

**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	<p>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. 80 p. : il. (algumas color.) ; 30 cm.</p> <p>Monografia (Graduação em Ciência da Computação) – Faculdade de Filosofia, Ciências e Letras de Ribeirão Preto, Universidade de São Paulo, 2025.</p> <p>1. Métodos Numéricos. 2. Meios Porosos. 3. Lei de Darcy. 4. Volumes Finitos. 5. Equações Diferenciais Parciais. 6. Escoamento Mono-fásico. 7. Transporte de Contaminantes. 8. Simulação Computacional.</p> <p>I. Chemetov, Nikolai Vasilievich. II. Estudo Numérico de Equações em Meios Porosos.</p>
-------	---

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.

AGRADECIMENTOS

A universidade teria sido um moroso tédio, temperado com dificuldades mil, caso não tivesse encontrado aqui minha família, que, pelas conversas de corredor, pelos passeios até o bandejão, ou pelas intensas discussões, puderam me mostrar um caminho mais ameno. Gostaria de, primeiramente, agradecer aos meus queridíssimos amigos Ana Júlia Ticianeli, Eduardo Campos e João Vitor Lopes, que me acompanharam desde as primeiras semanas até este final, que ofereceram alento nos momentos mais árduos e celebraram minhas festas aos mais extensos risos. Nossa quarteto tornou-se minha casa nesta cidade tão nova. Além, gostaria de agradecer a tantos primos que pude colecionar, aos meus amigos Sávio Guilherme, Letícia Landim, Edmara Viana, Maria José Ayala; aos meus camaradas do Centro Estudantil da Computação, da Representação Discente, à minha família Amendoiim; e por fim, às amigas e professoras do circo e do ballet.

Meus recessos, pude me aconchegar em Brasília acompanhado de um grupo tão meigo, que a distância somente enraizou mais nossos laços. Meus amigos do peito sanguíneo, os mais amados e guardados *ad infinitum* no átrio, aos meus irmãos Eduarda Souza, Felipe Cabral, João Luiz Matos, Andrey Fujikawa, Enzo Candeias, Meireles Amancio, Charles Mariano, Nathalia Oliveira e tantos, tantos e mais tantos outros que pude acolher tão docemente. Aos meus amigos mais distantes, minha irmã Maria Beatriz de Crasto em Pernambuco e minha querida amiga Mariana Rocha em Portugal, das quais me orgulho tão demasiadamente. Por fim, sou profundamente grato à plethora de professores do meu Ensino Médio, mas especialmente ao matemático Eliomar Caetano, à artista e tatuadora Isabela Alves e à historiadora Danielle Magalhôes, que me orientaram nos tão incômodos meandros da puerilidade.

A graça de poder somente me dedicar aos estudos, pude somente dado aos esforços integrais de meus queridos pais, o grande engenheiro João Batista Rodrigues e a incrível artista plástica Cybele Casellato, assim como do apoio de minha irmã caçula Luiza Casellato. Minha família nuclear foi minha base fundamental, pois me assegurou o que muito é estruturalmente furtado da realidade de grande parte dos brasileiros: desde o tempo para estudar até os recursos para me deslocar de Brasília a Ribeirão, ou morar com grande qualidade de vida. Todos os meus períodos de paz ou de turbulência foram carinhosamente agasalhados por minha formidável psicóloga Mônica Bueno, cuja inteligência foi imprescindível para meu esqueleto psíquico. Ainda por cima, gostaria de agradecer aos meus tios-avós Marta Cazelato e Manoel Pires, além de minhas queridíssimas primas Manuela, Giovanna e Amanda, as memórias que tenho de vocês serão sempre as mais divertidas.

Por último, gostaria de demonstrar minha profunda gratidão por meus antigos orientadores Tiago de Carvalho e Hermano Neto, e meu atual orientador Nikolai Chemetov, por toda a confiança, todos os conselhos e todas as centenas de oportunidades que pude aproveitar. Ademais, gostaria de agradecer a todos os professores e os funcionários do Departamento de Computação e Matemática da Faculdade, especialmente aos professores Vanessa Rolnik, Katia de Azevedo,

Joaquim Felipe, Renato Tinós e Clever Ricardo, que foram responsáveis por endireitar meu caminho dentro da universidade.

Meu trajeto foi recheado pela sorte que tive ao encontrar tantas pessoas, tantos colegas, tantos amigos, que o acaso gentilmente me apresentou. Serei, por isso, eternamente grato.

*“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. **Estudo Numérico de Equações em Meios Porosos.** 2025. 80 p. Monografia (Trabalho de Conclusão de Curso) - Faculdade de Filosofia, Ciências e Letras de Ribeirão Preto, Universidade de São Paulo, Ribeirão Preto, 2025.

Esta monografia apresenta um estudo numérico de equações diferenciais parciais elípticas e hiperbólicas, no contexto de escoamentos monofásicos em meios porosos e transporte de contaminantes. Foram implementados e analisados métodos de diferenças finitas, mas principalmente de volumes finitos, a fim de resolver os problemas de valores de contorno e de escoamento, unidimensionais e bidimensionais; com meios homogêneos e heterogêneos. A abordagem incluiu a discretização conservativa da equação de pressão e da equação de transporte, explorando diversas técnicas de fatorações matriciais e esquemas *upwind* para aproximação de fluxos. Os resultados numéricos demonstram a eficácia dos métodos na simulação de campos de pressão e na propagação de contaminantes, com erros de truncamento da ordem de $O(h^2)$ e conformidade com a condição CFL. Conclui-se que as técnicas numéricas aplicadas são robustas e adequadas para modelagem computacional em meios porosos, oferecendo bases para estudos mais complexos, como escoamentos multifásicos e acoplamento hidromecânico.

Palavras-chave: Métodos Numéricos. Meios Porosos. Lei de Darcy. Volumes Finitos. Equações Diferenciais Parciais. Escoamento Monofásico. Transporte de Contaminantes. Simulação Computacional.

ABSTRACT

COSTA, H. C. V. R. **Numerical Study of Porous Media Equations.** 2025. 80 p. Monograph (Conclusion Course Paper) - Faculdade de Filosofia, Ciências e Letras de Ribeirão Preto, Universidade de São Paulo, Ribeirão Preto, 2025.

This monograph presents a numerical study of elliptic and hyperbolic partial differential equations in the context of single-phase flow in porous media and contaminant transport. Finite difference methods were implemented and analyzed, but the main focus was on finite volume methods, in order to solve one- and two-dimensional boundary value and flow problems, considering both homogeneous and heterogeneous media. The approach included the conservative discretization of the pressure equation and the transport equation, exploring various matrix factorization techniques and *upwind* schemes for flux approximation. The numerical results demonstrate the effectiveness of the methods in simulating pressure fields and contaminant propagation, with truncation errors on the order of $O(h^2)$ and compliance with the CFL condition. It is concluded that the applied numerical techniques are robust and suitable for computational modeling in porous media, providing a foundation for more complex studies, such as multiphase flow and hydro-mechanical coupling.

Keywords: Numerical Methods. Porous Media. Darcy's Law. Finite Volumes. Partial Differential Equations. Single-Phase Flow. Contaminant Transport. Computational Simulation.

LISTA DE FIGURAS

Figura 1 – Malha uniforme no intervalo $[0, 1]$.	28
Figura 2 – Comparação y_i e w_i para o exemplo 2.2.1.	32
Figura 3 – Simplificação da vibração de uma corda em um berimbau.	36
Figura 4 – Exemplificação de tipos de contorno.	37
Figura 5 – Visualização do intervalo I com discretização no centro da célula e contorno de Neumann.	39
Figura 6 – Intervalo I com discretização no centro da célula, contorno de Dirichlet à esquerda usando célula fantasma.	40
Figura 7 – Intervalo I com discretização no centro da célula, contorno de Dirichlet à esquerda usando meia célula.	40
Figura 8 – Esquema de volumes finitos unidimensional.	41
Figura 9 – Solução por diferentes métodos de fatoração (Crout e LDL^t)	45
Figura 10 – Solução pelo método de fatoração de Crout	46
Figura 11 – Componentes norte, sul, leste e oeste em $\partial V_{i,j}$.	46
Figura 12 – Exemplo de ordenação das células computacionais para um problema bidimensional.	49
Figura 13 – Campo de pressões e vetores dos exemplos.	52
Figura 14 – Diferentes curvas características.	54
Figura 15 – Uma discretização de volumes finitos para leis de conservação hiperbólicas.	55
Figura 16 – Propagação da informação de t^n para t^{n+1} .	58
Figura 17 – Gráfico de concentrações em quatro tempos diferentes.	58
Figura 18 – Campo de pressões e velocidades.	59
Figura 19 – Gráfico de concentrações em quatro tempos diferentes.	59
Figura 20 – Campo de pressões e velocidades de 2.8.3.	61
Figura 21 – Gráficos de concentrações de 2.8.3.	62
Figura 22 – Gráficos de permeabilidade e de pressão com velocidades não normalizadas	63
Figura 23 – Gráficos de concentrações de 2.8.4.	63
Figura 24 – Gráficos de permeabilidade e de pressão com velocidades normalizadas	64
Figura 25 – Gráficos de concentrações de 2.8.5.	64
Figura 26 – Gráficos de permeabilidade e de pressão com velocidades normalizadas.	65
Figura 27 – Gráficos de concentrações de 2.8.6.	65

LISTA DE TABELAS

Tabela 1 – Tempos médios de métodos de fatoração diferentes para o problema unidimensional.	45
---	----

LISTA DE ABREVIATURAS E SIGLAS

EDO	Equação Diferencial Ordinária
EDP	Equação Diferencial Parcial
CFL	Courant-Friedrichs-Lowy
SPE	Society of Petroleum Engineers (Sociedade dos Engenheiros de Petróleo)
REV	Representative Elementary Volumes (Volumes Elementares Representativos)

LISTA DE SÍMBOLOS

ϕ	Porosidade do meio (poroso)
K	Permeabilidade absoluta (escalar ou tensor)
ρ	Massa específica (densidade) do fluido
μ	Viscosidade dinâmica do fluido
p	Pressão do fluido
u	Velocidade de Darcy
n	Vetor normal unitário
c	Concentração de um contaminante/traçador
q	Termo fonte/sumidouro (vazão por volume)
h	Passo espacial (tamanho da célula da malha)
Δt	Passo temporal
c_t	Compressibilidade total
c_r	Compressibilidade da rocha
c_f	Compressibilidade do fluido
Ω	Domínio de estudo
$\partial\Omega$	Contorno (fronteira) do domínio
$O(\cdot)$	Ordem de grandeza (notação Big O)
ν	Número de Courant (CFL)

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 Compressibilidade	33
	2.3.3 Lei de Darcy	33
	2.3.4 Viscosidade	34
	2.3.5 Volumes elementares representativos	34
	2.4 Modelagem de escoamentos monofásicos	34
	2.4.1 Condições auxiliares	35
	2.4.2 Meios homogêneos e heterogêneos	37
	2.5 Uma breve introdução ao método de volumes finitos	38
	2.6 Método de volumes finitos para equações elípticas	39
	2.6.1 Malha centrada em células	39
	2.6.2 Caso unidimensional	40
	2.6.2.1 Implementação	42
	2.6.3 Caso bidimensional	46
	2.6.3.1 Condição de contorno de Neumann	47
	2.6.3.2 Condição de contorno de Dirichlet	48
	2.6.3.3 Implementação	49
	2.7 Introdução a problemas de transporte passivo em meios porosos	52
	2.7.1 Derivação de leis de conservação hiperbólicas	53
	2.7.2 Equação de transporte linear	53
	2.8 Método de volumes finitos para equações hiperbólicas	54
	2.8.1 Método upwind para aproximação de fluxos discretos em uma dimensão	55
	2.8.1.1 Caso de coeficientes constantes	56
	2.8.1.2 Caso de coeficientes variáveis	56
	2.8.1.3 Condição CFL	57

2.8.1.4 Exemplos do caso unidimensional	58
2.8.2 Método upwind para aproximação de fluxos discretos em duas dimensões	60
2.8.2.1 Exemplos do caso bidimensional	61
3 CONCLUSÃO	67
REFERÊNCIAS	69
APÊNDICES	71
APÊNDICE A – NOTAS SOBRE FATORAÇÃO DE MATRIZES . . .	73
A.1 Fatoração LU	73
A.2 Fatoração de Cholesky	75
A.3 Fatoração LU tridiagonal em bloco	77
APÊNDICE B – NOTAS SOBRE O MÉTODO DE VOLUMES FINITOS	79

1 INTRODUÇÃO

Um meio poroso é um material caracterizado por sua habilidade de armazenar fluidos, sendo encontrado em diversos contextos, como em rochas sedimentares para extração de petróleo, aquíferos subterrâneos, tecidos biológicos, células de combustível, entre outros. A simulação de meios porosos – em aquíferos, por exemplo – requer um entendimento tanto da geologia do terreno como da hidráulica desse fluxo, assim como do controle de métodos numéricos capazes de estimar as soluções das equações que governam o meio.

No contexto do transporte de contaminantes (ou poluentes) em um aquífero, muitas vezes as descrições do regime de fluxo de água, que são adequadas para responder as questões hidráulicas, podem não ter a resolução necessária para corroborar na análise deste transporte. Dessa forma, as simulações numéricas podem integrar, pelo menos de forma aproximada, os vários efeitos de diversos processos químicos, físicos e de escoamento do fluxo. Indagações quanto à concentração de um contaminante em certo local, quando certa concentração será atingida em um ponto, ou ainda se certo projeto corretivo atingirá a redução necessária de concentração em certo tempo são colocadas de forma quantitativa, onde o raciocínio qualitativo, somente, não poderia responder.

Mesmo assim, o uso mais importante de simulações não está em seu poderio preditivo de cálculo, mas no processo investigativo em si. Idealmente, o estudo de transporte de contaminantes deveria representar o esforço contínuo para identificar os processos controladores de todos os tipos e suas interações, e então sintetizá-los em um modelo conceitual. A simulação numérica, portanto, dá a oportunidade de lançar à prova este modelo em termos quantitativos, testando sua consistência com as hipóteses teóricas e os dados observados. Em suma, simulações computacionais são instrumentos para entender estes processos, assim complementando as observações de campo, testes em laboratórios e modelos analíticos (TSANG; ZHENG; BODVARSSON, 2005).

Dante desse cenário, este trabalho de conclusão de curso pretende introduzir os conceitos, as teorias e as aplicações deste campo de pesquisa, atendo-se à leitura do material teórico sobre *Métodos Numéricos para Equações Diferenciais* e suas aplicações no contexto de *Meios Porosos e Mecânica dos Fluidos Computacional*. Em específico, serão estudados métodos para simulações numéricas com equações elípticas e hiperbólicas.

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. Os códigos usados neste trabalho podem ser acessados em: https://github.com/hcasellato/tcc_code.

2 DESENVOLVIMENTO

O desenvolvimento deste trabalho 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), (THOMAS, 1995) e (STRAUSS, 2008).

