

TÉCNICAS DE INTEGRAÇÃO REDUZIDA PARA SIMULAÇÃO DE  
PROBLEMAS NÃO-LINEARES DE TRANSPORTE PELO MÉTODO DOS  
ELEMENTOS FINITOS

Claudia Mazza Dias

TESE SUBMETIDA AO CORPO DOCENTE DA COORDENAÇÃO DOS  
PROGRAMAS DE PÓS-GRADUAÇÃO DE ENGENHARIA DA  
UNIVERSIDADE FEDERAL DO RIO DE JANEIRO COMO PARTE DOS  
REQUISITOS NECESSÁRIOS PARA A OBTENÇÃO DO GRAU DE  
DOUTOR EM CIÊNCIAS EM ENGENHARIA CIVIL.

Aprovada por:

---

Prof. Alvaro Luiz Gayoso de Azeredo Coutinho, D. Sc.

---

Prof. José Luis Drummond Alves, D. Sc.

---

Prof. Luiz Landau, D. Sc.

---

Prof. Abimael Fernando Dourado Loula, D. Sc.

---

Prof. Eduardo Lúcio Mendes Garcia, D. Sc.

---

Prof. Luis Felipe Feres Pereira, Ph. D.

RIO DE JANEIRO, RJ – BRASIL

NOVEMBRO DE 2001

DIAS, CLAUDIA MAZZA

Técnicas de Integração Reduzida para  
Simulação de Problemas Não-lineares de  
Transporte pelo Método dos Elementos  
Finitos [Rio de Janeiro] 2001

XIII, 116 p., 29.7 cm, (COPPE/UFRJ,  
D. Sc., Engenharia Civil, 2001)

Tese - Universidade Federal do Rio de  
Janeiro, COPPE

- 1 - Método dos elementos finitos
- 2 - Computação de alto desempenho
- 3 - Escoamentos miscíveis
- 4 - Meios porosos

I. COPPE/UFRJ II. Título (Série).

*Dias inteiros de calma, noites de ardência,  
dedos no leme e olhos no horizonte,  
descobri a alegria de transformar distâncias em tempo.  
Um tempo onde aprendi a entender as coisas do mar,  
a conversar com as ondas e não discutir com o mau tempo.  
A transformar o medo em respeito, o respeito em confiança.  
Descobri como é bom chegar quando se tem paciência.*

*Amyr Klink*

# Agradecimentos

Agradeço ao meu orientador Prof. Alvaro Coutinho pelo apoio, dedicação e paciência durante a realização deste trabalho.

A Eduardo Garcia pelo apoio nos últimos anos da pesquisa.

A Rita de Cássia Silva e Rigoberto Sanabria pelas discussões ao longo do trabalho.

Aos colegas da COPPE e do LNCC que em muitos momentos contribuíram para a realização desta tese.

Ao CNPq pelo apoio financeiro através da bolsa de doutorado.

Ao PEC, NACAD e LNCC pelo suporte computacional.

À minha família e amigos pelo apoio e incentivo.

E finalmente à minha mãe Aurea, minha irmã Marcia e meu companheiro Francisco Quaranta por estarem sempre presentes em todos os momentos de minha vida.

Resumo da Tese apresentada à COPPE/UFRJ como parte dos requisitos necessários para a obtenção do grau de Doutor em Ciências (D. Sc.)

TÉCNICAS DE INTEGRAÇÃO REDUZIDA PARA A SIMULAÇÃO DE  
PROBLEMAS NÃO-LINEARES DE TRANSPORTE PELO MÉTODO DOS  
ELEMENTOS FINITOS

Claudia Mazza Dias

Novembro/2001

Orientador: Alvaro Luiz Gayoso de Azeredo Coutinho

Programa: Programa de Engenharia Civil

A simulação de processos de escoamentos miscíveis em meios porosos é uma das áreas de maior interesse da mecânica computacional. O tempo de análise, o custo computacional, assim como a precisão dos resultados são seus fatores mais relevantes. O objetivo deste trabalho é estudar e desenvolver algumas técnicas capazes de tornar a simulação de processos de escoamentos em meios porosos mais eficiente computacionalmente. Para este fim, utiliza-se o método dos elementos finitos, onde estuda-se o comportamento do elemento bilinear, e propõe-se a utilização de uma técnica de integração reduzida estabilizada, de forma precisa e eficiente na determinação dos campos de pressões e concentrações. É estudada a avaliação dos gradientes de pressões (velocidades) no ponto de superconvergência, e ainda, são analisadas algumas técnicas de recuperação da ordem de convergência do campo de velocidades, e a utilização da integração reduzida estabilizada em conjunto com as mesmas. Apresenta-se exemplos numéricos como a injeção de traçadores em reservatórios de petróleo, a simulação de processos de recuperação terciária e de contaminação de aquíferos por substâncias reativas e não-reativas.

Abstract of Thesis presented to COPPE/UFRJ as a partial fulfillment of the requirements for the degree of Doctor of Science (D. Sc.)

REDUCED INTEGRATION TECHNIQUES FOR SIMULATION OF  
NONLINEAR TRANSPORT PROBLEMS BY FINITE ELEMENT METHOD

Claudia Mazza Dias

November/2001

Advisor: Alvaro Luiz Gayoso de Azeredo Coutinho

Department: Civil Engineering

The simulation of miscible flow in porous media is one of the most interesting areas of computational mechanics. Computational costs and the accuracy are its most relevant factors. The objective of this work is to study and to develop some techniques to increase computational performance of such simulations. We propose the use of a stabilized reduced integration technique for bilinear quadrilateral elements, on an accurate and efficient way, in the determination of the pressure and concentration fields. We study the evaluation of pressure gradients (Darcy's velocity) at the superconvergent points. We also investigate the stabilization of reduced integration in some current post-processing techniques. Numerical examples are shown, such as tracer injection simulations, tertiary recovery processes, and the contamination of aquifers with reactive and non-reactive solutes.

# Índice

<b>1</b>	<b>Introdução</b>	<b>1</b>
1.1	Preliminares . . . . .	1
1.2	O Problema da Simulação de Reservatórios de Petróleo . . . . .	3
1.3	O Problema da Contaminação de Águas Subterrâneas . . . . .	5
1.4	Escopo do Trabalho . . . . .	6
<b>2</b>	<b>Escoamento Incompressível Miscível em Meio Poroso Saturado</b>	<b>9</b>
2.1	Equações Governantes . . . . .	9
2.2	Problema Modelo . . . . .	15
2.2.1	Discretização por Elementos Finitos . . . . .	17
<b>3</b>	<b>Estratégia de Estabilização para Advecção-difusão</b>	<b>29</b>
3.1	O Elemento Quadrilátero Bilinear . . . . .	30
3.2	A Integração Reduzida e suas Consequências . . . . .	32
3.3	Método de Controle de Modos Espúrios via Técnica de Perturbação . . . . .	35
3.4	Resumo das Matrizes de Elemento . . . . .	39
3.5	Método de Controle dos Modos Espúrios de Hansbo . . . . .	40
<b>4</b>	<b>Cálculo do Campo de Velocidades</b>	<b>42</b>
4.1	Estimativas de Erro . . . . .	42
4.2	Superconvergência . . . . .	44

