{\partial y} \right)_{i-\frac{1}{2},j}. \end{aligned} \quad (167)$$

Para contornar a dificuldade natural de se determinar a derivada parcial de w com relação à y no ponto $(x_{i-\frac{1}{2}}, y_j)$, aproximando a última derivada que aparece no lado direito da Equação (167) pela média aritmética dos valores dessa derivada definidos nos respectivos pontos vizinhos, ou seja, considerando

$$\left(\frac{\partial w^n}{\partial y} \right)_{i-\frac{1}{2},j} = \frac{1}{2} \left[\left(\frac{\partial w^n}{\partial y} \right)_{i-1,j} + \left(\frac{\partial w^n}{\partial y} \right)_{i,j} \right]. \quad (168)$$

Em seguida, as duas derivadas que aparecem no lado direito da Equação (168) são aproximadas por diferenças finitas centradas, resultando em

$$\left(\frac{\partial w^n}{\partial y} \right)_{i-\frac{1}{2},j} = \frac{1}{2} \left(\frac{w^n_{i-1,j+1} - w^n_{i-1,j-1}}{2\Delta y} + \frac{w^n_{i,j+1} - w^n_{i,j-1}}{2\Delta y} \right). \quad (169)$$

Substituindo a Equação (169) na Equação (167) e discretizando as duas derivadas parciais restantes na Equação (167) por diferenças finitas centradas, obtém-se

$$\begin{aligned} F_x(w^n, P^{n+1})_{i-\frac{1}{2},j} &= -w^n_{i-\frac{1}{2},j} \left[\frac{\rho(P^{n+1})k}{\mu(w^n)} \right]_{i-\frac{1}{2},j} \frac{P^{n+1}_{i,j} - P^{n+1}_{i-1,j}}{\Delta x} \\ &- [\rho(P^{n+1}) D_{11}(w^n, P^{n+1})]_{i-\frac{1}{2},j} \frac{w^n_{i,j} - w^n_{i-1,j}}{\Delta x} \\ &- [\rho(P^{n+1}) D_{12}(w^n, P^{n+1})]_{i-\frac{1}{2},j} \frac{1}{2} \left(\frac{w^n_{i-1,j+1} - w^n_{i-1,j-1}}{2\Delta y} + \frac{w^n_{i,j+1} - w^n_{i,j-1}}{2\Delta y} \right). \end{aligned} \quad (170)$$

Note que a discretização indicada na Equação (168) não está definida para $j = 1$ e $j = n_y$. Em tais blocos de fronteira considerando aproximações de primeira ordem dadas,

$$\left(\frac{\partial w^n}{\partial y}\right)_{i-\frac{1}{2},j} = \frac{1}{2} \left(\frac{w_{i-1,j+1}^n - w_{i-1,j}^n}{\Delta y} + \frac{w_{i,j+1}^n - w_{i,j}^n}{\Delta y} \right), \text{ para } j = 1 \quad (171)$$

e

$$\left(\frac{\partial w^n}{\partial y}\right)_{i-\frac{1}{2},j} = \frac{1}{2} \left(\frac{w_{i-1,j}^n - w_{i-1,j-1}^n}{\Delta y} + \frac{w_{i,j}^n - w_{i,j-1}^n}{\Delta y} \right), \text{ para } j = n_y. \quad (172)$$

Como mencionado na seção 4.4 sobre o limitador de fluxo, considerando a seguinte aproximação baseada em uma expansão em série de Taylor,

$$w_{i-\frac{1}{2},j}^n = \begin{cases} w_{i-1,j}^n + \frac{\varphi_{i-\frac{1}{2},j}^n}{2} (w_{i,j}^n - w_{i-1,j}^n), & \text{se } u_{i-\frac{1}{2},j}^{n+1} \geq 0 \\ w_{i,j}^n + \frac{\varphi_{i-\frac{1}{2},j}^n}{2} (w_{i,j}^n - w_{i-1,j}^n), & \text{se } u_{i-\frac{1}{2},j}^{n+1} < 0. \end{cases} \quad (173)$$

