

**UNIVERSIDADE DE SÃO PAULO
FACULDADE DE FILOSOFIA, CIÊNCIAS E LETRAS DE
RIBEIRÃO PRETO**

Henrique Casellato Vitorio Rodrigues da Costa

Estudo Numérico de Equações em Meios Porosos

**Ribeirão Preto
2025**

Henrique Casellato Vitorio Rodrigues da Costa

Estudo Numérico de Equações em Meios Porosos

Monografia apresentada ao Curso de Ciência da Computação, da Unidade FFCLRP da Universidade de São Paulo, como parte dos requisitos para obtenção do título de Cientista da Computação.

Orientador: Prof. Dr. Nikolai Vasilievich Chemetov

**Ribeirão Preto
2025**

AUTORIZO A REPRODUÇÃO E DIVULGAÇÃO TOTAL OU PARCIAL DESTE TRABALHO, POR QUALQUER MEIO CONVENCIONAL OU ELETRÔNICO PARA FINS DE ESTUDO E PESQUISA, DESDE QUE CITADA A FONTE.

S856m Costa, Henrique C. V. R.
Estudo Numérico de Equações em Meios Porosos / Henrique Casellato Vitorio Rodrigues da Costa ; Orientador Nikolai Vasilievich Chemetov. – Ribeirão Preto, 2025.
63 p. : il. (algumas color.) ; 30 cm.

Monografia (Graduação em Ciência da Computação) – Faculdade de Filosofia, Ciências e Letras de Ribeirão Preto, Universidade de São Paulo, 2025.

1. LaTeX.
2. abnTeX.
3. Classe USPSC.
4. Editoração de texto.
5. Normalização da documentação.
6. Tese.
7. Dissertação.
8. Documentos (elaboração).
9. Documentos eletrônicos. I. Chemetov, Nikolai Vasilievich. II. Título.

Dedico meu trabalho à Fortuna, pois foi ela que, com tamanha sutileza, colocou em meu caminho companheiros que muito estimo, que me acudiram nos momentos mais obscuros, que se tornaram parte imanente de minh'alma.

*“Secretamente, no íntimo, ainda espero poder fazer algo de mim mesmo — mas quem consegue
fazer qualquer coisa depois de Beethoven?”*

Franz Schubert

RESUMO

COSTA, H. C. V. R. **Numerical Study of Pourus Media Equations.** 2025. 63 p. Monografia (Trabalho de Conclusão de Curso) - Faculdade de Filosofia, Ciências e Letras de Ribeirão Preto, Universidade de São Paulo, Ribeirão Preto, 2025.

O resumo deve ressaltar o objetivo, o método, os resultados e as conclusões do documento. A ordem e a extensão destes itens dependem do tipo de resumo (informativo ou indicativo) e do tratamento que cada item recebe no documento original. O resumo deve ser precedido da referência do documento, com exceção do resumo inserido no próprio documento. (...) Salientamos que algumas Unidades exigem o título dos trabalhos acadêmicos em inglês, tornando necessário a inclusão das referências nos resumos e abstracts, o que foi adotado no **Modelo para TCC em L^AT_EX utilizando a classe USPSC** e no **Modelo para teses e dissertações em L^AT_EX utilizando a classe USPSC**. As palavras-chave devem figurar logo abaixo do resumo, antecedidas da

Palavras-chave: LaTeX. Classe USPSC. Tese. Dissertação. Trabalho de conclusão de curso (TCC). Relatório.

ABSTRACT

COSTA, H. C. V. R. **Estudo Numérico de Equações em Meios Porosos.** 2025. 63 p. Monograph (Conclusion Course Paper) - Faculdade de Filosofia, Ciências e Letras de Ribeirão Preto, Universidade de São Paulo, Ribeirão Preto, 2025.

This is the english abstract.

Keywords: LaTeX. USPSC class. Thesis. Dissertation. Conclusion course paper. Report.

LISTA DE FIGURAS

Figura 1 – Malha uniforme no intervalo $[0, 1]$.	28
Figura 2 – Comparação y_i e w_i , com erro médio de $0,6809 \times 10^{-5}$.	32
Figura 3 – Campo de permeabilidades em um meio heterogêneo (escala logarítmica).	36
Figura 4 – Esquema de volumes finitos unidimensional.	38
Figura 5 – Solução por diferentes métodos de fatoração (Crout e LDL^t)	42
Figura 6 – Solução pelo método de fatoração de Crout	43
Figura 7 – Componentes norte, sul, leste e oeste em $\partial V_{i,j}$.	43
Figura 8 – Componentes norte, sul, leste e oeste em $\partial V_{i,j}$.	46
Figura 9 – Campo de pressões e vetores dos exemplos.	48

LISTA DE TABELAS

Tabela 1 – Tempos médios de métodos de fatoração diferentes para o problema unidimensional.	42
---	----

LISTA DE ABREVIATURAS E SIGLAS

ABNT	Associação Brasileira de Normas Técnicas
EDO	Equação Diferencial Ordinária
EDP	Equação Diferencial Parcial

LISTA DE SÍMBOLOS

Γ Letra grega Gama

Λ Lambda

ζ Letra grega minúscula zeta

\in Pertence

SUMÁRIO

1	INTRODUÇÃO	23
1.1	Nota técnica	23
2	DESENVOLVIMENTO	25
2.1	Conceitos iniciais	25
2.1.1	Detalhes para Equações Diferenciais Ordinárias	25
2.1.2	Detalhes para Equações Diferenciais Parciais	26
2.2	Problemas de Valores de Contorno	27
2.2.1	Método das diferenças finitas para problemas lineares	28
2.2.2	Implementação do método das diferenças finitas linear	30
2.3	Definições gerais e propriedades de meios porosos e de fluidos	32
2.3.1	Meios porosos	32
2.3.2	Fluidos	33
2.3.3	Lei de Darcy	33
2.4	Modelagem de escoamentos monofásicos	34
2.4.1	Condições auxiliares	35
2.4.2	Meios homogêneos e heterogêneos	35
2.5	Uma breve introdução ao método de volumes finitos	36
2.6	Método de volumes finitos para equações elípticas	37
2.6.1	Caso unidimensional	38
2.6.1.1	Implementação	39
2.6.2	Caso bidimensional	43
2.6.2.1	Condição de contorno de Neumann	44
2.6.2.2	Condição de contorno de Dirichlet	45
2.6.2.3	Implementação	46
3	CONCLUSÃO	49
	REFERÊNCIAS	51
	APÊNDICES	53
	APÊNDICE A – NOTAS SOBRE FATORAÇÃO DE MATRIZES . . .	55
A.1	Fatoração LU	55
A.2	Fatoração de Cholesky	57
A.3	Fatoração LU em bloco	58

**APÊNDICE B – NOTAS SOBRE A GERAÇÃO DE CAMPOS DE PER-
MEABILIDADES HETEROGÊNEOS 61**

APÊNDICE C – NOTAS SOBRE O MÉTODO DE VOLUMES FINITOS 63

1 INTRODUÇÃO

1.1 Nota técnica

Todos os experimentos numéricos foram executados em um sistema com processador Intel Core i7-7700HQ (4 núcleos, 8 threads; 2.8–3.8 GHz), 16 GB de RAM e Debian GNU/Linux 12 (kernel 6.1.0-37-amd64), compilados com GCC 12.2.0 e utilizando Python 3.11.2 para visualização de dados. Rotinas aceleradas por GPU utilizaram uma NVIDIA GTX 1050 Ti (4 GB GDDR5) quando indicado.

2 DESENVOLVIMENTO

O desenvolvimento da pesquisa se deu três fases principais, compreendendo o estudo de livros teóricos acompanhados da implementação de métodos numéricos. A primeira parte tem como foco os Problemas de Valores de Contorno e de Equações Diferenciais Parciais, usando como referência principal o livro (BURDEN; FAIRES; BURDEN, 2016). Como referências teóricas suplementares, serão usados os livros (ZILL, 2017) e (THOMAS, 1995).

A segunda fase terá foco nos métodos de Volumes Finitos para Equações Elípticas e Hiperbólicas, usando como referências os livros (ISAACSON; KELLER, 1966) e (SOUSA; ROCHA, 2022), bem como os livros complementares (STRAUSS, 2008) e (EYMARD; GALLOUËT; HERBIN, 2000).

Por fim, a última fase abarca a simulação de problemas de transporte passivo em meios porosos, usando também como referência principal o livro (SOUSA; ROCHA, 2022).

2.1 Conceitos iniciais

Uma *equação diferencial* é uma equação contendo as derivadas de uma ou mais variáveis dependentes, com respeito a uma ou mais variáveis independentes, classificadas quanto ao tipo, ordem e linearidade. Quanto ao tipo, têm-se as *equações diferenciais ordinárias* (EDO) onde somente existem derivadas ordinárias de uma ou mais variáveis dependentes com respeito a somente uma variável independente, como por exemplo

$$\frac{d^2y}{dx^2} - \frac{dy}{dx} + 6y = 0. \quad (2.1)$$

Há também há as *equações diferenciais parciais* (EDP) que envolvem as derivadas parciais de uma ou mais variáveis dependentes de duas ou mais variáveis independentes, como por exemplo

$$\frac{\partial u}{\partial y} = -\frac{\partial v}{\partial x}. \quad (2.2)$$

2.1.1 Detalhes para Equações Diferenciais Ordinárias

Quanto a ordem, para ambos os tipos de equações diferenciais, é a ordem da maior derivada, por exemplo a seguinte equação diferencial é de segunda ordem

$$\frac{d^2y}{dx^2} + 5\frac{dy}{dx} - 4y = e^x. \quad (2.3)$$

Para facilitar a representação de uma equação diferencial ordinária de enésima ordem em uma variável dependente, é possível expressar, com símbolos na forma geral,

$$F(x, y, y', \dots, y^{(n)}) = 0 \quad (2.4)$$

onde F é uma função de valores reais com $n + 2$ variáveis. Também, é possível escrevê-las na *forma normal*, em que f é uma função contínua de fatores reais, por

$$\frac{d^n y}{dx^n} = f(x, y, y', \dots, y^{(n-1)}), \quad (2.5)$$

onde, por exemplo, a forma normal da equação $4xy' + y = x$ é $y' = (x - y)/4x$. Quanto à linearidade, uma equação de enésima ordem é dita *linear* quando F é linear, ou seja, a EDO de enésima ordem quando

$$a_n(x) \frac{d^n y}{dx^n} + a_{n-1}(x) \frac{d^{n-1} y}{dx^{n-1}} + \dots + a_1(x) \frac{dy}{dx} + a_0(x)y = g(x). \quad (2.6)$$

Logo, uma EDO é *não linear* quando simplesmente não é linear, tal como

$$\frac{d^2 y}{dx^2} + \sin y = 0. \quad (2.7)$$

2.1.2 Detalhes para Equações Diferenciais Parciais

Será importante, para o seguimento do trabalho, classificar as EDPs de segunda ordem em três: *elípticas*, *hiperbólicas* e *parabólicas*, onde as duas primeiras serão o foco. Em geral, toma-se a EDP

$$Au_{xx} + 2Bu_{xy} + Cu_{yy} + Du_x + Eu_y + Fu = 0, \quad (2.8)$$

uma equação linear de ordem dois em duas variáveis, com seis coeficientes constantes reais.

Teorema 2.1. A equação (2.8) de variáveis independentes, pode ser reduzida a uma das três seguintes formas:

i. *Elíptica*, caso $B^2 < AC$, ela é reduzível à

$$u_{xx} + u_{yy} + \dots = 0.$$

ii. *Hiperbólica*, caso $B^2 > AC$, ela é reduzível à

$$u_{xx} - u_{yy} + \dots = 0.$$

iii. *Parabólica*, caso $B^2 = AC$, ela é reduzível à

$$u_{xx} + \dots = 0,$$

a não ser que $A = B = C = 0$.

Um exemplo de equação elíptica é a equação de Poisson

$$\frac{\partial^2 u}{\partial x^2}(x, y) + \frac{\partial^2 u}{\partial y^2}(x, y) = f(x, y),$$

que surgem em diversos problemas da física que independem do tempo, como a distribuição de calor estacionária em uma região plana ou a energia potencial de um ponto em um plano submetido a forças gravitacionais.

Agora, a equação

$$\alpha^2 \frac{\partial^2 u}{\partial x^2}(x, t) - \frac{\partial^2 u}{\partial t^2}(x, t) = 0,$$

que modela a vibração de uma corda em um plano vertical (onde $u(x, t)$, com $x \in (0, l)$ e $t > 0$, é o deslocamento vertical) é um exemplo de hiperbólica.