4.3	Cálculo do Campo de Velocidades . . . . .	48
<b>5</b>	<b>Experimentos de Validação</b>	<b>50</b>
5.1	Escoamento com Barreiras Impermeáveis . . . . .	50
5.2	Análise do Problema Pressão-Velocidade . . . . .	52
<b>6</b>	<b>Aplicações em Simulação de Reservatórios</b>	<b>61</b>
6.1	Injeção de Traçador ( $M = 1$ ) . . . . .	62
6.2	Simulação Numérica do Processo de Recuperação Terciária ( $M > 1$ )	75
<b>7</b>	<b>Aplicações em Águas Subterrâneas</b>	<b>81</b>
7.1	Transporte de Substâncias Não-reativas . . . . .	81
7.1.1	Escoamento Unidimensional . . . . .	81
7.1.2	Escoamento Bidimensional Radial com Dispersão . . . . .	84
7.2	Transporte de Substâncias Reativas . . . . .	87
7.2.1	Mecanismos de Iteração, Transformação ou Decaimento . . . . .	87
7.2.2	Discretização de Elementos Finitos para o Transporte de Substâncias Reativas . . . . .	92
7.2.3	Escoamento Unidimensional com Substância Reativa . . . . .	93
<b>8</b>	<b>Conclusões</b>	<b>97</b>
A.1	Técnica de Pós-processamento Local para Velocidades . . . . .	99
A.2	Técnica de Pós-processamento Global para o Campo de Velocidades .	104

# Índice de Figuras

3.1	Domínio do Elemento nos Sistemas Físico e de Referência . . . . .	30
3.2	Modos <i>Hourglass</i> . . . . .	35
5.1	Domínio e Condições de Contorno do Problema de Escoamento com Barreiras Impermeáveis. . . . .	51
5.2	Campo de Velocidades para o Problema de Escoamento com Barreiras Impermeáveis. . . . .	51
5.3	Campo de Velocidades para o Problema de Escoamento com Barreiras Impermeáveis. . . . .	53
5.4	Conservação da Massa entre as Barreiras Impermeáveis. . . . .	54
5.5	Domínio e Condições de Contorno do Problema de Liu e Belytschko [41]. . . . .	54
5.6	Solução do Problema de Liu e Belytschko [41] para Malha Regular. . . . .	55
5.7	Malha Distorcida para o Problema de Liu e Belytschko [41]. . . . .	55
5.8	Solução do Problema de Liu e Belytschko [41] para Malha Distorcida. . . . .	56
5.9	Convergência do Campo de Pressões para o Problema de Liu e Belytschko [41] . . . . .	57
5.10	Superconvergência das Velocidades para o Problema de Liu e Belytschko [41]. . . . .	58
5.11	Convergência do Campo de Pressões para o Problema de Liu e Belytschko [41] pelo Método de Hansbo [42]. . . . .	60

6.1	Modelo do Problema de Cinco Poços. . . . .	62
6.2	Comparação entre o Método dos Elementos Finitos com Integração Reduzida Estabilizada e a Solução Semi-analítica [60] para o Problema de Injeção de Traçadores na Configuração de Cinco Poços. . .	63
6.3	Resultados da Formulação Espaço-tempo [58], Solução Semi-analítica [60] e Solução Semi-discreta para o Problema de Injeção de Traçadores na Configuração de Cinco Poços. . . . .	64
6.4	Contorno das Concentrações para a malha $80 \times 80$ , em $t = 500 \text{ dias}$ e $t = 1000 \text{ dias}$ para o Problema de Injeção de Traçadores na Configuração de Cinco Poços. . . . .	64
6.5	Comparação entre a Solução pelo Método dos Elementos Finitos com Integração Reduzida Estabilizada, e a solução Semi-analítica [60] com $\Delta t$ variável para o Problema de Injeção de Traçadores na Configuração de Cinco Poços. . . . .	65
6.6	Variação do Passo de Tempo para o Problema de Injeção de Traçadores na Configuração de Cinco Poços. . . . .	66
6.7	Resultados com Matriz de Massa Diagonal para o Problema de Injeção de Traçadores na Configuração de Cinco Poços. . . . .	68
6.8	Resultados sem Operador de Captura de Descontinuidades para o Problema de Injeção de Traçadores na Configuração de Cinco Poços. . . . .	68
6.9	Resultados sem Operador de Captura de Descontinuidades e com Matriz de Massa Diagonal para o Problema de Injeção de Traçadores na Configuração de Cinco Poços. . . . .	69
6.10	Domínio do Problema Heterogêneo de Injeção de Traçadores na Configuração de Cinco Poços. . . . .	70
6.11	Contorno das Concentrações em $t = 500 \text{ dias}$ e $t = 1000 \text{ dias}$ para o Problema Heterogêneo de Injeção de Traçadores na Configuração de Cinco Poços. . . . .	71

6.12	Resultados do Problema Heterogêneo de Injeção de Traçadores na Configuração de Cinco Poços. . . . .	71
6.13	Malha com Refinamento Logarítmico para o Problema de Injeção de Traçadores na Configuração de Cinco Poços. . . . .	72
6.14	Resultados com Malha com Refinamento Logarítmico para o Problema de Injeção de Traçadores na Configuração de Cinco Poços. . . . .	73
6.15	Contorno das Concentrações em $t = 1000$ dias para a Malha Refinada nos Poços, para o Problema de Injeção de Traçadores na Configuração de Cinco Poços. . . . .	73
6.16	Malha Não-uniforme para o Problema de Injeção de Traçadores na Configuração de Cinco Poços. . . . .	74
6.17	Resultados com Malha Não-uniforme para o Problema de Injeção de Traçadores na Configuração de Cinco Poços. . . . .	74
6.18	Contorno das Concentrações em $t = 1000$ dias para a Malha Não-uniforme, para o Problema de Injeção de Traçadores na Configuração de Cinco Poços. . . . .	75
6.19	Resultados com Malha Não-uniforme e Matriz de Massa Diagonal para o Problema de Injeção de Traçadores na Configuração de Cinco Poços. . . . .	76
6.20	Curvas de Produção para Diferentes Valores de $M$ para o Problema de Recuperação Terciária. . . . .	77
6.21	Curvas de Produção pela Formulação Espaço-tempo com Diferentes Valores de $M$ para o Problema de Recuperação Terciária. . . . .	77
6.22	Comparação entre a Curva de Recuperação pelo Método dos Elementos Finitos com Integração Reduzida Estabilizada, e os Resultados de Coutinho e Alves [32], e Russel et al. [6] para o Problema de Recuperação Terciária. . . . .	78
6.23	Respostas com $M = 41$ em $t = 500$ dias e $t = 1000$ dias para o Problema de Recuperação Terciária. . . . .	78

6.24	Respostas para a Malha Não-uniforme em $t = 1000$ dias (a) Integração Reduzida Estabilizada, (b) Integração de Gauss $2 \times 2$ para o Problema de Recuperação Terciária. . . . .	80
7.1	Transporte em Diferentes Pontos do Domínio para o Problema de Escoamento Unidimensional. . . . .	82
7.2	Transporte em Diferentes Tempos da Análise para o Problema de Escoamento Unidimensional. . . . .	83
7.3	Resultados com Matriz de Massa Consistente e Matriz de Massa Diagonalizada para o Problema de Escoamento Unidimensional. . . . .	84
7.4	Escoamento Bidimensional Radial Comparação entre Resultados da Integração Reduzida Estabilizada, com a Solução Analítica e MOC3D [16] para o Problema de Escoamento Radial. . . . .	86
7.5	Transporte com Diferentes Valores de Fator de Retardo para o Problema de Escoamento Unidimensional com Substância Reativa. . . . .	94
7.6	Transporte com Decaimento Radioativo para o Problema de Escoamento Unidimensional com Substância Reativa. . . . .	95
A.1	Macroelementos Estáveis em Duas Dimensões com 12 e 18 Graus de Liberdade [30] . . . . .	100