onde da Equação (173) $\varphi_{i-\frac{1}{2},j}^n = \varphi_{i-\frac{1}{2},j}^n \left(r_{i-\frac{1}{2},j}^n \right)$ representa uma função limitador de fluxo, a qual depende de $r_{i-\frac{1}{2},j}^n$, a chamada razão de inclinação de w^n no ponto $(x_{i-\frac{1}{2}}, y_j)$. Tal razão de inclinação funciona como um sensor de descontinuidades, aqui definido por

$$r_{i-\frac{1}{2},j}^n = \begin{cases} \frac{w_{i-1,j}^n - w_{i-2,j}^n}{(w_{i,j}^n - w_{i-1,j}^n) + \delta}, & \text{se } i \neq 2 \\ 0, & \text{se } i = 2. \end{cases} \quad (174)$$

onde na Equação (174) $\delta > 0$ é um número suficientemente pequeno, usado para evitar possíveis divisões por zero. Utiliza-se aqui $\delta = 10^{-9}$.

No presente trabalho, empregando o limitador de fluxo denominado de superbee definido por

$$\varphi(r) = \max \{0, \min \{1, 2r\}, \min \{2, r\}\} \quad (175)$$

O termo $\left[\frac{\rho(P^{n+1})^k}{\mu(w^n)} \right]_{i-\frac{1}{2},j}$ que aparece na primeira parcela do lado direito da Equação (170) é aproximado pela média harmônica descrita na Equação (91).

Para finalizar a discretização do fluxo mostrado na Equação (170), aproximando os termos difusivos $[\rho(P^{n+1}) D_{11}(w^n, P^{n+1})]_{i-\frac{1}{2},j}$ e $[\rho(P^{n+1}) D_{12}(w^n, P^{n+1})]_{i-\frac{1}{2},j}$. Para isso,

usando a definição do tensor de difusão, como referenciada no capítulo 3,

$$\begin{aligned}
& [\rho(P^{n+1}) D_{11}(w^n, P^{n+1})]_{i-\frac{1}{2},j} = \phi d_M \rho(P^{n+1})_{i-\frac{1}{2},j} \\
& + \alpha_T \sqrt{\left[\sigma_x(w^n, P^{n+1})_{i-\frac{1}{2},j} \right]^2 + \left[\sigma_y(w^n, P^{n+1})_{i-\frac{1}{2},j} \right]^2} \\
& + \frac{(\alpha_L - \alpha_T) \left[\sigma_x(w^n, P^{n+1})_{i-\frac{1}{2},j} \right]^2}{\sqrt{\left[\sigma_x(w^n, P^{n+1})_{i-\frac{1}{2},j} \right]^2 + \left[\sigma_y(w^n, P^{n+1})_{i-\frac{1}{2},j} \right]^2}}
\end{aligned} \tag{176}$$

e

$$[\rho(P^{n+1}) D_{12}(w^n, P^{n+1})]_{i-\frac{1}{2},j} = \frac{(\alpha_L - \alpha_T) \sigma_x(w^n, P^{n+1})_{i-\frac{1}{2},j} \sigma_y(w^n, P^{n+1})_{i-\frac{1}{2},j}}{\sqrt{\left[\sigma_x(w^n, P^{n+1})_{i-\frac{1}{2},j} \right]^2 + \left[\sigma_y(w^n, P^{n+1})_{i-\frac{1}{2},j} \right]^2}} \tag{177}$$

onde da Equação (177)

$$\begin{aligned}
& \sigma_x(w^n, P^{n+1})_{i-\frac{1}{2},j} \equiv - \left[\frac{\rho(P^{n+1})k}{\mu(w^n)} \right]_{i-\frac{1}{2},j} \left(\frac{\partial P^{n+1}}{\partial x} \right)_{i-\frac{1}{2},j} \cong \\
& - \left[\frac{\rho(P^{n+1})k}{\mu(w^n)} \right]_{i-\frac{1}{2},j} \frac{P_{i,j}^{n+1} - P_{i-1,j}^{n+1}}{\Delta x}
\end{aligned} \tag{178}$$

