

**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. 73 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 Monofásico. 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

O caminho da universidade não teria sido nada além de um moroso tédio se não fossem os colegas que pude encontrar, pelas conversas de corredor, pelos passeios até o bandejão. 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 nos maiores risos. Nossa quarteto tornou-se minha família especial nesta cidade tão nova. Além, gostaria de agradecer a tantos primos que pude colecionar, aos meus amigos Sávio Guilherme, Edmara Viana, Maria José Ayala, aos meus colegas do Centro Estudantil da Computação, da Representação Discente e à minha família Amendoin.

Meus recessos, passei em Brasília acompanhado de um grupo tão meigo, que a distância somente enraizou nossa amizade. 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?**, 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, de quem me orgulho tão demasiadamente. Por fim, sou profundamente grato à plethora de professores do meu Ensino Médio, mas especialmente ao matemático Eliomar, à artista e tatuadora Isabela Alves e à historiadora Danielle Magalhões, que me orientaram nos tão incômodos meandros da puerilidade.

*“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. 73 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. 73 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 $[0, 1]$.	26
Figura 2 – Comparação y_i e w_i , com erro médio de $0,6809 \times 10^{-5}$.	30
Figura 3 – Simplificação da vibração de uma corda em um berimbau.	33
Figura 5 – Esquema de volumes finitos unidimensional.	36
Figura 6 – Solução por diferentes métodos de fatoração (Crout e LDL^t)	40
Figura 7 – Solução pelo método de fatoração de Crout	41
Figura 8 – Componentes norte, sul, leste e oeste em $\partial V_{i,j}$.	41
Figura 9 – Componentes norte, sul, leste e oeste em $\partial V_{i,j}$.	44
Figura 10 – Campo de pressões e vetores dos exemplos.	47
Figura 11 – Diferentes curvas características.	49
Figura 12 – Uma discretização de volumes finitos para leis de conservação hiperbólicas.	49
Figura 13 – Propagação da informação de t^n para t^{n+1} .	53
Figura 14 – Gráfico de concentrações em quatro tempos diferentes.	53
Figura 15 – Campo de pressões e velocidades.	54
Figura 16 – Gráfico de concentrações em quatro tempos diferentes.	54
Figura 17 – Gráficos de concentrações de 2.8.3.	56
Figura 18 – Gráficos de permeabilidade e de pressão com velocidades não normalizadas	57
Figura 19 – Gráficos de concentrações de 2.8.4.	57
Figura 20 – Gráficos de permeabilidade e de pressão com velocidades normalizadas	58
Figura 21 – Gráficos de concentrações de 2.8.5.	58
Figura 22 – Gráficos de permeabilidade e de pressão com velocidades normalizadas	59
Figura 23 – Gráficos de concentrações de 2.8.5.	59

LISTA DE TABELAS

Tabela 1 – Tempos médios de métodos de fatoração diferentes para o problema unidimensional.	40
---	----

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)

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
\mathbf{u}	Velocidade de Darcy
\mathbf{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 do domínio
$O(\cdot)$	Ordem de grandeza (notação Big O)
ν	Número de Courant (CFL)

SUMÁRIO

1	INTRODUÇÃO	21
	1.1 Nota técnica	21
2	DESENVOLVIMENTO	23
	2.1 Conceitos iniciais	23
	2.1.1 Detalhes para Equações Diferenciais Ordinárias	23
	2.1.2 Detalhes para Equações Diferenciais Parciais	24
	2.2 Problemas de Valores de Contorno	25
	2.2.1 Método das diferenças finitas para problemas lineares	26
	2.2.2 Implementação do método das diferenças finitas linear	28
	2.3 Definições gerais e propriedades de meios porosos e de fluidos	30
	2.3.1 Meios porosos	30
	2.3.2 Fluidos	31
	2.3.3 Lei de Darcy	31
	2.4 Modelagem de escoamentos monofásicos	32
	2.4.1 Condições auxiliares	33
	2.4.2 Meios homogêneos e heterogêneos	34
	2.5 Uma breve introdução ao método de volumes finitos	34
	2.6 Método de volumes finitos para equações elípticas	35
	2.6.1 Caso unidimensional	36
	2.6.1.1 Implementação	37
	2.6.2 Caso bidimensional	41
	2.6.2.1 Condição de contorno de Neumann	42
	2.6.2.2 Condição de contorno de Dirichlet	43
	2.6.2.3 Implementação	44
	2.7 Introdução a problemas de transporte passivo em meios porosos	46
	2.7.1 Derivação de leis de conservação hiperbólicas	47
	2.7.2 Equação de transporte linear	48
	2.8 Método de volumes finitos para equações hiperbólicas	49
	2.8.1 Método upwind para aproximação de fluxos discretos em uma dimensão	50
	2.8.1.1 Caso de coeficientes constantes	50
	2.8.1.2 Caso de coeficientes variáveis	51
	2.8.1.3 Condição CFL	52
	2.8.1.4 Exemplos do caso unidimensional	53
	2.8.2 Método upwind para aproximação de fluxos discretos em duas dimensões	55

2.8.2.1 Exemplos do caso bidimensional	56
3 CONCLUSÃO	61
REFERÊNCIAS	63
APÊNDICES	65
APÊNDICE A – NOTAS SOBRE FATORAÇÃO DE MATRIZES . . .	67
A.1 Fatoração LU	67
A.2 Fatoração de Cholesky	69
A.3 Fatoração LU em bloco	70
APÊNDICE B – NOTAS SOBRE O MÉTODO DE VOLUMES FINITOS	73

1 INTRODUÇÃO

Um meio poroso é um material caracterizado pela 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, pp. XV-XVII).

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

A segunda 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 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

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

2.1.1 Detalhes para Equações Diferenciais Ordinárias

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

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

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

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

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

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

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

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

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: *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

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

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

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

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

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

a não ser que $A = B = C = 0$.

Um exemplo de equação elíptica é a equação de Poisson

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

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

Agora, a equação

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

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

2.2 Problemas de Valores de Contorno

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

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

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

Teorema 2.2.1. (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_{yy} também sejam contínuas em D . Se

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

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 trata de uma 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

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

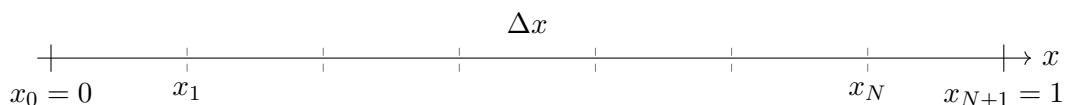


Figura 1 – Malha uniforme no intervalo $[0, 1]$.

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

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

é uma aproximação razoável, a expressão

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

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

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

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

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

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

Definição 2.2.1. Dado uma função $f(s)$, $f(s) = O(\phi(s))$ para $s \in S$ se existe uma constante A tal que $|f(s)| \leq A|\phi(s)|$ para todo $s \in S$. Diz-se que $f(x)$ é a *big O* de $\phi(s)$ ou que $f(x)$ é da ordem de $\phi(s)$.