A segunda e terceira fases terão 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), e as notas de texto de (Mishra; Fjordholm; Abgrall, 2017). Por fim, o trabalho pretende se debruçar, como aplicação final, sobre a simulação de problemas de transporte passivo em meios porosos.

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 tendo $y = y(x)$:

$$\frac{d^2y}{dx^2} - \frac{dy}{dx} + 6y = 0. \quad (2.1.1)$$

Há também 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 (tendo $u = u(x, y)$)

$$\frac{\partial u}{\partial y} = -\frac{\partial u}{\partial x}. \quad (2.1.2)$$

2.1.1 Detalhes para Equações Diferenciais Ordinárias

Para ambos os tipos de equações diferenciais, a *ordem* da equação diferencial é justamente a ordem da maior derivada, por exemplo a seguinte equação diferencial

$$\frac{d^2y}{dx^2} + 5\frac{dy}{dx} - 4y = e^x \quad (2.1.3)$$

é de segunda ordem. Para facilitar a representação de uma equação diferencial ordinária de enésima ordem em uma variável dependente, é introduzida uma notação com símbolos na forma geral:

$$F(x, y, y', \dots, y^{(n)}) = 0, \quad (2.1.4)$$

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

$$\frac{d^n y}{dx^n} = f(x, y, y', \dots, y^{(n-1)}), \quad (2.1.5)$$

onde, por exemplo, a forma normal da equação $4xy' + y = x$ é $y' = (x - y)/4x$. Dada essa explicação, quanto à *linearidade*, uma equação de enésima ordem é dita *linear* quando F é linear em $y, y', \dots, y^{(n)}$, ou seja, a EDO de enésima ordem quando (2.1.4) é

$$a_n(x) \frac{d^n y}{dx^n} + a_{n-1}(x) \frac{d^{n-1} y}{dx^{n-1}} + \dots + a_1(x) \frac{dy}{dx} + a_0(x)y = g(x). \quad (2.1.6)$$

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

$$\frac{d^2 y}{dx^2} + \sin y = 0. \quad (2.1.7)$$

2.1.2 Detalhes para Equações Diferenciais Parciais

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

$$Au_{xx} + 2Bu_{xy} + Cu_{yy} + Du_x + Eu_y + Fu = 0, \quad (2.1.8)$$

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

Teorema 2.1.1. (STRAUSS, 2008, pp. 28-29) A equação (2.1.8) de variáveis independentes, pode ser reduzida a uma das três seguintes formas:

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

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

(onde \dots denota os termos de ordem 1 ou 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 surge 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 equação hiperbólica.

2.2 Problemas de Valores de Contorno

Quando se tem uma equação linear de ordem maior que um, em que as variáveis dependentes y , ou suas derivadas, são especificadas em pontos diferentes, têm-se um *problema de valores de contorno*, tal qual

$$\begin{cases} a_2(x) \frac{d^2 y}{dx^2} + a_1(x) \frac{dy}{dx} + a_0(x)y = g(x) \\ y(a) = y_0 \\ y(b) = y_1 \end{cases} \quad (2.2.1)$$

com $y = y(x)$, 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

$$\begin{cases} y'' = f(x, y, y'), \quad \text{para } x \in [a, b] \\ y(a) = \alpha \\ y(b) = \beta \end{cases} \quad (2.2.2)$$

em que suas soluções analíticas não serão o foco, 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 2.2.1. (BURDEN; FAIRES; BURDEN, 2016, p. 752) *Supondo uma função f no problema de contorno*

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

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

ii. existir uma constante M tal que

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

então o problema de contorno tem uma solução única.

Por exemplo, o problema

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

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 tem equação diferencial linear, o teorema 2.2.1 pode ser simplificado para:

Corolário 2.2.2. (BURDEN; FAIRES; BURDEN, 2016, p. 735) *Supondo o problema de contorno linear*

$$y'' = p(x)y' + q(x)y + r(x), \quad \text{para } x \in [a, b], \text{ com } y(a) = \alpha \text{ e } y(b) = \beta, \quad (2.2.3)$$

que satisfaça

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

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

Então, o problema de contorno tem solução única.

2.2.1 Método das diferenças finitas para problemas lineares

Para ilustrar como é o funcionamento do *método de diferenças finitas*, 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

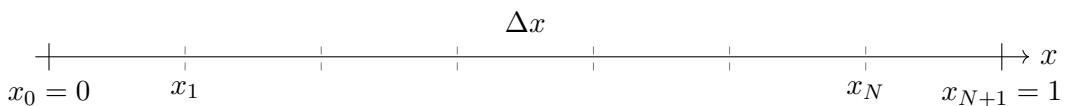


Figura 1 – Malha uniforme no intervalo $[0, 1]$.

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

$$y'(x) = \lim_{\Delta x \rightarrow 0} \frac{y(x + \Delta x) - y(x)}{\Delta x}, \quad (2.2.4)$$

é uma aproximação razoável, a expressão

$$y'(x_k) \approx \frac{y(x_{k+1}) - y(x_{k-1})}{2\Delta x}, \quad (2.2.5)$$

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

$$y''(x_k) \approx \frac{y(x_{k+1}) - 2y(x_k) + y(x_{k-1})}{\Delta x^2}. \quad (2.2.6)$$

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

$$\begin{aligned} y'(x_k) &= \frac{y(x_{k+1}) - y(x_{k-1})}{2\Delta x} + O(\Delta x^2) \\ y''(x_k) &= \frac{y(x_{k+1}) - 2y(x_k) + y(x_{k-1})}{\Delta x^2} + O(\Delta x^2), \end{aligned}$$

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

Definição 2.2.1. 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, considerando $w_i = y(x_i)$,

$$\frac{-w_{i+1} + 2w_i - w_{i-1}}{h^2} + p(x_i) \frac{w_{i+1} - w_{i-1}}{2h} + q(x_i)w_i = -r(x_i) \quad \forall i \in \{1, 2, \dots, N\}. \quad (2.2.7)$$

Esta equação (2.2.7) 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 esta pode ser expressa 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 2.2.3. (BURDEN; FAIRES; BURDEN, 2016, p. 769) *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 $L = \max_{a \leq x \leq b} |p(x)|$.*

Para garantir que o erro de truncamento seja de ordem $O(h^2)$, é preciso assegurar que $y^{(4)}$ é contínua em $[a, b]$. Nota-se que, apesar das hipóteses do teorema 2.2.3 garantirem uma solução única para o problema de contorno (2.2.3), este não garante que $y \in C^4[a, b]$.

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, onde a diagonal de L é igual a 1), da forma que $Aw = LUw = b$, então

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

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 (2.2.3):

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 (chamado de 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 2.2.1. 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 $y = y(x)$, $N = 19$ e, portanto, $h = 0,01$. Também, 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

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

O método de fatoração de Crout para matrizes tridiagonais aproxima a solução com erro médio de $0,6809 \times 10^{-5}$. A comparação entre a solução exata e a solução do algoritmo pode ser visualizada pelo gráfico:

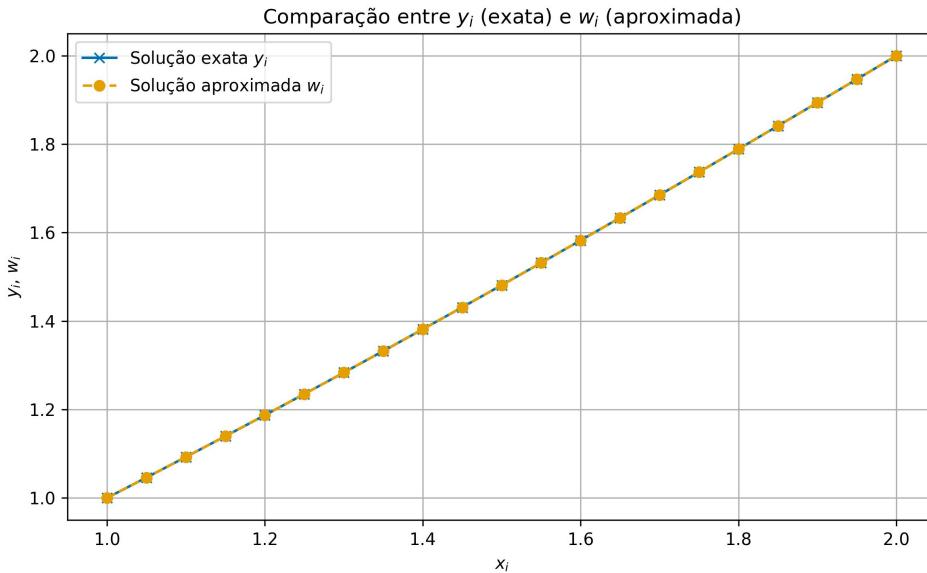


Figura 2 – Comparaçāo y_i e w_i para o exemplo 2.2.1.

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 por eles.

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, o arenito e calcário possuem porosidade entre 0.05 e 0.5.

Um meio *incompressível* tem porosidade estática, enquanto que os *compressíveis* têm porosidade dinâmica. Tomando o caso compressível, no contexto de rochas em reservatórios, a porosidade delas depende da pressão p do reservatório devido à compressibilidade c_r :

$$c_r = \frac{1}{\phi} \frac{d\phi}{dp} = \frac{d \ln \phi}{dp}. \quad (2.3.1)$$

Considerando c_r constante e integrando a equação (2.3.1):

$$\phi(p) = \phi_0 e^{c_r(p-p_0)}, \quad (2.3.2)$$

onde p_0 é a pressão de referência quando ϕ_0 . Normalmente, assume-se uma aproximação linear e usando expansão em séries de Taylor, é possível aproximar $\phi(p)$ por:

$$\phi(p) \approx \phi_0(1 + c_r(p - p_0)). \quad (2.3.3)$$

A *permeabilidade* K representa a habilidade do meio poroso em transmitir um fluido 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 Compressibilidade

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

$$c_f = \frac{1}{V} \frac{dV}{dp} \Big|_T = \frac{1}{\rho} \frac{\partial \rho}{\partial p} \Big|_T, \quad (2.3.4)$$

onde pela mesma lógica usada para c_r , obtém-se

$$\rho \approx \rho_0(1 + c_f(p - p_0)). \quad (2.3.5)$$

2.3.3 Lei de Darcy

Para entender a *Lei de Darcy*, imagina-se um filtro vertical de areia preenchido com água, de largura A e altura L , sendo as taxas de fluxo de entrada e saída iguais e os parâmetros hidráulicos medidos com manômetros de coluna de mercúrio. Sua *altura hidráulica* h (com h_t no topo e h_b na base) em relação a um ponto fixo z dada por

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

onde g é a magnitude da aceleração da gravidade, p é a pressão de água e ρ é a massa específica da água. A taxa de fluxo Q pode ser equacionada por

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

onde \check{e} é o vetor direção do escoamento e k a condutividade hidráulica, que (nesse contexto) é dada por

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

sendo 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:

$$u = \frac{Q}{A} = \mathbf{k} \frac{h_t - h_b}{L} \check{e} = \frac{\rho g K}{\mu} \nabla h = \frac{\rho g K}{\mu} \nabla \left(-\frac{p}{\rho g} + z \right) = -\frac{K}{\mu} (\nabla p - \rho g \nabla z), \quad (2.3.6)$$

sendo z a profundidade. Esta equação (2.3.6) 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.

2.3.4 Viscosidade

A *viscosidade* é a medida da resistência de um fluido ao próprio escoamento. Os gases, que possuem moléculas distanciadas, apresentam baixa resistência ao escoamento e portanto, baixa viscosidade. Por outro lado, fluidos mais densos apresentam alta resistência ao escoamento, e consequentemente alta viscosidade. Ainda, é possível medir a variação da viscosidade em relação à pressão do reservatório, considerando o efeito da pressão nas massas específicas dos fluidos.

Como este trabalho se propõe a estudar o caso de escoamentos incompressíveis (como a água), conforme será visto logo mais, vale notar que neste caso a viscosidade não varia quando a pressão aumenta, o que não ocorre nos compressíveis (como o gás). Já no caso do óleo, a variação da viscosidade ocorre, pois o óleo pode transferir parte de sua massa para a forma de gás, porém como não faz parte do escopo deste trabalho, não será elucidado.

2.3.5 Volumes elementares representativos

Os Volumes Elementares Representativos, do inglês *Representative Elementary Volumes* (REVs), são os menores volumes sobre os quais uma medida pode ser feita para representar o todo. Tais volumes encontram-se entre a escala dos poros da rocha (de 10^{-6} à 10^{-3} metros) e a *escala de Darcy* (tipicamente entre 10^{-2} e 10^1 metros). Isso significa que o tamanho de um REV varia entre milímetros cúbicos e centímetros cúbicos.

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:

$$\frac{\partial}{\partial t} \int_V \phi \rho \, dx + \int_{\partial V} \rho (u \cdot n) \, ds = \int_V q \, dx. \quad (2.4.1)$$

Aplicando-se o teorema da divergência²,

$$\frac{\partial}{\partial t} \int_V \phi \rho \, dx + \int_V \nabla \cdot (\rho u) \, dx = \int_V q \, dx \quad (2.4.2)$$

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

$$\int_V \left(\frac{\partial}{\partial t} (\phi \rho) + \nabla \cdot (\rho u) \right) = \int_V q \, dx. \quad (2.4.3)$$

Como a equação (2.4.3) vale para qualquer volume elementar V , obtém-se a EDP

$$\frac{\partial}{\partial t} (\phi \rho) + \nabla \cdot (\rho u) = q. \quad (2.4.4)$$

Utilizando a Lei de Darcy em (2.4.4) e desenvolvendo-a, obtém-se a equação diferencial parcial de incógnitas p e ρ :

$$\rho \phi c_t \frac{\partial p}{\partial t} - \nabla \cdot \left(\frac{\rho K}{\mu} (\nabla p - \rho g \nabla z) \right) = q, \quad (2.4.5)$$

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. Com isso, ρ e ϕ são independentes de p e, portanto, $c_t = 0$. A equação (2.4.5) torna-se uma equação elíptica com coeficientes variáveis:

$$-\nabla \cdot \left(\frac{\rho K}{\mu} (\nabla p - \rho g \nabla z) \right) = q. \quad (2.4.6)$$

2.4.1 Condições auxiliares

Além das equações que, de fato, modelam escoamentos monofásicos, faz-se necessário ainda condições de contorno. Estas condições podem ser classificadas principalmente em três tipos:

- i. *Dirichlet*, onde se dá pressão $p(x)$;
- ii. *Neumann*, onde o fluxo $\nabla u \cdot n$ é dado; e
- iii. *Robin* ou mista, onde é especificado $\alpha u + \beta(\nabla u \cdot n)$;

onde u é uma função escalar, como por exemplo a temperatura. 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 2.4.1 (Dirichlet). Em um berimbau, instrumento de percussão com origem angolana e muito tradicional na cultura afro-brasileira da capoeira, o som é produzido ao percutir uma corda fixa nas duas extremidades de uma vara de madeira (ou verga). Portanto, toma-se 0 e l como extremidades dessa corda, com a percussão simplificada no desenho abaixo:

² 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 .