# Índice de Tabelas

3.1	Matrizes de Elemento . . . . .	40
6.1	Tempos de Processamento para o Problema de Injeção de Traçadores na Configuração de Cinco Poços. . . . .	66
6.2	Desempenho dos Solucionadores para o Problema de Injeção de Traçadores na Configuração de Cinco Poços. . . . .	67
6.3	Desempenho das Principais Rotinas para o Problema de Injeção de Traçadores na Configuração de Cinco Poços. . . . .	67
6.4	Desempenho das Principais Rotinas para o Problema de Injeção de Traçadores na Configuração de Cinco Poços sem Operador de Captura de Descontinuidades. . . . .	70
6.5	Tempos de Processamento para o Problema de Recuperação Terciária. . . . .	79
6.6	Tempos de Processamento para a Malha Não-uniforme para o Problema de Recuperação Terciária. . . . .	80
7.1	Relação entre Tempos de Processamento para as Rotinas de Montagem das Matrizes de Elemento. . . . .	86

# Capítulo 1

## Introdução

### 1.1 Preliminares

O êxito da mecânica computacional está em sua efetividade na solução de problemas de interesse para a sociedade e em prover um entendimento profundo dos fenômenos naturais e de sistemas de engenharia [1]. Dentre as diversas aplicações da mecânica computacional, destacamos os estudos de escoamentos em meios porosos, onde encontramos as aplicações em problemas relacionados à simulação de reservatórios de petróleo, e a simulação da contaminação de aquíferos, objetos do presente trabalho. Existem quatro estágios principais para a modelagem do processo de escoamento em um meio poroso [2]:

- (1<sup>o</sup>) Modelagem física do processo de escoamento;
- (2<sup>o</sup>) Formulação matemática do modelo físico, que geralmente envolve sistemas acoplados de equações diferenciais parciais não-lineares;
- (3<sup>o</sup>) Modelagem numérica, desenvolvida de forma a garantir a existência, unicidade e regularidade da solução. O modelo numérico deve ter precisão e estabilidade suficientes para produzir soluções representativas do fenômeno físico, sem introduzir fenômenos espúrios associados ao esquema numérico;

(4<sup>a</sup>) Programa computacional, capaz de efetuar com eficiência os cálculos necessários, de forma a se obter resultados concretos para o modelo, que devem estar em acordo com as observações medidas dos processos físicos.

Atualmente, a simulação de processos de escoamentos em meios porosos é uma ferramenta importante na tomada de decisões. Isto se deve principalmente às melhorias tecnológicas que tornaram mais simples a simulação e a possibilidade de soluções mais realísticas. Desde seu início na década de 50, até os dias atuais muitas foram estas melhorias [3], entre elas salientamos:

- O progresso substancial da computação, chegando aos atuais computadores de alto desempenho que utilizam múltiplos processadores em paralelo;
- O crescimento do tamanho e complexidade do modelo computacional, acompanhando o crescimento da velocidade de processamento;
- Avanços técnicos, como por exemplo, o uso de malhas flexíveis;
- Aumento da capacidade do simulador do ponto de vista do usuário, incluindo interfaces gráficas, refinamento automático da malha, etc;
- Evolução de *softwares* e suporte.

Hoje em dia, as pesquisas em escoamentos em meios porosos, além de ter em vista a precisão da análise, devem também observar o custo computacional. Desta forma, o objetivo principal deste trabalho é estudar e desenvolver técnicas que possam tornar a simulação de escoamentos em meios porosos mais eficiente computacionalmente. Para tanto, utiliza-se o método dos elementos finitos, onde analisa-se o comportamento do elemento quadrilátero bilinear associado à integração reduzida, isto é, a integração com um ponto de quadratura, de modo a diminuir o tempo necessário para a avaliação dos termos das matrizes de elemento, responsáveis por grande parte do tempo de processamento.

## 1.2 O Problema da Simulação de Reservatórios de Petróleo

O petróleo na natureza é encontrado impregnando rochas porosas denominadas reservatórios. Estes em geral contêm camadas de gás natural, hidrocarbonetos e água, e estão submetidos à grandes pressões. A perfuração de um poço cria um caminho para que a pressão impulse naturalmente o gás, os hidrocarbonetos ou a água. Este estágio do processo de recuperação é chamado de recuperação primária. Em reservatórios com baixas pressões internas, ou quando a pressão inicial diminui após algum tempo de extração, pode-se utilizar algumas técnicas de recuperação conhecidas como recuperação secundária, onde um fluido (geralmente água) é injetado em um poço de modo a forçar o deslocamento do óleo residente na direção dos poços de produção. No entanto, através desta técnica só é possível recuperar algo em torno de 40% do óleo contido no reservatório. Algumas técnicas foram então desenvolvidas com a finalidade de melhorar a taxa de recuperação nestes reservatórios. Estas técnicas são conhecidas como recuperação terciária (*Enhanced Oil Recovery Technique* - EOR). Nestas, obtém-se um escoamento miscível onde os processos físicos e as mudanças de fase que acompanham o processo devem ser descritas matematicamente. Uma das técnicas de recuperação terciária mais utilizadas é a que utiliza a injeção de um componente químico que se mistura aos hidrocarbonetos residentes, formando uma fase fluídica única [2].

O propósito da gestão de reservatórios é o controle de operações para a obtenção da máxima recuperação possível, com base em fatos, informações e conhecimentos, utilizando os recursos financeiros, tecnológicos e humanos, de forma a minimizar os investimentos e despesas de operação [4].

A viabilidade econômica de um reservatório é influenciada pelo desempenho da produção sob as condições correntes e futuras de operação. Com a utilização da simulação numérica, é possível se obter dados quantitativos e qualitativos que podem oferecer uma visão mais clara do fenômeno, e entender os processos químicos, físicos e de escoamento que ocorrem em um reservatório, de forma a ser capaz de otimizar a recuperação dos hidrocarbonetos.

O problema modelo para a simulação numérica de reservatórios geralmente evita as complexidades envolvidas na simulação de problemas reais, enquanto exibem as mesmas dificuldades numéricas [5]. Uma simplificação importante é o caso onde os componentes químicos se misturam formando uma única fase. Este modelo é conhecido como modelo de deslocamento miscível (*miscible displacement*), que será tratado neste trabalho.

Boa parte dos simuladores usados na indústria de petróleo utilizam o método das diferenças finitas [6], apesar de suas dificuldades na representação de geometrias complexas. Outros métodos numéricos também são utilizados neste tipo de simulação como os métodos de elementos finitos mistos [7], onde pressão e velocidade são tratadas simultaneamente, isto é, ambas são incógnitas do problema. Como para o regime permanente esta formulação conduz a matrizes não positivas-definidas, passou-se a utilizar técnicas para superar esta dificuldade, como a técnica de separação de variáveis [8], e mais tarde a técnica de hibridização [9]. Todos estes métodos são caros do ponto de vista computacional em relação ao método de Galerkin com interpolações Lagrangeanas para a pressão. Assim, outras alternativas surgiram, como a aplicação do método de volumes de controle [10], entre outros [11, 12]. Mais recentemente, o método dos elementos finitos volta a ser destaque principalmente pela sua habilidade em representar geometrias complexas, descontinuidades, melhorar a resolução em torno dos poços, entre outras vantagens. Biswas e Carey [13] fazem um apanhado histórico da modelagem do problema. Atualmente, as formulações clássicas de elementos finitos, baseadas em interpolações Lagrangeanas lineares ou bilineares para o cálculo das pressões, são usadas na modelagem de problemas de escoamentos em meios porosos, incluindo a simulação numérica de reservatórios de petróleo, como será visto mais adiante.