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

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

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

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

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

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

Teorema 2.2.3. (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), da forma que $Aw = LUw = b$, então

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

Então, tomindo $Uw = x$, 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 (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 $N = 19$ e, portanto, $h = 0,01$, com a solução exata:

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

em que

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

e

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

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

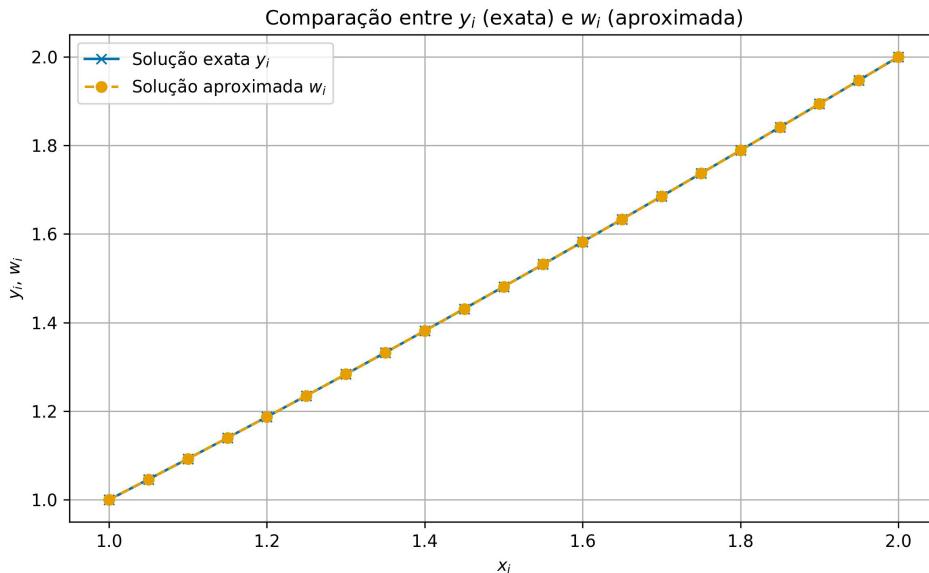


Figura 2 – Comparação y_i e w_i , com erro médio de $0,6809 \times 10^{-5}$.

2.3 Definições gerais e propriedades de meios porosos e de fluidos

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

2.3.1 Meios porosos

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

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

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

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

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 , e normalmente se assume uma aproximação linear (usando expansão em séries de Taylor):

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

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

2.3.2 Fluidos

A compressibilidade c_f 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 de areia com água, de largura A e altura L , onde sua *altura hidráulica* h (com h_t no topo e h_b na base) em relação a um ponto fixo z :

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

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

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

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

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

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

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

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.

2.4 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

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

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, ρ e ϕ são independentes de p e, portanto, $c_t = 0$. Portanto, 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 Vale lembrar que o teorema da divergência afirma que: o fluxo de um campo vetorial F pela superfície de fronteira de uma região sólida simples E é igual à integral tripla do divergente de F ($\nabla \cdot F$) em E .

2.4.1 Condições auxiliares

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

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

Exemplo 2.4.1 (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:

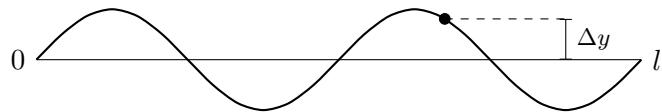


Figura 3 – Simplificação da vibração de uma corda em um berimbau.

Se for considerado $y = v(x, t)$ 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 nas bordas ∂G , pois o fluxo de calor é nulo entre as bordas.

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:

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

onde k é a condutividade térmica da barra, h é o coeficiente de transferência de calor por convecção, $u(l, t)$ é a temperatura na extremidade da barra e $T_{\text{env}}(t)$ é a temperatura do reservatório. Rearranjando, têm-se a condição de Robin não homogênea:

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

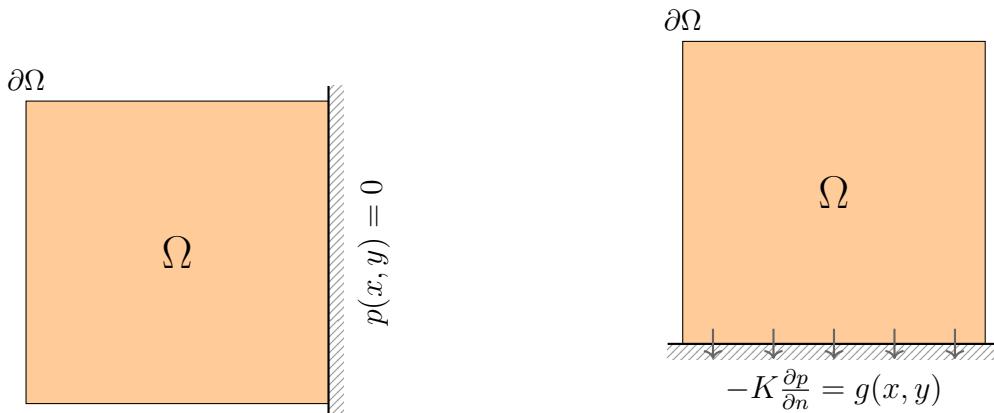
onde $\beta = h/k > 0$.

2.4.2 Meios homogêneos e heterogêneos

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

$$\begin{cases} \nabla \cdot u = \frac{q}{\rho} & \text{em } \Omega \\ u = -\frac{K}{\mu} \nabla p & \text{em } \Omega \\ p = p_b & \text{em } \partial\Omega_p \\ u \cdot n = u_b & \text{em } \partial\Omega_u. \end{cases} \quad (2.4.7)$$

Um meio dito *homogêneo*, governado pelo sistema de escoamentos monofásicos (2.4.7), 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.



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

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

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

2.5 Uma breve introdução ao método de volumes finitos

O *método de volumes finitos* é um método de discretização útil para simulações numéricas de leis de conservação de vários tipos: elípticas, hiperbólicas ou parabólicas, por exemplo. Este método tem alguns pontos importantes, como poder ser usado em geometrias arbitrárias, usar

³ Para uma função v qualquer que, por exemplo, determina a posição x em um determinado tempo, a condição de contorno de Neumann dá sua derivada normal $\partial v / \partial n$, por isso aparece a condição de Robin como $\alpha v + \beta \partial v / \partial n$. Como, no contexto deste trabalho, u é a velocidade de Darcy (2.3.6), pode-se escrever o contorno de Robin tal como no início desta subseção.

malhas estruturadas ou não, além de conservar localmente os fluxos numéricos; o que o faz particularmente interessante para problemas de mecânica dos fluidos. Comparativamente, o método de volumes finitos é um tanto diferente dos métodos de diferenças finitas (já explorado, em parte, na subseção 2.2.2) e de elementos finitos⁴.

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

O *método de elementos finitos* é baseado em uma formulação 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

2.6 Método de volumes finitos para equações elípticas

Nesta seção, usando como referência o livro (SOUSA; ROCHA, 2022), serão explorados os esquemas de volumes finitos para equações elípticas, com o objetivo de aproximar numericamente a solução do sistema (2.6.1) com simplificações, resultando em:

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

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

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

⁴ Este 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.

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

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

e com o teorema da divergência,

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

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 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

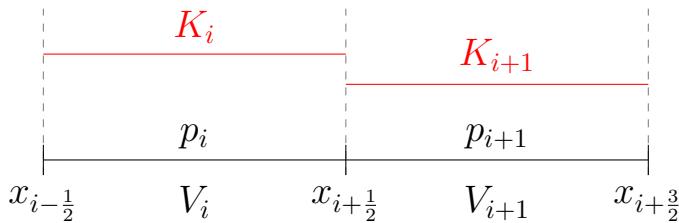


Figura 5 – Esquema de volumes finitos unidimensional.

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 5). 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,

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

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

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 (2.6.5) em cada volume V_i é dada por

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

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

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

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

e então para a primeira equação do sistema (2.6.10) fica

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

e na outra extremidade similarmente.

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

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

e então a última equação do sistema (2.6.10) fica

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

e na outra extremidade similarmente.