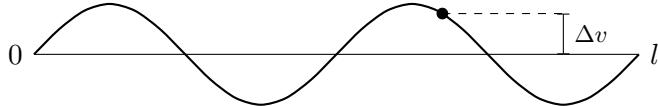


Figura 3 – Simplificação da vibração de uma corda em um berimbau.

Se for considerado $v = v(x, t)$ a distância da corda com o eixo central em uma posição de $x \in (0, l)$ em um determinado tempo t , é possível interpretar que há uma condição de Dirichlet homogênea haja vista que $v(0, t) = v(l, t) = 0$.

Exemplo 2.4.2 (Neumann). Uma garrafa de água hermeticamente fechada G , perfeitamente insulada, não possui fluxo de calor entre o líquido e o ambiente externo. Dessa forma, é possível entender que G tem uma condição de Neumann homogênea $\nabla v \cdot n = 0$ nas bordas ∂G , onde v é a temperatura e n é a normal à ∂G .

Exemplo 2.4.3 (Robin). Supondo uma barra insulada nas bordas no intervalo $0 \leq x \leq l$ (isto é, não há fluxo de calor através da superfície lateral) e que sua extremidade $x = l$ foi imersa em um reservatório com temperatura $T(t)$. O calor é trocado entre a extremidade da barra e o reservatório por convecção, então pela conservação de energia na interface, o fluxo de calor por condução (dentro da barra) deve igualar o fluxo de calor por convecção (para o reservatório). Utilizando a lei de Fourier para condução e a lei de resfriamento de Newton para convecção em $x = l$, obtém-se:

$$-k \frac{\partial v}{\partial x}(l, t) = h(v(l, t) - T(t)),$$

onde k é a condutividade térmica da barra, h é o coeficiente de transferência de calor por convecção, $v(l, t)$ é a temperatura na extremidade da barra. Rearranjando, têm-se a condição de Robin não homogênea:

$$v(l, t) + \frac{1}{\beta} \frac{\partial v}{\partial x}(l, t) = T(t),^3$$

onde $\beta = h/k > 0$.

Observação. 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

$$\frac{\partial v}{\partial n} = \nabla v \cdot n,$$

por isso aparece a condição de Robin como

$$\alpha v + \beta \frac{\partial v}{\partial n}. \tag{2.4.7}$$

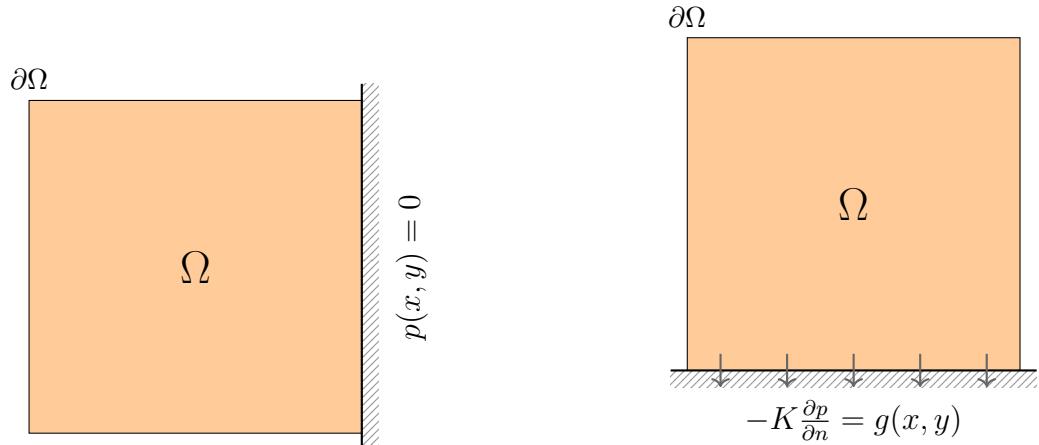
Sendo esta uma generalização da condição de contorno de Robin para uma dimensão. Como, no contexto deste trabalho, u é a velocidade de Darcy (2.3.6), pode-se escrever o contorno de Robin tal como no início desta subseção.

2.4.2 Meios homogêneos e heterogêneos

Para classificar meios como homogêneos ou heterogêneos, considera-se uma simplificação de (2.4.6) para o escoamento monofásico, com as hipóteses do escoamento ser incompressível, isotérmico e sem efeito gravitacional, da forma que:

$$\left\{ \begin{array}{ll} \nabla \cdot u = \frac{q}{\rho} & \text{em } \Omega \\ u = -\frac{K}{\mu} \nabla p & \text{em } \Omega \\ p = p_b & \text{em } \partial\Omega_p \\ u \cdot n = u_b & \text{em } \partial\Omega_u \end{array} \right. , \quad (2.4.8)$$

onde a viscosidade μ e massa específica ρ são uniformes no caso incompressível e consideradas unitárias aqui. Também, onde $\partial\Omega = \partial\Omega_p \cup \partial\Omega_u$ é a fronteira do domínio $\Omega \subset \mathbb{R}^d$ com $d = \{1, 2, 3\}$.



(a) Contorno Dirichlet homogêneo na borda leste
de Ω .

(b) Contorno Neumann não homogêneo na borda
sul de Ω .

Figura 4 – Exemplificação de tipos de contorno.

Um meio dito *homogêneo*, governado pelo sistema de escoamentos monofásicos (2.4.8), ocorre quando a permeabilidade absoluta K é constante e uniforme, logo não dependendo de x . Quando 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.

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 no site da (SPE) (2023): <https://www.spe.org/web/csp/datasets/set02.htm>.

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, em malhas estruturadas ou não, além de conservar localmente os fluxos numéricos; o que o faz particularmente interessante para problemas de mecânica dos fluidos.

Isso pode ser obtido, pois é baseado em uma abordagem "balanceada":

- i. Um balanço local é escrito em cada célula de discretização, que é frequentemente chamada de *volume de controle*;
- ii. Pela fórmula de divergência, uma formulação da integral dos fluxos sobre a fronteira do volume de controle é obtida.

Os fluxos nas fronteiras são discretizados com respeito aos discretos "desconhecidos". Comparativamente, o método de volumes finitos é um tanto diferente (mas ainda relacionado) dos métodos de diferenças finitas (já explorado, em parte, na subseção 2.2.2) e de elementos finitos⁴.

A princípio, no *método de diferenças finitas*, em cada ponto da discretização, as derivadas do que não é conhecido são trocadas pelas diferenças finitas obtidas por 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 estejam no contorno dos volumes de controle.

O *método de elementos finitos* é baseado em uma formulação variacional⁵, 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.⁶

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.⁷

⁴ O método de elementos finitos não será explorado neste trabalho ademais da comparação com o de volumes finitos e uma introdução muito simples.

⁵ 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.

⁶ Vale ressaltar que também há métodos mistos com volumes finitos e elementos finitos.

⁷ 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.

2.6 Método de volumes finitos para equações elípticas

Nesta seção, usando como referência o livro de SOUSA e ROCHA (2022), serão explorados os esquemas de volumes finitos para equações elípticas, com o objetivo de aproximar numericamente a solução do sistema (2.4.6) com simplificações:

$$\begin{cases} -\nabla \cdot (K \nabla p) = q & \text{em } \Omega \\ p = p_b & \text{em } \partial\Omega_p, \\ (-K \nabla p) \cdot n = u_b & \text{em } \partial\Omega_u \end{cases} \quad (2.6.1)$$

no caso de um escoamento monofásico, com as hipóteses de ser incompressível, isotérmico e sem efeito gravitacional, de viscosidade μ e massa específica ρ constantes e unitárias. Ademais, tem pressão relacionada a velocidade de Darcy

$$u = -K \nabla p. \quad (2.6.2)$$

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

$$-\int_{V_k} \nabla \cdot (K \nabla p) dx = \int_{V_k} q dx \quad (2.6.3)$$

e com o teorema da divergência,

$$-\int_{\partial V_k} (K \nabla p) \cdot n_k ds = \int_{V_k} q dx, \quad (2.6.4)$$

em que n_k é o vetor normal à V_k . A discretização de K deve ser tratada adequadamente, tendo grande impacto na solução aproximada⁸.

2.6.1 Malha centrada em células

Durante o restante desse trabalho, será usada uma discretização *centrada em células* (como descrita em THOMAS (1995, pp. 32-34)), onde é considerado que o valor aproximado da função, ou da média dos valores da célula, está justamente no centro dela. Para visualizar melhor como esses intervalos são construídos, toma-se o intervalo $I = [0, 1]$ com três subintervalos de espaçamento uniforme:

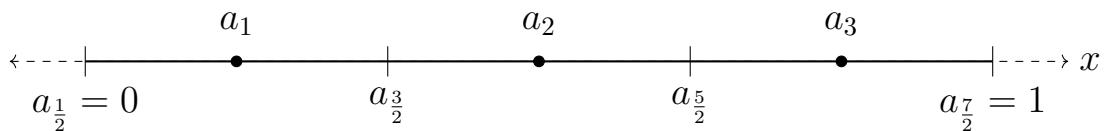


Figura 5 – Visualização do intervalo I com discretização no centro da célula e contorno de Neumann.

Os valores dos nós a_i são vistos como os *centros* das células, então $a_{i-1/2}$ e $a_{i+1/2}$ seriam suas faces à esquerda e à direita respectivamente. No que tange o tratamento das condições

⁸ Consultar o apêndice B para maiores detalhes quanto ao tratamento da discretização de K .

de contorno, observa-se que a extremidade do intervalo não é um ponto da malha. No caso de contornos de Neumann, o procedimento é simples: na primeira célula (por exemplo), durante a integração de $[a_{\frac{1}{2}}, a_{\frac{3}{2}}]$, o fluxo vindo de $a_{\frac{1}{2}}$ seria a imposição de fluxo da interface esquerda do contorno de Neumann.

Não é tão claro como nas condições de Neumann, tratar dos contornos de Dirichlet neste tipo de discretização centrado em células. Geralmente, inclui-se uma *célula fantasma*, assumindo que a condição de Dirichlet é descrita nessa célula, como na figura abaixo:

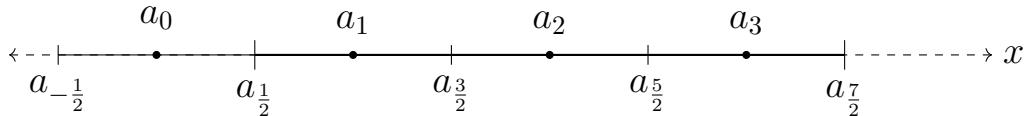


Figura 6 – Intervalo I com discretização no centro da célula, contorno de Dirichlet à esquerda usando célula fantasma.

No exemplo do intervalo I descrito, a célula fantasma seria a célula com centro em a_0 , então se utilizando desse valor na integração em $[a_{\frac{1}{2}}, a_{\frac{3}{2}}]$. Por simplicidade, o contorno à direita se manteve de Neumann. Vale notar que, caso a solução dependa fortemente da distância com a condição de contorno, resultados com essa abordagem podem não ser adequadas. Também, é possível usar meia célula no final do intervalo, como em:

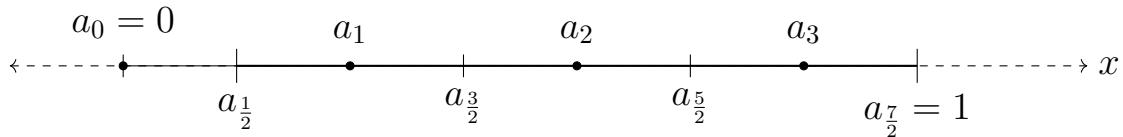


Figura 7 – Intervalo I com discretização no centro da célula, contorno de Dirichlet à esquerda usando meia célula.

Além da discretização no centro das células, existe a *discretização centrada em vértices*, que segue uma ideia parecida, porém avaliando a função nos próprios nós. Este tipo de discretização não será explorado neste trabalho, mas pode ser estudado na própria referência THOMAS (1995).

2.6.2 Caso unidimensional

Considerando um domínio unidimensional $\Omega = [a, b]$ onde a primeira equação de (2.6.1) é escrita como

$$\frac{d}{dx} \left(K \frac{dp}{dx} \right) = q \quad (2.6.5)$$

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 ,

$$-\int_{x_{i-1/2}}^{x_{i+1/2}} q \, dx = \int_{x_{i-1/2}}^{x_{i+1/2}} \frac{d}{dx} \left(K \frac{dp}{dx} \right) \, dx = K \frac{dp}{dx} \Big|_{x_{i+1/2}} - K \frac{dp}{dx} \Big|_{x_{i-1/2}}. \quad (2.6.6)$$

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

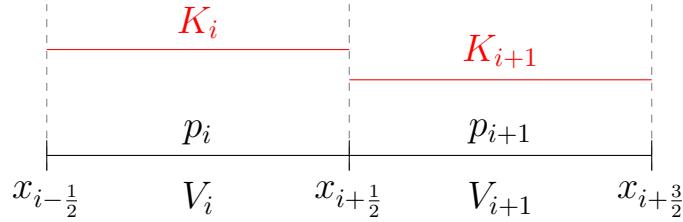


Figura 8 – Esquema de volumes finitos unidimensional.

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 8). 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,

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

Imponto 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

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

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

$$K \frac{dp}{dx} \Big|_{x_{i+1/2}} = \frac{2K_i K_{i+1}}{K_i + K_{i+1}} \left(\frac{p_{i+1} - p_i}{\Delta x} \right). \quad (2.6.7)$$

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 (2.6.6), 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

$$K_{i+1/2} = \frac{2K_i K_{i+1}}{K_i + K_{i+1}}, \quad (2.6.8)$$

a equação (2.6.6) em cada volume V_i é dada por

$$-\frac{1}{\Delta x^2} (K_{i+1/2}(p_{i+1} - p_i) - K_{i-1/2}(p_i - p_{i-1})) = q_i. \quad (2.6.9)$$

2.6.2.1 Implementação

Para implementar o método de volumes finitos, considera-se o esquema numérico (2.6.9) escrito em forma matricial, com N células

$$Aw = d, \quad (2.6.10)$$

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

$$(Aw)_i = \frac{1}{\Delta x^2} \left(-K_{i-\frac{1}{2}} p_{i-1} + \left(K_{i-\frac{1}{2}} + K_{i+\frac{1}{2}} \right) p_i - K_{i+\frac{1}{2}} p_{i+1} \right), \quad (2.6.11)$$

para $i = 2, \dots, N - 1$. Supondo o contexto de uma malha centrada em células como discutido na subseção 2.6.1, as linhas $i = 1$ e $i = N$ da matriz são usadas para impor condições de contorno que, neste seguinte exemplo explicativo, são de Neumann à esquerda e de Dirichlet à direita. Para obter os valores nas fronteiras, segue o desenvolvimento das condições:

- i. de Neumann, quando $i = 1$, a condição de contorno à esquerda estaria na célula $x_{i-1/2} = x_{1/2}$. Então, com

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

para a primeira equação do sistema (2.6.10),

$$\begin{aligned} - \left(K \frac{dp}{dx} \Big|_{x_{\frac{3}{2}}} - K \frac{dp}{dx} \Big|_{x_{\frac{1}{2}}} \right) &= \Delta x q_1 \\ \frac{2K_1 K_2}{K_1 + K_2} \left(\frac{p_2 - p_1}{\Delta x} \right) &= \Delta x q_1 + u_b \end{aligned}$$

ou ainda:

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

e poderia ser feito na extremidade oposta de forma similar, caso necessário.