e

$$\begin{aligned}
& \sigma_y(w^n, P^{n+1})_{i-\frac{1}{2},j} \equiv - \left[\frac{\rho(P^{n+1})k}{\mu(w^n)} \right]_{i-\frac{1}{2},j} \left(\frac{\partial P^{n+1}}{\partial y} \right)_{i-\frac{1}{2},j} \cong \\
& - \left[\frac{\rho(P^{n+1})k}{\mu(w^n)} \right]_{i-\frac{1}{2},j} \frac{1}{2} \left(\frac{P_{i-1,j+1}^n - P_{i-1,j-1}^n}{2\Delta y} + \frac{P_{i,j+1}^n - P_{i,j-1}^n}{2\Delta y} \right).
\end{aligned} \tag{179}$$

Observe que nas Equações (178) e (179) usando aproximações em diferenças finitas inteiramente análogas aquelas previamente empregadas na discretização de outros termos da Equação (170). Dessa maneira, note que os últimos dois termos entre parênteses, que aparecem na Equação (179), admitem correções semelhantes às mostradas nas Equações (171) e (172). Novamente, a quantidade $\left[\frac{\rho(P^{n+1})k}{\mu(w^n)} \right]_{i-\frac{1}{2},j}$ é aproximada pela média harmônica mostrada na Equação (91). Por outro lado, o termo $\rho(P^{n+1})_{i-\frac{1}{2},j}$ que aparece na primeira parcela do lado direito da Equação (104) é aproximado por média aritmética dos respectivos valores definidos nos blocos vizinhos.

Isto conclui a discretização do termo de fluxo $F_x(w^n, P^{n+1})_{i-\frac{1}{2},j}$ que aparece na Equação (93).

APÊNDICE B – Discretização espacial do termo $\mathbf{F}_y(w^n, P^{n+1})_{i,j+\frac{1}{2}}$ de fluxo da Equação (93)

De acordo com o capítulo 4 para a Equação (93) e Equação (94), necessitamos da discretização espacial do termo de fluxo $F_y(w^n, P^{n+1})_{i,j+\frac{1}{2}}$. Isso será feito supondo $i \neq n_y$, pois caso contrário tal termo é zero.

Assim, escrevendo

$$\begin{aligned} F_y(w^n, P^{n+1})_{i,j+\frac{1}{2}} &= -w^n_{i,j+\frac{1}{2}} \left[\frac{\rho(P^{n+1})k}{\mu(w^n)} \right]_{i,j+\frac{1}{2}} \left(\frac{\partial P^{n+1}}{\partial y} \right)_{i,j+\frac{1}{2}} \\ &- [\rho(P^{n+1}) D_{21}(w^n, P^{n+1})]_{i,j+\frac{1}{2}} \left(\frac{\partial w^n}{\partial x} \right)_{i,j+\frac{1}{2}} \\ &- [\rho(P^{n+1}) D_{22}(w^n, P^{n+1})]_{i,j+\frac{1}{2}} \left(\frac{\partial w^n}{\partial y} \right)_{i,j+\frac{1}{2}}. \end{aligned} \quad (180)$$

Para contornar a dificuldade natural de se determinar a derivada parcial de w com relação à x no ponto $(x_i, y_{j+\frac{1}{2}})$, aqui aproximando a última derivada da segunda linha que aparece no lado direito da Equação (180) pela média aritmética dos valores dessa derivada definidos nos respectivos pontos vizinhos, ou seja, considerando

$$\left(\frac{\partial w^n}{\partial x} \right)_{i,j+\frac{1}{2}} = \frac{1}{2} \left[\left(\frac{\partial w^n}{\partial x} \right)_{i,j} + \left(\frac{\partial w^n}{\partial x} \right)_{i,j+1} \right]. \quad (181)$$