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

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

e

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

Nota-se que a matriz A é diagonal dominante, portanto, pelo teorema A.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 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:

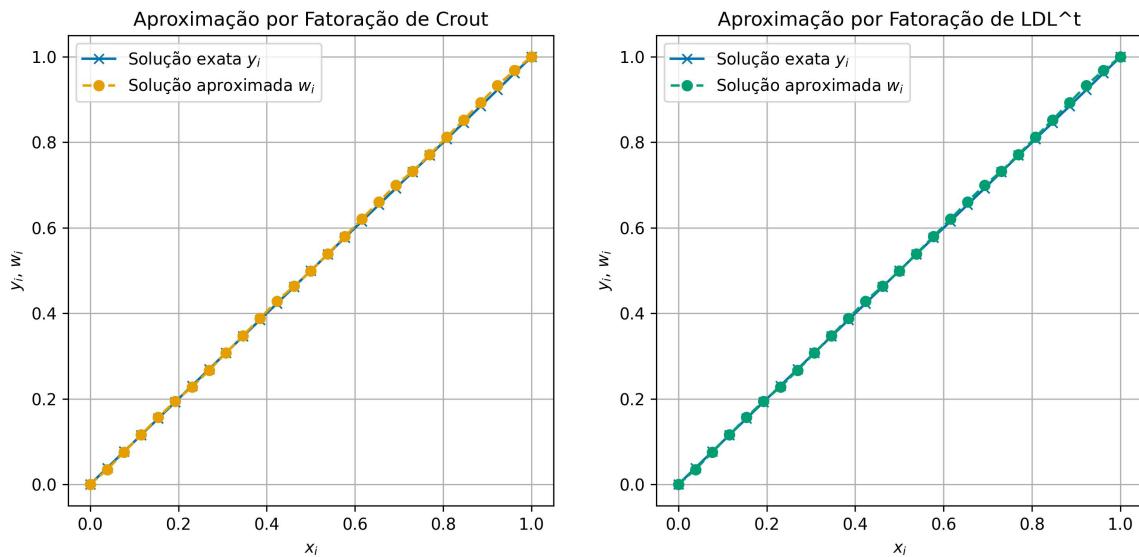


Figura 6 – Solução por diferentes métodos de fatoração (Crout e LDL^t)

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

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

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

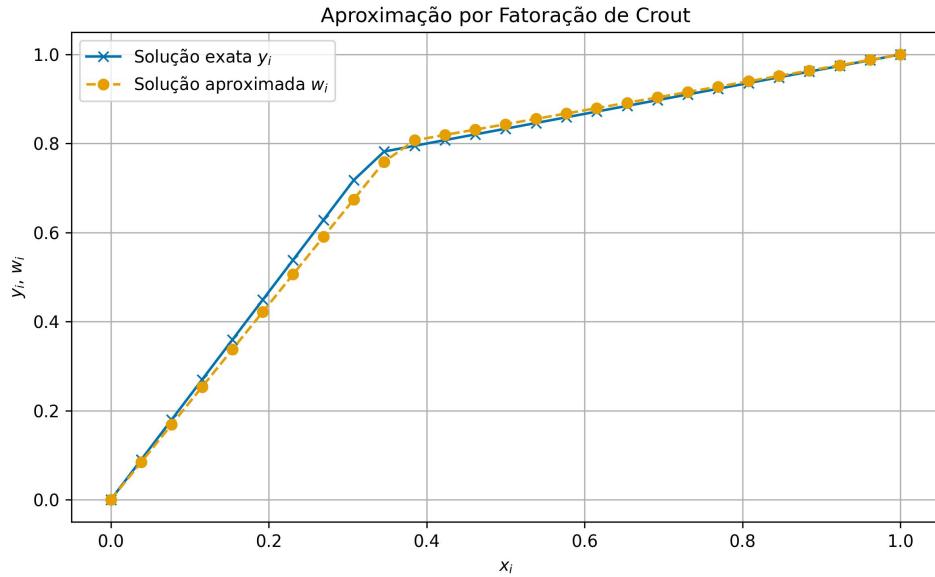


Figura 7 – Solução pelo método de fatoração de Crout

2.6.2 Caso bidimensional

A generalização do método de volumes finitos para uma dimensão maior segue um procedimento análogo à subseção anterior, obter uma discretização de (2.6.4) 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 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 9 abaixo.

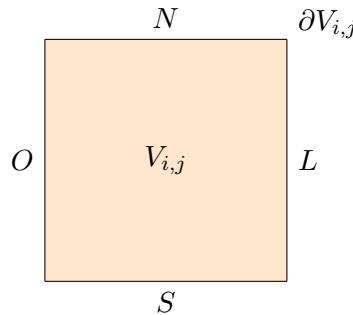


Figura 8 – Componentes norte, sul, leste e oeste em $\partial V_{i,j}$.

Com isso, têm-se

$$\int_{\partial V_{i,j}} u \cdot n \, ds = \int_N u \cdot n_N \, ds + \int_S u \cdot n_S \, ds + \int_L u \cdot n_L \, ds + \int_O u \cdot n_O \, ds, \quad (2.6.12)$$

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

$$\int_S u \cdot n_S \, ds = \int_{x_{i-1/2}}^{x_{i+1/2}} K \frac{\partial p}{\partial y} \Big|_{(x,y_{j-1/2})} \, dx \quad (2.6.13)$$

$$\simeq \int_{x_{i-1/2}}^{x_{i+1/2}} -\frac{2K_{i,j-1}K_{i,j}}{K_{i,j-1}K_{i,j}} \left(\frac{p_{i,j} - p_{i,j-1}}{\Delta y} \right) \, dx \quad (2.6.14)$$

$$= \frac{\Delta x}{\Delta y} K_{i,j-\frac{1}{2}} (p_{i,j-1} - p_{i,j}), \quad (2.6.15)$$

com $n_S = (0, -1)$, e similarmente para as outras faces. Portanto, a forma discreta de 2.6.4 para um problema bidimensional é

$$\begin{aligned} q_{i,j} = & -\frac{1}{\Delta y^2} K_{i,j+\frac{1}{2}} p_{i,j+1} - \frac{1}{\Delta y^2} K_{i,j-\frac{1}{2}} p_{i,j-1} \\ & - \frac{1}{\Delta x^2} K_{i+\frac{1}{2},j} p_{i+1,j} - \frac{1}{\Delta x^2} K_{i-\frac{1}{2},j} p_{i-1,j} \\ & + \left(\frac{1}{\Delta y^2} K_{i,j+\frac{1}{2}} + \frac{1}{\Delta y^2} K_{i,j-\frac{1}{2}} + \frac{1}{\Delta x^2} K_{i+\frac{1}{2},j} + \frac{1}{\Delta x^2} K_{i-\frac{1}{2},j} \right) p_{i,j} \end{aligned} \quad (2.6.16)$$

onde se usam as médias harmônicas $K_{i,j\pm 1/2} K_{i\pm 1/2,j}$. Após a pressão ser calculada (via métodos numéricos da parte 2.6.2.3), o campo de velocidades pode ser calculado usando a mesma estratégia de aproximação dos fluxos nas integrais em $\partial V_{i,j}$. Pela definição da velocidade de Darcy (2.3.6):

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

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

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

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

$$u_{i,j} = \frac{u_L + u_O}{2} \quad \text{e} \quad v_{i,j} = \frac{v_N + v_S}{2}. \quad (2.6.17)$$

2.6.2.1 Condição de contorno de Neumann

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

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

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

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

Portanto, sua contribuição na equação (2.6.12) será eliminada. Caso g não seja nula, têm-se uma condição de contorno do tipo *não homogênea*, e a integral será alterada para:

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

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

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

da forma que a equação (2.6.16) será modificada (no exemplo de quando $i = M$) para

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

2.6.2.2 Condição de contorno de Dirichlet

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

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

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

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

E novamente, integra-se g em G_i :

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

e portanto, a equação (2.6.16) será modificada (no exemplo de quando $j = 1$) para

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

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

2.6.2.3 Implementação

Considerando uma discretização $M \times N$ células, o esquema (2.6.16) pode ser escrito em forma matricial

$$Aw = d$$

com $w = (p_1, \dots, p_{MN})^t$ e $b = (q_1, \dots, q_{MN})^t$. Cada linha da matriz A está relacionada com uma célula (i, j) e leva em consideração as contribuições de seus quatro vizinhos $(i - 1, j)$, $(i + 1, j)$, $(i, j - 1)$ e $(i, j + 1)$. Para ordenar as células no caso bidimensional, pode-se escolher (entre as triviais) ordenar por colunas ou linhas; por exemplo, em uma malha 3×3 , as células podem ser ordenadas (por linhas) da esquerda para direita, de cima para baixo, como a figura 9.