- ii. de Dirichlet, quando $i = N$, a face $x_{N+1/2}$, tem pressão imposta

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

e então a última equação do sistema (2.6.10) seria, portanto,

$$- \left(K \frac{dp}{dx} \Big|_{x_{N+\frac{1}{2}}} - K \frac{dp}{dx} \Big|_{x_{N-\frac{1}{2}}} \right) = \Delta x q_N. \quad (2.6.12)$$

Para este exemplo de contorno Dirichlet, será usada uma discretização com meio volume de controle:

$$K \frac{dp}{dx} \Big|_{x_{N+\frac{1}{2}}} = K_N \left(\frac{p_b - p_N}{\Delta x / 2} \right) = 2K_N \left(\frac{p_b - p_N}{\Delta x} \right)$$

Dessa forma, em 2.6.12:

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

ou equivalentemente,

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

e poderia ser feito na extremidade oposta de forma similar, caso necessário.

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

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

Nota-se que a matriz A é diagonal dominante e pelo teorema A.1.3, possui fatoração LU única. Além de fatoração LU , pode-se explorar a simetria de A , utilizar as fatorações de Cholesky e LDL^T , e especializá-las para matrizes tridiagonais. Em específico, a implementação da solução do problema (2.6.1) 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 2.6.1).

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 2.6.1. 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:

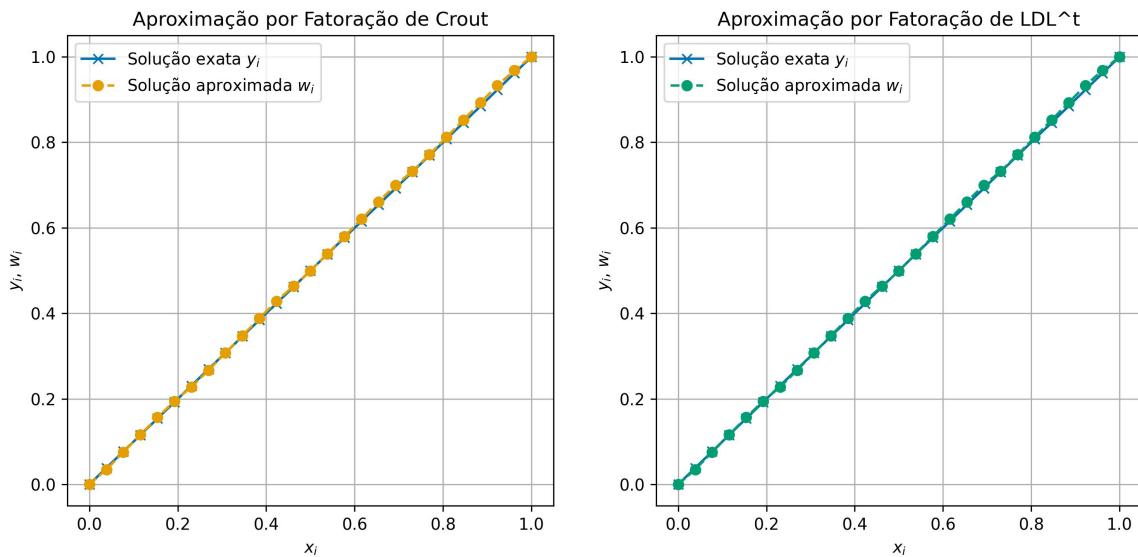


Figura 9 – Solução por diferentes métodos de fatoração (Crout e LDL^t)

Exemplo 2.6.2. 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

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

Usando o método da fatoração de Crout (mas podendo testado com os outros métodos descritos), 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:

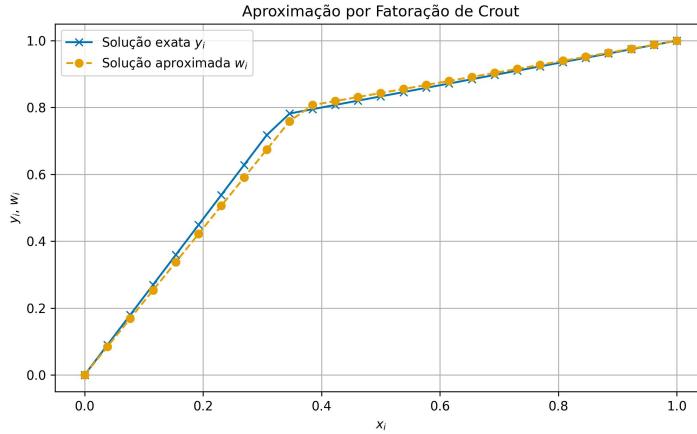


Figura 10 – Solução pelo método de fatoração de Crout

2.6.3 Caso bidimensional

A generalização do método de volumes finitos para uma dimensão maior segue um procedimento análogo ao da subseção anterior: obter uma discretização de (2.6.4) 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 o termo fonte/sumidouro 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 11 abaixo.

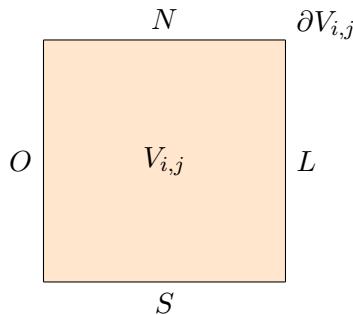


Figura 11 – Componentes norte, sul, leste e oeste em $\partial V_{i,j}$.

Com isso, têm-se

$$\int_{\partial V_{i,j}} u \cdot n \, ds = \int_N u \cdot n_N \, ds + \int_S u \cdot n_S \, ds + \int_L u \cdot n_L \, ds + \int_O u \cdot n_O \, ds, \quad (2.6.13)$$

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:

$$\int_S \mathbf{u} \cdot \mathbf{n}_S \, ds = \int_{x_{i-1/2}}^{x_{i+1/2}} K \frac{\partial p}{\partial y} \Big|_{(x, y_{j-1/2})} \, dx \quad (2.6.14)$$

$$\simeq \int_{x_{i-1/2}}^{x_{i+1/2}} -\frac{2K_{i,j-1}K_{i,j}}{K_{i,j-1}K_{i,j}} \left(\frac{p_{i,j} - p_{i,j-1}}{\Delta y} \right) \, dx \quad (2.6.15)$$

$$= \frac{\Delta x}{\Delta y} K_{i,j-\frac{1}{2}} (p_{i,j-1} - p_{i,j}), \quad (2.6.16)$$

com $\mathbf{n}_S = (0, -1)$, e similarmente para as outras faces. Portanto, a forma discreta de (2.6.4) para um problema bidimensional é

$$\begin{aligned} q_{i,j} = & -\frac{1}{\Delta y^2} K_{i,j+\frac{1}{2}} p_{i,j+1} - \frac{1}{\Delta y^2} K_{i,j-\frac{1}{2}} p_{i,j-1} \\ & - \frac{1}{\Delta x^2} K_{i+\frac{1}{2},j} p_{i+1,j} - \frac{1}{\Delta x^2} K_{i-\frac{1}{2},j} p_{i-1,j} \\ & + \left(\frac{1}{\Delta y^2} K_{i,j+\frac{1}{2}} + \frac{1}{\Delta y^2} K_{i,j-\frac{1}{2}} + \frac{1}{\Delta x^2} K_{i+\frac{1}{2},j} + \frac{1}{\Delta x^2} K_{i-\frac{1}{2},j} \right) p_{i,j}, \end{aligned} \quad (2.6.17)$$

onde se usam as médias harmônicas $K_{i,j\pm 1/2}$ $K_{i\pm 1/2,j}$. Após a pressão ser calculada, 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 (2.3.6):

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

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

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

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

$$u_{i,j} = \frac{u_L + u_O}{2} \quad \text{e} \quad v_{i,j} = \frac{v_N + v_S}{2}. \quad (2.6.18)$$

2.6.3.1 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:

$$\int_L (K \nabla p) \cdot n_L ds = 0.$$

Portanto, sua contribuição na equação (2.6.13) será eliminada. Caso g não seja nula, têm-se uma condição de contorno do tipo *não homogênea*, e a integral será alterada para:

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

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 (2.6.17) será modificada (no exemplo de quando $i = M$) para

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

2.6.3.2 Condição de contorno de Dirichlet

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

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

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:

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

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 (2.6.17) 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 como no contorno de Neumann, quando $g \neq 0$, a condição de contorno de Dirichlet é do tipo *não homogêneo* e, caso contrário, *homogêneo*.

2.6.3.3 Implementação

Considerando uma discretização $M \times N$ células computacionais, o esquema (2.6.17) pode ser escrito na forma matricial

$$Aw = d$$

com $w = (p_1, \dots, p_{MN})^t$ e $b = (q_1, \dots, q_{MN})$. 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 (dentre 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 12.

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

Figura 12 – Exemplo de ordenação das células computacionais para um problema bidimensional.

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 propriedades⁹, 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

$$w = (w^{(1)}, \dots, w^{(Q)})^t \text{ e } d = (d^{(1)}, \dots, d^{(Q)})^t, \quad (2.6.19)$$

e algoritmo de resolução:

Solução usando fatoração LU em bloco

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

$$\bar{A}_1\Gamma_1 = C_1; \quad (2.6.20)$$

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 $i = 1, \dots, Q$.

⁹ 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 operações¹⁰ de $O(3NM^3)$ para $O(\frac{5}{3}NM^3)$, tendo como referência os estudos presentes em ISAACSON e KELLER (1966, pp. 58-61).

Exemplo 2.6.3. Dado um problema elíptico bidimensional simplificado como (2.6.1), de contorno Neumann homogêneo

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

com velocidade de Darcy $u = -K\nabla p$, onde a permeabilidade absoluta do meio é $K = 1$ e solução exata $p(x) = \cos(2\pi x) \cos(2\pi y)$. Usando o método de volumes finitos descrito anteriormente, foi possível obter resultados 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 figura 13a abaixo.

Definição 2.6.1. Em um reservatório, quando se secciona uma porção deste lugar em um domínio Ω com exatamente poço de injeção e outro de produção (onde se é extraído um fluido), esta porção é denominada como *a quarter of the five spot*. A injeção e produção são induzidas por um termo fonte q

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

aplicado em células localizadas em extremos de Ω , geralmente a injeção no extremo inferior esquerdo e a produção no superior direito.

Exemplo 2.6.4. Dado um problema elíptico bidimensional simplificado como (2.6.1), uma configuração *a quarter of the five spot* como na definição 2.6.1 e condições de contorno homogêneas de Neumann:

$$\begin{cases} \nabla \cdot u = q & \text{em } \Omega = [0, 1] \times [0, 1] \\ u \cdot n = 0 & \text{sobre } \partial\Omega \\ -K\nabla p = u & (\text{Velocidade de Darcy}) \end{cases}.$$

Com uma permeabilidade absoluta $K(x) = 1$ constante, termo fonte $\tilde{q} = 1$, poço de injeção na célula $(1, 1)$ e poço de produção em (N, M) . O gráfico do campo de pressões com vetores normalizados pode ser visualizado na figura 13b abaixo. Para este problema, assim como no exemplo anterior, é preciso especificar a pressão para evitar a indeterminação.

¹⁰ 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.

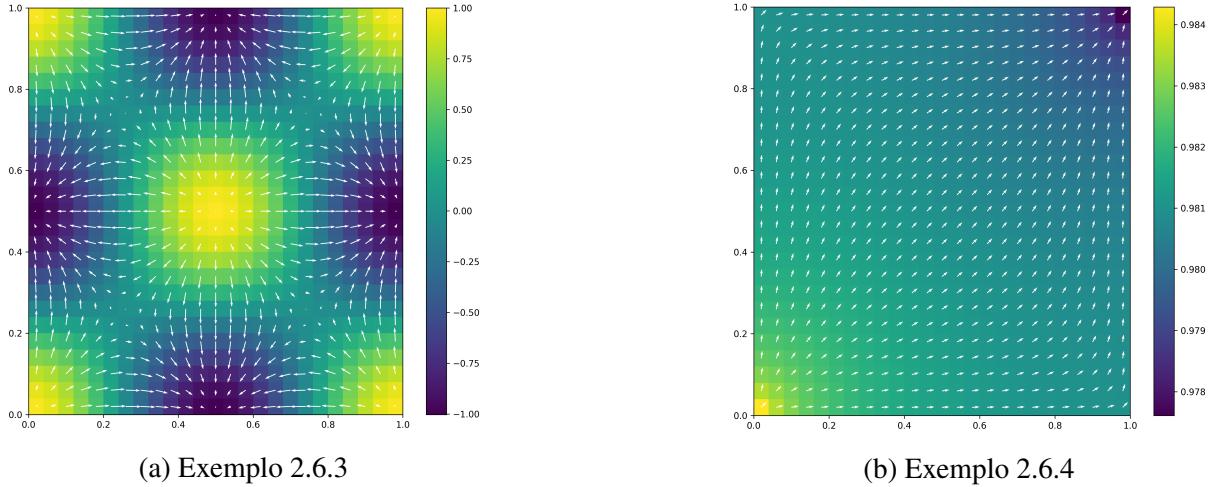


Figura 13 – Campo de pressões e vetores dos exemplos.

2.7 Introdução a problemas de transporte passivo em meios porosos

O movimento de um fluido em escoamento monofásico em meios porosos é descrito por um problema de *transporte passivo*, onde o fluido marcado¹¹ segue o escoamento sem alterar suas propriedades. Com a velocidade do fluido u , obtida através da solução do problema elíptico dado por (2.6.1) e (2.3.6), esse deslocamento pode ser estimado pela seguinte equação hiperbólica:

$$\begin{cases} \frac{\partial}{\partial t}(\phi c) + \nabla \cdot (uc) = q & \text{em } \Omega \\ c(x, t=0) = c_0 & \text{em } \Omega \\ c(x, t) = c_b(x, t) & \text{em } \partial\Omega^- \end{cases}, \quad (2.7.1)$$

onde ϕ é a porosidade, q é o termo fonte, $c(x, t)$ é a concentração do contaminante, c_0 é a condição inicial e c_b é a concentração nas bordas de entrada $\partial\Omega^- = \{x \in \partial\Omega; u \cdot n < 0\}$, onde n é a normal exterior à fronteira $\partial\Omega$. Em simulações numéricas, geralmente o termo fonte da equação (2.7.1) leva em conta os poços de injeção e produção, os quais podem ser convertidos em condições de contorno adequadas, gerando a equação:

$$\begin{cases} \phi \frac{\partial c}{\partial t} + \nabla \cdot (uc) = 0 & \text{em } \Omega \\ c(x, t=0) = c_0 & \text{em } \Omega \\ c(x, t) = c_b(x, t) & \text{em } \partial\Omega^- \end{cases}, \quad (2.7.2)$$

onde a porosidade $\phi = \phi(x)$ é constante no tempo. Caso a porosidade seja uniforme e constante no tempo, é possível escalarizar a primeira equação de (2.7.2) para

$$\frac{\partial c}{\partial \tau} + \nabla \cdot (uc) = 0, \quad (2.7.3)$$

¹¹ Também pode ser interpretado como problema de transporte de *contaminantes*, *poluentes*, traçadores passivos, etc.

onde $\tau = t/\phi$. Admitindo que a velocidade u é conhecida e não depende da concentração (considerando que K é constante), têm-se uma *lei de conservação hiperbólica linear*.