2.2 Problemas de Valores de Contorno

Quando se tem uma equação linear de ordem maior que dois, em que as variáveis dependentes y ou suas derivadas são específicas em pontos diferentes, o problema é dito um *problema de valores de contorno*, tal qual

$$\begin{cases} a_2(x) \frac{d^2 y}{dx^2} + a_1(x) \frac{dy}{dx} + a_0(x)y = g(x) \\ y(a) = y_0 \\ y(b) = y_1 \end{cases} \quad (2.9)$$

onde os valores $y(a) = y_0$ e $y(b) = y_1$ são as *condições de contorno*. Para efeitos deste trabalho, serão considerados os problemas da forma

$$\begin{cases} y'' = f(x, y, y'), \text{ para } x \in [a, b] \\ y(a) = \alpha \\ y(b) = \beta \end{cases} \quad (2.10)$$

em que não será foco as soluções analíticas, mas sim as provenientes dos métodos numéricos a serem descritos. Dando seguimento, os próximos teoremas fornecem condições para gerais para garantir a existência e unicidade da solução para o problema de contorno de segunda ordem:

Teorema 2.2. *Supondo uma função f no problema de contorno*

$$y'' = f(x, y, y'), \text{ para } x \in [a, b], \text{ com } y(a) = \alpha \text{ e } y(b) = \beta,$$

contínua no conjunto

$$D = \{(x, y, y'') \mid \text{para } x \in [a, b], \text{ com } y \in (-\infty, \infty) \text{ e } y' \in (-\infty, \infty)\}$$

e que as derivadas parciais f_y e $f_{y'}$ também sejam contínuas em D . Se

i. $f_y(x, y, y') > 0, \forall (x, y, y'') \in D$, e

ii. *existir uma constante M tal que*

$$|f_{y'}(x, y, y')| \leq M, \forall (x, y, y'') \in D,$$

então o problema de contorno tem uma solução única.

Por exemplo, o problema

$$y'' + e^{-xy} + \sin y' = 0, \text{ para } x \in [1, 2], \text{ com } y(1) = y(2) = 0$$

tem solução única, pois

$$f_y(x, y, y') = xe^{-xy} > 0 \quad \text{e} \quad |f_{y'}(x, y, y')| = |- \cos y'| \leq 1.$$

Porém, quando se trata de uma equação diferencial linear, o teorema 2.2 pode ser simplificado para

Corolário 2.3. *Supondo o problema de contorno linear*

$$y'' = p(x)y' + q(x)y + r(x), \text{ para } x \in [a, b], \text{ com } y(a) = \alpha \text{ e } y(b) = \beta, \quad (2.11)$$

que satisfaça

i. $p(x), q(x)$ e $r(x)$ contínuas em $[a, b]$, e

ii. $q(x) > 0$ em $[a, b]$.

2.2.1 Método das diferenças finitas para problemas lineares

Primeiramente, discretiza-se o domínio espacial para colocar sobre ele, uma malha que, por conveniência, será uniforme com espaçamento $h = \Delta x = 1/(N + 1)$ como é mostrado a seguir

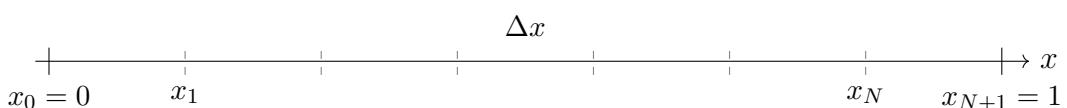


Figura 1 – Malha uniforme no intervalo $[0, 1]$.

Onde é possível acessar qualquer ponto x_k desta malha fazendo $x_k = k\Delta x$ com $k = 0, 1, \dots, N + 1$. Então, para prosseguir, pode-se notar que, para a função

$$y'(x) = \lim_{\Delta x \rightarrow 0} \frac{y(x + \Delta x) - y(x)}{\Delta x}, \quad (2.12)$$

é uma aproximação razoável, a expressão

$$y' \approx \frac{y_{k+1} - y_{k-1}}{2\Delta x}, \quad (2.13)$$

e, de forma similar, é possível aproximar y'' com

$$y'' \approx \frac{y_{k+1} - 2y_k + y_{k-1}}{\Delta x^2}. \quad (2.14)$$

É possível chegar nesses resultados usando a expansão em polinômios de Taylor. É comum escrever essa fórmula de *diferenças centradas* usando a notação *big O* da forma

$$y' = \frac{y_{k+1} - y_{k-1}}{2\Delta x} + O(\Delta x^2) \text{ e } y'' = \frac{y_{k+1} - 2y_k + y_{k-1}}{\Delta x^2} + O(\Delta x^2),$$

onde este $O(\Delta x^2)$ representa a ordem do *erro de truncamento*.

Definição 2.1. Dado uma função $f(s)$, $f(s) = O(\phi(s))$ para $s \in S$ se existe uma constante A tal que $|f(s)| \leq A|\phi(s)|$ para todo $s \in S$. Diz-se que $f(x)$ é a *big O* de $\phi(s)$ ou que $f(x)$ é da ordem de $\phi(s)$.

Usando estas definições, a mais das condições de contorno $y(a) = \alpha$ e $y(b) = \beta$, defini-se então um sistema de equações lineares com $w_0 = \alpha$, $w_{N+1} = \beta$ e

$$-\frac{w_{i+1} + 2w_i - w_{i-1}}{h^2} + p(x_i)\frac{w_{i+1} - w_{i-1}}{2h} + q(x_i)w_i = -r(x_i) \quad \forall i \in \{1, 2, \dots, N\}. \quad (2.15)$$

Esta equação (2.15) pode ser reescrita como

$$-\left(1 + \frac{h}{2}p(x_i)\right)w_{i-1} + (2 + h^2q(x_i))w_i - \left(1 - \frac{h}{2}p(x_i)\right)w_{i+1} = -h^2r(x_i) \quad \forall i \in \{1, 2, \dots, N\}$$

e então este pode ser expresso na forma de uma matriz tridiagonal $N \times N$, $Aw = b$, tal que

$$A = \begin{bmatrix} 2 + h^2q(x_1) & -1 + \frac{h}{2}p(x_1) & 0 & \cdots & 0 \\ -1 - \frac{h}{2}p(x_1) & 2 + h^2q(x_2) & -1 + \frac{h}{2}p(x_2) & \cdots & \vdots \\ 0 & \cdots & \cdots & \cdots & \vdots \\ \vdots & \ddots & \ddots & \cdots & -1 + \frac{h}{2}p(x_{N-1}) \\ 0 & \cdots & 0 & -1 - \frac{h}{2}p(x_N) & 2 + h^2q(x_N) \end{bmatrix},$$

$$w = \begin{bmatrix} w_1 \\ w_2 \\ \vdots \\ w_{N-1} \\ w_N \end{bmatrix} \quad e \quad b = \begin{bmatrix} -r(x_1) + \left(1 + \frac{h}{2}p(x_1)\right)w_0 - r(x_2) \\ \vdots \\ -r(x_{N-1}) \\ -r(x_N) + \left(1 - \frac{h}{2}p(x_N)\right)w_{N+1} \end{bmatrix}.$$

O teorema a seguir fornecerá as condições sob as quais o sistema linear tridiagonal em questão tem uma solução única:

Teorema 2.4. Supondo que p , q e r sejam contínuas em $[a, b]$. Se $q(x) \geq 0$ em $[a, b]$, então o sistema tridiagonal descrito anteriormente tem uma solução única; contanto que $h < 2/L$, em que $L = \max_{a \leq x \leq b} |p(x)|$.

Nota-se que, apesar do teorema 2.4 garantir uma solução única para o problema de contorno (2.11), este não garante que $y \in C^4[a, b]$. Para garantir que o erro de truncamento seja de ordem $O(h^2)$, é preciso assegurar que $y^{(4)}$ é contínua em $[a, b]$ (devido à expansão do polinômio de Taylor).

2.2.2 Implementação do método das diferenças finitas linear

Para implementar o método descrito na seção anterior, será usada uma especialização da *Fatoração de Crout*¹ usando a vantagem da matriz A ser tridiagonal. De forma sucinta, o algoritmo fatora a matriz A em duas matrizes L e U , matrizes triangulares inferior e superior respectivamente, com a diagonal de U igual a 1 (o que o difere da fatoração de Doolittle), da forma que $Aw = LUw = b$, então

$$A = LU = \begin{bmatrix} l_{11} & 0 & 0 & \cdots & 0 \\ l_{21} & l_{22} & & & 0 \\ \vdots & & \ddots & & 0 \\ \vdots & & & \ddots & 0 \\ 0 & \cdots & 0 & l_{N,N-1} & l_{N,N} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} 1 & u_{12} & 0 & \cdots & 0 \\ 0 & 1 & u_{23} & & 0 \\ \vdots & & \ddots & & 0 \\ \vdots & & & \ddots & u_{N-1,N} \\ 0 & \cdots & 0 & 0 & 1 \end{bmatrix}.$$

Então, tomando $Uw = x$, resolve-se $Lx = b$ e então descobre-se w . O método, pela vantagem de A ser tridiagonal, resolve o sistema $N \times N$ realizando somente $(5N - 4)$ multiplicações/divisões e $(3N - 3)$ adições/subtrações. O seguinte algoritmo implementa esta fatoração, bem como resolve o problema de contorno (2.11):

Solução para o problema de contorno

Passo 1) Calcular $h = \frac{B-A}{N+1}$ e $x_1 = A + h$. Inicializar os coeficientes:

$$\begin{aligned} a_{11} &= 2.0 + h^2 \cdot q(x_1) \\ a_{12} &= \frac{h}{2} \cdot p(x_1) - 1.0 \\ d_1 &= -h^2 \cdot r(x_1) + \left(1 + \frac{h}{2} \cdot p(x_1)\right) \cdot \alpha \end{aligned}$$

¹ As condições que garantem a aplicação da fatoração de Crout, bem como notas e definições importantes usadas para o estudo desta seção, podem ser encontradas no apêndice A.

Passo 2) Para cada $i = 2, \dots, N - 1$:

$$\begin{aligned}x_i &= A + i \cdot h \\a_{ii} &= 2.0 + h^2 \cdot q(x_i) \\a_{i,i+1} &= \frac{h}{2} p(x_i) - 1 \\a_{i,i-1} &= -\frac{h}{2} p(x_i) - 1 \\d_i &= -h^2 \cdot r(x_i)\end{aligned}$$

Passo 3) Para o ponto $x_N = B - h$:

$$\begin{aligned}a_{NN} &= 2.0 + h^2 \cdot q(x_N) \\a_{N,N+1} &= \frac{h}{2} \cdot p(x_N) - 1.0 \\a_{N,N-1} &= -\frac{h}{2} \cdot p(x_N) - 1.0 \\d_N &= -h^2 \cdot r(x_N) + \left(1.0 - \frac{h}{2} \cdot p(x_N)\right) \cdot \beta\end{aligned}$$

Passo 4) Fatoração LU inicial:

$$l_{11} = a_{11}, \quad u_{12} = \frac{a_{12}}{l_{11}} \text{ e } z_1 = \frac{d_1}{l_{11}}$$

Passo 5) Para cada $i = 2, \dots, N - 1$:

$$\begin{aligned}l_{ii} &= a_{ii} - a_{i,i-1} \cdot u_{i-1,i} \\u_{i,i+1} &= \frac{a_{i,i+1}}{l_{ii}} \\z_i &= \frac{d_i - a_{i,i-1} \cdot z_{i-1}}{l_{ii}}\end{aligned}$$

Passo 6) Completar a fatoração:

$$\begin{aligned}l_{NN} &= a_{NN} - a_{N,N-1} \cdot u_{N-1,N} \\z_N &= \frac{d_N - a_{N,N-1} \cdot z_{N-1}}{l_{NN}}\end{aligned}$$

Passo 7) Atribuir condições de contorno:

$$w_0 = \alpha, \quad w_N = z_N \text{ e } w_{N+1} = \beta$$

Passo 8) Resolver o sistema triangular superior (substituição regressiva) para $i = N - 1, \dots, 1$:

$$w_i = z_i - u_{i,i+1} \cdot w_{i+1}$$

Passo 9) Saída: As aproximações w_i para $i = 0, \dots, N + 1$.