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

Figura 9 – Componentes norte, sul, leste e oeste em $\partial V_{i,j}$.

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

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

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

$$w = (w^{(1)}, \dots, w^{(Q)})^t \text{ e } d = (d^{(1)}, \dots, d^{(Q)})^t, \quad (2.6.18)$$

e algoritmo de resolução:

Solução usando fatoração LU em bloco

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

$$\bar{A}_1\Gamma_1 = C_1; \quad (2.6.19)$$

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 $O(\frac{5}{3}NM^3)$, em ISAACSON e KELLER (1966, pp. 58-61). Abaixo, estão alguns exemplos de campos de pressão em duas dimensões:

Exemplo 2.6.3. Dado um problema elíptico bidimensional de contorno Neumann homogêneo

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

onde a permeabilidade absoluta do meio é $K = 1$ e solução exata $p(x) = \cos(2\pi x) \cos(2\pi y)$, 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 imagem 10a abaixo.

Exemplo 2.6.4. 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 nos extremos de Ω . Então, consideram-se condições de contorno homogêneas de Neumann, $\partial\Omega = \partial\Omega_u$ com $u_b = 0$.

Usando esses conceitos, usando uma permeabilidade absoluta $K(x) = 1$ constante e termo fonte $\tilde{q} = 1$. O gráfico do campo de pressões com vetores normalizados pode ser visualizado na imagem 10b abaixo. Para este problema, assim como no exemplo anterior, é preciso especificar a pressão para evitar a indeterminação.

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

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.

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

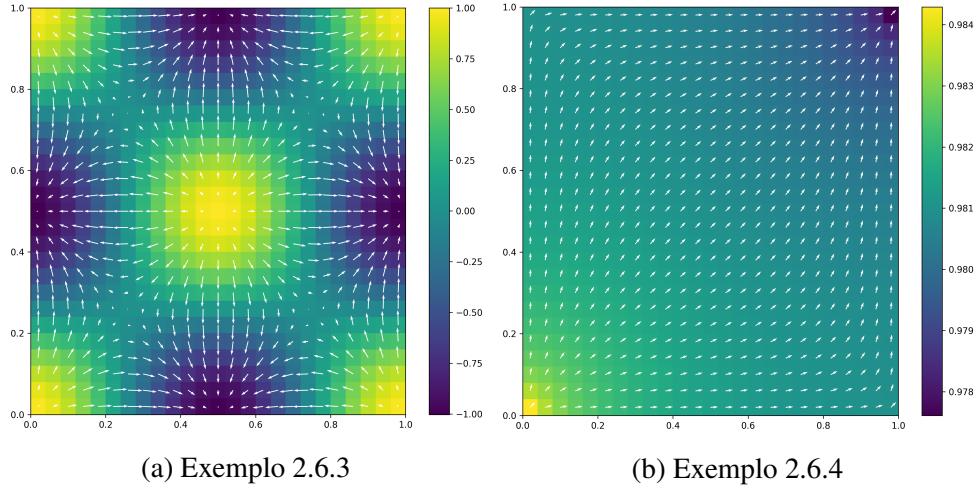


Figura 10 – Campo de pressões e vetores dos exemplos.

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 $\partial\Omega^- = \{x \in \partial\Omega; u \cdot n_{\partial\Omega} < 0\}$. 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, é possível escalar a primeira equação de 2.7.2 para

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

onde $\tau = t/\phi$. Como a velocidade u é conhecida e não depende da concentração, 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 *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 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 à Ω , $f(c)$ 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 hiperbólicas 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 estrutura da equação. Portanto, assumindo que 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 $x'(t)$ é constante, as trajetórias

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

chamadas de *curvas características*, são soluções para a equação (2.7.7).

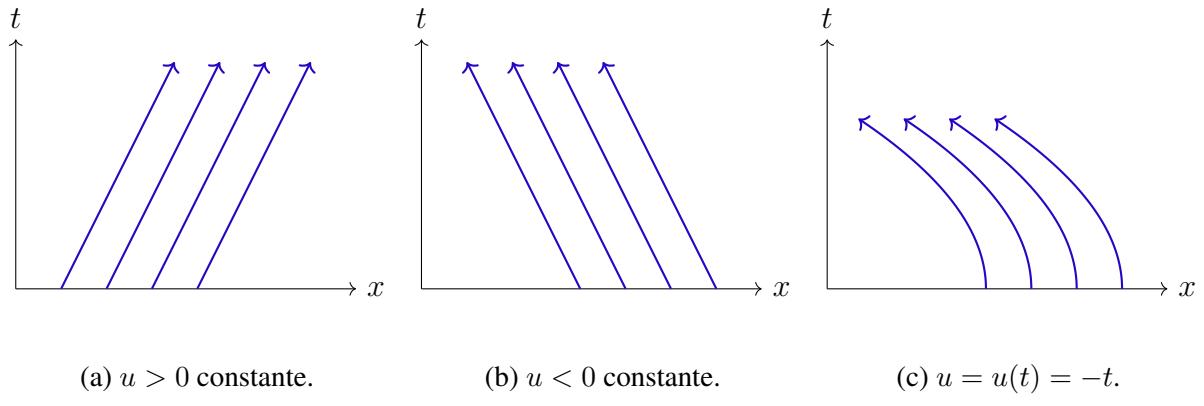


Figura 11 – Diferentes curvas características.

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:

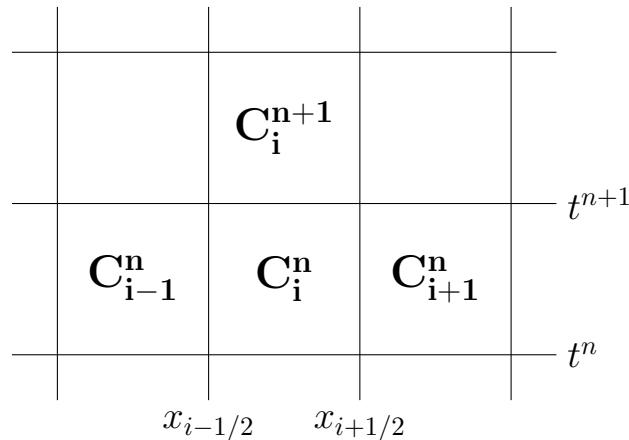


Figura 12 – Uma discretização de volumes finitos para leis de conservação hiperbólicas.