2.7.1 Derivação de leis de conservação hiperbólicas

Para entender como surge uma EDP hiperbólica, fisicamente, deriva-se uma *lei de balanço* para determinar a conservação de *concentração* $c(x, t)$ em um domínio $\Omega \subset \mathbb{R}^n$. Essa lei de balanço estabelece que a variação temporal da quantidade c em um domínio Ω é igual a taxa de fluxo de c por $\partial\Omega$ mais o total de c injetado ou retirado de Ω . Matematicamente, pode ser expresso por:

$$\frac{\partial}{\partial t} \int_{\Omega} \phi c(x, t) dx = - \int_{\partial\Omega} f(c(x, t)) \cdot n ds + \int_{\Omega} q dx, \quad (2.7.4)$$

onde n é o vetor normal ao exterior de Ω (ou seja, $\partial\Omega$), $f(c)$ é a função de fluxo dependendo de c (não necessariamente linear) e q o termo fonte. Com o teorema da divergência:

$$\frac{\partial}{\partial t} \int_{\Omega} \phi c(x, t) dx = - \int_{\Omega} \nabla \cdot f(c(x, t)) dx + \int_{\Omega} q dx,$$

ou seja,

$$\int_{\Omega} \left(\frac{\partial}{\partial t} (\phi c(x, t)) + \nabla \cdot f(c(x, t)) - q \right) dx = 0. \quad (2.7.5)$$

Como a equação (2.7.5) vale para qualquer domínio arbitrário Ω e a porosidade $\phi = \phi(x)$ é constante no tempo, então é possível obter a forma diferencial:

$$\phi \frac{\partial c}{\partial t} + \nabla \cdot f(c) = q \quad (2.7.6)$$

chamada, então, de *equação diferencial parcial hiperbólica*, ou lei de conservação quando $q = 0$.

2.7.2 Equação de transporte linear

Um exemplo simples e clássico da lei de conservação hiperbólica é a *equação de transporte linear*, ou também chamada de *equação de advecção linear*, onde dada a equação (2.7.6) com $f(c) = uc$ e u a velocidade constante, se tem a equação

$$\frac{\partial c}{\partial t} + u \frac{\partial c}{\partial x} = 0, \quad (2.7.7)$$

equivalente à equação (2.7.3) em uma dimensão. O problema de valor inicial para (2.7.7) consiste em achar uma solução para a equação que satisfaça a condição inicial $c(x, 0) = c_0(x)$ para todo x em \mathbb{R} . Isso pode ser construído pelo *método das características*, que busca reduzir a EDP (2.7.7) em uma EDO pela própria estrutura da equação.

Portanto, seja $x(t)$ uma característica, sendo solução do sistema:

$$\begin{cases} x'(t) = u(x(t), t) & \text{para } t > 0 \\ x(0) = x_0 \end{cases}$$

assumindo uma curva $x(t)$ em que a solução c é constante, significa que

$$\frac{d}{dt}c(x(t), t) = c_t(x(t), t) + c_x(x(t), t)x'(t) = 0.$$

Considerando o caso mais simples, onde a velocidade u é constante, as trajetórias

$$x(t) = x_0 + ut,$$

chamadas de *curvas características*, são soluções para a equação (2.7.7), podendo ser vistas em 14a e 14b. No caso de 14c:

$$x(t) = \frac{x^2}{2} + x_0.$$

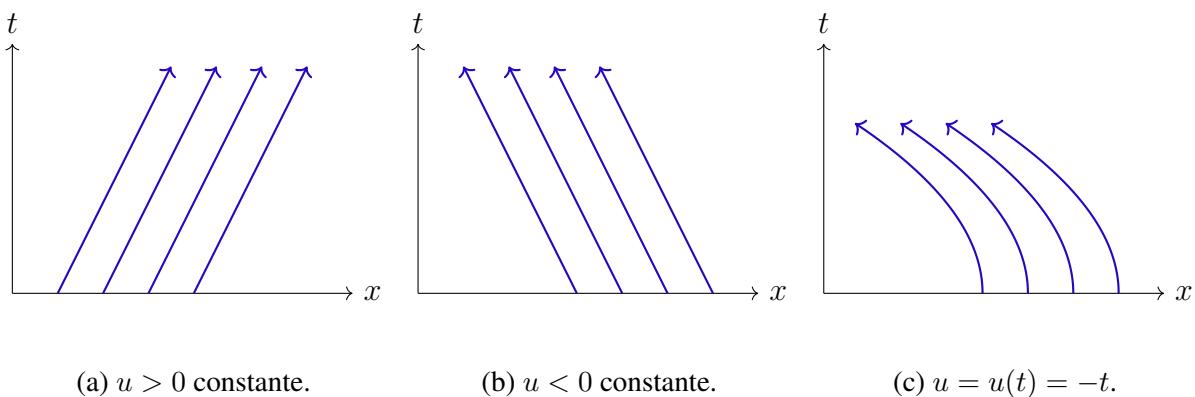


Figura 14 – Diferentes curvas características.

2.8 Método de volumes finitos para equações hiperbólicas

O método de discretização por volumes finitos é amplamente usado para solucionar equações hiperbólicas, pois trata adequadamente de descontinuidades presentes nas soluções, além de levar em conta as velocidades e direções de propagação da informação. Considerando uma lei de conservação hiperbólica da forma (2.7.6) com $\phi = 1$ e $q = 0$, têm-se a forma unidimensional

$$\frac{\partial c}{\partial t} + \frac{\partial}{\partial x}f(c) = 0. \quad (2.8.1)$$

Por simplicidade, a discretização será uniforme e centrada nos pontos: x_i , $i = 1, \dots, N$, de forma que as interfaces entre dois volumes de controle V_{i-1} e V_i são dadas por

$$x_{i \pm \frac{1}{2}} = x_i \pm \frac{\Delta x}{2}.$$

Com isso, cada volume de controle é dado por

$$V_i = [x_{i-\frac{1}{2}}, x_{i+\frac{1}{2}}).$$

A discretização temporal também será considerada uniforme, com cada passo de tempo de tamanho Δt , sendo cada nível denotado por $t^n = n\Delta t$. A representação pode ser dada por uma malha tal como:

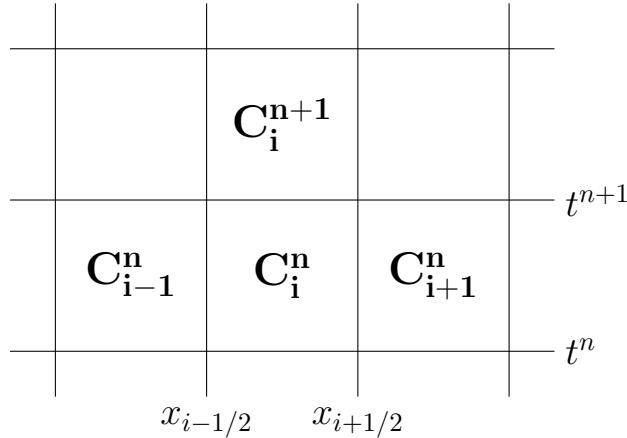


Figura 15 – Uma discretização de volumes finitos para leis de conservação hiperbólicas.

Em cada passo de tempo t^n , a aproximação da solução no volume de controle é dada pelo valor médio de concentração nessa célula:

$$C_i^n = \frac{1}{\Delta x} \int_{x_{i-\frac{1}{2}}}^{x_{i+\frac{1}{2}}} c(x, t^n) dx,$$

e também, define-se uma média temporal da função fluxo

$$\bar{F}_{i \pm \frac{1}{2}}^n = \frac{1}{\Delta t} \int_{t^n}^{t^{n+1}} f(c(x_{i \pm \frac{1}{2}}, t)) dt.$$

Integrando a lei de conservação (2.8.1) em $[x_{i-\frac{1}{2}}, x_{i+\frac{1}{2}}] \times [t^n, t^{n+1}]$:

$$\int_{t^n}^{t^{n+1}} \int_{x_{i-\frac{1}{2}}}^{x_{i+\frac{1}{2}}} \left(\frac{\partial c}{\partial t} + \frac{\partial}{\partial x} f(c) \right) dx dt = 0,$$

e separando as integrais, utilizando-se também do teorema fundamental do cálculo

$$\int_{x_{i-\frac{1}{2}}}^{x_{i+\frac{1}{2}}} c(x, t^{n+1}) dx - \int_{x_{i-\frac{1}{2}}}^{x_{i+\frac{1}{2}}} c(x, t^n) dx = \int_{t^n}^{t^{n+1}} f(c(x_{i-\frac{1}{2}}, t)) dt - \int_{t^n}^{t^{n+1}} f(c(x_{i+\frac{1}{2}}, t)) dt.$$

Têm-se, portanto,

$$C_i^{n+1} = C_i^n - \frac{\Delta t}{\Delta x} \left(\bar{F}_{i+\frac{1}{2}}^n - \bar{F}_{i-\frac{1}{2}}^n \right). \quad (2.8.2)$$

Ou seja, a equação acima estabelece um princípio de conservação: a variação média da concentração na célula é dada pela diferença dos fluxos nas fronteiras da mesma; ainda sem quaisquer tipos de aproximações.

2.8.1 Método upwind para aproximação de fluxos discretos em uma dimensão

Para aproximar os fluxos discretos $\bar{F}_{i \pm \frac{1}{2}}^n$, pode-se usar diversos métodos, como o esquema central (diferenças finitas) ou os métodos de Lax-Friedrichs e Lax-Wendroff. Ainda mais, o método focal usado neste trabalho será o *método upwind*, que leva em conta a estrutura da solução, de modo que a informação em cada ponto é obtida olhando a direção na qual a mesma se propaga. Esse método, assim como os outros, pode ser dividido em casos de coeficientes (velocidades) constantes ou variáveis.

2.8.1.1 Caso de coeficientes constantes

Tendo como exemplo a *equação de advecção escalar*, há apenas uma velocidade, que é positiva ou negativa e, portanto, o método upwind se torna unilateral, com valores determinados com base nas informações à esquerda ou à direita da célula. Dessa forma, o fluxo numérico pode ser definido como

$$F_{i+1/2}^n = \begin{cases} uC_i^n, & \text{se } u > 0 \\ uC_{i+1}^n, & \text{se } u < 0 \end{cases} \quad \text{e} \quad F_{i-1/2}^n = \begin{cases} uC_{i-1}^n, & \text{se } u > 0 \\ uC_i^n, & \text{se } u < 0 \end{cases}.$$

Com isso, a equação (2.8.2) se torna:

$$C_i^{n+1} = \begin{cases} C_i^n - u \frac{\Delta t}{\Delta x} (C_i^n - C_{i-1}^n), & \text{se } u > 0 \\ C_i^n - u \frac{\Delta t}{\Delta x} (C_{i+1}^n - C_i^n) & \text{se } u < 0 \end{cases}. \quad (2.8.3)$$

Ou também, por uma perspectiva de propagações de onda, considerando as funções de salto:

$$W_{i+\frac{1}{2}} = C_{i+1}^n - C_i^n \quad \text{e} \quad W_{i-\frac{1}{2}} = C_i^n - C_{i-1}^n \quad (2.8.4)$$

que representam as ondas se movendo para as células V_{i+1} e V_i , respectivamente, com velocidade u e então:

$$C_i^{n+1} = \begin{cases} C_i^n - u \frac{\Delta t}{\Delta x} W_{i-\frac{1}{2}}, & \text{se } u > 0 \\ C_i^n - u \frac{\Delta t}{\Delta x} W_{i+\frac{1}{2}} & \text{se } u < 0 \end{cases}. \quad (2.8.5)$$

Considerando $u^+ = \max\{u, 0\}$ e $u^- = \min\{u, 0\}$, é possível ter a fórmula de concentração:

$$\begin{aligned} C_i^{n+1} &= C_i^n - \frac{\Delta t}{\Delta x} (u^+ C_i^n + u^- C_{i+1}^n - u^+ C_{i-1}^n - u^- C_i^n) \\ &= C_i^n - \frac{\Delta t}{\Delta x} (u^+ W_{i-\frac{1}{2}} + u^- W_{i+\frac{1}{2}}). \end{aligned} \quad (2.8.6)$$

2.8.1.2 Caso de coeficientes variáveis

No caso de coeficientes variáveis, onde a velocidade depende da posição, os métodos desenvolvidos não podem ser aplicados diretamente. Ou seja, têm-se uma função $f(c, x) = u(x)c$ que leva à

$$\frac{\partial c}{\partial t} + \frac{\partial}{\partial x}(u(x)c) = 0,$$

onde a dependência de x da função f pode ser "retirada" e então a transformando em um sistema hiperbólico. Para entender o raciocínio desta transformação, pode-se considerar um exemplo do caso escalar com dependência $f = f(x, t, c)$ na equação

$$\frac{\partial c}{\partial t} + \frac{\partial}{\partial x}f = 0,$$

e definir uma outra função q :

$$q(x, t) = (q_1, q_2, q_3) := (x, t, c),$$

de modo que

$$\frac{\partial}{\partial t} q(x, t) = (0, 1, \partial_t c).$$

Ademais, ter que

$$\mathbf{F}(q(x, t)) = \begin{bmatrix} 0 \\ -q_1 \\ f(q_1, q_2, q_3) \end{bmatrix},$$

portanto

$$\frac{\partial}{\partial t} \begin{bmatrix} x \\ t \\ c \end{bmatrix} + \frac{\partial}{\partial x} \begin{bmatrix} 0 \\ -x \\ f(x, t, c) \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 0 \\ 1 - 1 \\ \partial_t c + \partial_x f \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 0 \\ 0 \\ 0 \end{bmatrix}$$

que é um sistema hiperbólico

$$q_t + \mathbf{F}(q)_x = 0. \quad (2.8.7)$$

Portanto, com essa técnica de formar um sistema hiperbólico, é possível aplicar uma adaptação de esquemas de volumes finitos para sistemas. O fluxo em $x_{i+1/2}$, por exemplo, seria definido por:

$$\bar{F}_{i+\frac{1}{2}}^n = \frac{1}{\Delta t} \int_{t^n}^{t^{n+1}} u(x_{i+\frac{1}{2}}) c(x_{i+\frac{1}{2}}, t) dt.$$