Exemplo 2.1. Para ilustrar essa implementação, dado o problema de valor de contorno:

$$y'' = -\frac{2}{x}y' + \frac{2}{x^2}y + \frac{\sin(\ln x)}{x^2}, \text{ para } x \in [1, 2], \text{ com } y(1) = 1 \text{ e } y(2) = 2,$$

com $N = 19$ e, portanto, $h = 0,01$, com a solução exata:

$$y = c_1x + \frac{c_2}{x^2} - \frac{3}{10}\sin(\ln x) - \frac{1}{10}\cos(\ln x),$$

em que

$$c_2 = \frac{1}{70}(8 - 12\sin(\ln 2) - 4\cos(\ln 2)) \approx -0.03921$$

e

$$c_1 = \frac{11}{10} - c_2 \approx 1.13921.$$

A comparação entre a solução exata e a solução do algoritmo pode ser visualizada pelo gráfico:

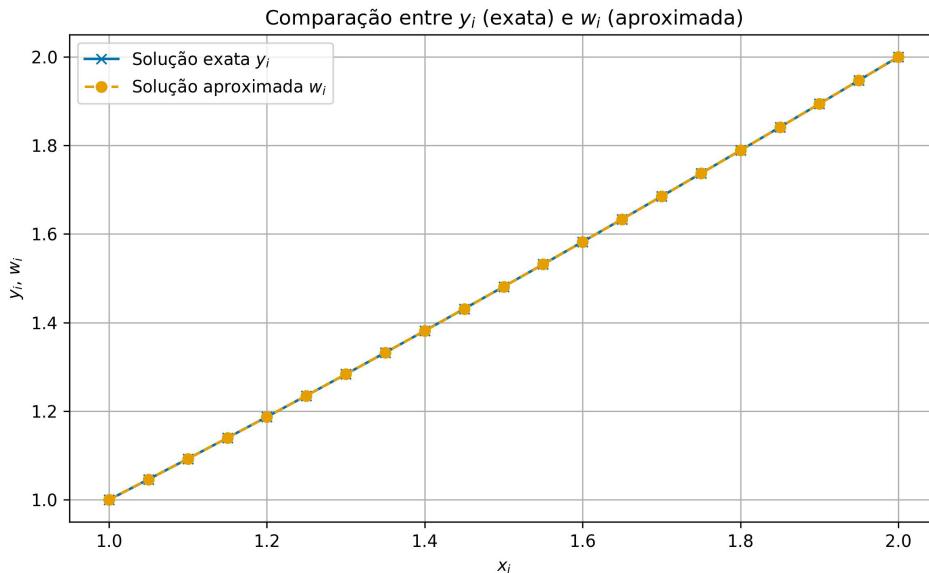


Figura 2 – Comparação y_i e w_i , com erro médio de $0,6809 \times 10^{-5}$.

2.3 Definições gerais e propriedades de meios porosos e de fluidos

Esta seção procura apresentar as definições teóricas das propriedades tanto dos meios porosos, quanto dos fluidos que escoam neles.

2.3.1 Meios porosos

Um meio poroso é caracterizado por sua *porosidade* ϕ , a fração entre o volume dos espaços vazios V_p e o total V_t , portanto sendo uma grandeza adimensional entre zero e um. Como exemplo concreto, o arenito e calcário possuem porosidade entre 0.05 e 0.5, onde a porosidade do arenito depende principalmente do seu processo de sedimentação.

Um meio *compressível* tem porosidade estática, enquanto que os *compressíveis* têm porosidade dinâmica. Tomando o caso compressível, no contexto de rochas em reservatórios, a

porosidade das rochas (por exemplo) depende da pressão p do reservatório devido à compressibilidade c_r :

$$c_r = \frac{1}{\phi} \frac{d\phi}{dp} = \frac{d \ln \phi}{dp}. \quad (2.16)$$

Considerando c_r constante e integrando a equação (2.16),

$$\phi(p) = \phi_0 e^{c_r(p-p_0)}, \quad (2.17)$$

onde p_0 é a pressão de referência quando ϕ_0 , e normalmente se assume uma aproximação linear (usando expansão em séries de Taylor):

$$\phi(p) \approx \phi_0(1 + c_r(p - p_0)). \quad (2.18)$$

A *permeabilidade* K representa a habilidade do meio poroso em transmitir um fluido dos através dos seus poros interconectados, sendo um parâmetro que mede a capacidade de transmissão do fluido quando o meio poroso está completamente saturado do mesmo. Quando somente dá um único fluido no meio poroso, esta propriedade recebe o nome de *permeabilidade absoluta*. A permeabilidade é dada por um tensor simétrico positivo definido, caso ela seja isotrópica, K é um escalar; quando K é espacialmente constante o meio se denomina *homogêneo* e caso contrário, *heterogêneo*.

2.3.2 Fluidos

A compressibilidade c_f ² relacionada à variação do volume V ou massa específica ρ com a variação de pressão p :

$$c_f = \frac{1}{V} \frac{dV}{dp} \Big|_T = \frac{1}{\rho} \frac{\partial \rho}{\partial p} \Big|_T, \quad (2.19)$$

onde pela mesma lógica usada para c_r , obtém-se

$$\rho \approx \rho_0(1 + c_f(p - p_0)). \quad (2.20)$$

2.3.3 Lei de Darcy

Para entender a *Lei de Darcy*, imagina-se um filtro de areia com água, de largura A e altura L , onde sua *altura hidráulica* h (com h_t no topo e h_b na base) em relação a um ponto fixo z :

$$h = -\frac{p}{\rho g} + z,$$

onde g é a magnitude da aceleração da gravidade. Dessa forma, o fluxo Q pode ser equacionado por

$$\frac{Q}{A} = \mathbf{k} \frac{h_t - h_b}{L},$$

onde \mathbf{k} é o vetor direção do escoamento e \mathbf{k} a condutividade hidráulica, que é dada por

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

² Formalmente, a compressibilidade é uma propriedade do escoamento e não do fluido.

onde μ é a viscosidade do fluido. Este fluxo representa o volume total do fluido pela área total por tempo, sendo também conhecido como *velocidade de Darcy* dada por:

$$u = \frac{Q}{A} = \mathbf{k} \frac{h_t - h_b}{L} = \frac{\rho g K}{\mu} \nabla h = \frac{\rho g K}{\mu} \nabla \left(-\frac{p}{\rho g} + z \right) = -\frac{K}{\mu} \nabla (\nabla p - \rho g \nabla z). \quad (2.21)$$

Esta equação (2.21) é conhecida como *Lei de Darcy* e representa a conservação de quantidade de movimento, na qual duas forças governam o fluxo, a pressão e a gravidade.

2.4 Modelagem de escoamentos monofásicos

Quando se aplica uma pressão (ou fluxo) em um domínio saturado por apenas *um fluido*, é induzido o que se chama de *escoamento monofásico*. O escoamento de um fluido em um meio poroso é o fluxo que ocorre nos espaços vazios interconectados do meio, onde dado um volume V , a conservação de massa do fluido implica que a massa acumulada em V deve ser igual a taxa de fluido pelas bordas, mais a injeção de massa:

$$\frac{\partial}{\partial t} \int_V \phi \rho \, dx + \int_{\partial V} \rho (u \cdot n) \, ds = \int_V q \, dx. \quad (2.22)$$

Aplicando-se o teorema da divergência³,

$$\frac{\partial}{\partial t} \int_V \phi \rho \, dx + \int_V \nabla \cdot (\rho u) \, dx = \int_V q \, dx \quad (2.23)$$

e alternando ∂_t com a integração espacial, pode-se escrever

$$\int_V \left(\frac{\partial}{\partial t} (\phi \rho) + \nabla \cdot (\rho u) \right) = \int_V q \, dx. \quad (2.24)$$

Como a equação (2.24) vale para qualquer volume elementar V , obtém-se a EDP

$$\int_V \left(\frac{\partial}{\partial t} (\phi \rho) + \nabla \cdot (\rho u) \right). \quad (2.25)$$

Utilizando a Lei de Darcy em (2.25) e desenvolvendo-a, obtém-se

$$\rho \phi c_t \frac{\partial p}{\partial t} - \nabla \cdot \left(\frac{\rho K}{\mu} (\nabla p - \rho g \nabla z) \right) = q, \quad (2.26)$$

onde $c_t = c_f + c_r$ representa a compressibilidade total. Para o escopo deste trabalho, será considerado um *escoamento incompressível*, ou seja, quando a rocha e o fluido são incompressíveis, ρ e ϕ são independentes de p e, portanto, $c_t = 0$. Portanto, a equação (2.26) torna-se uma equação elíptica com coeficientes variáveis:

$$-\nabla \cdot \left(\frac{\rho K}{\mu} (\nabla p - \rho g \nabla z) \right) = q. \quad (2.27)$$

³ Vale lembrar que o teorema da divergência afirma que: o fluxo de um campo vetorial F pela superfície de fronteira de uma região sólida simples E é igual à integral tripla do divergente de F ($\nabla \cdot F$) em E .

2.4.1 Condições auxiliares

Além das equações que, de fato, modelam escoamentos monofásicos, faz-se necessário ainda condições de contorno. Estas condições de contorno podem ser classificadas, principalmente, em três tipos: as de *Neumann*, onde o fluxo $u \cdot n$ é dado, as de *Dirichlet*, onde se dá pressão $p(x)$, e as de *Robin* ou mista, onde é especificado $\alpha u + \beta(u \cdot n)$. Estas condições podem ser *homogêneas*, quando o contorno é igual a zero, ou *heterogêneas*, quando são iguais a uma função g .

Tomando exemplos dessas condições de contorno, além de meios porosos, têm-se:

Exemplo 2.2 (Dirichlet). Em um berimbau, a corda é fixa nas extremidades e, portanto, tem uma condição de Dirichlet homogênea $v(0, t) = v(l, t) = 0$, com $v(x, t), x \in (0, l)$ sendo o deslocamento da corda em uma dimensão.

Exemplo 2.3 (Neumann). Uma garrafa de água hermeticamente fechada G possui uma condição de Neumann homogênea nas bordas ∂G .

Exemplo 2.4 (Robin). Supondo que se tem uma barra insulada na sua largura $0 \leq x \leq l$, em que sua extremidade $x = l$ é imersa em um reservatório de temperatura $g(t)$. Se o calor é trocado entre o fim da barra e o reservatório, então precisa obedecer a *lei do resfriamento de Newton* e, portanto, tem uma condição de Robin não homogênea

$$v(l, t) + \frac{1}{\beta} \frac{\partial v}{\partial x}(l, t) = g(t),^4$$

onde $\beta > 0$.

2.4.2 Meios homogêneos e heterogêneos

Para classificar meios como homogêneos ou heterogêneos, considera-se uma simplificação para o escoamento monofásico, com as hipóteses de o escoamento ser incompressível, isotérmico e sem efeito gravitacional, da forma que:

$$\left\{ \begin{array}{ll} \nabla \cdot u = \frac{q}{\rho} & \text{em } \Omega \\ u = -\frac{K}{\mu} \nabla p & \text{em } \Omega \\ p = p_b & \text{em } \partial\Omega_p \\ u \cdot n = u_b & \text{em } \partial\Omega_u \end{array} \right. \quad (2.28)$$

Um meio dito *homogêneo*, governado pelo sistema de escoamentos monofásicos (2.28), ocorre quando a permeabilidade absoluta K é constante e uniforme, logo não dependendo de x . Quando

⁴ Para uma função v qualquer que, por exemplo, determina a posição x em um determinado tempo, a condição de contorno de Neumann dá sua derivada normal $\partial v / \partial n$, por isso aparece a condição de Robin como $\alpha v + \beta \partial v / \partial n$. Como, no contexto deste trabalho, u é a velocidade de Darcy (2.21), pode-se escrever o contorno de Robin tal como no início desta subseção.

o meio é *heterogêneo*, a permeabilidade absoluta K varia com x e então o escoamento tende a passar pelas regiões de alta permeabilidade e evitar as de baixa permeabilidade.

Como exemplo de uma forma mais verossimilhante de se construir um meio heterogêneo⁵, imagina-se um campo de permeabilidades no domínio $\Omega = [0, 1] \times [0, 1]$ gerado em uma malha cartesiana regular de 25×25 células, por $K = e^{4.5\xi(x)}$, onde $\xi(x)$ é uma distribuição Gaussiana auto-semelhante de medida nula e função de covariança dada por $C(x, y) = |x - y|^{-1/2}$. Este exemplo pode ser visualizado abaixo:

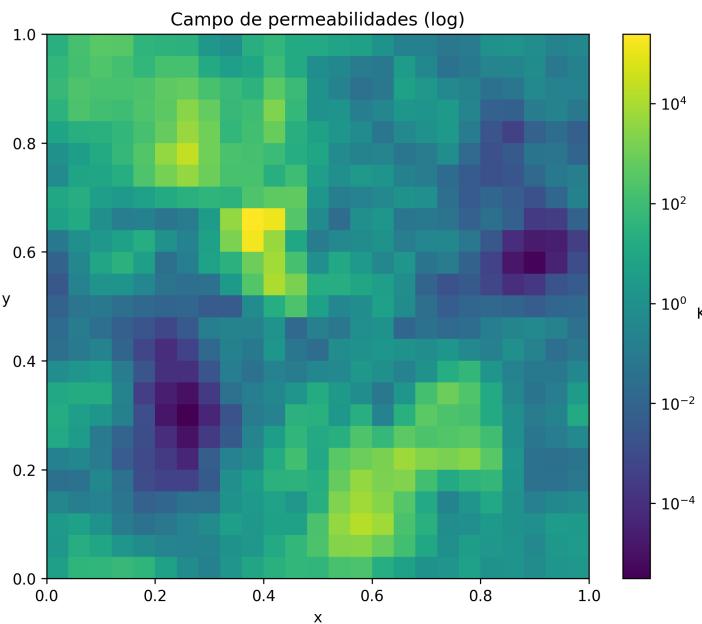


Figura 3 – Campo de permeabilidades em um meio heterogêneo (escala logarítmica).