### 1.3 O Problema da Contaminação de Águas Subterrâneas

Águas subterrâneas são aquelas encontradas nos sistemas aquíferos, na chamada zona de saturação, na qual os poros estão completamente preenchidos com água. Armazenadas ao longo de milhares de anos, se encontram, em condições naturais, numa situação de quase equilíbrio, governado por um mecanismo de carga e descarga. São de imensa importância para o ser humano, uma vez que 97 % da água doce disponível na Terra encontra-se no subsolo [14].

A partir dos anos 80, a ênfase nas pesquisas sobre águas subterrâneas nos países industrializados mudou de avaliação quantitativa (abastecimento de água), para avaliação qualitativa e controle da água. Recentemente, o problema da contaminação das águas subterrâneas tem preocupado muitos pesquisadores [15]. As águas podem ser contaminadas por resíduos industriais perigosos, chorumes de depósitos de lixo urbano, derramamento de petróleo, uso de fertilizantes, pesticidas, herbicidas, e ainda, por resíduos radiativos.

A movimentação de um contaminante em um aquífero depende das propriedades deste contaminante, da geologia do aquífero e da velocidade das águas. O processo de transporte de um contaminante, assim como no caso dos traçadores não-reativos em reservatórios, pode ser basicamente descrito como sendo advectivo-difusivo.

Os problemas de contaminação são complexos e requerem uma abordagem interdisciplinar. A modelagem computacional pode ser útil na análise do escoamento das águas, onde pode se fazer simulações de diferentes situações e assim estimar e prevenir seus efeitos. Muitos modelos foram desenvolvidos usando diferentes métodos numéricos como o método das características [16], método das diferenças finitas, o método dos elementos finitos, entre outros.

O modelo adotado neste caso é o mesmo utilizado para a simulação de reservatórios de petróleo, ou seja, o de escoamento de um contaminante miscível em um meio poroso saturado, que requer a solução numérica de um sistema de equações diferenciais parciais. A primeira é a equação da pressão, que associada à lei de Darcy fornece a distribuição do fluxo no meio poroso considerado. A segunda é a equação

de transporte, que descreve o processo de advecção-difusão, e que nos fornece a distribuição da concentração do contaminante no decorrer do tempo. As respostas do modelo matemático também dependem da qualidade dos dados de campo disponíveis para se definir os parâmetros de entrada e as condições de contorno do problema.

## 1.4 Escopo do Trabalho

Como as implementações do método dos elementos finitos utilizam com frequência a quadratura de Gauss na avaliação das integrais oriundas da formulação fraca do problema, o custo computacional destas avaliações é diretamente proporcional ao número de pontos de integração utilizados. Para um elemento quadrilátero que usa polinômios de baixa ordem, uma integração precisa pode ser obtida com quadratura com  $2 \times 2$  pontos de integração. A integração reduzida mostra-se uma alternativa interessante para diminuir o custo computacional da avaliação destas integrais. No entanto, se uma menor ordem de integração for utilizada podem surgir oscilações indesejáveis devido ao fato de que o operador gradiente discreto não ter controle sobre certos modos espúrios conhecidos como *hourglass modes*. Este fenômeno se deve à deficiência de posto das matrizes de elemento subintegradas, e pode comprometer a qualidade das soluções [17].

Para contornar este inconveniente, é necessário que estas instabilidades sejam controladas sem perda de eficiência computacional. Algumas metodologias de estabilização ( *hourglass control* ) já são utilizadas, principalmente na mecânica dos sólidos e problemas difusivos [18]. Recentemente, começam a ser utilizadas em problemas advectivos [19]. Em alguns casos a precisão do método estabilizado é da mesma ordem da quadratura de Gauss tradicional.

Em particular, o escoamento de fluidos incompressíveis, miscíveis em meios porosos é descrito por um sistema de equações diferenciais parciais acoplado. Tal sistema é composto por um problema elíptico, onde a velocidade relaciona-se com o gradiente da pressão através da lei de Darcy, e por uma equação convectiva-difusiva associada à concentração. Será estudada a utilização de um esquema de integração

reduzida capaz de avaliar de forma precisa as matrizes de elemento, e assim obter corretamente e com grande economia (em alguns casos chegando a 40 %), os campos de pressão, velocidades e concentração.

Para a discretização com elementos quadriláteros bilineares será testado o esquema desenvolvido por Belytschko e co-autores [18], conhecido como controle de modos espúrios via técnica de perturbação. Originalmente criado para a elasticidade, este método é muito utilizado em problemas difusivos e recentemente vem sendo aplicado a problemas advectivos [19, 20]. Neste, o controle dos modos espúrios baseia-se na modificação do gradiente discreto, a fim de reestabelecer o posto correto das matrizes de elemento. Mostra-se através de testes numéricos, que o esquema de integração é eficiente na determinação do campo de pressões, possui boa convergência e é muito econômico quando comparado à quadratura de Gauss tradicional. A determinação do campo de velocidades é estudada uma vez que sua determinação é importante principalmente nos casos onde a viscosidade do fluido injetado é menor do que a do fluido residente (alta razão de mobilidade). Assim, considera-se o cálculo das velocidades diretamente da lei de Darcy, utilizando-se o conceito de superconvergência. O cálculo da concentração também utiliza a integração reduzida estabilizada de forma similar à utilizada na determinação do campo de pressões, desta vez considerando o caráter predominantemente convectivo da equação de transporte. As velocidades calculadas com um ponto de integração são utilizadas na obtenção do campo de concentrações.

No capítulo que se segue é feito um resumo da formulação do problema de escoamentos miscíveis em meios porosos. Em seguida, no capítulo 3, apresentam-se as estratégias de estabilização para o cálculo do campo de pressões e de concentrações. No capítulo 4 é feita a descrição da metodologia para o cálculo do campo de velocidades. Em seguida, no capítulo 5 apresenta-se os experimentos numéricos de validação da proposta para o problema pressão-velocidade. Os capítulos 6 e 7 trazem os experimentos em petróleo e águas subterrâneas, respectivamente. Finalmente, no capítulo 8, apresentam-se as conclusões do trabalho. Encontra-se nos Apêndices uma proposta de utilização da integração reduzida estabilizada em con-

junto com técnicas de pós-processamento que recuperam a ordem de convergência do campo de velocidades [21, 22]. A bibliografia utilizada é encontrada ao final do trabalho.