Dessa forma, o método upwind não é mais um método apenas unilateral, pois agora com $u(x)$ variável, a discretização pode variar também, a depender do sinal de u . O fluxo em $x_{i+1/2}$

$$F_{i+\frac{1}{2}}^n = u^+(x_{i+\frac{1}{2}}) C_i^n + u^-(x_{i+\frac{1}{2}}) C_{i+1}^n,$$

onde $u^+ = \max\{u, 0\}$, $u^- = \min\{u, 0\}$. Consequentemente:

$$\begin{aligned} C_i^{n+1} &= C_i^n - \frac{\Delta t}{\Delta x} \left(u^+(x_{i+\frac{1}{2}}) C_i^n + u^-(x_{i+\frac{1}{2}}) C_{i+1}^n - u^+(x_{i-\frac{1}{2}}) C_{i-1}^n - u^-(x_{i-\frac{1}{2}}) C_i^n \right) \\ &= C_i^n - \frac{\Delta t}{\Delta x} \left(u^+(x_{i+\frac{1}{2}}) C_i^n + u^-(x_{i+\frac{1}{2}}) (C_{i+1}^n - C_i^n) + u^-(x_{i+\frac{1}{2}}) C_i^n \right. \\ &\quad \left. + u^+(x_{i-\frac{1}{2}}) (C_i^n - C_{i-1}^n) - u^+(x_{i-\frac{1}{2}}) C_i^n - u^-(x_{i-\frac{1}{2}}) C_i^n \right), \end{aligned}$$

e, finalmente

$$\begin{aligned} C_i^{n+1} &= C_i^n - \frac{\Delta t}{\Delta x} \left[\left(u^+(x_{i+\frac{1}{2}}) - u^+(x_{i-\frac{1}{2}}) + u^-(x_{i+\frac{1}{2}}) - u^-(x_{i-\frac{1}{2}}) \right) C_i^n \right] \\ &\quad - \frac{\Delta t}{\Delta x} \left[u^-(x_{i-\frac{1}{2}}) W_{i-\frac{1}{2}} + u^+(x_{i+\frac{1}{2}}) W_{i+\frac{1}{2}} \right]. \end{aligned} \quad (2.8.8)$$

2.8.1.3 Condição CFL

A condição CFL (Courant, Friedrichs e Lewy) é uma condição necessária, mas não suficiente, para garantir convergência do método de volumes finitos para a equação diferencial, à medida que a malha é refinada. Ou seja, caso a condição CFL seja satisfeita, pode ser que o método converja, porém caso contrário, não há nenhuma chance de convergência. A convergência ocorre

caso ν (conhecido como número de Courant) for menor ou igual a 1 (SOUSA; ROCHA, 2022, p. 76):

$$\nu := u \frac{\Delta t}{\Delta x} \leq 1,$$

com u constante. Caso essa condição não seja satisfeita, a solução não irá convergir pois a solução seria construída com informações que não levam à solução exata. Abaixo há um exemplo visual de casos em que a condição CFL é satisfeita ou não:

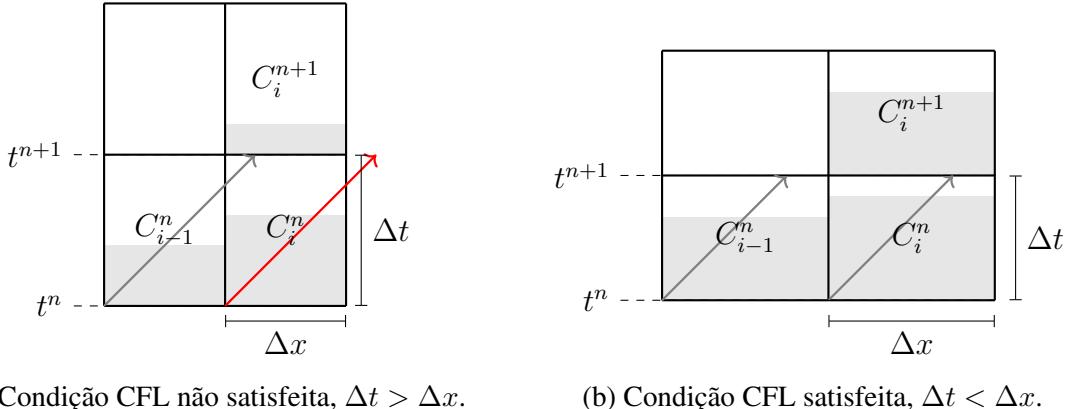


Figura 16 – Propagação da informação de t^n para t^{n+1} .

2.8.1.4 Exemplos do caso unidimensional

A implementação para resolver o problema de concentrações é bem trivial, pois dadas as velocidades, bastaria calcular a próxima "linha temporal" a partir das concentrações anteriores, com as equações (2.8.6) ou (2.8.8). Para ilustrar as soluções, serão utilizados dois exemplos em graus distintos de dificuldade.

Exemplo 2.8.1. Dado um reservatório unidimensional $\Omega = [0, 100]$, com velocidade de transporte igual à $u(t) = 1$ constante. Considerando a concentração do fluido $c(x, t)$:

$$\begin{cases} \partial_t c + u \partial_x c = 0 & \text{em } \Omega \\ c_0(x) = \frac{\sin(25x)}{4} + \frac{x}{2} + .2 & \text{em } \Omega \end{cases}.$$

Utilizando a equação (2.8.6), é possível chegar numa solução onde o contaminante passa pelo reservatório da esquerda para a direita sem grandes alterações:

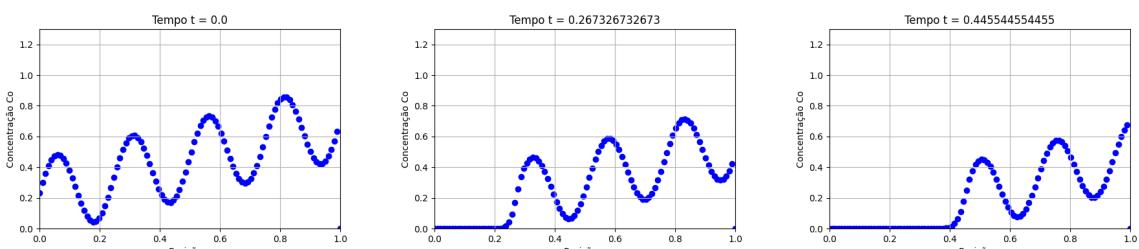


Figura 17 – Gráfico de concentrações em quatro tempos diferentes.

Exemplo 2.8.2. Dado o problema de contorno unidimensional (2.6.1), que modela o escoamento monofásico de um reservatório saturado, com sistema de equações dado por:

$$\begin{cases} -\frac{d}{dx} \left(K \frac{dp}{dx} \right) = -25 \cos(25x) & \text{em } \Omega_e = [0, 1] \\ p = x & \text{sobre } \partial\Omega_e \end{cases} \quad (2.8.9)$$

onde $K(x) = 2 + \sin(25x)$, com soluções em campos de pressões e velocidades:

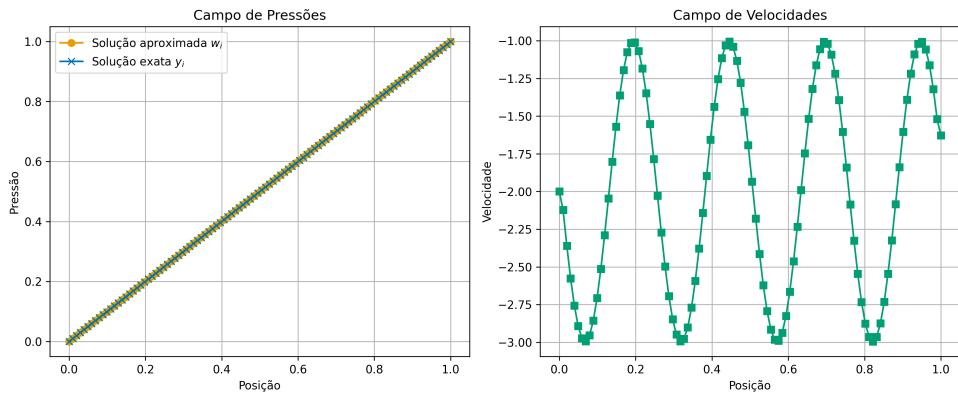


Figura 18 – Campo de pressões e velocidades.

Será simulado o fluxo de um contaminante com concentrações $c(x, t)$, governado pelo sistema:

$$\begin{cases} \partial_t c + u \partial_x c = 0 & \text{em } \Omega_h \\ c_0(x) = e^{-20(3x-.5)^2} + e^{-(3x-3.5)^2} & \text{em } \Omega_h \end{cases},$$

com $\Omega_h = [0, 100]$ e u velocidade obtida na resolução do sistema (2.8.9). Ademais, foram impostas duas condições de contorno: a extração do contaminante à esquerda do reservatório (com $c(0, n) = 0$) e injeção do contaminante por uma função $g(n)$ à direita do reservatório em todos os n passos temporais. Como detalhe, o contaminante se desloca da direita para a esquerda, haja vista que as velocidades são negativas. Segue que $g(n)$ é:

$$g(n) = \left| \frac{\sin(10n\pi\Delta t)}{10} + \frac{1}{10n} \right|.$$

Utilizando a equação (2.8.8), é possível chegar numa solução visualizada pelos gráficos a seguir:

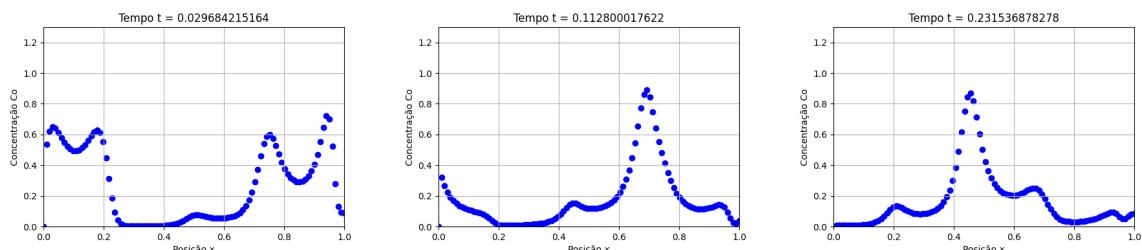


Figura 19 – Gráfico de concentrações em quatro tempos diferentes.

2.8.2 Método upwind para aproximação de fluxos discretos em duas dimensões

Para problemas em duas dimensões, a lei de conservação (2.8.1) assume a forma

$$c_t + f_x(c) + g_y(c) = 0, \quad (2.8.10)$$

onde a concentração do fluido depende de x, y e t , isto é, $c(x, y, t)$ e $f(c)$ e $g(c)$ são as funções de fluxo nas direções x e y , respectivamente. A equação de advecção em duas dimensões é dada por

$$c_t + (u(x, y, t)c)_x + (v(x, y, t)c)_y = 0,$$

ou ainda

$$\frac{\partial c}{\partial t} + \nabla \cdot (\mathbf{u}c) = 0,$$

com $\mathbf{u} = [u(x, y, t), v(x, y, t)]$. Como em uma dimensão, pode-se considerar malhas cartesianas e definir o valor médio da concentração na célula (i, j) no tempo t^n por

$$C_{i,j}^n = C(x_i, y_i, t^n) \approx \frac{1}{\Delta x \Delta y} \int_{y_{j-\frac{1}{2}}}^{y_{j+\frac{1}{2}}} \int_{x_{i-\frac{1}{2}}}^{x_{i+\frac{1}{2}}} c(x, y, t) dx dy.$$

Considerando o domínio bidimensional Ω com discretização cartesiana, então o volume de controle é da forma

$$V_{i,j} = [x_{i-\frac{1}{2}}, x_{i+\frac{1}{2}}] \times [y_{j-\frac{1}{2}}, y_{j+\frac{1}{2}}].$$

Integrando a lei de conservação (2.8.10) sobre o domínio $[x_{i-1/2}, x_{i+1/2}] \times [y_{j-1/2}, y_{j+1/2}] \times [t^n, t^{n+1}]$, obtém-se

$$\int_{t^n}^{t^{n+1}} \int_{y_{j-\frac{1}{2}}}^{y_{j+\frac{1}{2}}} \int_{x_{i-\frac{1}{2}}}^{x_{i+\frac{1}{2}}} (c_t + f_x(c) + g_y(c)) dx dy dt = 0. \quad (2.8.11)$$

Com manipulações matemáticas e definindo

$$\bar{F}_{i+\frac{1}{2},j}^n = \frac{1}{\Delta t \Delta x} \int_{t^n}^{t^{n+1}} \int_{y_{j-\frac{1}{2}}}^{y_{j+\frac{1}{2}}} f(c(x_{i+\frac{1}{2}}, y, t)) dy dt \quad (2.8.12)$$

e

$$\bar{G}_{i,j+\frac{1}{2}}^n = \frac{1}{\Delta t \Delta x} \int_{t^n}^{t^{n+1}} \int_{x_{i-\frac{1}{2}}}^{x_{i+\frac{1}{2}}} g(c(x, y_{j+\frac{1}{2}}, t)) dx dt, \quad (2.8.13)$$

além de dividir ambos os lados de (2.8.11) por $\Delta x \Delta y$, têm-se

$$C_{i,j}^{n+1} = C_{i,j}^n - \frac{\Delta t}{\Delta x} \left(\bar{F}_{i+\frac{1}{2},j}^n - \bar{F}_{i-\frac{1}{2},j}^n \right) - \frac{\Delta t}{\Delta y} \left(\bar{G}_{i,j+\frac{1}{2}}^n - \bar{G}_{i,j-\frac{1}{2}}^n \right) \quad (2.8.14)$$

onde os fluxos \bar{F} e \bar{G} podem ser aproximados por fluxos discretos em cada direção, assim como em (2.8.6) ou (2.8.8). Analogamente como na seção anterior, a condição CFL pode ser descrita agora, em duas dimensões, por:

$$\Delta t \leq \frac{\min\{\Delta x, \Delta y\}}{\max\{|u|, |v|\}}.$$

2.8.2.1 Exemplos do caso bidimensional

A implementação para resolver o problema de concentrações é análogo ao unidimensional, porém agora calculando os fluxos discretos sequencialmente: primeiro \bar{F} e depois \bar{G} . Para ilustrar as soluções, serão utilizados alguns exemplos, homogêneos e heterogêneos, em graus distintos de dificuldade. Todos os exemplos seguem a mesma formatação, com diferenças apenas na equação de permeabilidade $K(x, y)$: são problemas do tipo *a quarter of the five spot* com a injeção de um contaminante em $(1, 1)$ e extração em (M, N) , em um intervalo $\Omega_e = [0, 1] \times [0, 1]$ em 50×50 células computacionais.

Nota-se que foi necessário o artifício de um *contorno de Dirichlet local*, já usado em seções anteriores, onde se impôs uma pressão em um ponto específico da matriz, no caso o ponto $(1, 1)$.