Também, é possível usar um modelo do projeto *SPE10* fornecido pela *Sociedade de Engenheiros de Petróleo*, utilizado como referência em simulações de reservatórios de petróleo. Estes modelos, porém, não serão utilizados neste trabalho, mas podem ser acessados ((SPE), 2023).

2.5 Uma breve introdução ao método de volumes finitos

O *método de volumes finitos* é um método de discretização útil para simulações numéricas de leis de conservação de vários tipos: elípticas, hiperbólicas ou parabólicas, por exemplo. Este método tem alguns pontos importantes, como poder ser usado em geometrias arbitrárias, usar malhas estruturadas ou não, além de conservar localmente os fluxos numéricos; o que o faz particularmente interessante para problemas de mecânica dos fluidos. Comparativamente, o método de volumes finitos é um tanto diferente dos métodos de diferenças finitas (já explorado, em parte, na subseção 2.2.2) e de elementos finitos⁶.

⁵ Para maiores detalhes quanto a essa forma de gerar campos heterogêneos, consultar o apêndice B e na leitura de (GLIMM *et al.*, 1993).

⁶ Este método (de elementos finitos) não será explorado neste trabalho ademais da comparação com o de volumes finitos e uma introdução muito simples.

Primeiro, no *método de diferenças finitas*, em cada ponto da discretização as derivadas do que não é conhecido são trocadas pelas diferenças finitas pelas expansões de Taylor. Isto se torna problemático quando os coeficientes envolvidos na equação são descontínuos (como em um meio heterogêneo), o que não ocorre no método de volumes finitos contanto que a malha seja escolhida tal que essas descontinuidades estão no contorno dos volumes de controle.

O *método de elementos finitos* é baseado em uma formulação variacional⁷, que pode ser escrita para ambos os casos contínuos e discretos, obtida por multiplicar a equação original por uma "função de teste". O desconhecido contínuo é então aproximado por uma combinação linear de "funções de forma", que são as funções de teste para uma formulação variacional discreta (também chamada de expansão de Galerkin), e então o resultado é integrado sobre o domínio.⁸

Por um ponto de vista industrial, o método de volumes finitos é um método robusto para discretização de leis de conservação, no sentido que o esquema se comporta bem até em equações especialmente difíceis (como em sistemas hiperbólicos não lineares). Ademais, é um esquema barato, pois tem uma programação curta e confiável para problemas complexos. Entretanto, o método de elementos finitos pode ser mais preciso que o de volumes finitos quando se usa polinômios de ordens mais altas, mas precisa de uma estrutura funcional apropriada que não é sempre disponível nos problemas industriais.⁹

2.6 Método de volumes finitos para equações elípticas

Nesta seção, serão explorados os esquemas de volumes finitos para equações elípticas, com o objetivo de aproximar numericamente a solução do sistema (2.29) com simplificações, resultando em:

$$\begin{cases} -\nabla \cdot u = q & \text{em } \Omega \\ p = p_b & \text{em } \partial\Omega_p \\ u \cdot n = u_b & \text{em } \partial\Omega_u, \end{cases} \quad (2.29)$$

onde a viscosidade μ e massa específica ρ são uniformes no caso incompressível e consideradas unitárias aqui. Ademais, tem pressão relacionada a velocidade de Darcy

$$u = -(K\nabla p). \quad (2.30)$$

Para obter uma discretização de volumes finitos, integra-se $-\nabla \cdot u = q$ sobre um volume genérico

$$-\int_{V_k} \nabla \cdot u \, dx = \int_{V_k} q \, dx \quad (2.31)$$

e com o teorema da divergência,

$$-\int_{\partial V_k} u \cdot n_k \, ds = \int_{V_k} q \, dx, \quad (2.32)$$

⁷ Este termo advém do método variacional do *Cálculo de Variações*, que, neste contexto, é usado para aproximar uma solução por minimizar uma função de erro associada.

⁸ Vale ressaltar que também há métodos mistos com volumes finitos e elementos finitos.

⁹ Existem métodos mais precisos, como os métodos de partículas ou os espectrais, mas podem ser muito mais caros e menos robustos que o de volumes finitos.

em que n_k é o vetor normal à V_k . A discretização de K deve ser tratada adequadamente, tendo grande impacto na solução aproximada¹⁰.

2.6.1 Caso unidimensional

Considerando um domínio unidimensional $\Omega = [a, b]$ onde a primeira equação de (2.29) é escrita como

$$\frac{d}{dx} \left(K \frac{dp}{dx} \right) = q \quad (2.33)$$

Aplicando uma discretização por volumes finitos, têm-se uma partição do domínio em N intervalos $V_i = [x_{i-1/2}, x_{i+1/2}]$ e integrando a equação em qualquer V_i ,

$$-\int_{x_{i-1/2}}^{x_{i+1/2}} q \, dx = \int_{x_{i-1/2}}^{x_{i+1/2}} \frac{d}{dx} \left(K \frac{dp}{dx} \right) \, dx = K \frac{dp}{dx} \Big|_{x_{i+1/2}} - K \frac{dp}{dx} \Big|_{x_{i-1/2}}. \quad (2.34)$$

Considerando que a permeabilidade absoluta é constante em cada volume de controle, têm-se uma situação como abaixo

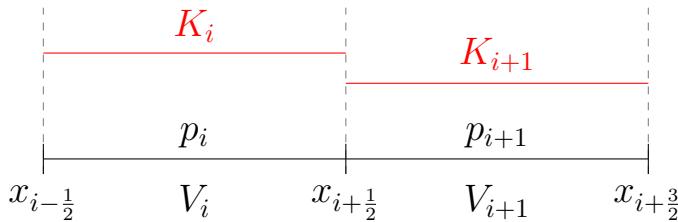


Figura 4 – Esquema de volumes finitos unidimensional.

No método de volumes finitas, a pressão é interpretada como sendo uma aproximação para a média da solução exata no volume de controle V_i ,

$$p_i \simeq \frac{1}{|V_i|} \int_{V_i} p(x) \, dx,$$

que pode ser constante na célula (como na figura 4). Supondo a existência de um valor intermediário $p_{i+1/2}$ em $x_{i+1/2}$, pode-se fazer a discretização do fluxo em cada lado de $x_{i+1/2}$ para encontrar um valor de $p_{i+1/2}$ que preserve o fluxo entre os volumes de controle. Portanto,

$$\lim_{x \rightarrow x_{i+1/2}^-} K \frac{dp}{dx} \simeq K_i \frac{p_{i+1/2} - p_i}{\Delta x_i/2} \quad \text{e} \quad \lim_{x \rightarrow x_{i+1/2}^+} K \frac{dp}{dx} \simeq K_{i+1} \frac{p_{i+1} - p_{i+1/2}}{\Delta x_{i+1}/2}.$$

Impondo a continuidade de fluxo nas interfaces,

$$\lim_{x \rightarrow x_{i+1/2}^-} K \frac{dp}{dx} = \lim_{x \rightarrow x_{i+1/2}^+} K \frac{dp}{dx},$$

ou seja, os fluxos discretos devem satisfazer

$$K_i \frac{p_{i+1/2} - p_i}{\Delta x_i} = K_{i+1} \frac{p_{i+1} - p_{i+1/2}}{\Delta x_{i+1}}.$$

¹⁰ Consultar o apêndice C.

Desenvolvendo a equação e considerando que $\Delta x_{i+1} = \Delta x_i = \Delta x$,

$$K \frac{dp}{dx} \Big|_{x_{i+1/2}} = \frac{2K_i K_{i+1}}{K_i + K_{i+1}} \left(\frac{p_{i+1} - p_i}{\Delta x} \right). \quad (2.35)$$

Logo, o coeficiente que torna o método *conservativo*, isto é, que preserva a quantidade de fluxo que passa através de uma fronteira entre células, é a média harmônica entre K_i e K_{i+1} e que define o valor adequado de K em $x_{i+1/2}$. Voltando para (2.34), resta aproximar a integral do lado esquerdo em

$$\int_{x_{i-1/2}}^{x_{i+1/2}} q \, dx = \Delta x q_i,$$

onde q_i é o valor médio do termo fonte em V_i e, portanto, constante por partes. Tomando

$$K_{i+1/2} = \frac{2K_i K_{i+1}}{K_i + K_{i+1}}, \quad (2.36)$$

a equação (2.33) em cada volume V_i é dada por

$$-\frac{1}{\Delta x^2} (K_{i+1/2}(p_{i+1} - p_i) - K_{i-1/2}(p_i - p_{i+1})) = q_i. \quad (2.37)$$

2.6.1.1 Implementação

Para implementar o método de volumes finitos, considera-se o esquema numérico (2.37) escrito em forma matricial, com N células

$$Aw = d, \quad (2.38)$$

com w e d representando os vetores de valores aproximados para a pressão e os de injeção q . Por fim, A é uma matriz tridiagonal definida por

$$(Aw)_i = \frac{1}{\Delta x^2} \left(-K_{i-\frac{1}{2}} p_{i-1} + (K_{i-\frac{1}{2}} + K_{i+\frac{1}{2}}) p_i - K_{i+\frac{1}{2}} p_{i+1} \right), \quad (2.39)$$

para $i = 2, \dots, N - 1$. As linhas $i = 1$ e $i = N$ da matriz são usadas para impor condições de contornos, as quais podem ser:

- i. de Neumann, em $x_{1/2}$ por exemplo, com

$$-K \frac{dp}{dx} \Big|_{x_{\frac{1}{2}}} = u_b,$$

e então para a primeira equação do sistema (2.38) fica

$$\frac{1}{\Delta x^2} \left(-K_{\frac{3}{2}}(p_2 - p_1) \right) = q_1 + \frac{u_b}{\Delta x}$$

e na outra extremidade similarmente.

ii. de Dirichlet, em $x_{N+1/2}$ por exemplo, com pressão imposta

$$p|_{x_{N+1/2}} = p_b$$

e então a última equação do sistema (2.38) fica

$$\frac{1}{\Delta x^2} \left(2K_N p_N + K_{N-\frac{1}{2}} (p_N - p_{N-1}) \right) = q_1 + \frac{2K_N p_b}{\Delta x^2}$$

e na outra extremidade similarmente.