# Capítulo 2

## Escoamento Incompressível

### Miscível em Meio Poroso Saturado

#### 2.1 Equações Governantes

Quando um fluido escoar através dos vazios interconectados e passagens de um meio poroso, as paredes destes vazios e passagens formam pequenos túneis pelos quais o fluido escoar. O estudo deste fenômeno físico nesta escala, isto é, na escala do poro é chamado de método microscópico. Devido a complexidade da microgeometria do meio poroso, o estudo dos detalhes do escoamento nesta escala se torna de difícil execução. Por este motivo, descreve-se o fenômeno do escoamento em escala macroscópica. O método da média espacial (*Spacial Average Method*) [23] possibilita transferir propriedades do meio poroso do nível microscópico para o macroscópico. Para tanto, considera-se um volume elementar na região do escoamento, definido como uma partícula do meio poroso. Ou seja, grande o suficiente para conter um considerável número de partículas sólidas e poros, de forma que valores médios de certas propriedades físicas possam ser obtidos sobre o domínio; e pequeno o suficiente em comparação com o domínio. O volume (partícula) definido

desta forma é chamado de volume elementar representativo (*Representative Elementary Volume* - REV). Desta forma, todo ponto matemático no meio poroso é associado com uma partícula. Então, o meio poroso, constituído de matrizes sólidas e poros, pode ser considerado como um contínuo preenchido por tais partículas. Assim, as propriedades e parâmetros relevantes são tomados como funções contínuas e diferenciáveis, evitando-se as dificuldades da microestrutura do meio poroso. Esta aproximação é chamada de aproximação macroscópica. Não se fará distinção no texto entre propriedades macroscópicas e microscópicas, entendendo-se que para cada propriedade microscópica do fluido (seja esta escalar ou vetorial), assume-se uma média espacial no REV, definindo portanto, uma propriedade macroscópica.

Considerando-se um meio poroso saturado (todos os poros preenchidos pelo fluido), o modelo que descreve o transporte de um fluido injetado, miscível no fluido residente no meio poroso, objetiva o cálculo ao longo do tempo das concentrações deste fluido, isto é, do componente químico dissolvido, soluto, ou contaminante. Neste trabalho utiliza-se a definição de concentração volumétrica como massa de soluto por unidade de volume da solução ( $ML^{-3}$ ). As mudanças nas concentrações são causadas principalmente pelos seguintes fatores: o transporte advectivo, onde as substâncias dissolvidas são carregadas pelo escoamento de um lugar para outro; a dispersão hidrodinâmica, que combina os efeitos da difusão molecular e iônica, causada pela distribuição não homogênea do soluto no fluido, onde as moléculas do soluto com alta concentração se movem para áreas com menores concentrações até formar uma distribuição uniforme, e da dispersão mecânica, resultado das iterações mecânicas entre a fase sólida e a fase líquida, e da microestrutura do meio poroso, fazendo com que as velocidades variem de magnitude e direção, o que leva a uma expansão do soluto em uma área maior do que a atingida por simples advecção; a diluição nas fontes do fluido; a adsorção e troca iônica que ocorrem na interface entre as fases sólida e líquida; o decaimento radioativo, e as reações químicas e/ou biológicas no fluido residente, ou entre este último e os materiais sólidos do meio poroso [16]. O cálculo das concentrações requer a solução numérica de equações

matemáticas que descrevem o fluxo no meio poroso e o processo de transporte. As principais equações envolvidas são a equação da conservação da massa e a equação de transporte, cujas deduções serão vistas adiante.

Considerando-se o volume elementar REV, as mudanças da massa líquida, no tempo  $dt$ , são computadas como a soma das parcelas que entram (ou saem), e da produção (ou eliminação) devido a reações químicas ou outras razões [23]. O balanço de massa pode então ser dado por ,

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} + \text{div}(\rho \mathbf{v}) = I \quad (2.1)$$

Nesta equação,  $\rho$  representa a massa específica do sistema ( $ML^{-3}$ ),  $\mathbf{v} = (v_x, v_y, v_z)^T$  é a velocidade de percolação do fluido ( $LT^{-1}$ ), e  $I$  é a taxa de produção por unidade de volume ( $ML^{-3}T^{-1}$ ). Esta equação também é conhecida como equação da continuidade.

Supondo-se que o meio poroso é saturado com um fluido homogêneo incompressível, então,

$$\mathbf{v} = \frac{\boldsymbol{\nu}}{\varphi} \quad (2.2)$$

onde  $\boldsymbol{\nu} = (\nu_x, \nu_y, \nu_z)^T$  é a chamada velocidade de Darcy ( $LT^{-1}$ ), e  $\varphi$  é a porosidade efetiva, que considera a fração volumétrica do fluido no REV (*adimensional*). A lei de Darcy é uma lei básica da teoria de percolação, estabelecida empiricamente por Henri Darcy em 1856 [24]. Ela estabelece que o fluxo de água através de uma formação arenosa depende da área da seção transversal desta formação, da altura piezométrica e da porosidade do meio. Assim, obtem-se a velocidade de Darcy,

$$\nu_i = -\mathcal{K}_{ij} \frac{\partial h}{\partial x_j} \quad i, j = 1, 2, 3 \quad (2.3)$$

onde o tensor simétrico  $\mathcal{K}$  é conhecido como condutividade hidráulica ( $LT^{-1}$ ). Este parâmetro macroscópico depende tanto de propriedades do meio poroso quanto do

fluido, e pode ser escrito como,

$$\mathcal{K} = \frac{\mathbf{k} \rho g}{\mu} \quad (2.4)$$

onde  $\mu$  é a viscosidade do fluido ( $ML^{-1}T^{-1}$ ),  $g$  é a aceleração gravitacional ( $LT^{-2}$ ), e  $\mathbf{k}$  é a permeabilidade do meio poroso, propriedade que não depende do fluido e que é definida em escala macroscópica ( $L^2$ ) [24].

A altura hidráulica (altura estática ou piezométrica)  $h$ , é dada por,

$$h = z + \frac{p}{\rho g} \quad (2.5)$$

A cota  $z$  é a altura do nível de referência até o ponto ( $L$ ),  $p$  é a distribuição das pressões hidroestáticas ( $ML^{-1}T^{-2}$ ). A altura hidráulica é uma propriedade macroscópica ( $L$ ) que pode ser vista como a energia potencial na unidade de massa do fluido no ponto. Como a movimentação no aquífero é relativamente lenta, a energia cinética pode ser ignorada e  $h$  pode ser tratado como energia mecânica total na unidade de massa do fluido.

Assim, da relação (2.2) e da lei de Darcy (2.3) pode-se escrever,

$$v_i = -\frac{k_{ij}}{\varphi \mu} \left( \frac{\partial p}{\partial x_j} + \rho g \frac{\partial z}{\partial x_j} \right) \quad i, j = 1, 2, 3 \quad (2.6)$$

Para um fluido homogêneo, a equação de pressão pode ser obtida combinando-se a equação da continuidade (2.1) e a equação (2.6),

$$\operatorname{div} \left( \mathcal{K} \frac{\partial h}{\partial x_i} \right) = S_s \frac{\partial h}{\partial t} + f \quad i = 1, 2, 3 \quad (2.7)$$

Na equação acima,  $f$  é o termo fonte ( $T^{-1}$ ) e  $S_s$  é o armazenamento específico ( $L^{-1}$ ), definido como a fração do volume de água liberada de um REV com o declínio unitário de  $h$ ,

$$S_s = \rho g [\alpha (1 - \varphi) + \varphi \beta] \quad (2.8)$$

onde  $\alpha$  e  $\beta$  são as compressibilidades da matriz sólida e da água respectivamente. Detalhes sobre a obtenção de (2.7), (2.8) podem ser obtidos em Marsily [24] e em Sun [23].