Exemplo 2.8.3. O primeiro exemplo é o mais simples, utiliza do mesmo esquema do exemplo 2.6.4, a saber: um problema elíptico bidimensional simplificado como (2.6.1), uma configuração *a quarter of the five spot* como na definição 2.6.1 e condições de contorno homogêneas de Neumann:

$$\begin{cases} \nabla \cdot u = q & \text{em } \Omega = [0, 1] \times [0, 1] \\ u \cdot n = 0 & \text{sobre } \partial\Omega \\ -K\nabla p = u & \text{(Velocidade de Darcy)} \end{cases} .$$

Com uma permeabilidade absoluta $K(x, y) = 1$ constante, termo fonte $\tilde{q} = 1$, poço de injeção na célula $(1, 1)$ e poço de produção em (N, M) . Ao resolver o problema elíptico de escoamento, obtém-se o campo de pressões e o campo de velocidades da figura 13b, mas novamente:

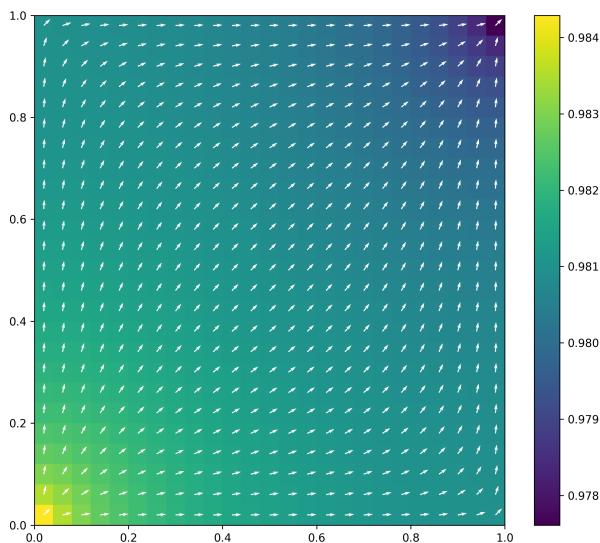


Figura 20 – Campo de pressões e velocidades de 2.8.3.

Então, dadas as velocidades como conhecidas, simula-se a concentração de um contaminante em cada célula do problema pelo método UpWind descrito anteriormente (mais especificadamente, com as equações para coeficientes variáveis). A dispersão do contaminante é uniforme, podendo ser observadas nas figuras:

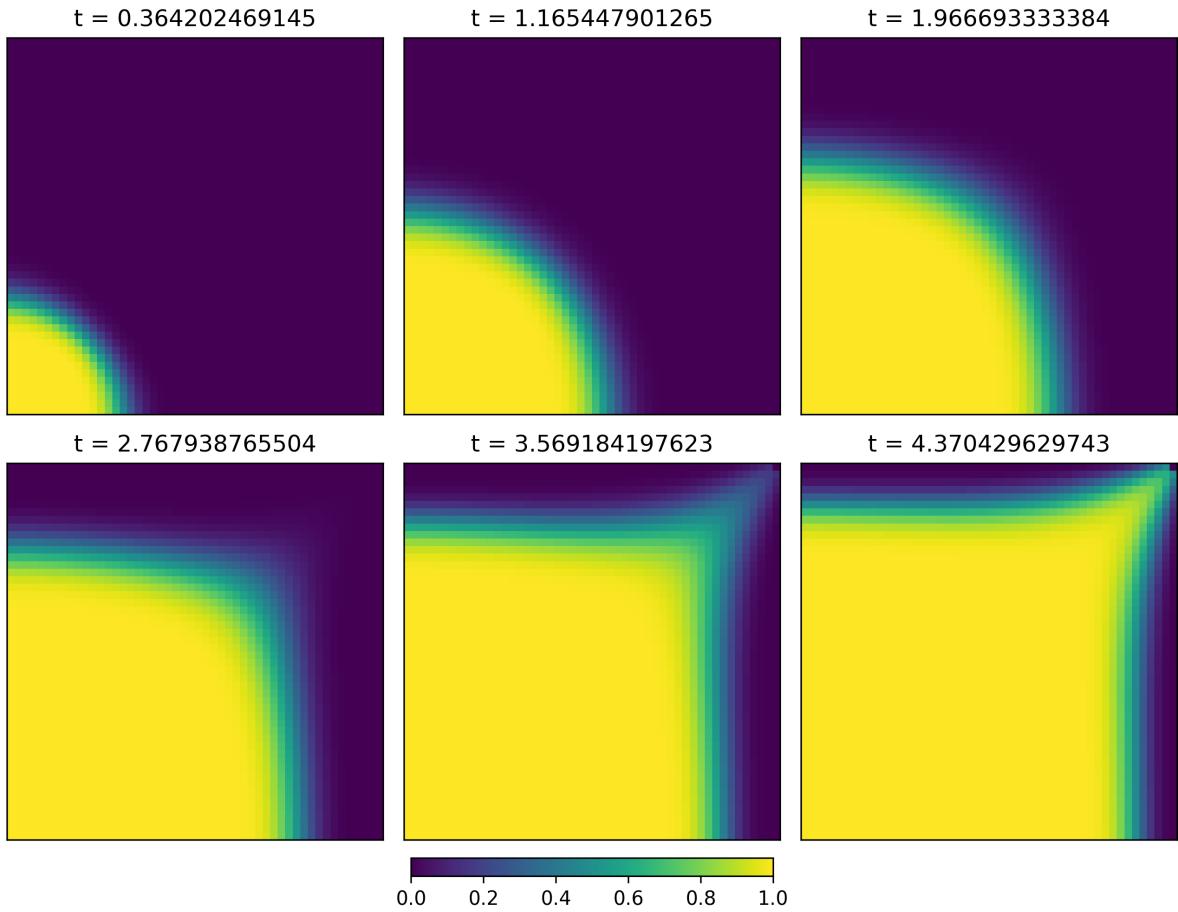


Figura 21 – Gráficos de concentrações de 2.8.3.

Exemplo 2.8.4. Neste segundo exemplo, dado um problema elíptico bidimensional simplificado como (2.6.1), uma configuração *a quarter of the five spot* como na definição 2.6.1 e condições de contorno homogêneas de Neumann:

$$\begin{cases} \nabla \cdot u = q & \text{em } \Omega = [0, 1] \times [0, 1] \\ u \cdot n = 0 & \text{sobre } \partial\Omega \\ -K\nabla p = u & \text{(Velocidade de Darcy)} \end{cases} .$$

Além disso, o problema tem um meio heterogêneo, com campo de permeabilidades dividido em cinco faixas verticais, termo fonte $\tilde{q} = 1$, poço de injeção na célula $(1, 1)$ e poço de produção em (N, M) . A permeabilidade absoluta $K(x, y)$ pode ser esquematizada por:

$$K(x, y) = \begin{cases} .1 & \text{se } y \in [0, .2] \cup (.8, 1] \\ .3 & \text{se } y \in (.2, .4] \cup (.6, .8] \\ .7 & \text{se } y \in (.4, .6] \end{cases}$$

para todo x . O campo de permeabilidade, assim como o de pressões e velocidades obtidos pela solução do problema elíptico acima, pode ser visualizado abaixo:

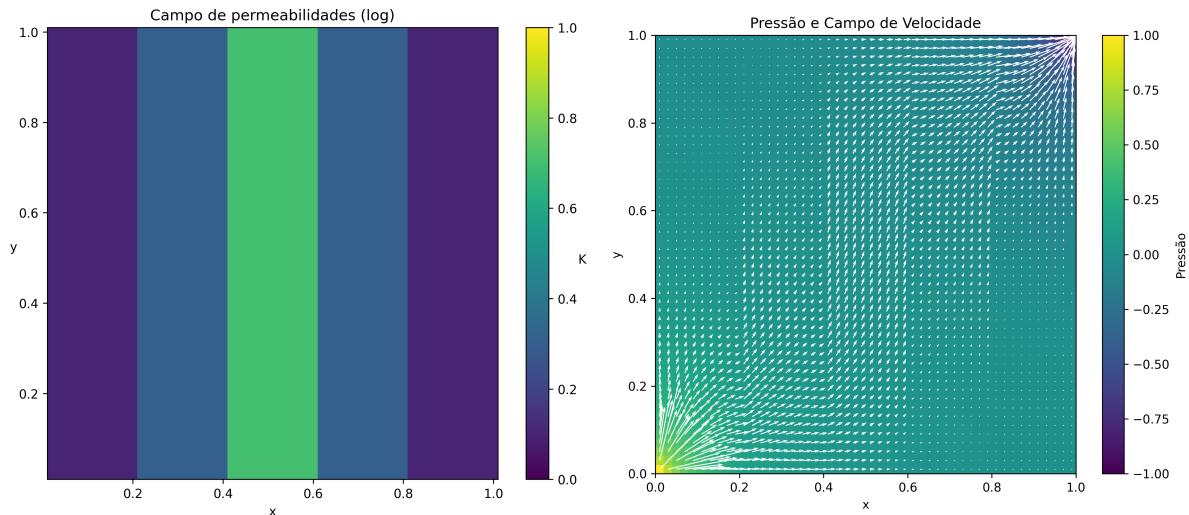


Figura 22 – Gráficos de permeabilidade e de pressão com velocidades não normalizadas

Então, dadas as velocidades conhecidas, simula-se a concentração do contaminante na malha com o método de discretização UpWind. Neste caso, a injeção do contaminante será somente no início da simulação e o que se observa é o óbvio, o contaminante tem fluxo mais acelerado nas faixas de maior permeabilidade:

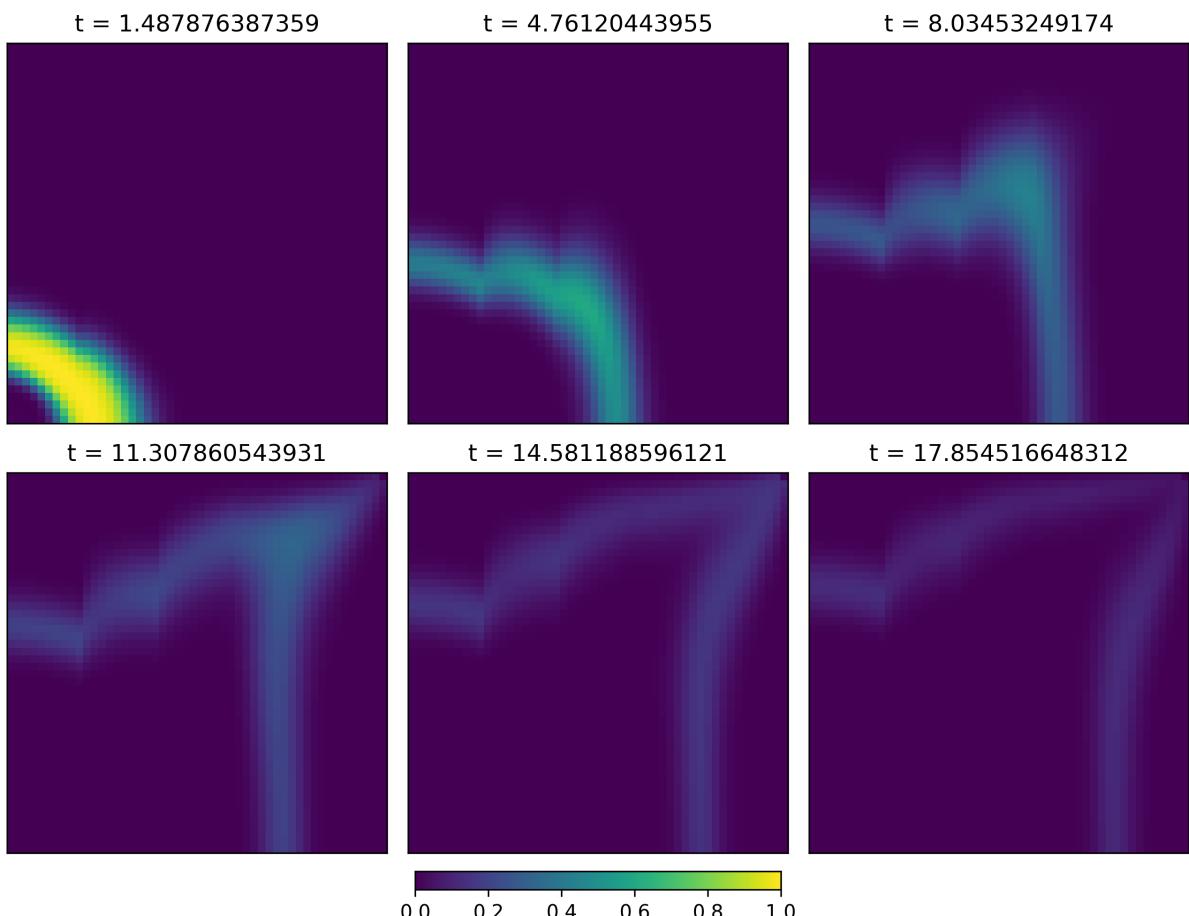


Figura 23 – Gráficos de concentrações de 2.8.4.

Exemplo 2.8.5. Neste terceiro exemplo, configura-se um problema elíptico bidimensional simplificado como (2.6.1), uma configuração *a quarter of the five spot* como na definição 2.6.1 e condições de contorno homogêneas de Neumann. Ademais, têm-se um campo de permeabilidades heterogêneo, com uma diagonal de maior permeabilidade e decaimento exponencial quanto mais distante dela:

$$K(x, y) = e^{-|x-y|-0.3}$$

para todo x, y . O campo de permeabilidade, assim como o de pressões e velocidades, pode ser visualizado abaixo:

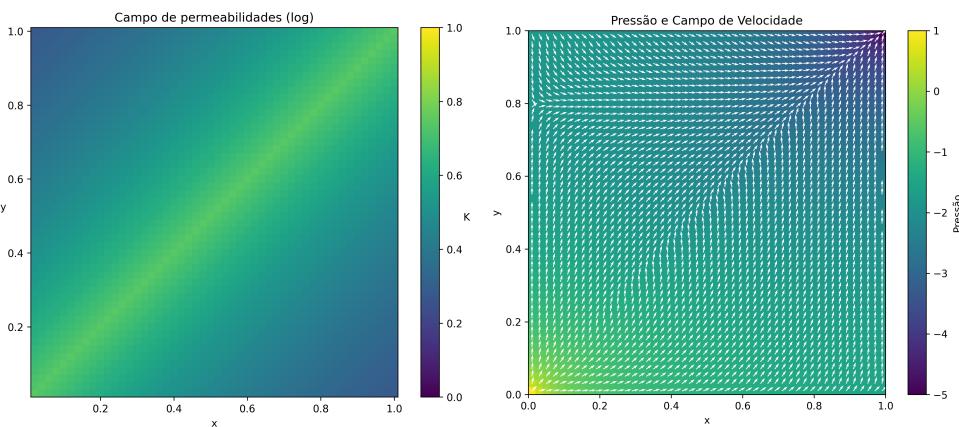


Figura 24 – Gráficos de permeabilidade e de pressão com velocidades normalizadas

Então, dadas as velocidades obtidas pela solução do problema elíptico descrito anteriormente, simula-se a concentração do contaminante na malha com o método de discretização UpWind. A injeção do contaminante será no início da simulação e o que se observa é intuitivo: um fluxo maior pela diagonal.