Portanto, a matriz A do sistema, considerando as duas condições de contorno (de Neumann pela esquerda e de Dirichlet pela direita) é dada por

$$A = \frac{1}{\Delta x^2} \begin{bmatrix} K_{\frac{3}{2}} & -K_{\frac{3}{2}} & & & \\ -K_{\frac{3}{2}} & \left(K_{\frac{3}{2}} + K_{\frac{5}{2}} \right) & -K_{\frac{5}{2}} & & \\ & \ddots & \ddots & \ddots & \\ & & -K_{N-\frac{3}{2}} & \left(K_{N-\frac{3}{2}} + K_{N-\frac{1}{2}} \right) & -K_{N-\frac{1}{2}} \\ & & & -K_{N-\frac{1}{2}} & \left(K_{N-\frac{1}{2}} + 2K_N \right) \end{bmatrix}$$

e

$$d^t = \left(q_1 + \frac{u_b}{\Delta x}, q_2, \dots, q_{N-1}, q_N + \frac{2K_N}{\Delta x^2} \right).$$

Nota-se que a matriz A é diagonal dominante, portanto, pelo teorema A.3, possui fatoração LU única. Além de fatoração LU , pode-se explorar a simetria de A , utilizar as fatorações de Cholesky e LDL^T especializá-las para matrizes tridiagonais. Em específico, a implementação da solução do problema (2.29) unidimensional, com condições de contorno de Dirichlet, pela fatoração LDL^t pode ser escrita como:

Solução para o problema de escoamento unidimensional com condições de Neumann

Passo 1) Calcular $h = \frac{B-A}{N+1}$ e inicializar:

$$a_{11} = \frac{K_{1/2} + K_{3/2}}{h^2}$$

Passo 2) Para cada $i = 2, \dots, N-1$:

$$\begin{aligned} a_{i,i-1} &= -\frac{K_{i-1/2}}{h^2} \\ a_{ii} &= \frac{K_{i-1/2} + K_{i+1/2}}{h^2} \\ d_i &= q \left(A + \left(i - \frac{1}{2} \right) h \right) \end{aligned}$$

Passo 3) Calcular último elemento e ajustar condições de Neumann:

$$\begin{aligned} a_{N,N-1} &= -\frac{K_{N-1/2}}{h^2} \\ a_{NN} &= \frac{K_{N-1/2} + K_{N+1/2}}{h^2} \\ d_1 &= q \left(A + \frac{h}{2} \right) + \frac{K_{1/2}\alpha}{h^2} \\ d_N &= q \left(A + \left(N - \frac{1}{2} \right) h \right) + \frac{K_{N+1/2}\beta}{h^2} \end{aligned}$$

Passo 4) Fatoração LDL^T inicial:

$$D_1 = a_{11}, \quad l_2 = \frac{a_{21}}{D_1} \text{ e } z_1 = d_1$$

Passo 5) Para cada $i = 2, \dots, N - 1$:

$$\begin{aligned} D_i &= a_{ii} - l_i^2 D_{i-1} \\ l_{i+1} &= \frac{a_{i+1,i}}{D_i} \\ z_i &= \frac{d_i - l_i z_{i-1}}{D_i} \end{aligned}$$

Passo 6) Completar fatoração:

$$D_N = a_{NN} - l_N^2 D_{N-1} \text{ e } z_N = \frac{d_N - l_N z_{N-1}}{D_N}$$

Passo 7) Atribuir condições de contorno:

$$w_0 = \alpha, \quad w_N = \frac{z_N}{D_N} \text{ e } w_{N+1} = \beta$$

Passo 8) Resolver sistema regressivamente para $i = N - 1, \dots, 1$:

$$w_i = \frac{z_i}{D_i} - l_{i+1} w_{i+1}$$

Passo 9) Saída: w_i para $i = 0, \dots, N + 1$

Foram realizados testes para aferir o tempo de execução médio entre os três algoritmos de fatoração, nomeadamente, LDL^t , de Crout e de Cholesky. Os testes se deram no computador pessoal descrito na ficha técnica 1.1, onde cada algoritmo foi executado mil vezes para diferentes números de subintervalos. Pode-se ver na tabela 1 que, realmente, o algoritmo LDL^t performou (ligeiramente) melhor que a fatoração de Crout (pensando no problema do exemplo 2.5).

Vale notar que os três algoritmos possuem a mesma ordem de erro de truncamento $O(h^2)$.

Subintervalos	LDL ^t	Crout	Cholesky
10 ²	$0.18247 \times 10^{-4} \text{ s}$	$0.18758 \times 10^{-4} \text{ s}$	$0.20147 \times 10^{-4} \text{ s}$
10 ³	$0.86234 \times 10^{-4} \text{ s}$	$0.95469 \times 10^{-4} \text{ s}$	$0.98242 \times 10^{-4} \text{ s}$
10 ⁴	$0.82834 \times 10^{-3} \text{ s}$	$0.92428 \times 10^{-3} \text{ s}$	$0.94293 \times 10^{-3} \text{ s}$
10 ⁵	$0.72082 \times 10^{-2} \text{ s}$	$0.79367 \times 10^{-2} \text{ s}$	$0.83214 \times 10^{-2} \text{ s}$

Tabela 1 – Tempos médios de métodos de fatoração diferentes para o problema unidimensional.

Para ilustrar esse método, tomam-se dois exemplos:

Exemplo 2.5. Dado um problema de valor de contorno unidimensional

$$\begin{cases} -\frac{d}{dx} \left(K \frac{dp}{dx} \right) = -25 \cos(25x) & \text{em } \Omega = [0, 1] \\ p = x & \text{sobre } \partial\Omega \end{cases}$$

onde a permeabilidade absoluta do meio é $K(x) = 2 + \sin(25x)$ e solução exata $p(x) = x$. As fatorações produziram resultados próximos à solução exata, com erro de truncamento $\epsilon \approx 0.355 \times 10^{-2}$, e gráficos:

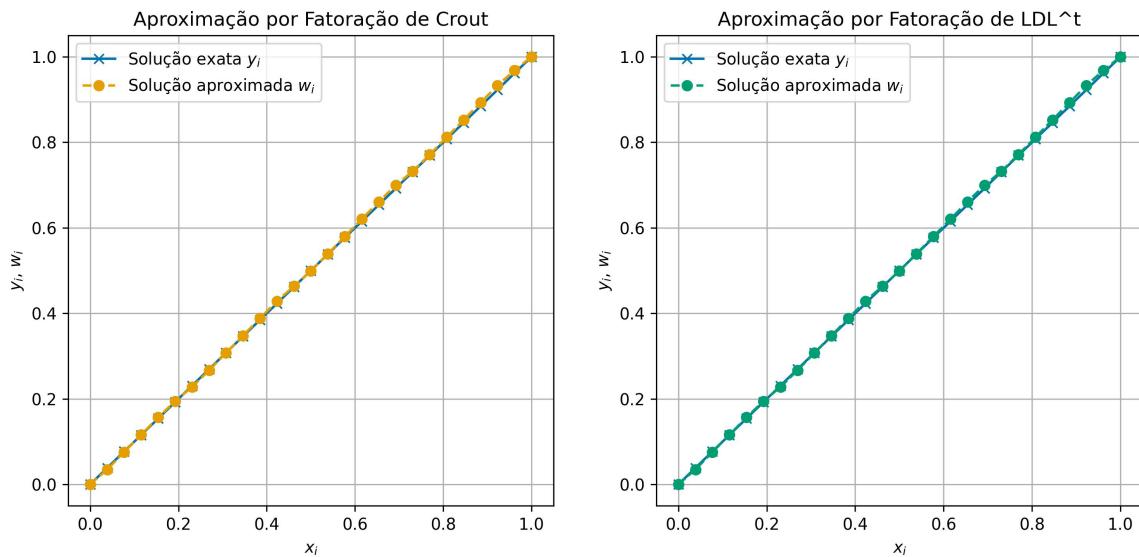


Figura 5 – Solução por diferentes métodos de fatoração (Crout e LDL^t)

Exemplo 2.6. Dado um problema de valor de contorno unidimensional $-\frac{d}{dx} \left(K \frac{dp}{dx} \right) = 0$ em $\Omega = [0, 1]$, e contorno de Dirichlet $p(0) = 0$ e $p(1) = 1$. A permeabilidade absoluta do meio é descontínua dada por

$$K(x) = \begin{cases} \kappa, & \text{em } x \in [0, x^*] \\ 1, & \text{em } x \in (x^*, 1] \end{cases}$$

e solução exata

$$p(x) = \begin{cases} \frac{x}{x^* - \kappa x^* + \kappa}, & \text{em } x \in [0, x^*) \\ \frac{\kappa(x-1)}{x^* - \kappa x^* + \kappa} + 1, & \text{em } x \in (x^*, 1] \end{cases}.$$

Somente usando a fatoração de Crout, foi possível chegar perto da solução exata com erro de truncamento $\epsilon \approx 0.124 \times 10^{-1}$, maior do que no problema contínuo, e gráfico:

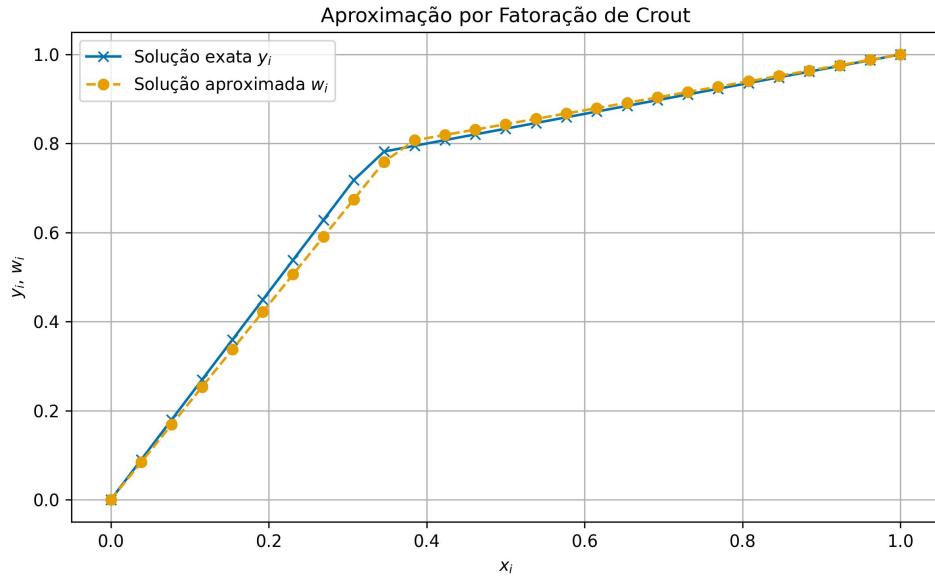


Figura 6 – Solução pelo método de fatoração de Crout

2.6.2 Caso bidimensional

A generalização do método de volumes finitos para uma dimensão maior segue um procedimento análogo à subseção anterior, obter uma discretização de (2.32) em $\Omega \subset \mathbb{R}^2$. Primeiro, integra-se

$$\int_{V_{i,j}} q \, dx = |V_{i,j}| q_{i,j} = \Delta x \Delta y \, q_{i,j},$$

onde $\Delta x \Delta y$ é o volume da célula $V_{i,j}$ e $q_{i,j}$ é constante por célula. Após, decompõe-se a borda $\partial V_{i,j}$ em componentes *norte*, *sul*, *leste* e *oeste*, respectivamente, $\partial V_{i,j} = N + S + L + O$, como ilustrado na figura 8 abaixo.

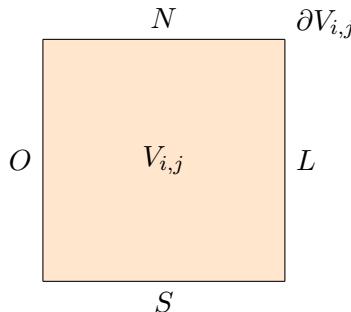


Figura 7 – Componentes norte, sul, leste e oeste em $\partial V_{i,j}$.

Com isso, têm-se

$$\int_{\partial V_{i,j}} u \cdot n \, ds = \int_N u \cdot n_N \, ds + \int_S u \cdot n_S \, ds + \int_L u \cdot n_L \, ds + \int_O u \cdot n_O \, ds, \quad (2.40)$$

em que n_N, n_S, n_L e n_O são os vetores normais a cada aresta de $\partial V_{i,j}$, apontando para fora do volume. Usando a discretização conservativa, pode-se aproximar cada integral separadamente, como por exemplo:

$$\int_S u \cdot n_S \, ds = \int_{x_{i-1/2}}^{x_{i+1/2}} K \frac{\partial p}{\partial y} \Big|_{(x,y_{j-1/2})} \, dx \quad (2.41)$$

$$\simeq \int_{x_{i-1/2}}^{x_{i+1/2}} -\frac{2K_{i,j-1}K_{i,j}}{K_{i,j-1}K_{i,j}} \left(\frac{p_{i,j} - p_{i,j-1}}{\Delta y} \right) \, dx \quad (2.42)$$

$$= \frac{\Delta x}{\Delta y} K_{i,j-\frac{1}{2}} (p_{i,j-1} - p_{i,j}), \quad (2.43)$$

com $n_S = (0, -1)$, e similarmente para as outras faces. Portanto, a forma discreta de 2.32 para um problema bidimensional é

$$\begin{aligned} q_{i,j} = & -\frac{1}{\Delta y^2} K_{i,j+\frac{1}{2}} p_{i,j+1} - \frac{1}{\Delta y^2} K_{i,j-\frac{1}{2}} p_{i,j-1} \\ & -\frac{1}{\Delta x^2} K_{i+\frac{1}{2},j} p_{i+1,j} - \frac{1}{\Delta x^2} K_{i-\frac{1}{2},j} p_{i-1,j} \\ & + \left(\frac{1}{\Delta y^2} K_{i,j+\frac{1}{2}} + \frac{1}{\Delta y^2} K_{i,j-\frac{1}{2}} + \frac{1}{\Delta x^2} K_{i+\frac{1}{2},j} + \frac{1}{\Delta x^2} K_{i-\frac{1}{2},j} \right) p_{i,j} \end{aligned} \quad (2.44)$$

onde se usam as médias harmônicas $K_{i,j\pm\frac{1}{2}}$ $K_{i\pm\frac{1}{2},j}$. Após a pressão ser calculada (via métodos numéricos da parte 2.6.2.3), o campo de velocidades pode ser calculado usando a mesma estratégia de aproximação dos fluxos nas integrais em $\partial V_{i,j}$. Pela definição da velocidade de Darcy (2.21):

$$\mathbf{u} = \begin{bmatrix} u \\ v \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} -K \partial_x p \\ -K \partial_y p \end{bmatrix}.$$