Na equação de pressão (2.7) utilizou-se um tensor de condutividade hidráulica  $\mathcal{K}$  constante no tempo, uma vez que a viscosidade do fluido  $\mu$  foi considerada não dependente da concentração. No entanto, em muitos casos práticos  $\mu$  pode depender da concentração sendo então uma função não-linear que depende de alguma relação empírica, como a seguinte relação,

$$\mu(c) = (1 - c + M^{0.25} c)^{-4} \mu_r \quad (2.9)$$

onde  $\mu_r$  é a viscosidade do fluido residente ( $ML^{-1}T^{-1}$ ), e  $M$  é a chamada razão de mobilidade (*adimensional*), definida como a razão entre as viscosidades do fluido residente e do soluto  $\mu_s$ ,

$$M = \frac{\mu_r}{\mu_s} \quad (2.10)$$

A física dos problemas aqui tratados depende fortemente da razão de mobilidade. Estudos mostram que para  $M > 1$  a frente de concentrações pode se tornar fisicamente instável, o que ocorre em muitos casos práticos onde o soluto é menos viscoso do que o fluido residente (modelo de recuperação terciária).

O princípio da conservação de massa requer que a massa líquida do soluto que entra (ou sai) do REV durante um certo intervalo de tempo, deve ser igual ao acúmulo (ou perda) da massa armazenada neste volume no mesmo intervalo de tempo. Isto pode ser expresso para um fluido incompressível através da seguinte equação,

$$\begin{aligned} \frac{\partial}{\partial t}(\varphi c) + \frac{\partial}{\partial t}(\rho_b \bar{c}) + \frac{\partial}{\partial x_i}(\varphi c v_i) - \frac{\partial}{\partial x_i}(\varphi \mathcal{D}_{ij} \frac{\partial}{\partial x_j} c) \\ - c^* f + \lambda(\varphi c + \rho_b \bar{c}) = 0 \quad i, j = 1, 2, 3 \end{aligned} \quad (2.11)$$

Nesta equação,  $c$  é a concentração do fluido injetado (soluto ou contaminante) ( $ML^{-3}$ ),  $c^*$  é o valor da concentração nos pontos de injeção/extração ( $ML^{-3}$ ),  $\rho_b$  é a densidade volumétrica do material do aquífero ( $ML^{-3}$ ),  $\bar{c}$  é a concentração da massa do soluto contido no material sólido do aquífero por sorção (massa de soluto por unidade de massa do material do aquífero  $MM^{-1}$ ),  $f$  é a fonte volumétrica ( $T^{-1}$ ),  $\lambda$  é a taxa de decaimento ( $T^{-1}$ ) e  $\mathcal{D}$  é o tensor de dispersão-difusão ( $L^2 T^{-1}$ ).

Os três primeiros termos em (2.11) correspondem a um balanço de massa semelhante ao da equação (2.1). O quarto termo representa as mudanças na concentração devido à dispersão hidrodinâmica, e é análogo ao fluxo difusivo descrito pela lei de Fick [24]. O coeficiente de dispersão-difusão pode ser relacionado à velocidade do fluxo pela equação de Schedegger [16],

$$\mathcal{D}_{ij} = \alpha_{ijmn} \frac{v_m v_n}{\|\mathbf{v}\|} \quad i, j, m, n = 1, 2, 3 \quad (2.12)$$

onde  $\alpha_{ijmn}$  são as componentes do tensor de dispersividades ( $L$ ). Para um aquífero isotrópico, este tensor pode ser definido em termos de dispersividades longitudinal e transversal,  $\alpha_L$  e  $\alpha_T$  (consideradas constantes no tempo) ( $L$ ). Além disso, um coeficiente de difusão isotrópico  $D_m$  é adicionado de forma a considerar a difusão molecular e o efeito da tortuosidade do meio. Desta forma, o tensor de dispersão-difusão  $\mathcal{D}$  pode ser dado por [5, 25],

$$\mathcal{D} = (D_m + \alpha_T \|\mathbf{v}\|) \mathbf{I} + (\alpha_L - \alpha_T) \frac{\mathbf{v} \otimes \mathbf{v}}{\|\mathbf{v}\|} \quad (2.13)$$

onde  $\mathbf{I}$  é o tensor unitário.

O último termo na equação (2.11) representa o decaimento radioativo do soluto, usualmente expresso como a meia vida  $t_{\frac{1}{2}}$ , isto é, o tempo necessário para a concentração cair a metade de seu valor original, ou seja,

$$t_{\frac{1}{2}} = \frac{\ln 2}{\lambda} \quad (2.14)$$

Em alguns casos, o termo de decaimento pode representar a decomposição química ou biodegradação.

O termo com divergente da velocidade em (2.11) pode ser eliminado, uma vez que,

$$\begin{aligned}\frac{\partial}{\partial t}(\varphi c) &= \varphi \frac{\partial c}{\partial t} + c \frac{\partial \varphi}{\partial t} \\ \frac{\partial}{\partial x_i}(\varphi c v_i) &= \varphi v_i \frac{\partial c}{\partial x_i} + c \frac{\partial}{\partial x_i}(\varphi v_i) \quad i = 1, 2, 3\end{aligned}\tag{2.15}$$

O que leva a,

$$\begin{aligned}\varphi \frac{\partial c}{\partial t} + \frac{\partial}{\partial t}(\rho_b \bar{c}) + \varphi v_i \frac{\partial c}{\partial x_i} - \frac{\partial}{\partial x_i}(\varphi \mathcal{D}_{ij} \frac{\partial c}{\partial x_j}) \\ - f(c^* - c) + \varphi \lambda(c + \frac{\rho_b \bar{c}}{\varphi}) = 0 \quad i, j = 1, 2, 3\end{aligned}\tag{2.16}$$

Esta equação pode ser simplificada considerando-se o equilíbrio de sorção do soluto governado por uma isoterma de Freundlich [24], e reações químicas reversíveis e instantâneas de forma que o equilíbrio local possa ser assumido. Então,  $\bar{c} = k_d c$ , onde  $k_d$  é o coeficiente de sorção ou distribuição ( $M^{-1}L^{-3}$ ),

$$\frac{\partial}{\partial t}(\rho_b \bar{c}) = \rho_b k_d \frac{\partial c}{\partial t}\tag{2.17}$$

Definindo-se ainda o chamado fator de retardo  $R_f$  como,

$$R_f = 1 + \frac{\rho_b k_d}{\varphi}\tag{2.18}$$

A equação (2.16) se reduz a,

$$\begin{aligned}\varphi \frac{\partial c}{\partial t} + \frac{\varphi v_i}{R_f} \frac{\partial c}{\partial x_i} - \frac{1}{R_f} \frac{\partial}{\partial x_i}(\varphi \mathcal{D}_{ij} \frac{\partial c}{\partial x_j}) \\ - \frac{1}{R_f} f(c^* - c) + \varphi \lambda c = 0\end{aligned}\tag{2.19}$$

que doravante será chamada de equação de transporte.