Em seguida, as duas derivadas que aparecem no lado direito da Equação (181) são aproximadas por diferenças finitas centradas, resultando em

$$\left(\frac{\partial w^n}{\partial x} \right)_{i,j+\frac{1}{2}} = \frac{1}{2} \left(\frac{w^n_{i+1,j} - w^n_{i-1,j}}{2\Delta x} + \frac{w^n_{i+1,j+1} - w^n_{i-1,j+1}}{2\Delta x} \right). \quad (182)$$

Substituindo a Equação (182) na Equação (180) e discretizando as duas derivadas parciais restantes na Equação (180) por diferenças finitas centradas, obtendo

$$\begin{aligned} F_y(w^n, P^{n+1})_{i,j+\frac{1}{2}} &= -w^n_{i,j+\frac{1}{2}} \left[\frac{\rho(P^{n+1})k}{\mu(w^n)} \right]_{i,j+\frac{1}{2}} \frac{P^{n+1}_{i,j+1} - P^{n+1}_{i,j}}{\Delta y} \\ &- [\rho(P^{n+1}) D_{21}(w^n, P^{n+1})]_{i,j+\frac{1}{2}} \frac{1}{2} \left(\frac{w^n_{i+1,j} - w^n_{i-1,j}}{2\Delta x} + \frac{w^n_{i+1,j+1} - w^n_{i-1,j+1}}{2\Delta x} \right) \\ &- [\rho(P^{n+1}) D_{22}(w^n, P^{n+1})]_{i,j+\frac{1}{2}} \frac{w_{i,j+1} - w_{i,j}}{\Delta y}. \end{aligned} \quad (183)$$

Note que a discretização indicada na Equação (181) não está definida para $i = 1$ e

$i = n_x$. Em tais blocos de fronteira considerando aproximações de primeira ordem dadas,

$$\left(\frac{\partial w^n}{\partial x}\right)_{i,j+\frac{1}{2}} = \frac{1}{2} \left(\frac{w_{i+1,j}^n - w_{i,j}^n}{\Delta x} + \frac{w_{i+1,j+1}^n - w_{i,j+1}^n}{\Delta x} \right), \text{ para } i = 1 \quad (184)$$

e

$$\left(\frac{\partial w^n}{\partial x}\right)_{i,j+\frac{1}{2}} = \frac{1}{2} \left(\frac{w_{i,j}^n - w_{i-1,j}^n}{\Delta x} + \frac{w_{i,j+1}^n - w_{i-1,j+1}^n}{\Delta x} \right), \text{ para } i = n_x. \quad (185)$$

Como mencionado na seção 4.4 sobre o limitador de fluxo, considerando a seguinte aproximação baseada em uma expansão em série de Taylor,

$$w_{i,j+\frac{1}{2}}^n = \begin{cases} w_{i,j}^n + \frac{\varphi_{i,j+\frac{1}{2}}^n}{2} (w_{i,j+1}^n - w_{i,j}^n), & \text{se } u_{i,j+\frac{1}{2}}^{n+1} \geq 0 \\ w_{i,j+1}^n + \frac{\varphi_{i,j+\frac{1}{2}}^n}{2} (w_{i,j+1}^n - w_{i,j}^n), & \text{se } u_{i,j+\frac{1}{2}}^{n+1} < 0. \end{cases} \quad (186)$$

onde na Equação (186) $\varphi_{i,j+\frac{1}{2}}^n = \varphi_{i,j+\frac{1}{2}}^n (r_{i,j+\frac{1}{2}}^n)$ representa uma função limitador de fluxo, a qual depende de $r_{i,j+\frac{1}{2}}^n$, a chamada razão de inclinação de w^n no ponto $(x_i, y_{j+\frac{1}{2}})$. Tal razão de inclinação funciona como um sensor de discontinuidades, aqui definido por

$$r_{i,j+\frac{1}{2}}^n = \begin{cases} \frac{w_{i,j}^n - w_{i,j-1}^n}{(w_{i,j+1}^n - w_{i,j}^n) + \delta}, & \text{se } j \neq 1 \\ 0, & \text{se } j = 1. \end{cases} \quad (187)$$

onde na Equação (187) $\delta > 0$ é um número suficientemente pequeno, usado para evitar possíveis divisões por zero. Utiliza-se $\delta = 10^{-9}$.