Usando-se a discretização dos fluxos discutida anteriormente, mantendo-se a aproximação conservativa de volumes finitos, consegue-se:

$$\begin{aligned} u_L &\simeq -K_{i+\frac{1}{2},j} \frac{p_{i+1,j} - p_{i,j}}{\Delta x}, & u_O &\simeq -K_{i-\frac{1}{2},j} \frac{p_{i,j} - p_{i-1,j}}{\Delta x} \\ v_N &\simeq -K_{i,j+\frac{1}{2}} \frac{p_{i,j+1} - p_{i,j}}{\Delta y}, & \text{e} \quad v_S &\simeq -K_{i,j-\frac{1}{2}} \frac{p_{i,j} - p_{i,j-1}}{\Delta y}. \end{aligned}$$

Para fins de visualização, o campo vetorial pode ser calculado no centro das células, fornecendo um campo discreto mais conveniente para a maioria das situações. Isso pode ser calculado por médias simples, da forma

$$u_{i,j} = \frac{u_L + u_O}{2} \quad \text{e} \quad v_{i,j} = \frac{v_N + v_S}{2}. \quad (2.45)$$

2.6.2.1 Condição de contorno de Neumann

Quando se impõe uma condição de contorno do tipo *Neumann*, significa impor um fluxo naquela fronteira, ou seja,

$$-K \frac{\partial p}{\partial n} = -(K \nabla p) \cdot n = g(x, y) \quad \text{em } \zeta \subset \partial V_{i,j},$$

onde g é uma função conhecida. Se g é nula, têm-se um contorno do tipo *homogênea* e para explicar a discretização do contorno, toma-se o exemplo da face leste, que teria, então:

$$\int_L u \cdot n_L ds = 0.$$

Portanto, sua contribuição na equação (2.40) será eliminada. Caso g não seja nula, têm-se uma condição de contorno do tipo *não homogênea*, e a integral será alterada para:

$$\int_L u \cdot n_L ds = \int_{y_{j-1/2}}^{y_{j+1/2}} u \cdot n_L dy = \int_{y_{j-1/2}}^{y_{j+1/2}} g(x_{\frac{1}{2}}, y) dy.$$

Desse modo, seria preciso integrar numericamente g , por exemplo, pela regra do trapézio:

$$G_j = \int_{y_{j-1/2}}^{y_{j+1/2}} g(x_{\frac{1}{2}}, y) dy \simeq \frac{\Delta y}{2} \left(g(x_{\frac{1}{2}}, y_{i-\frac{1}{2}}) + g(x_{\frac{1}{2}}, y_{i+\frac{1}{2}}) \right),$$

da forma que a equação (2.44) será modificada (no exemplo de quando $i = M$) para

$$\begin{aligned} q_{M,j} - \frac{G_j}{\Delta x \Delta y} &= -\frac{1}{\Delta y^2} K_{M,j+\frac{1}{2}} p_{M,j+1} - \frac{1}{\Delta y^2} K_{M,j-\frac{1}{2}} p_{M,j-1} - \frac{1}{\Delta x^2} K_{M-\frac{1}{2},j} p_{M-1,j} \\ &\quad + \left(\frac{1}{\Delta y^2} K_{M,j+\frac{1}{2}} + \frac{1}{\Delta y^2} K_{M,j-\frac{1}{2}} + \frac{1}{\Delta x^2} K_{M-\frac{1}{2},j} \right) p_{M,j}. \end{aligned}$$

2.6.2.2 Condição de contorno de Dirichlet

Quando o contorno é do tipo *Dirichlet*, significa que foi imposta uma pressão em alguma fronteira, ou seja,

$$p = g(x, y) \text{ em } \zeta \subset \partial V_{i,j},$$

onde g é uma função conhecida para a pressão na borda. Por exemplo, a face sul do volume $V_{i,1}$ está em ζ , então a contribuição da integral deve ser recalculada para:

$$\begin{aligned} \int_S u \cdot n_S ds &= \int_{x_{i-1/2}}^{x_{i+1/2}} -K \frac{\partial p}{\partial y}(x, y_{\frac{1}{2}}) dx \\ &\simeq \int_{x_{i-1/2}}^{x_{i+1/2}} -K \left(\frac{p_{i,1} - g(x, y_{\frac{1}{2}})}{y_1 - y_{\frac{1}{2}}} \right) dx \\ &= -2 \frac{\Delta x}{\Delta y} K_{i,\frac{1}{2}} p_{i,1} + \frac{2}{\Delta y} K_{i,\frac{1}{2}} \int_{x_{i-1/2}}^{x_{i+1/2}} g(x, y_{\frac{1}{2}}) dx. \end{aligned}$$

E novamente, integra-se g em G_i :

$$G_i = \int_{x_{j-1/2}}^{x_{j+1/2}} g(x, y_{\frac{1}{2}}) dx \simeq \frac{\Delta x}{2} \left(g(x_{i-\frac{1}{2}}, y_{\frac{1}{2}}) + g(x_{i+\frac{1}{2}}, y_{\frac{1}{2}}) \right),$$

e portanto, a equação (2.44) será modificada (no exemplo de quando $j = 1$) para

$$\begin{aligned} q_{M,j} - \frac{2}{\Delta y^2 \Delta x} G_i K_{i,\frac{1}{2}} &= -\frac{1}{\Delta y^2} K_{i,\frac{3}{2}} p_{i,2} - \frac{1}{\Delta x^2} K_{i+\frac{1}{2},1} p_{i+1,1} - \frac{1}{\Delta x^2} K_{i-\frac{1}{2},1} p_{i-1,j} \\ &\quad + \left(\frac{1}{\Delta y^2} K_{i,\frac{3}{2}} + \frac{2}{\Delta y^2} K_{i,\frac{1}{2}} + \frac{1}{\Delta x^2} K_{i+\frac{1}{2},1} + \frac{1}{\Delta x^2} K_{i-\frac{1}{2},1} \right) p_{i,1}, \end{aligned}$$

com $K_{i,\frac{1}{2}} = K_{i,1}$. Da mesma forma que no contorno de Neumann, quando $g \neq 0$, a condição de contorno de Dirichlet é do tipo *não homogêneo* e, caso contrário, *homogêneo*.

2.6.2.3 Implementação

Considerando uma discretização $M \times N$ células, o esquema (2.44) pode ser escrito em forma matricial

$$Aw = d$$

com $w = (p_1, \dots, p_{MN})^t$ e $b = (q_1, \dots, q_{MN})^t$. Cada linha da matriz A está relacionada com uma célula (i, j) e leva em consideração as contribuições de seus quatro vizinhos $(i - 1, j)$, $(i + 1, j)$, $(i, j - 1)$ e $(i, j + 1)$. Para ordenar as células no caso bidimensional, pode-se escolher (entre as triviais) ordenar por colunas ou linhas; por exemplo, em uma malha 3×3 , as células podem ser ordenadas (por linhas) da esquerda para direita, de cima para baixo, como a figura 8.

$i - 1, j - 1$	i, j	$i + 1, j + 1$
7	8	9
$i - 1, j - 1$	i, j	$i + 1, j + 1$
4	5	6
$i - 1, j - 1$	i, j	$i + 1, j + 1$
1	2	3

Figura 8 – Componentes norte, sul, leste e oeste em $\partial V_{i,j}$.

Ainda nesse exemplo, a linha 5 da matriz $A_{9 \times 9}$ que está relacionada à célula (i, j) tem contribuições nas colunas 4, 5, 6, 2 e 8, além de receber contribuições do fator que a multiplica $p_{i,j}$; e por sua vez, as colunas 4, 6, 2 e 8 recebem, respectivamente, $p_{i-1,j}$, $p_{i+1,j}$, $p_{i,j-1}$ e $p_{i,j+1}$. Dessa forma, com essa ordenação, a matriz terá uma estrutura pentadiagonal, três diagonais sucessivas e duas a uma distância M da diagonal principal. A estrutura seria como a representação da matriz abaixo:

$$A_{9 \times 9} = \begin{bmatrix} x & x & x \\ x & x & x & x \\ x & x & & x \\ x & & x & x & x \\ x & & x & x & x & x \\ x & & x & x & & x \\ x & & & x & x & \\ x & & & x & x & x \\ x & & & x & x & x \end{bmatrix}.$$

Essa ordenação pode ser calculada por uma relação algébrica dada por

$$k = i + (j - 1)M,$$

onde k é o número da incógnita e correspondente linha da matriz, M o número de células em cada linha da malha, $i = 1, 2, \dots, M$ e $j = 1, 2, \dots, M$. Nota-se que, a matriz em questão é quadrada e pode ser descrita por blocos, haja vista

$$\mathbf{A}_{9 \times 9} = \begin{bmatrix} A & C \\ B & A & C \\ & B & A \end{bmatrix},$$

e portanto, dadas certas propriedades¹¹, é possível fatorá-la em duas matrizes (diagonais inferior L e superior U) da forma

$$\mathbf{A}_{9 \times 9} = LU = \begin{bmatrix} \bar{A}_1 & & \\ \bar{B}_2 & \bar{A}_2 & \\ & \bar{B}_3 & \bar{A}_3 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} I_1 & \Gamma_1 & \\ & I_2 & \Gamma_2 \\ & & I_3 \end{bmatrix}.$$

Pensando em matrizes mais gerais, com $Q = M \times N$, o sistema $Aw = d$, então, teria também w e d em blocos

$$w = (w^{(1)}, \dots, w^{(Q)})^t \text{ e } d = (d^{(1)}, \dots, d^{(Q)})^t, \quad (2.46)$$

e algoritmo de resolução:

Solução usando fatoração LU em bloco

Passo 1) Colocar $\bar{A}_1 = A_1$ e resolver (para Γ_1):

$$\bar{A}_1\Gamma_1 = C_1; \quad (2.47)$$

Passo 2) Para $i = 2, 3, \dots, Q - 1$, calcular

$$\bar{A}_i = A_i - B_i\Gamma_{i-1}$$

e resolver (para Γ_i)

$$\bar{A}_i\Gamma_i = C_i;$$

Passo 3) Calcular $\bar{A}_N = A_N - B_N\Gamma_{Q-1}$;

Passo 4) Pensando em $Lz = d$, resolver $\bar{A}_1 z^{(1)} = d^{(1)}$ e, para $i = 2, 3, \dots, Q$,

$$\bar{A}_i z^{(i)} = d^{(i)} - B_i w^{(i-1)};$$

Passo 5) Calcular, com $w^{(Q)} = z^{(Q)}$, para $i = N - 1, N - 2, \dots, 1$,

$$w^{(i)} = z^{(i)} - \Gamma_i w^{(i+1)};$$

Passo 6) Saída: As aproximações w_i para $i = 1, \dots, Q$.

¹¹ Ver apêndice A.

Este algoritmo usa a estratégia de trocar os cálculos das inversas de \bar{A} por uma resolução de sistema, o que reduz a ordem de operações de $O(3Q^4)$ para $O(\frac{5}{3}Q^4)$ ¹². Abaixo, estão alguns exemplos de campos de pressão em duas dimensões:

Exemplo 2.7. Dado um problema elíptico bidimensional de contorno Neumann homogêneo

$$\begin{cases} \nabla \cdot u = -8\pi^2 \cos(2\pi x) \cos(2\pi y) & \text{em } \Omega = [0, 1] \times [0, 1] \\ u \cdot n = 0 & \text{sobre } \partial\Omega \end{cases}$$

onde a permeabilidade absoluta do meio é $K = 1$ e solução exata $p(x) = \cos(2\pi x) \cos(2\pi y)$. Os resultados foram próximos à solução exata, com erro de truncamento $\epsilon \approx 0.5198 \times 10^{-2}$ e tempo de execução da ordem de 10^{-1} segundos. Para resolver com exatidão o problema, foi usado um recurso de *contorno Dirichlet local*, onde se impõe uma pressão em um ponto específico da matriz, nesse caso, o ponto $(1, 1)$ por simplicidade. O gráfico do campo de pressões com vetores normalizados pode ser visualizado na imagem 9a abaixo.