## 2.2 Problema Modelo

O modelo matemático a ser adotado no presente trabalho considera o escoamento de um fluido miscível, incompressível, através de um meio poroso rígido saturado

$\Omega \subset \mathbb{R}^2$  de contorno  $\partial\Omega$ . Fazendo-se as simplificações usuais em (2.6), (2.7) e (2.19) tem-se o seguinte conjunto acoplado de equações diferenciais parciais [5],

• Equação da Pressão :

$$\operatorname{div} \left( \frac{k_{ij}}{\varphi \mu} \nabla p \right) = q \quad em \ \Omega \times [0, T] \quad (2.20)$$

com condição de contorno de fluxo nulo, isto é,

$$\mathbf{v} \cdot \mathbf{n} = 0 \quad em \ \partial\Omega \quad (2.21)$$

Para assegurar a unicidade para a pressão impõe-se a normalização,

$$\int_{\Omega} p \, d\Omega = 0 \quad em \ \Omega \times [0, T] \quad (2.22)$$

• Equação de Transporte :

$$\varphi \frac{\partial c}{\partial t} + \operatorname{div}(\varphi \mathbf{v} c) - \operatorname{div}(\varphi \mathcal{D} \nabla c) = c^* f \quad em \ \Omega \times [0, T] \quad (2.23)$$

sujeitas às condições de contorno e inicial,

$$\mathcal{D}(\mathbf{v}) \nabla c \cdot \mathbf{n} = 0 \quad em \ \partial\Omega \quad (2.24)$$

$$c(\mathbf{x}, 0) = c_0(\mathbf{x}) \quad em \ \Omega$$

onde,

$$\operatorname{div} \mathbf{u} = \frac{\partial u_i}{\partial x_i} \quad i = 1, 2 \quad (2.25)$$

$$\nabla \mathbf{u} = \begin{bmatrix} \frac{\partial u}{\partial x} \\ \frac{\partial u}{\partial y} \end{bmatrix} \quad (2.26)$$

Nestas equações  $c_0$  é o valor da concentração no instante  $t = 0$ ,  $\mathbf{x}$  são as coordenadas cartesianas,  $\mathbf{n}$  é o vetor unitário normal à fronteira e  $[0, T]$  é o intervalo de

tempo de interesse.

### **Observações:**

1 - Estas equações são válidas desde que não existam reações químicas, e/ou biológicas capazes de afetar as propriedades do fluido ou do meio poroso, decaimento nulo, e ainda considerando-se o fator de retardo unitário. Este é caso de contaminantes não reativos, e quando não há biodegradação [16].

2 - Na equação de transporte, o termo advectivo é predominante na maioria dos casos, como por exemplo, na injeção de traçadores em reservatórios de petróleo, e na contaminação de águas subterrâneas. Problemas estes que serão tratados neste trabalho.

3 - O problema modelo é muito utilizado, principalmente na simulação de processos de recuperação terciária, como será visto no Capítulo 6.

4 - A equação (2.20) é obtida substituindo-se a lei de Darcy na equação da conservação de massa.

## **2.2.1 Discretização por Elementos Finitos**

### **Discretização Espacial**

Como na maioria dos casos práticos, a solução analítica das equações governantes não pode ser obtida diretamente, métodos numéricos são utilizados, como o método dos elementos finitos, onde as variáveis principais são substituídas por variáveis discretas, definidas nos nós de uma malha de elementos finitos [27].

- Equação da Pressão:

A formulação fraca de Galerkin do problema da pressão será então: Achar  $p \in \mathcal{U}$ , tal que,

$$\int_{\Omega} \left( \frac{k_{ij}}{\varphi \mu} \cdot \nabla p \right) \nabla w \, d\Omega - \int_{\Omega} q w \, d\Omega = 0 \quad \forall w \in \mathcal{U} \quad (2.27)$$

Para  $\mathcal{U} = \{w \in \mathcal{H}^1(\Omega), \int_{\Omega} w \, d\Omega = 0\}$  onde  $w$  são as funções discretas de ponderação.

Dividindo-se o domínio  $\Omega$  em uma malha de  $nel$  elementos finitos, de forma que,

$$\Omega = \bigcup_{e=1}^{nel} \Omega^e \quad ; \quad \Omega_i^e \cap \Omega_j^e = \emptyset \quad i \neq j, \quad i, j = 1, \dots, nel \quad (2.28)$$

onde o superíndice  $e$  indica o  $e$ -ésimo elemento da malha e o subíndice  $h$  indica a discretização de elementos finitos. Assim tem-se  $\mathcal{U}_h = \{w_h \in \mathcal{U}; w_h^e \in P_k(\Omega^e)\}$ , onde  $P_k(\Omega^e)$  é o conjunto dos polinômios definidos em  $\Omega^e$  com grau menor ou igual a  $k$ , e a aproximação usual de elementos finitos para a pressão será,

$$p_h = \sum_{i=1}^{nnos} p_i N_i \quad (2.29)$$

onde  $nnos$  é o número total de nós da malha e  $N_i$  são as funções de interpolação Lagrangeanas usuais para o elemento bilinear,

$$N_i = \frac{1}{4} (\eta + \eta \eta_i) (1 + \xi \xi_i) \quad i = 1, \dots, 4 \quad (2.30)$$

definidas no domínio de referência  $[\xi = -1, \xi = 1] \times [\eta = -1, \eta = 1]$ .

A formulação clássica do método de Galerkin para a equação da pressão (2.27) leva à seguinte formulação de elementos finitos,

$$p_i \int_{\Omega} \left( \frac{k_{ij}}{\varphi \mu} \nabla N_i \right) \cdot \nabla N_j \, d\Omega - \int_{\Omega} f N_i \, d\Omega = 0 \quad i, j = 1, \dots, 4 \quad (2.31)$$

Esta formulação pode ser escrita na forma matricial,

$$\mathbf{S} \mathbf{p} = \mathbf{q} \quad (2.32)$$

onde  $\mathbf{p}$  contém as pressões nodais incógnitas,  $\mathbf{q}$  contém os termos independentes, e a matriz  $\mathbf{S}$  é a chamada matriz de rigidez global. Pode-se mostrar que  $\mathbf{S}$  é simétrica e positiva-definida. De forma usual,  $\mathbf{S}$  e  $\mathbf{q}$  são obtidas a partir das contribuições dos elementos, de forma que,

$$\mathbf{S} = \sum_{e=1}^{nel} \mathbf{S}^e \quad \mathbf{q} = \sum_{e=1}^{nel} \mathbf{q}^e \quad (2.33)$$

onde  $\mathbf{S}^e$  e  $\mathbf{q}^e$  têm como componentes, respectivamente,

$$S_{ij}^e = \int_{\Omega^e} \nabla N_i \frac{k_{ij}}{\varphi \mu} \nabla N_j d\Omega \quad q_i^e = \int_{\Omega^e} N_i q d\Omega \quad i, j = 1, \dots, 4 \quad (2.34)$$

- Obtenção do Campo de Velocidades:

Sabe-se que o cálculo das velocidades diretamente da lei de Darcy leva a uma taxa de convergência inferior a obtida para as pressões, e além disso satisfaz fracamente às condições de fluxo nulo. Serão examinadas no Capítulo 4 algumas técnicas que podem ser utilizadas para melhorar a qualidade da aproximação do campo de velocidades.

- Equação de Transporte:

A equação de transporte é advectiva-difusiva. Sendo assim, oscilações numéricas podem ocorrer se for usada a formulação clássica de Galerkin, principalmente em problemas fortemente advectivos. Por este motivo, utiliza-se a formulação SUPG (*Streamline Upwind Petrov-Galerkin*) [28], que utiliza funções peso descontínuas, onde às funções peso de Galerkin, são somadas perturbações que atuam na direção das linhas de corrente, levando a soluções menos oscilatórias. Este método atualmente é muito usado em problemas de advecção dominante.