Em cada passo de tempo t^j , 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 $F_{i\pm\frac{1}{2}}^n$, 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:

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

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

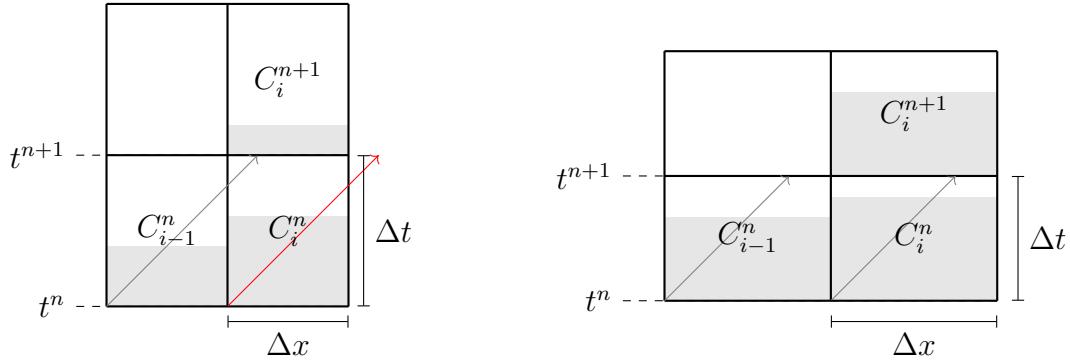
$$\begin{aligned} C_i^{n+1} &= C_i^n - \frac{\Delta t}{\Delta x} \left[\left(u^+(x_{i+\frac{1}{2}}) - u^+(x_{i-\frac{1}{2}}) + u^-(x_{i+\frac{1}{2}}) - u^-(x_{i-\frac{1}{2}}) \right) C_i^n \right] \\ &\quad - \frac{\Delta t}{\Delta x} \left[u^-(x_{i-\frac{1}{2}}) W_{i-\frac{1}{2}} + u^+(x_{i+\frac{1}{2}})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

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:

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

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:



(a) Condição CFL não satisfeita, $\Delta t > \Delta x$. (b) Condição CFL satisfeita, $\Delta t < \Delta x$.

Figura 13 – 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:

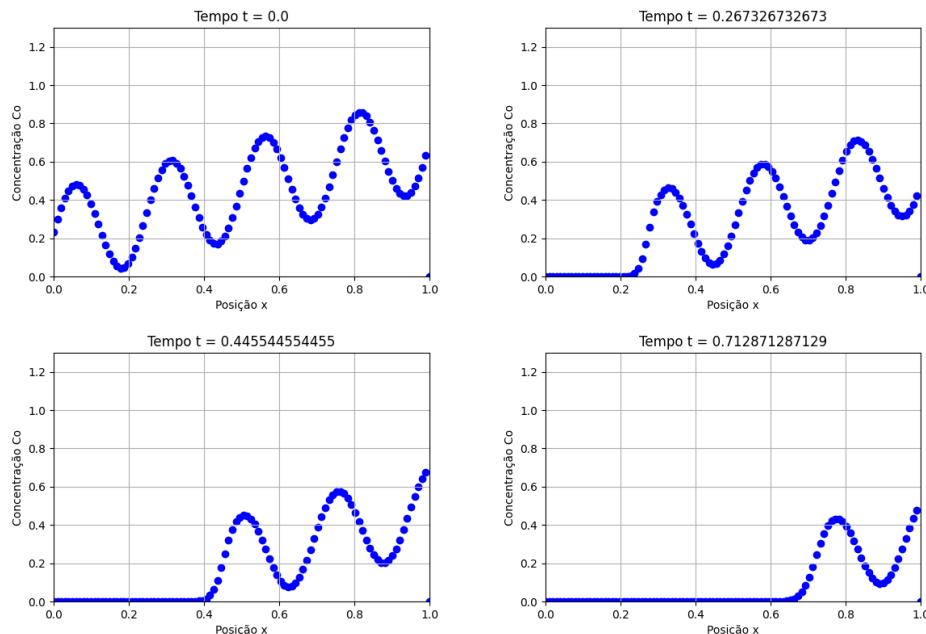


Figura 14 – Gráfico de concentrações em quatro tempos diferentes.

Exemplo 2.8.2. Dado o problema de contorno unidimensional (2.6.1),

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

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

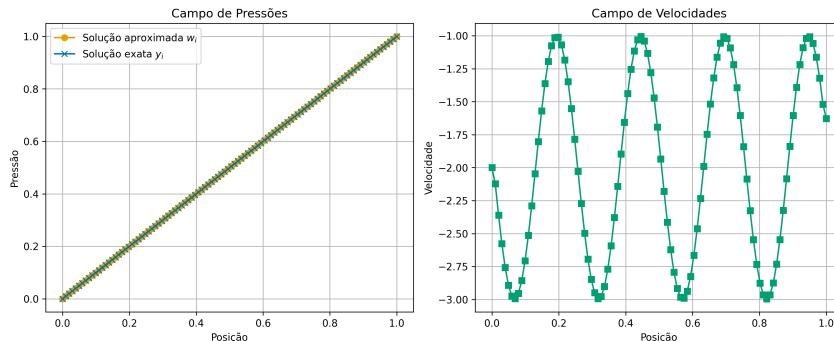


Figura 15 – Campo de pressões e velocidades.

Ademais, dado o problema de concentração de contaminante $c(x, t)$, em $\Omega_h = [0, 100]$:

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

Por fim, tendo uma condição de contorno onde se injeta o contaminante por uma função $g(x)$, considerando o índice n temporal da concentração $C_{i=N}^n$ dada por:

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

Utilizando a equação (2.8.8), é possível chegar numa solução onde o contaminante passa pelo reservatório da direita para a esquerda:

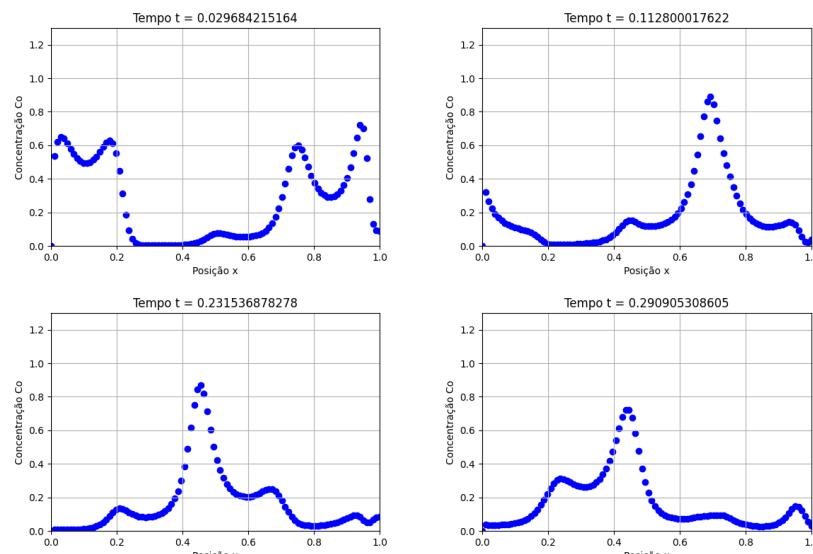


Figura 16 – Gráfico de concentrações em quatro tempos diferentes.