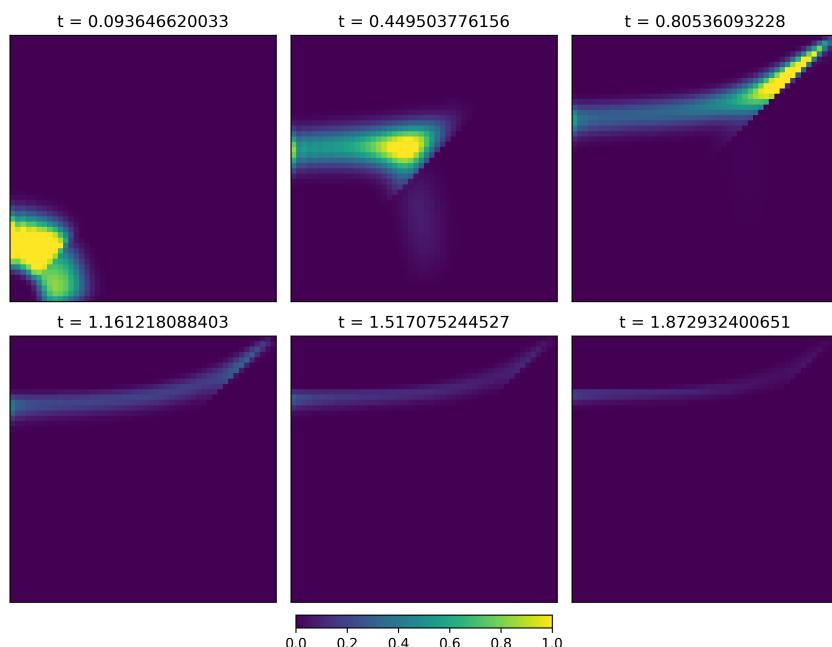


Figura 25 – Gráficos de concentrações de 2.8.5.

Exemplo 2.8.6. No quarto exemplo, esquematiza-se um problema elíptico bidimensional simplificado como (2.6.1), uma configuração *a quarter of the five spot* como na definição 2.6.1 e condições de contorno homogêneas de Neumann. Além, têm-se uma região circular de baixa permeabilidade no centro, sendo exponencialmente aumentada até as bordas. O campo não homogêneo pode ser obtido com

$$K(x, y) = \max \{e^{0.8d+0.1} - 1.1, 0.1\},$$

com d sendo a distância entre a coordenada (x, y) e o centro $(0.5, 0.5)$: $d = d(x, y) = \sqrt{(x - 0.5)^2 + (y - 0.5)^2}$, para todo x, y . O campo de permeabilidade, assim como o de pressões e velocidades, pode ser visualizado abaixo:

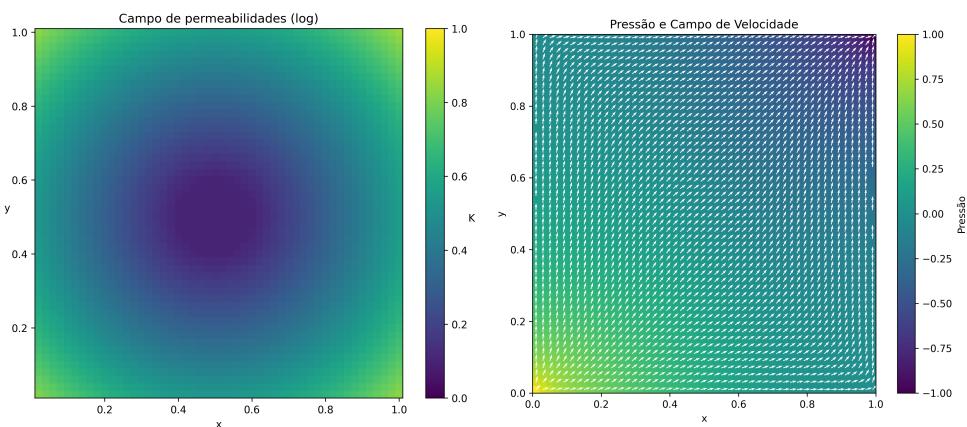


Figura 26 – Gráficos de permeabilidade e de pressão com velocidades normalizadas.

Dessa forma, dadas as velocidades pela solução do problema elíptico, calcula-se a concentração do contaminante no tempo com a injeção do contaminante somente no início da simulação. O contaminante, então, evita a região central, indo pelas bordas:

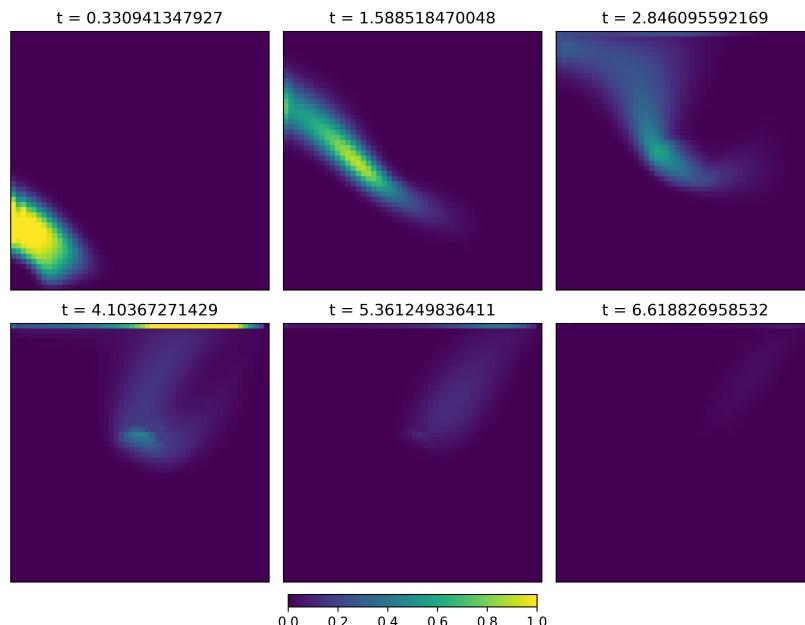


Figura 27 – Gráficos de concentrações de 2.8.6.

3 CONCLUSÃO

O objetivo principal deste trabalho de conclusão de curso consistiu em estudar *métodos numéricos para equações diferenciais* com aplicações em *meios porosos*, a fim de formar o aluno com uma base sólida e estruturada em mecânica do fluidos computacional e prepará-lo para o prosseguimento de seus estudos na pós-graduação. Considera-se que este objetivo foi alcançado, pois, conforme elaborado nesta monografia, foi possível abordar desde a teoria de equações diferenciais parciais e problemas de valores de contorno, até a modelagem de escoamentos monofásicos por meio do método de volumes finitos.

Além de revisitar e aprofundar tópicos já presentes na formação em Ciência da Computação – como álgebra linear, métodos numéricos e análise de algoritmos – este trabalho permitiu o estudo de conteúdos não contemplados na graduação, dentre os quais destacam-se o método de volumes finitos, a teoria de EDPs elípticas e hiperbólicas, e a simulação de escoamentos monofásicos.

Os resultados presentes na monografia demonstram a robustez do método de volumes finitos, tanto na discretização de equações elípticas quanto para as hiperbólicas; além de discutir, durante sua implementação no caso unidimensional, três técnicas de fatoração matricial para a resolução dos sistemas lineares resultantes. Os erros de truncamento obtidos foram consistentes com a literatura estudada, os exemplos numéricos incluíram casos de uma e duas dimensões, além de contemplarem diferentes níveis de complexidade e perfis de permeabilidade. As simulações permitiram a visualização dos campos de pressão e de velocidades, assim como da dispersão de contaminantes, então validando a metodologia adotada e reforçando sua aplicabilidade em problemas reais de engenharia de reservatórios e hidrologia.

Cabe ressaltar que o trabalho limitou-se ao tratamento de escoamentos monofásicos e incompressíveis, com equações governantes simplificadas e em geometrias uniformes de uma e duas dimensões. Não foram abordados fenômenos de escoamentos multifásicos (como óleo-água, relevantes para a indústria do petróleo), de malhas não estruturadas, de acoplamentos hidromecânicos, ou ainda (no contexto das tecnologias da computação) da paralelização de CPU ou GPU. Apesar disso, o estudo realizado serve como base promissora para investigações futuras, a exemplo de estudos envolvendo meios porosos não saturados e extensões para problemas tridimensionais e com termos de transporte reativo.

Por fim, este trabalho não apenas cumpriu seu propósito formativo, como também abriu caminho para a continuação da pesquisa acadêmica em matemática aplicada e computacional, áreas de grande relevância na academia, indústria e projetos de preservação ambiental.

REFERÊNCIAS

- 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.
- 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.
- 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). 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.
- MISHRA, S.; FJORDHOLM, U. S.; ABGRALL, R. **Numerical Methods for Conservation Laws and Related Equations**. 2017. Notas de Aula. Acesso em: 23 ago. 2025. Disponível em: https://metaphor.ethz.ch/x/2019/hs/401-4671-00L/literature/mishra_hyperbolic_pdes.pdf.
- SOUSA, 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.
- TSANG, C.-F.; ZHENG, C.; BODVARSSON, G. S. **Applied contaminant transport theory and practice**. 2. ed. Hoboken: Wiley-Interscience, 2005. XV–XVII p. (Wiley Series in Water Resources Engineering). ISBN 9780471713250.
- 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

Este apêndice tem como objetivo complementar a monografia com teoremas e definições, ainda que laterais ao objetivo final do trabalho, muito importantes para o bom andamento da leitura; no que tange a 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, tanto sendo 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
$u_{1j} = a_{1j}/l_{11} \quad \text{e} \quad l_{j1} = a_{j1}/u_{11};$
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 $LUw = b$ 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, são necessárias ainda algumas definições, começando com a singularidade de matrizes:

Definição A.1.1. 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.1.2. 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.1.1. (HIGHAM, 2002, p. 161) 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.1.2. (BURDEN; FAIRES; BURDEN, 2016, p. 448) 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 inferiores e superiores, L e U , respectivamente; da forma que (com $m_{ji} = a_{ji}^{(i)} / a_{ii}^{(i)}$),

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

Como as matrizes de permeabilidades tratadas nesta monografia são *diagonais dominantes*, é natural que sejam descritas as definições e teoremas para este tipo de matriz:

Definição A.1.3. (BURDEN; FAIRES; BURDEN, 2016, p. 457) Diz-se que a matriz $A_{N,N}$ é *diagonal dominante por linhas* quando

$$|a_{ii}| \geq \sum_{j=1, j \neq i}^N |a_{ij}|, \forall i = 1, 2, \dots, N, \quad (\text{A.1.1})$$

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.1.3. (HIGHAM, 2002, p. 172) 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

Definição A.2.1. (HIGHAM, 2002, p. 196) Uma matriz simétrica $A \in \mathbb{R}^{n \times n}$ é positiva definida se $x^t Ax > 0$ para todos os vetores não nulos $x \in \mathbb{R}$. Condições equivalentes conhecidas para $A = A^t$ ser positiva definida são:

- i. $\det(A_k) > 0$, $k = 1 : n$, onde $A_k = A(1 : k, 1 : k)$ é a submatriz principal líder de ordem K ; e
- ii. $\lambda_k(A) > 0$, $k = 1 : n$, onde λ_k é o k -ésimo maior autovalor.

¹ Este teorema é uma versão condensada do *teorema 9.9* em HIGHAM (2002, p. 172). Isto foi feito, pois o teorema abrangia outros conceitos que não serão importantes para este trabalho, assim podendo atrapalhar o seguimento.

Já pela primeira condição, implica-se que A tem uma fatoração LU (ver teorema A.1.1)

Teorema A.2.1. (HIGHAM, 2002, p. 196) Se $A \in \mathbb{R}^{N \times N}$ é simétrica positiva definida, então existe uma única matriz triangular inferior $L \in \mathbb{R}^{N \times N}$ com elementos da diagonal positivos tal que $LL^t = A$.

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 .

E tem um custo de $n^3/3$ 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 .

Nesta monografia, não há uma indicação direta que as matrizes tridiagonais estudadas sejam necessariamente simétricas positivas definidas, portanto são usados outros resultados que justificam a fatoração de Cholesky e LDL^t :

Teorema A.2.2. (BURDEN; FAIRES; BURDEN, 2016, p. 463) A matriz simétrica A é definida positiva se e somente se a eliminação de Gauss sem trocas de linhas puder ser feita no sistema linear $Ax = b$, com todos os elementos pivô positivos. Além disso, nesse caso, os cálculos são estáveis com relação ao crescimento de erros de arredondamento.

Corolário A.2.3. (BURDEN; FAIRES; BURDEN, 2016, p. 463) Seja A uma matriz $n \times n$ simétrica para a qual a eliminação de Gauss possa ser aplicada sem trocas de linhas. Então, A pode ser fatorada em LDL^t , em que L é triangular inferior com 1 em sua diagonal e D é a matriz diagonal com $a_{11}^{(1)}, \dots, a_{nn}^{(n)}$ em sua diagonal.

A.3 Fatoração LU tridiagonal em bloco

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

Teorema A.3.1. (ISAACSON; KELLER, 1966, p. 61) 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, se 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 $i = 2, 3, \dots, N$,

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

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 O MÉTODO DE VOLUMES FINITOS

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

$$\begin{cases} -\nabla \cdot (\nabla u) = f(x) & x \in (0, 1) \\ u(0) = 0 \\ u(1) = 0 \end{cases}. \quad (\text{B.0.1})$$

Se $f \in C([0, 1], \mathbb{R})$, existe uma única solução $u \in C^2([0, 1], \mathbb{R})$ para (B.0.1). Para computar uma aproximação numérica para a solução, segue a definição de uma malha admissível:

Definição B.0.1. (EYMARD; GALLOUËT; HERBIN, 2000, p. 729) 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

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

Colocando

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

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 (B.0.1) é escrito como

$$\begin{aligned} F_{i+1/2} - F_{i-1/2} &= h_i f_i & \forall i = 1, \dots, N, \\ F_{i+1/2} &= -\frac{u_{i+1} - u_i}{h_{i+1/2}} & \forall i = 0, \dots, N, \end{aligned} \quad (\text{B.0.2})$$

com, especialmente, $u_0 = u_{N+1} = 0$. Agora, um teorema para uma estimativa de erro para o problema simples (B.0.1)

Teorema B.0.1. (EYMARD; GALLOUËT; HERBIN, 2000, p. 735) Seja $f \in C([0, 1], \mathbb{R})$ e $u \in C^2([0, 1], \mathbb{R})$ uma solução (única) para o problema (B.0.1). Dada uma malha admissível (no sentido da definição B.0.1), então existe um vetor único $U = (u_1, \dots, u_N)^t \in \mathbb{R}^N$ solução para (B.0.2) e existe $T \geq 0$, somente dependendo de u , tal que

$$\sum_{i=0}^N \frac{(e_{i+1} - e_i)^2}{h_{i+1/2}} \leq T^2 h^2 \quad (\text{B.0.3})$$

e

$$|e_i| \leq Th, \quad \forall i = 1, \dots, N, \quad (\text{B.0.4})$$

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