Exemplo 2.8. Dado um problema elíptico bidimensional *a quarter of the five spot*, onde há contorno Neumann homogêneo $\nabla \cdot u = 0$, permeabilidade absoluta $K(x) = 1$ e termo fonte:

$$q = \begin{cases} \tilde{q} & \text{no poço de injeção} \\ -\tilde{q} & \text{no poço de produção} \\ 0 & \text{no restante do domínio} \end{cases},$$

com $\tilde{q} = 1$. O gráfico do campo de pressões com vetores normalizados pode ser visualizado na imagem 9b abaixo. Para este problema, assim como no exemplo anterior, é preciso especificar a pressão para evitar a indeterminação.

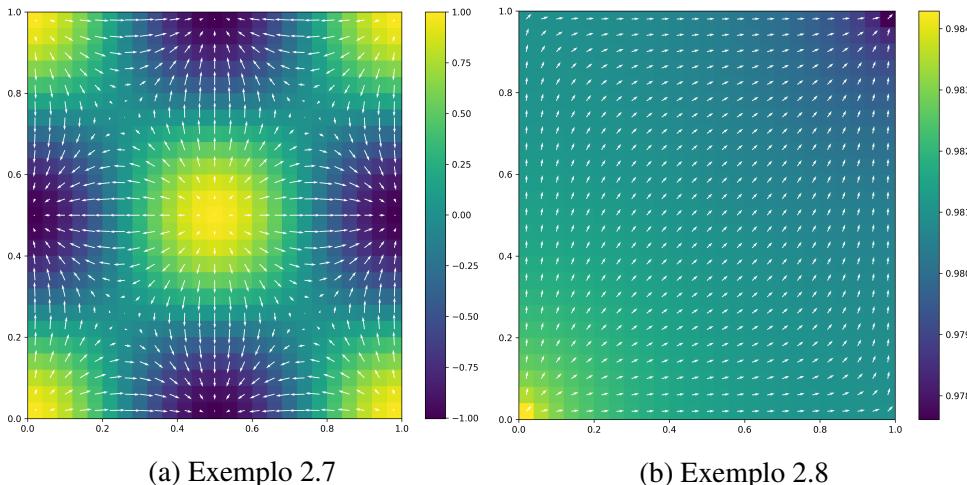


Figura 9 – Campo de pressões e vetores dos exemplos.

¹² Para comparar, o método de eliminação Gaussiana tem quantidade de operações na ordem, para matrizes $m \times m$, de $O(\frac{1}{3}m^6)$. A economia na fatoração LU em bloco surge por levar em conta os vários zeros na matriz original.

3 CONCLUSÃO

Apresentar as conclusões correspondentes aos objetivos ou hipóteses propostos para o desenvolvimento do trabalho, podendo incluir sugestões para novas pesquisas.

REFERÊNCIAS

- ADLER, R. J.; TAYLOR, J. E. **Random Fields and Geometry**. New York: Springer, 2007. (Springer Monographs in Mathematics). ISBN 978-0-387-48112-8.
- BURDEN, R. L.; FAIRES, J. D.; BURDEN, A. M. **Análise Numérica**. 10. ed. São Paulo: Cengage Learning, 2016. Tradução de: *Numerical Analysis*. 10. ed. ISBN 978-85-221-2341-4.
- CHILÈS JEAN-PAUL E DELFINER, P. **Geostatistics: Modeling Spatial Uncertainty**. 1. ed. New York: John Wiley & Sons, 1999. (Wiley Series in Probability and Statistics). ISBN 978-0-471-08315-3.
- EYMARD, R.; GALLOUËT, T.; HERBIN, R. **Finite Volume Methods**. Amsterdam: North-Holland, 2000. v. 7. 713–1020 p. (Handbook of Numerical Analysis, v. 7). Título em inglês: "Finite Volume Methods". ISBN 978-0-444-50437-7.
- GELFAND, I. M.; VILENKIN, N. Y. **Generalized Functions**. New York: Academic Press, 1964. v. 4. Volume 4.
- GLIMM, J. *et al.* A theory of macrodispersion for the scale-up problem. **Transport in Porous Media**, Kluwer Academic Publishers, Netherlands, v. 13, p. 97–122, 1993.
- HIGHAM, N. J. **Accuracy and Stability of Numerical Algorithms**. 2. ed. Philadelphia, PA: Society for Industrial and Applied Mathematics (SIAM), 2002. (Other Titles in Applied Mathematics). Inclui bibliografia e índice. ISBN 0-89871-521-0.
- ISAACSON, E.; KELLER, H. B. **Analysis of Numerical Methods**. New York: John Wiley & Sons, 1966. Reprinted by Dover Publications in 1994. ISBN 0-486-68029-0.
- SOUZA, F. S.; ROCHA, F. F. **Métodos de volumes finitos para modelagem computacional de reservatórios de petróleo**. São Carlos, SP: SBMAC, 2022. v. 96. 102 p. (Notas em Matemática Aplicada, v. 96). ISBN 978-65-86388-18-3.
- (SPE), S. of P. E. **CSP Datasets: Set02**. 2023. Acesso em: 9 ago. 2025. Disponível em: <https://www.spe.org/web/csp/datasets/set02.htm>.
- STRAUSS, W. A. **Partial Differential Equations: An Introduction**. 2. ed. Hoboken, NJ: John Wiley & Sons, 2008. ISBN 978-0470-05456-7.
- THOMAS, J. W. **Numerical Partial Differential Equations: Finite Difference Methods**. New York: Springer, 1995. v. 22. (Texts in Applied Mathematics, v. 22). ISBN 978-1-4899-7278-1.
- ZILL, D. G. **A First Course in Differential Equations with Modeling Applications**. 9. ed. Boston, MA: Cengage Learning, 2017. ISBN 978-1-305-96573-6.

APÊNDICES

APÊNDICE A – NOTAS SOBRE FATORAÇÃO DE MATRIZES

A.1 Fatoração LU

Considera-se que a matriz $A_{n,n} = [a_{ij}]$ pode ser fatorada em duas matrizes $L_{n,n} = [l_{ij}]$ e $U_{n,n} = [u_{ij}]$, triangulares inferior e superior, da forma que

$$A = LU = \begin{bmatrix} l_{11} & 0 & 0 & \cdots & 0 \\ l_{21} & l_{22} & & & 0 \\ \vdots & & \ddots & & 0 \\ \vdots & & & \ddots & 0 \\ 0 & \cdots & 0 & l_{N,N-1} & l_{N,N} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} u_{11} & u_{12} & 0 & \cdots & 0 \\ 0 & u_{22} & u_{23} & & 0 \\ \vdots & & \ddots & & 0 \\ \vdots & & & \ddots & u_{N-1,N} \\ 0 & \cdots & 0 & 0 & u_{N,N} \end{bmatrix}.$$

Existem três métodos principais para fatoração de matrizes, os métodos de *Doolittle*, de *Crout* e de *Cholesky*, onde, respectivamente: $l_{ii} = 1$, $u_{ii} = 1$ e $l_{ii} = u_{ii}$; em todos os casos, para cada i . Para fatorar a matriz, independente do método ser Doolittle ou Crout, pode-se usar o algoritmo geral:

Fatoração LU
Passo 1) Selecionar l_{11} e u_{11} tal que $l_{11}u_{11} = a_{11}$. Caso $l_{11}u_{11} = 0$, a fatoração é impossível;
Passo 2) Para $j = 2, \dots, n$, fazer
$u_{1j} = a_{1j}/l_{11}$ e $l_{j1} = a_{j1}/u_{11};$
Passo 3) Para $i = 2, \dots, n - 1$, fazer
Passo 3.1) Selecionar l_{11} e u_{11} tal que:
$l_{ii}u_{ii} = a_{ii} - \sum_{k=1}^{i-1} l_{ik}u_{ki}.$
Caso $l_{ii}u_{ii} = 0$, a fatoração é impossível;
Passo 3.2) Para $j = i + 1, \dots, n$, fazer
$u_{ij} = (a_{ij} - \sum_{k=1}^{i-1} l_{ik}u_{kj})/l_{ii} \quad \text{e} \quad l_{ji} = (a_{ji} - \sum_{k=1}^{i-1} l_{jk}u_{ki})/u_{ii};$
Passo 4) Selecionar l_{nn} e u_{nn} tal que:
$l_{nn}u_{nn} = a_{nn} - \sum_{k=1}^{n-1} l_{nk}u_{kn}.$
Caso $l_{nn}u_{nn} = 0$, a fatoração é possível, porém A é singular;
Passo 5) Saída de L e U .

Esta fatoração tem custo de $N^2(M - N/2)$ flops, para uma matriz $A \in \mathbb{R}^{M \times N}$, $M \geq N$. Após a fatoração, o sistema de equações $Aw = b$ se transforma em $Lw = b$ e para resolvê-lo, toma-se $Uw = x$, descobre-se x em $Lx = b$ e depois w . Para isso, faz-se o processo de *substituição progressiva*

$$x_1 = \frac{b_1}{l_{11}} \quad \text{e} \quad x_i = \frac{1}{l_{ii}} \left(b_i - \sum_{j=1}^{i-1} l_{ij}x_j \right), \quad \forall i = 2, 3, \dots, n.$$

Depois que x é descoberto, faz-se a *substituição regressiva*

$$w_n = \frac{x_n}{u_{nn}} \quad \text{e} \quad w_i = \frac{1}{u_{ii}} \left(b_i - \sum_{j=i+1}^n u_{ij}w_j \right), \quad \forall j = 2, 3, \dots, n.$$

Antes de introduzir teoremas importantes para o segmento do capítulo de desenvolvimento deste trabalho, no que ocupa a fatoração de matrizes, são necessárias ainda algumas definições, começando com a singularidade de matrizes:

Definição A.1. Uma matriz não invertível é chamada de *singular* e uma matriz invertível é chamada de *não singular*.

Às vezes, é preciso que linhas de uma matriz sejam reorganizadas para que os erros de arredondamento sejam controlados. Para tanto, é usada uma classe de matrizes de permutação.

Definição A.2. Uma matriz de permutação $P_{n,n} = [p_{ij}]$, é uma matriz identidade com linhas permutadas, por exemplo:

$$P = \begin{bmatrix} 0 & 0 & 1 \\ 0 & 1 & 0 \\ 1 & 0 & 0 \end{bmatrix}.$$

Agora, o teorema que garante a existência de uma fatoração LU , usando a notação de submatrizes $A_k := A(1:k, 1:k)$,

Teorema A.1. Existe uma única fatoração LU de $A \in \mathbb{R}^{n \times n}$ se e somente se as submatrizes A_k são não singulares para $k = 1, 2, \dots, n-1$. Se A_k é singular para alguns $1 \leq k \leq n-1$, então a fatoração pode existir, mas não será única.

Ou seja, que:

Teorema A.2. Se a eliminação de Gauss puder ser realizada no sistema linear $Ax = b$ sem pivotamento, então a matriz A pode ser fatorada no produto de matrizes triangulares inferior e superior, L e U , respectivamente; da forma que (com $m_{ji} = a_{ji}^{(i)} / a_{ii}^{(i)}$),

$$A = LU = \begin{bmatrix} 1 & 0 & 0 & \cdots & 0 \\ m_{21} & 1 & & & 0 \\ \vdots & & \ddots & & 0 \\ \vdots & & & \ddots & 0 \\ m_{N,1} & \cdots & 0 & m_{N,N-1} & 1 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} a_{11}^{(1)} & a_{12}^{(1)} & \cdots & \cdots & a_{1,N}^{(1)} \\ 0 & a_{22}^{(2)} & a_{23}^{(2)} & & \vdots \\ \vdots & & \ddots & & 0 \\ \vdots & & & \ddots & a_{N-1,N}^{(N-1)} \\ 0 & \cdots & 0 & 0 & a_{N,N}^{(N)} \end{bmatrix}.$$

Definição A.3. Diz-se que a matriz $A_{N,N}$ é *diagonal dominante por linhas* quando

$$|a_{ii}| \geq \sum_{j=1, j \neq i}^N |a_{ij}|, \forall i = 1, 2, \dots, N, \quad (\text{A.1})$$

e por colunas de forma similar. Também, ela é *estritamente diagonal dominante* quando a desigualdade for estrita para cada N .

O seguinte teorema garante a fatoração LU para matrizes:

Teorema A.3. Seja $A \in \mathbb{C}^{N \times N}$ não singular, se A é diagonal dominante por linhas e colunas, então A tem uma fatoração LU sem pivotamento.¹

A.2 Fatoração de Cholesky

Como, em geral, as matrizes usadas serão matrizes simétricas, segue que

Teorema A.4. Sendo A uma matriz simétrica: se a fatoração $LU = A$ é possível, então a escolha de $l_{kk} = u_{kk}$ implica em $l_{ik} = u_{ki}$, ou seja, $LL^t = A$.