No presente trabalho, empregando o limitador de fluxo denominado de *superbee* definido por

$$\varphi(r) = \max\{0, \min\{1, 2r\}, \min\{2, r\}\} \quad (188)$$

O termo $\left[\frac{\rho(P^{n+1})_k}{\mu(w^n)}\right]_{i,j+\frac{1}{2}}$ que aparece na primeira parcela do lado direito da Equação (183) é aproximado pela média harmônica descrita na Equação (91).

Para finalizar a discretização do fluxo mostrado na Equação (183), a seguir aproximaremos os termos difusivos $[\rho(P^{n+1}) D_{21}(w^n, P^{n+1})]_{i,j+\frac{1}{2}}$ e $[\rho(P^{n+1}) D_{22}(w^n, P^{n+1})]_{i,j+\frac{1}{2}}$. Para isso, usando a definição do chamado tensor de difusão, como referenciada no capítulo

4, temos as seguintes equações:

$$\begin{aligned}
& [\rho(P^{n+1}) D_{21}(w^n, P^{n+1})]_{i,j+\frac{1}{2}} = \phi d_M \rho(P^{n+1})_{i,j+\frac{1}{2}} \\
& + \alpha_T \sqrt{\left[\sigma_x(w^n, P^{n+1})_{i,j+\frac{1}{2}} \right]^2 + \left[\sigma_y(w^n, P^{n+1})_{i,j+\frac{1}{2}} \right]^2} \\
& + \frac{(\alpha_L - \alpha_T) \left[\sigma_x(w^n, P^{n+1})_{i,j+\frac{1}{2}} \right]^2}{\sqrt{\left[\sigma_x(w^n, P^{n+1})_{i,j+\frac{1}{2}} \right]^2 + \left[\sigma_y(w^n, P^{n+1})_{i,j+\frac{1}{2}} \right]^2}}
\end{aligned} \tag{189}$$

e

$$\begin{aligned}
& [\rho(P^{n+1}) D_{22}(w^n, P^{n+1})]_{i-\frac{1}{2},j} = \\
& \frac{(\alpha_L - \alpha_T) \sigma_x(w^n, P^{n+1})_{i,j+\frac{1}{2}} \sigma_y(w^n, P^{n+1})_{i,j+\frac{1}{2}}}{\sqrt{\left[\sigma_x(w^n, P^{n+1})_{i,j+\frac{1}{2}} \right]^2 + \left[\sigma_y(w^n, P^{n+1})_{i,j+\frac{1}{2}} \right]^2}}
\end{aligned} \tag{190}$$

onde na Equação (190)

$$\begin{aligned}
& \sigma_x(w^n, P^{n+1})_{i,j+\frac{1}{2}} \equiv - \left[\frac{\rho(P^{n+1})k}{\mu(w^n)} \right]_{i,j+\frac{1}{2}} \left(\frac{\partial P^{n+1}}{\partial x} \right)_{i,j+\frac{1}{2}} \cong \\
& - \left[\frac{\rho(P^{n+1})k}{\mu(w^n)} \right]_{i,j+\frac{1}{2}} \frac{1}{2} \left(\frac{P_{i+1,j}^n - P_{i-1,j}^n}{2\Delta x} + \frac{P_{i+1,j+1}^n - P_{i,-1j+1}^n}{2\Delta x} \right)
\end{aligned} \tag{191}$$

e

$$\begin{aligned}
& \sigma_y(w^n, P^{n+1})_{i,j+\frac{1}{2}} \equiv - \left[\frac{\rho(P^{n+1})k}{\mu(w^n)} \right]_{i,j+\frac{1}{2}} \left(\frac{\partial P^{n+1}}{\partial y} \right)_{i,j+\frac{1}{2}} \cong \\
& - \left[\frac{\rho(P^{n+1})k}{\mu(w^n)} \right]_{i,j+\frac{1}{2}} \frac{P_{i,j+1}^{n+1} - P_{i,j}^{n+1}}{\Delta y}.
\end{aligned} \tag{192}$$