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

$$c_t + f_x(c) + g_y(c) = 0, \quad (2.8.9)$$

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

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

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 2.8.9 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

$$\int_{t^n}^{t^{n+1}} \int_{y_{j-\frac{1}{2}}}^{y_{j+\frac{1}{2}}} \int_{x_{i-\frac{1}{2}}}^{x_{i+\frac{1}{2}}} (c_t + f_x(c) + g_y(c)) dx dy dt = 0. \quad (2.8.10)$$

Com manipulações matemáticas e definindo

$$\bar{F}_{i+\frac{1}{2},j}^n = \frac{1}{\Delta t \Delta x} \int_{t^n}^{t^{n+1}} \int_{y_{j-\frac{1}{2}}}^{y_{j+\frac{1}{2}}} f(c(x_{i+\frac{1}{2}}, y, t)) dy dt \quad (2.8.11)$$

e

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

além de dividir ambos os lados de 2.8.10 por $\Delta x \Delta y$, têm-se

$$C_{i,j}^{n+1} = C_{i,j}^n - \frac{\Delta t}{\Delta x} \left(\bar{F}_{i+\frac{1}{2},j}^n - \bar{F}_{i-\frac{1}{2},j}^n \right) - \frac{\Delta t}{\Delta y} \left(\bar{G}_{i,j+\frac{1}{2}}^n - \bar{G}_{i,j-\frac{1}{2}}^n \right) \quad (2.8.13)$$

onde os fluxos \bar{F} e \bar{G} podem ser aproximados por fluxos discretos em cada direção. 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.

Exemplo 2.8.3. O primeiro exemplo é o mais simples, utiliza do mesmo esquema de 2.6.4, com equação de permeabilidade $K(x, y) = 1$ e uma injeção constante de contaminante. A dispersão do contaminante é uniforme, podendo ser observadas:

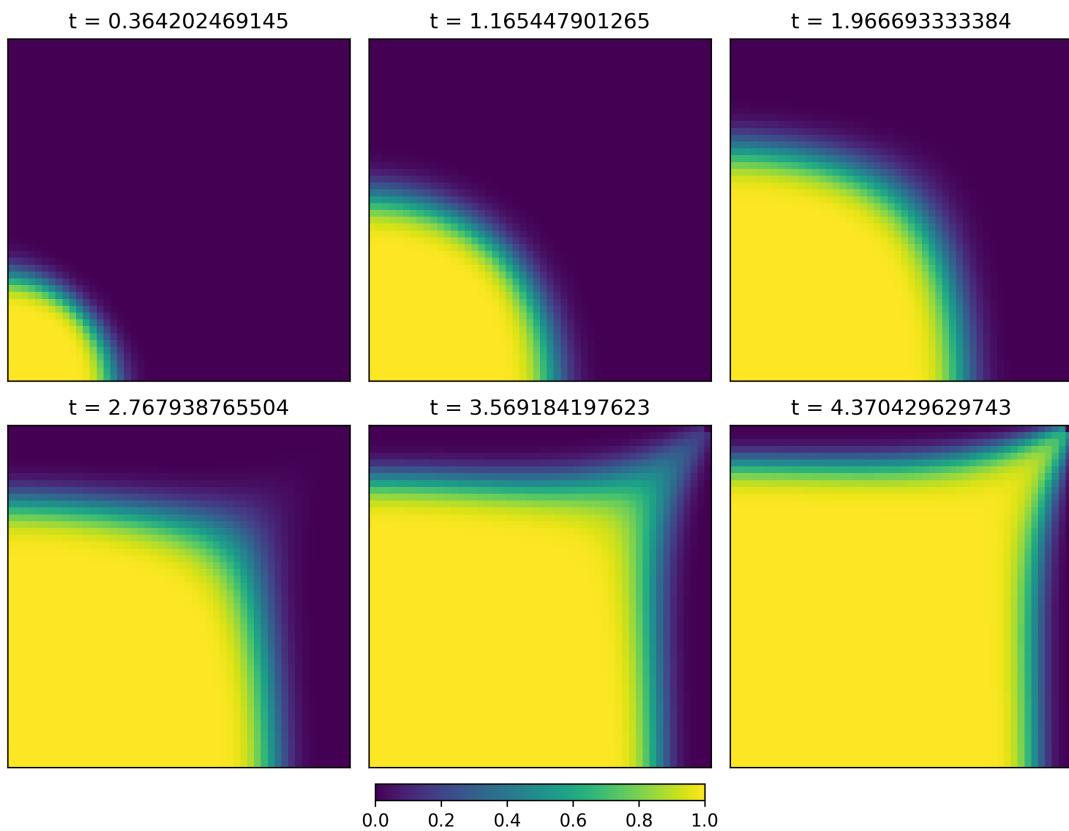


Figura 17 – Gráficos de concentrações de 2.8.3.

Exemplo 2.8.4. Neste segundo exemplo, será um campo não homogêneo em cinco faixas verticais de permeabilidade:

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

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

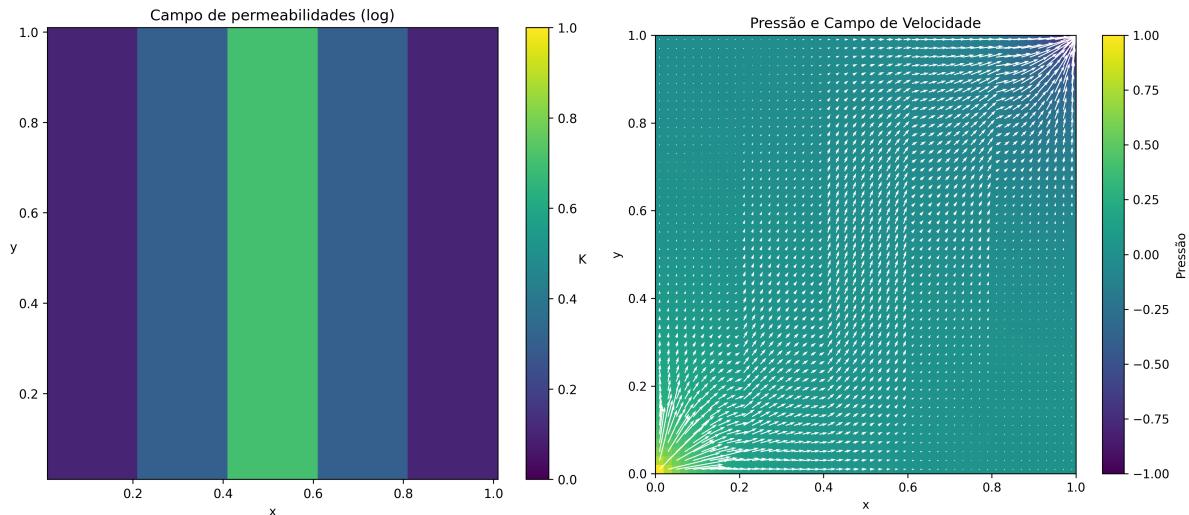


Figura 18 – Gráficos de permeabilidade e de pressão com velocidades não normalizadas

A injeção do contaminante, porém, 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:

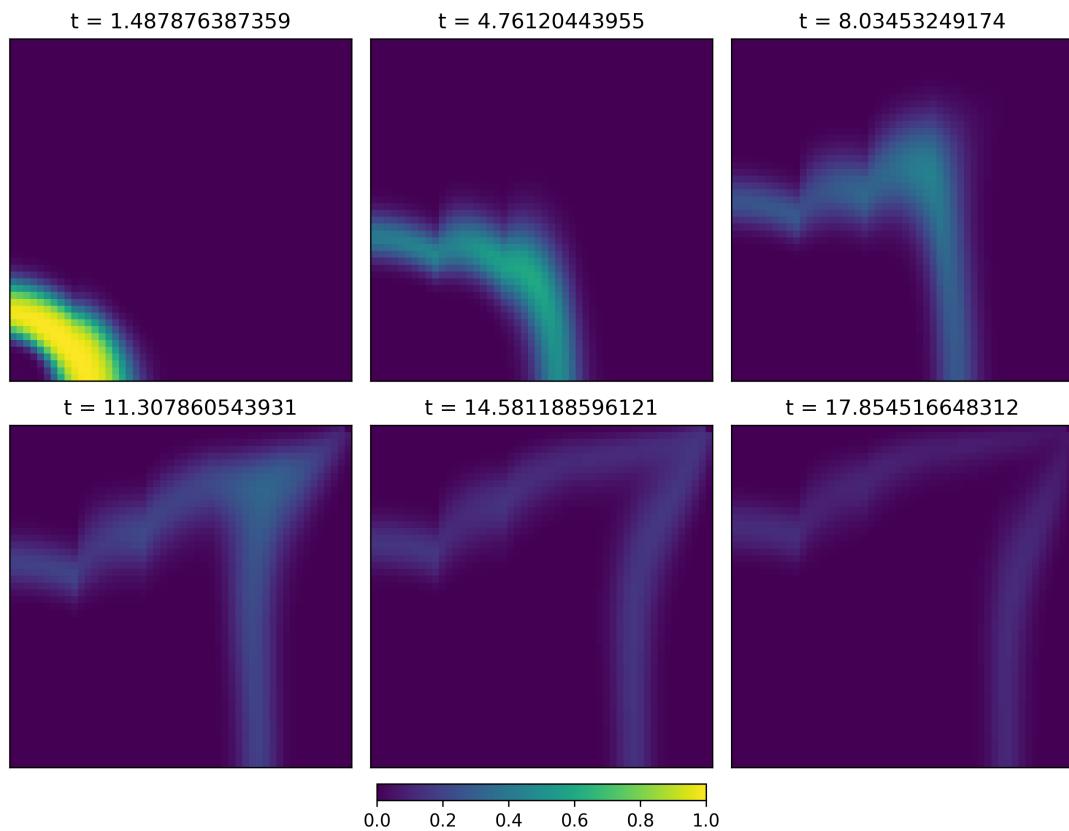


Figura 19 – Gráficos de concentrações de 2.8.4.

Exemplo 2.8.5. Neste terceiro exemplo, será uma diagonal de maior permeabilidade, com um decaimento exponencial:

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

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

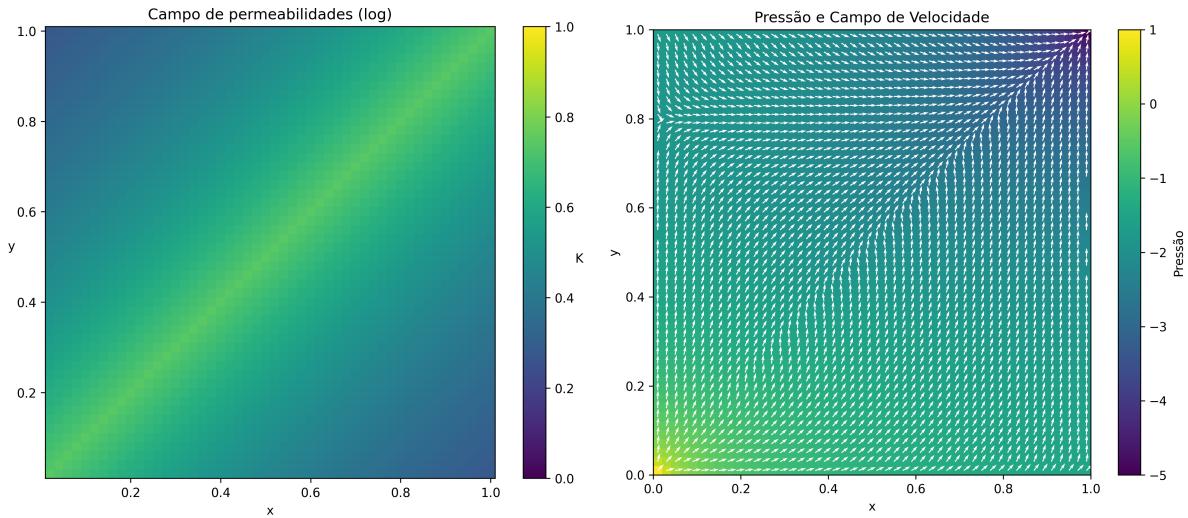


Figura 20 – Gráficos de permeabilidade e de pressão com velocidades normalizadas

A injeção do contaminante, será no início da simulação e o que se observa é um fluxo maior pela diagonal:

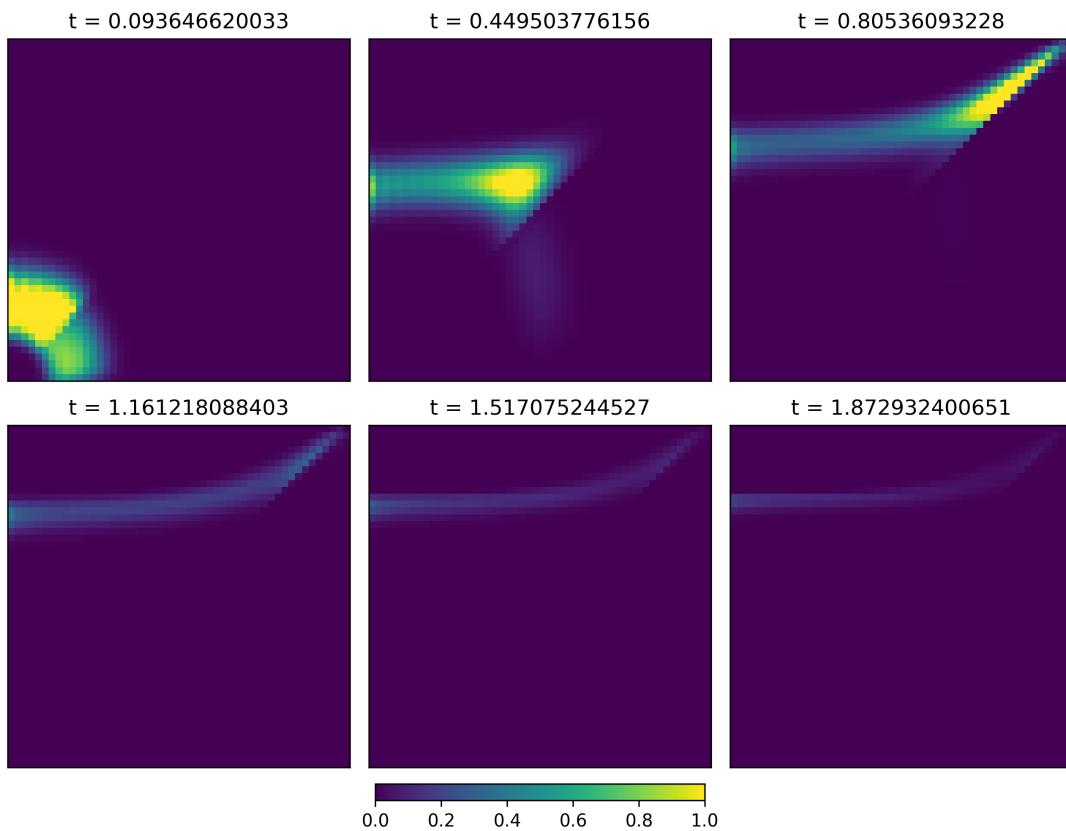


Figura 21 – Gráficos de concentrações de 2.8.5.