Mais ainda,

Definição A.4. Uma matriz simétrica $A \in \mathbb{R}^{n \times n}$ é positiva definida se $x^t Ax > 0$ para todos os vetores não nulos $x \in \mathbb{R}$.

Teorema A.5. Se A é simétrica positiva definida, então A pode ser fatorada em $LL^t = A$.

Para tal, usa-se um algoritmo de fatoração de Cholesky

Fatoração de Cholesky

Passo 1) Fazer $l_{ii} = \sqrt{a_{ii}}$;

Passo 2) Para $j = 2, \dots, n$, fazer $l_{j1} = a_{j1}/l_{11}$;

Passo 3) Para $i = 2, \dots, n - 1$,

Passo 3.1) Fazer

$$l_{ii} = \sqrt{a_{ii} - \sum_{k=1}^{i-1} l_{ik}^2};$$

Passo 3.2) Para $j = i + 1, \dots, n$, fazer

$$l_{ji} = \sqrt{a_{ji} - \sum_{k=1}^{i-1} l_{jk} l_{ik}};$$

Passo 4) Fazer $l_{nn} = (a_{nn} - \sum_{k=1}^{n-1} l_{nk}^2)^{1/2}$;

Passo 5) Saída de L .

¹ Este teorema é uma versão condensada do teorema 9.9 em HIGHAM (2002, p. 172).

E tem um custo de $n^3/3 \text{ flops}$, menor que na fatoração LU . Pelo algoritmo de Cholesky usar raízes quadradas, geralmente se usa uma variação $A = LDL^t$, onde L é a matriz triangular inferior de diagonal igual a um e D uma matriz diagonal. O algoritmo é da forma

Fatoração LDL^t

Passo 1) Para $i = 1, \dots, n$,

Passo 1.1) Para $j = 1, \dots, i$, fazer $v_j = l_{ij}d_j$;

Passo 1.2) Fazer $d_i = a_{ii} - \sum_{k=1}^{i-1} l_{ik}v_k$;

Passo 1.3) Para $j = i + 1, \dots, n$, fazer

$$l_{ji} = \frac{a_{ji} - \sum_{k=1}^{i-1} l_{jk}v_k}{d_i};$$

Passo 2) Saída de L e D .

A.3 Fatoração LU em bloco

O que garante que a matriz possa ser fatorada em LU por blocos é o fato de que:

Teorema A.6. Caso as submatrizes diagonais principais

$$A^{(k)} \equiv \begin{bmatrix} A_1 & C_1 & & & \\ B_2 & A_2 & C_2 & & \\ & B_3 & A_3 & \ddots & \\ & & \ddots & \ddots & C_{k-1} \\ & & & B_k & A_k \end{bmatrix}, \quad k = 1, 2, \dots, n,$$

da matriz original sejam não singulares, então a fatoração em bloco pode ser realizada (isto é, A_i são não singulares).

O algoritmo original da fatoração LU em bloco, com a inversão da matriz \bar{A} e que leva à ordem de quantidades de operações $O(3NM^3)$, é

solução do sistema por fatoração LU em bloco original

Passo 1) Colocar $\bar{A}_1 = A_1$ e $\Gamma_1 = \bar{A}_1^{-1}C_1$;

Passo 2) Para $i = 2, 3, \dots, N$, calcular

$$\bar{A}_i = A_i - B_i\Gamma_{i-1}$$

Passo 3) Para $i = 2, 3, \dots, N - 1$, calcular

$$\Gamma_i = \bar{A}_i^{-1}C_i;$$

Passo 4) Calcular $\bar{A}_N = A_N - B_N\Gamma_{N-1}$;

Passo 5) Pensando em $Lz = d$, colocar $z^{(1)} = \bar{A}_1^{-1}d^{(1)}$ e, para $i = 2, 3, \dots, N$,

$$z^{(i)} = \bar{A}_i^{-1}(d^{(i)} - B_i w^{(i-1)});$$

Passo 6) Calcular, com $w^{(N)} = z^{(N)}$, para $i = N-1, N-2, \dots, 1$,

$$w^{(i)} = z^{(i)} - \Gamma_i w^{(i+1)};$$

Passo 7) Saída: As aproximações w_i para $i = 1, \dots, N$.

APÊNDICE B – NOTAS SOBRE A GERAÇÃO DE CAMPOS DE PERMEABILIDADES HETEROGÊNEOS

Este apêndice baseia-se na leitura do artigo (GLIMM *et al.*, 1993), que está fora do escopo deste trabalho, dado que tem como referências conteúdos de análise funcional, processos estocásticos e geoestatística. Porém, como é importante para a geração de campos de permeabilidade heterogêneos e é citado no livro (SOUSA; ROCHA, 2022), será desenvolvido, assim como possível, nesta seção. Pode-se usar como referências adicionais os livros (GELFAND; VILENKO, 1964), (ADLER; TAYLOR, 2007) e (CHILÈS Jean-Paul e DELFINER, 1999).

A incerteza é uma característica essencial ao fluxo em meios porosos, haja vista que a permeabilidade, porosidade e fatores de atraso são altamente variáveis. É possível modelar, tendo como base o artigo (GLIMM *et al.*, 1993), a incerteza dessas propriedades geológicas como um campo aleatório $\xi(x)$.

Considera-se que esse campo é estacionário, onde suas propriedades estatísticas são invariantes à translação, com média $\bar{\xi}$ independente de $x \in \mathbb{R}^d$ e covariância $\langle \xi(x)\xi(y) \rangle = g(x - y)$, dependendo somente da variável de diferença $x - y$. Esse campo será *isotrópico* e invariante à translação se a covariância (e todos os seus momentos de maior ordem) dependerem somente do tamanho euclidiano de $|x - y|$

Pensando na computação deste campo, ξ é definido em uma malha de pontos discretos $i \in \epsilon\mathbb{Z}^d$ que aproxima \mathbb{R}^d , de espaçamento ϵ . Por exemplo, para o caso unidimensional ($d = 1$) com um espaçamento $\epsilon = .25$, pode-se ver uma seção dos pontos da malha de $.25\mathbb{Z} \cap [-2, 2]$ é:

$$.25\mathbb{Z} \cap [0, 1] = \{0.0, 0.25, 0.50, 0.75, 1.0\}.$$

Dessa forma, primeiro toma-se variáveis aleatórias Gaussianas independentes $\eta(i)$ de média zero e covariância $\langle \eta(i)^2 \rangle = \epsilon^d$, e então com elas é possível formar uma integral de convolução discreta com limite contínuo

$$\xi(x) = \int f(x - y)\eta(y) dy. \quad (\text{B.1})$$

Logo, o campo ξ é Gaussiano, com covariância

$$g(x) = \int f(x - y)f(-y) dy \equiv f * f^\vee(x), \quad (\text{B.2})$$

onde $f^\vee(x) = f(-x)$.

Esta covariância g será sempre positiva definida e sempre tem uma convolução de raiz quadrada f (por ξ ser um campo estacionário aleatório). Como o artigo se debruça sobre leis de escala,

$$f(x) = b'r^{-\beta-d/2},$$

em que β é um expoente de escala assintótico. A função de covariância¹ para a permeabilidade $\log \xi(x)$ é da forma

$$\langle \xi(x)\xi(y) \rangle = b|x - y|^{-\beta}, \quad (\text{B.3})$$

em que b e β são funções de $r = |x - y|$ que variam lentamente. Caso b e β sejam independentes de r , o que é o caso tratado aqui, então a covariância é *auto-semelhante* ou *fractal*².

Este método de construção de campos aleatórios é computacionalmente intenso, e pode ser mitigado com paralelização (já que os valores $\xi(x)$ são obtidos independentemente e os campos de ruído $\eta(x)$ podem ser armazenados ou recalculados) ou com métodos para tratar a longa calda da integral de convolução em (B.1).

A permeabilidade é geralmente descrita como uma variável log-normal

$$K(x) = e^{\xi(x)} \quad (\text{B.4})$$

para um campo de permeabilidades escalares $K(x)$. Ademais, restringe-se o problema a

$$K = K_0 e^{\xi(x)} = K_0 e^{\xi'(y)}, \quad (\text{B.5})$$

onde K_0 é um tensor constante e ξ' é um escalar Gaussianamente distribuído e estatisticamente isotrópico como a função $y = \Lambda^{-1}x$.

A geologia de um local é, geralmente, parcialmente conhecida, portanto variáveis aleatórias sem restrições é inapropriado. No caso de restrições lineares, ou conhecimento parcial de ξ , a separação $\xi = \xi_d + \xi_r$ em uma soma de um campo determinístico (ou restrito) ξ_d com um campo aleatório ξ_r , que é dado pelo método de Krigagem (ver o capítulo 3 de (CHILÈS Jean-Paul e DELFINER, 1999)).

¹ No artigo, os termos, mesmo que tecnicamente diferentes, são usados de forma intercambiável, pois, no contexto de campos gaussianos estacionários de média 0, também aliado ao fato que neste artigo σ^2 é constante Vale lembrar que a correlação é a covariância de duas variáveis dividida pelo produto de seus desvios padrões.

² Auto-semelhança é uma característica de um objeto que é exatamente ou aproximadamente similar a uma parte de si mesmo, como a orla de continentes ou o conjunto de Mandelbrot.

APÊNDICE C – NOTAS SOBRE O MÉTODO DE VOLUMES FINITOS

Considerando um problema unidimensional com contorno Dirichlet homogêneo, uma função $f : (0, 1) \mapsto \mathbb{R}$ da forma que

$$\begin{cases} -\nabla(\nabla u) = f(x) & x \in (0, 1) \\ u(0) = 0 \\ u(1) = 0 \end{cases}. \quad (\text{C.1})$$

Se $f \in C([0, 1], \mathbb{R})$, existe uma única solução $u \in C^2([0, 1], \mathbb{R})$ para (C.1). Para computar uma aproximação numérica para a solução, segue a definição de uma malha admissível:

Definição C.1. Uma malha unidimensional admissível de $(0, 1)$ é dada pelas famílias $(K_i)_{i=1,\dots,N}$, $N \in \mathbb{N}^*$, tal que $K_i = (x_{i-1/2}, x_{i+1/2})$, e $(x_i)_{i=0,\dots,N+1}$ da forma que

$$x_0 = x_{1/2} = 0 < x_1 < x_{3/2} < \dots < x_{i-1/2} < x_i < x_{i+1/2} < \dots < x_N < 1 = x_{N+1/2} = x_{N+1}.$$

Colocando $h_i = x_{i+1/2} - x_{i-1/2}$ para $i = 1, \dots, N$ e então $\sum_{i=1}^N h_i = 1$, $h_i^- = x_i - x_{i-1/2}$, $h_i^+ = x_{i+1/2} - x_i$ para $i = 1, \dots, N$, $h_{i+1/2} = x_{i+1} - x_i$ para $i = 0, \dots, N$ e $h = \max \{h_i, i = 1, \dots, N\}$.

Levando as condições de contorno em consideração e colocando

$$f_i = \frac{1}{h_i} \int_{K_i} f(x) dx \quad \forall i = 1, \dots, N,$$

o esquema de volumes finitos para (C.1) é escrito como

$$\begin{aligned} F_{i+1/2} - F_{i-1/2} &= h_i f_i & \forall i = 1, \dots, N, \\ F_{i+1/2} &= -\frac{u_{i+1} - u_i}{h_{i+1/2}} & \forall i = 0, \dots, N, \end{aligned} \quad (\text{C.2})$$

com, especialmente, $u_0 = u_{N+1} = 0$. Agora, um teorema para uma estimativa de erro para o problema simples (C.1)

Teorema C.1. Seja $f \in C([0, 1], \mathbb{R})$ e $u \in C^2([0, 1], \mathbb{R})$ uma solução única para o problema (C.1). Dada uma malha admissível (no sentido da definição C.1), então existe um vetor único $U = (u_1, \dots, u_N)^t \in \mathbb{R}^N$ solução para (C.2) e existe $T \geq 0$, somente dependendo de u , tal que

$$\sum_{i=0}^N \frac{(e_{i+1} - e_i)^2}{h_{i+1/2}} \leq T^2 h^2 \quad (\text{C.3})$$

e

$$|e_i| \leq Th, \quad \forall i = 1, \dots, N, \quad (\text{C.4})$$

com $e_0 = e_{N+1} = 0$ e $e_i = u(x_i) - u_i$ para todo $i = 1, \dots, N$.