Observe que nas Equações (191) e (192) usamos aproximações em diferenças finitas inteiramente análogas aquelas previamente empregada na discretização de outros termos da Equação (183). Dessa maneira, note que os últimos dois termos entre parênteses, que aparecem na Equação (191), admitem correções semelhantes às mostradas nas Equação (184) e (185). Novamente, a quantidade $\left[\frac{\rho(P^{n+1})k}{\mu(w^n)} \right]_{i,j+\frac{1}{2}}$ é aproximada pela média harmônica mostrada na Equação (91). Por outro lado, o termo $\rho(P^{n+1})_{i,j+\frac{1}{2}}$ que aparece na primeira parcela do lado direito da Equação (189) é aproximado por média aritmética dos respectivos valores definidos nos blocos vizinhos.

Isto conclui a discretização do termo de fluxo $F_y(w^n, P^{n+1})_{i,j+\frac{1}{2}}$ que aparece na Equação (93).

APÊNDICE C – Discretização espacial do termo de fluxo $F_y(w^n, P^{n+1})_{i,j-\frac{1}{2}}$ da Equação (93)

De acordo com o capítulo 4 para a Equação (93) e Equação (94), necessitamos da discretização espacial do termo de fluxo $F_y(w^n, P^{n+1})_{i,j-\frac{1}{2}}$. Isso será feito supondo $i \neq 1$, pois caso contrário tal termo é zero.

Assim, podemos escrever

$$\begin{aligned} F_y(w^n, P^{n+1})_{i,j-\frac{1}{2}} &= -w^n_{i,j-\frac{1}{2}} \left[\frac{\rho(P^{n+1})k}{\mu(w^n)} \right]_{i,j-\frac{1}{2}} \left(\frac{\partial P^{n+1}}{\partial y} \right)_{i,j-\frac{1}{2}} \\ &- [\rho(P^{n+1}) D_{21}(w^n, P^{n+1})]_{i,j-\frac{1}{2}} \left(\frac{\partial w^n}{\partial x} \right)_{i,j-\frac{1}{2}} \\ &- [\rho(P^{n+1}) D_{22}(w^n, P^{n+1})]_{i,j-\frac{1}{2}} \left(\frac{\partial w^n}{\partial y} \right)_{i,j-\frac{1}{2}}. \end{aligned} \quad (193)$$

Para contornar a dificuldade natural de se determinar a derivada parcial de w com relação à x no ponto $(x_i, y_{j-\frac{1}{2}})$, aqui aproximaremos a última derivada da segunda linha que aparece no lado direito da Equação (193) pela média aritmética dos valores dessa derivada definidos nos respectivos pontos vizinhos, ou seja, considerando

$$\left(\frac{\partial w^n}{\partial x} \right)_{i,j-\frac{1}{2}} = \frac{1}{2} \left[\left(\frac{\partial w^n}{\partial x} \right)_{i,j-1} + \left(\frac{\partial w^n}{\partial x} \right)_{i,j} \right]. \quad (194)$$

Em seguida, as duas derivadas que aparecem no lado direito da Equação (194) são aproximadas por diferenças finitas centradas, resultando em

$$\left(\frac{\partial w^n}{\partial x} \right)_{i,j-\frac{1}{2}} = \frac{1}{2} \left(\frac{w^n_{i+1,j-1} - w^n_{i-1,j-1}}{2\Delta x} + \frac{w^n_{i+1,j} - w^n_{i-1,j}}{2\Delta x} \right). \quad (195)$$