Exemplo 2.8.6. No quarto exemplo, 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 $(0.5, 0.5)$, para todo x, y . O campo de permeabilidade, assim como o de pressões e velocidades, pode ser visualizado abaixo:

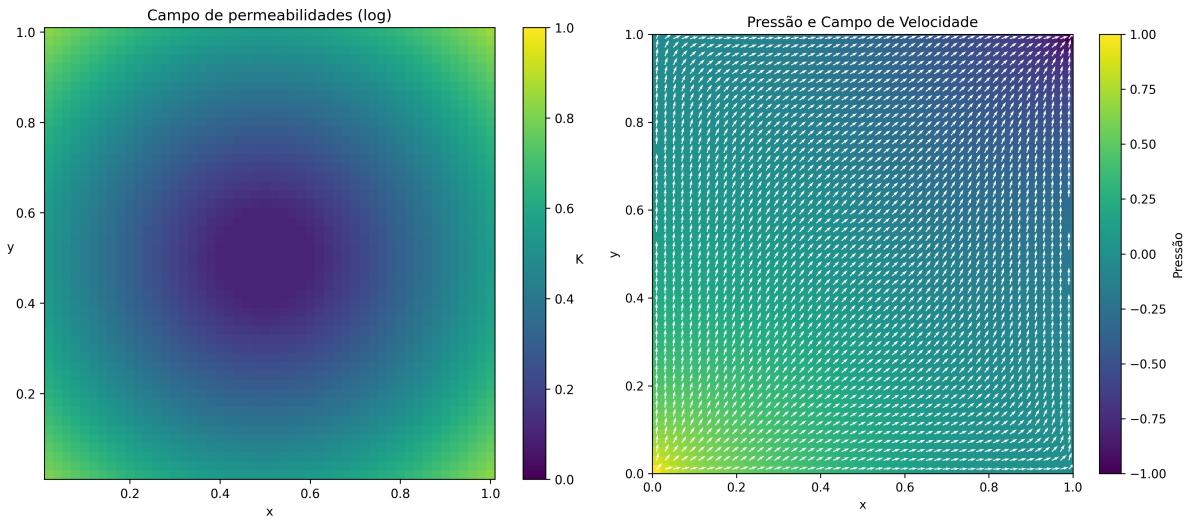


Figura 22 – Gráficos de permeabilidade e de pressão com velocidades normalizadas

A injeção do contaminante evita a região central, indo pelas bordas:

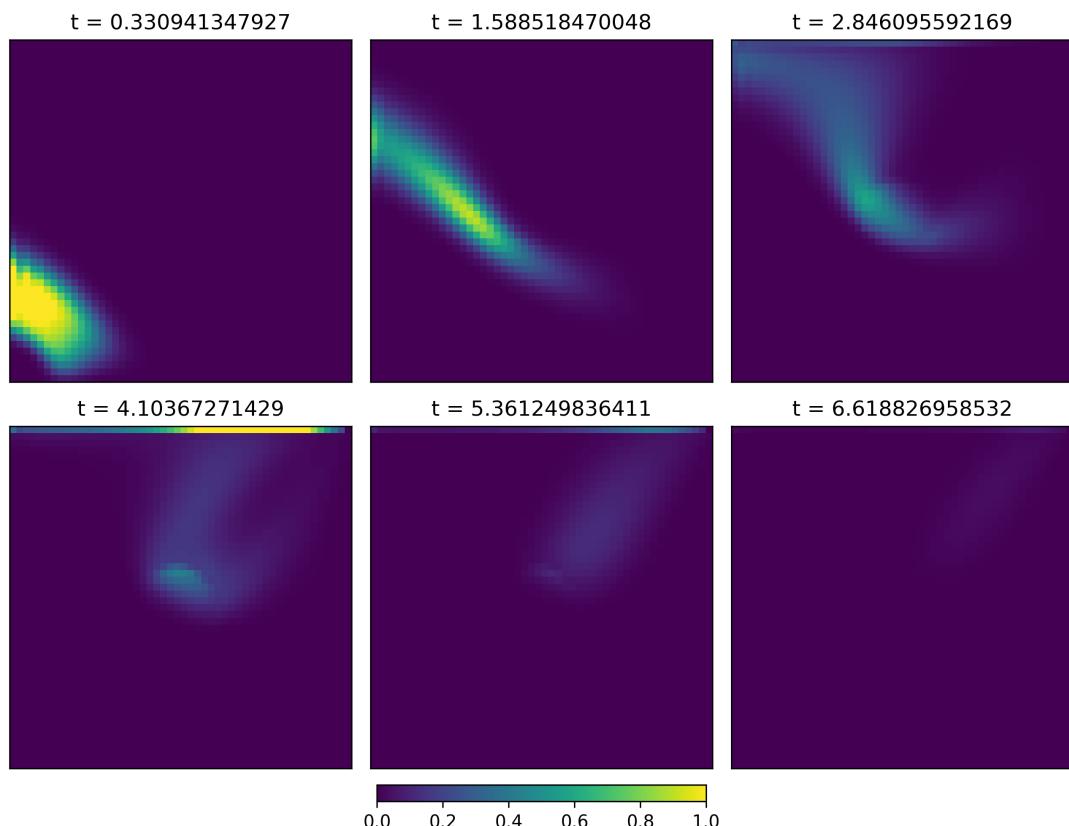


Figura 23 – Gráficos de concentrações de 2.8.5.

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, entre os quais se destacam os métodos de volumes finitos, a teoria de EDPs elípticas e hiperbólicas, e a simulação de escoamentos em meios porosos.

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, no durante sua implementação, 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 unidimensionais e bidimensionais, com diferentes níveis de complexidade e perfis de permeabilidade. As simulações permitiram visualizar campos de pressão e de velocidades, e a dispersão de contaminantes, assim 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 de uma e duas dimensões. Não foram abordados fenômenos como escoamentos multifásicos (como óleo-água, relevantes para a indústria do petróleo), malhas não estruturadas ou acoplamentos hidromecânicos. 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 tanto teórica quanto prática.

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. (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

A.1 Fatoração LU

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

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

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

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

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

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

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

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

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

Definição A.1.1. 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. 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. Se a eliminação de Gauss puder ser realizada no sistema linear $Ax = b$ sem pivotamento, então a matriz A pode ser fatorada no produto de matrizes triangulares inferior e superior, L e U , respectivamente; da forma que (com $m_{ji} = a_{ji}^{(i)} / a_{ii}^{(i)}$),

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

Definição A.1.3. Diz-se que a matriz $A_{N,N}$ é *diagonal dominante por linhas* quando

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

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

A.2 Fatoração de Cholesky

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

Teorema A.2.1. Sendo A uma matriz simétrica: se a fatoração $LU = A$ é possível, então a escolha de $l_{kk} = u_{kk}$ implica em $l_{ik} = u_{ki}$, ou seja, $LL^t = A$.

Mais ainda,

Definição A.2.1. Uma matriz simétrica $A \in \mathbb{R}^{n \times n}$ é positiva definida se $x^t Ax > 0$ para todos os vetores não nulos $x \in \mathbb{R}$.

Teorema A.2.2. Se A é simétrica positiva definida, então A pode ser fatorada em $LL^t = A$.

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

Fatoração de Cholesky

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

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

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

Passo 3.1) Fazer

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

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

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

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

Passo 5) Saída de L .

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

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

Fatoração LDL^t

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

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

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

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

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

Passo 2) Saída de L e D .

A.3 Fatoração LU em bloco

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

Teorema A.3.1. Caso as submatrizes diagonais principais

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

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

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

solução do sistema por fatoração LU em bloco original

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

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

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

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

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

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

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

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

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

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

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

APÊNDICE B – NOTAS SOBRE O MÉTODO DE VOLUMES FINITOS

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

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

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

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

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

Levando as condições de contorno em consideração e colocando

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

o esquema de volumes finitos para (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. 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 $i = 1, \dots, N$.