Substituindo a Equação (195) na Equação (193) e discretizando as duas derivadas parciais restantes na Equação (193) por diferenças finitas centradas, obtemos

$$\begin{aligned} F_y(w^n, P^{n+1})_{i,j-\frac{1}{2}} &= -w^n_{i,j-\frac{1}{2}} \left[\frac{\rho(P^{n+1})k}{\mu(w^n)} \right]_{i,j-\frac{1}{2}} \frac{P^{n+1}_{i,j} - P^{n+1}_{i,j-1}}{\Delta y} \\ &- [\rho(P^{n+1}) D_{21}(w^n, P^{n+1})]_{i,j-\frac{1}{2}} \frac{1}{2} \left(\frac{w^n_{i+1,j-1} - w^n_{i-1,j-1}}{2\Delta x} + \frac{w^n_{i+1,j} - w^n_{i-1,j}}{2\Delta x} \right) \\ &- [\rho(P^{n+1}) D_{22}(w^n, P^{n+1})]_{i,j-\frac{1}{2}} \frac{w_{i,j} - w_{i,j-1}}{\Delta y}. \end{aligned} \quad (196)$$

Note que a discretização indicada na Equação (194) não está definida para $i = 1$ e $i = n_x$. Em tais blocos de fronteira consideraremos aproximações de primeira ordem

dadas,

$$\left(\frac{\partial w^n}{\partial x}\right)_{i,j-\frac{1}{2}} = \frac{1}{2} \left(\frac{w_{i+1,j-1}^n - w_{i,j-1}^n}{\Delta x} + \frac{w_{i+1,j}^n - w_{i,j}^n}{\Delta x} \right), \text{ para } i = 1 \quad (197)$$

e

$$\left(\frac{\partial w^n}{\partial x}\right)_{i,j-\frac{1}{2}} = \frac{1}{2} \left(\frac{w_{i,j-1}^n - w_{i-1,j-1}^n}{\Delta x} + \frac{w_{i,j}^n - w_{i-1,j}^n}{\Delta x} \right), \text{ para } i = n_x. \quad (198)$$

Como mencionado na seção 4.4 sobre o limitador de fluxo, considerando a seguinte aproximação baseada em uma expansão em série de Taylor,

$$w_{i,j-\frac{1}{2}}^n = \begin{cases} w_{i,j-1}^n + \frac{\varphi_{i,j-\frac{1}{2}}^n}{2} (w_{i,j}^n - w_{i,j-1}^n), & \text{se } u_{i,j-\frac{1}{2}}^{n+1} \geq 0 \\ w_{i,j}^n + \frac{\varphi_{i,j-\frac{1}{2}}^n}{2} (w_{i,j-1}^n - w_{i,j}^n), & \text{se } u_{i,j-\frac{1}{2}}^{n+1} < 0. \end{cases} \quad (199)$$

onde $\varphi_{i,j-\frac{1}{2}}^n = \varphi_{i,j-\frac{1}{2}}^n (r_{i,j-\frac{1}{2}}^n)$ representa uma função limitador de fluxo, a qual depende de $r_{i,j-\frac{1}{2}}^n$, a chamada razão de inclinação de w^n no ponto $(x_i, y_{j-\frac{1}{2}})$. Tal razão de inclinação funciona como um sensor de discontinuidades, aqui definido por

$$r_{i,j-\frac{1}{2}}^n = \begin{cases} \frac{w_{i,j-1}^n - w_{i,j-2}^n}{(w_{i,j}^n - w_{i,j-1}^n) + \delta}, & \text{se } j \neq 2 \\ 0, & \text{se } j = 2. \end{cases} \quad (200)$$

onde $\delta > 0$ é um número suficientemente pequeno, usado para evitar possíveis divisões por zero. Considera-se neste trabalho $\delta = 10^{-9}$.

No presente trabalho, empregando o limitador de *superbee* definido por

$$\varphi(r) = \max \{0, \min \{1, 2r\}, \min \{2, r\}\} \quad (201)$$

O termo $\left[\frac{\rho(P^{n+1})_k}{\mu(w^n)} \right]_{i,j-\frac{1}{2}}$ que aparece na primeira parcela do lado direito da Equação (196) é aproximado pela média harmônica descrita na Equação (91).

Para finalizar a discretização do fluxo mostrado na Equação (196), a seguir aproximaremos os termos difusivos $[\rho(P^{n+1}) D_{21}(w^n, P^{n+1})]_{i,j-\frac{1}{2}}$ e $[\rho(P^{n+1}) D_{22}(w^n, P^{n+1})]_{i,j-\frac{1}{2}}$. Para isso, usando a definição do chamado tensor de difusão, como referenciada no capítulo

4, temos as seguintes equações:

$$\begin{aligned}
& [\rho(P^{n+1}) D_{21}(w^n, P^{n+1})]_{i,j-\frac{1}{2}} = \phi d_M \rho(P^{n+1})_{i,j-\frac{1}{2}} \\
& + d_T \sqrt{\left[\sigma_x(w^n, P^{n+1})_{i,j-\frac{1}{2}} \right]^2 + \left[\sigma_y(w^n, P^{n+1})_{i,j-\frac{1}{2}} \right]^2} \\
& + \frac{(\alpha_L - \alpha_T) \left[\sigma_x(w^n, P^{n+1})_{i,j-\frac{1}{2}} \right]^2}{\sqrt{\left[\sigma_x(w^n, P^{n+1})_{i,j-\frac{1}{2}} \right]^2 + \left[\sigma_y(w^n, P^{n+1})_{i,j-\frac{1}{2}} \right]^2}}
\end{aligned} \tag{202}$$

e

$$[\rho(P^{n+1}) D_{22}(w^n, P^{n+1})]_{i-\frac{1}{2},j} = \frac{(d_L - d_T) \sigma_x(w^n, P^{n+1})_{i,j-\frac{1}{2}} \sigma_y(w^n, P^{n+1})_{i,j-\frac{1}{2}}}{\sqrt{\left[\sigma_x(w^n, P^{n+1})_{i,j-\frac{1}{2}} \right]^2 + \left[\sigma_y(w^n, P^{n+1})_{i,j-\frac{1}{2}} \right]^2}} \tag{203}$$

onde na Equação (203)

$$\begin{aligned}
& \sigma_x(w^n, P^{n+1})_{i,j-\frac{1}{2}} \equiv - \left[\frac{\rho(P^{n+1})k}{\mu(w^n)} \right]_{i,j-\frac{1}{2}} \left(\frac{\partial P^{n+1}}{\partial x} \right)_{i,j-\frac{1}{2}} \cong \\
& - \left[\frac{\rho(P^{n+1})k}{\mu(w^n)} \right]_{i,j-\frac{1}{2}} \frac{1}{2} \left(\frac{P_{i+1,j-1}^n - P_{i-1,j-1}^n}{2\Delta x} + \frac{P_{i+1,j}^n - P_{i-1,j}^n}{2\Delta x} \right)
\end{aligned} \tag{204}$$

e

$$\begin{aligned}
& \sigma_y(w^n, P^{n+1})_{i,j-\frac{1}{2}} \equiv - \left[\frac{\rho(P^{n+1})k}{\mu(w^n)} \right]_{i,j-\frac{1}{2}} \left(\frac{\partial P^{n+1}}{\partial y} \right)_{i,j-\frac{1}{2}} \cong \\
& - \left[\frac{\rho(P^{n+1})k}{\mu(w^n)} \right]_{i,j-\frac{1}{2}} \frac{P_{i,j}^{n+1} - P_{i,j-1}^{n+1}}{\Delta y}.
\end{aligned} \tag{205}$$

Observe que nas Equações (204) e (205) usamos aproximações em diferenças finitas inteiramente análogas aquelas previamente empregada na discretização de outros termos da Equação (196). Dessa maneira, note que os últimos dois termos entre parênteses, que aparecem na Equações (204), admitem correções semelhantes às mostradas nas Equações (197) e (198). Novamente, a quantidade $\left[\frac{\rho(P^{n+1})k}{\mu(w^n)} \right]_{i,j-\frac{1}{2}}$ é aproximada pela média harmônica mostrada na Equação (91). Por outro lado, o termo $\rho(P^{n+1})_{i,j-\frac{1}{2}}$ que aparece na primeira parcela do lado direito da Equação (202) é aproximado por média aritmética dos respectivos valores definidos nos blocos vizinhos.

Isto conclui a discretização do termo de fluxo $F_y(w^n, P^{n+1})_{i,j-\frac{1}{2}}$ que aparece na Equação (93).