A difusão na direção das linhas de corrente introduzida pela formulação SUPG não é suficiente para se obter um esquema monótono e então, uma difusão adicional

transversal às linhas de corrente, pode ser necessária. O método de Codina [29] mantém inalterada a difusão na direção das linhas de corrente, enquanto modifica apenas a difusão transversal às mesmas (CD - *Crosswind Dissipation*). Isto é feito com o objetivo de satisfazer a duas condições: evitar um amortecimento excessivo (*overdamping*), e ser pequeno nas regiões onde os efeitos advectivos não são importantes. Assim, um novo termo, proporcional ao resíduo no interior do elemento deve ser somado à formulação. Tem-se então a seguinte formulação fraca aproximada para o problema posto pelas equações (2.23) e (2.24) [30],

$$\begin{aligned}
B(w_h, c_h) + \sum_{e=1}^{nel} \int_{\Omega} \tau \mathbf{v}_h \cdot \nabla w_h (L(c_h) - c_h^* f) d\Omega + \\
+ \sum_{e=1}^{nel} \int_{\Omega} \tau_c \nabla w_h \cdot \bar{\mathbf{v}}_h \cdot \nabla c_h d\Omega = L(w_h)
\end{aligned} \tag{2.35}$$

onde,

$$B(w_h, c_h) = \int_{\Omega} w_h L(c_h) d\Omega \tag{2.36}$$

$$L(w_h) = \int_{\Omega} w_h c_h^* f d\Omega \tag{2.37}$$

são os termos de Galerkin, enquanto que o termo envolvendo o primeiro somatório representa a parcela de estabilização do método SUPG, e o segundo somatório corresponde ao operador de captura de descontinuidades. O operador  $L(c_h)$  é calculado como,

$$L(c_h) = \varphi \frac{\partial c_h}{\partial t} - \operatorname{div}(\varphi \mathcal{D} \nabla c_h) + \operatorname{div}(\varphi \mathbf{v}_h c_h) \tag{2.38}$$

O parâmetro  $\tau$  é calculado como em Brooks e Hughes [28],

$$\tau = \frac{\alpha^e h^e}{2 \|\mathbf{v}\|} \tag{2.39}$$

onde,

$$\begin{aligned}
\alpha^e &= \min\left(\frac{P_e}{3}, 1\right) \\
P_e &= \frac{\|\mathbf{v}\| h^e}{2 \mathcal{D}} \\
h^e &= 2 \frac{\|\mathbf{v}\|}{\|\mathbf{v}_N\|} h_N
\end{aligned} \tag{2.40}$$

O parâmetro  $\alpha^e$  é a função *upwind*,  $P_e$  é o número de Péclet e  $h^e$  é o comprimento característico do elemento  $e$ . O sub-índice  $N$  indica a projeção no plano de referência em coordenadas naturais  $(\xi, \eta)$  [31].

Já o parâmetro  $\tau_c$ , que multiplica a parcela do operador de captura de descontinuidades é calculado por [31, 32],

$$\tau_c = \alpha_c^e h_{//}^e \frac{\|L(c_h) - c_h^* f\|}{2 \|\nabla c_h\|} \quad (2.41)$$

onde,

$$\begin{aligned} \alpha_c^e &= \min\left(\frac{P_{e//}}{3}, 0.7\right) \\ P_{e//} &= \frac{\|\mathbf{v}_{//}\| h_{//}^e}{2 \mathcal{D}} \\ h_{//}^e &= 2 \frac{\|\mathbf{v}_{//}\|}{\|\mathbf{v}_N\|} h_N \end{aligned} \quad (2.42)$$

O subíndice  $//$  indica a projeção na direção paralela a  $\nabla c$ . Já o tensor  $\bar{\mathbf{v}}$  usado em (2.35) é dado por,

$$\bar{\mathbf{v}} = \mathbf{I} - \frac{1}{\|\mathbf{v}\|^2} \mathbf{v} \otimes \mathbf{v} \quad (2.43)$$

Note que para o operador de captura CAU (*Consistent Approximate Upwind*) [33],  $\bar{\mathbf{v}} = \mathbf{I}$ .

Substituindo-se a aproximação de elementos finitos para a concentração,

$$c_h = \sum_{i=1}^{nnos} c_i N_i \quad (2.44)$$

na equação (2.35), chega-se à formulação de elementos finitos, que pode ser escrita na forma matricial,

$$\mathbf{M} \dot{\mathbf{c}} + \mathbf{K} \mathbf{c} = \mathbf{f} \quad (2.45)$$

onde,

$$\mathbf{M} = \mathbf{M}_c + \mathbf{M}_{pg} \quad (2.46)$$

$$\mathbf{K} = \mathbf{K}_a + \mathbf{K}_d + \mathbf{K}_{pg} + \mathbf{K}_{cd}$$

Nestas equações,  $\mathbf{M}$  é a matriz de massa, formada pela soma das parcelas consistente  $\mathbf{M}_c$  e de correção de Petrov-Galerkin  $\mathbf{M}_{pg}$ .  $\mathbf{K}$  é a matriz dos coeficientes, formada pela soma das parcelas referentes à advecção, à difusão, Petrov-Galerkin e captura de descontinuidades, de subíndices  $a$ ,  $d$ ,  $pg$ ,  $cd$ , respectivamente. O vetor  $\mathbf{c}$  contém as concentrações incógnitas nodais, e  $\mathbf{f}$  provém da contribuição dos graus de liberdade prescritos de concentração. O superíndice  $(\cdot)$  indica a diferenciação no tempo. Como no caso da equação da pressão, tais matrizes também são obtidas a partir da contribuição dos elementos, de forma que para o  $e$ -ésimo elemento temos as seguintes componentes,

$$M_{c_{ij}}^e = \int_{\Omega^e} \varphi N_i \cdot N_j d\Omega \quad i, j = 1, \dots, 4 \quad (2.47)$$

$$M_{pg_{ij}}^e = \int_{\Omega^e} \tau \varphi \nabla N_i \cdot \mathbf{v} N_j d\Omega$$

$$K_{d_{ij}}^e = \int_{\Omega^e} \varphi \nabla N_i \mathcal{D}_{ij} \nabla N_j d\Omega$$

$$K_{a_{ij}}^e = \int_{\Omega^e} \varphi N_i \mathbf{v} \cdot \nabla N_j d\Omega \quad i, j = 1, \dots, 4 \quad (2.48)$$

$$K_{pg_{ij}}^e = \int_{\Omega^e} \tau \varphi \nabla N_i \cdot \mathbf{v} \otimes \mathbf{v} \cdot \nabla N_j d\Omega$$

$$K_{cd_{ij}}^e = \int_{\Omega^e} \tau_c \nabla N_i \cdot \bar{\mathbf{v}} \cdot \nabla N_j d\Omega$$

As matrizes (2.34), (2.47) e (2.48) são calculadas geralmente utilizando-se integração numérica de Gauss. Esta regra de quadratura necessita de um certo número de pontos de integração suficientes para computar exatamente uma dada integral [34]. No caso de elementos bilineares, a quadratura de Gauss necessita de  $2 \times 2$  pontos de quadratura. O Capítulo 3 tratará da chamada integração reduzida, onde se utiliza apenas 1 ponto na avaliação das integrais.

É importante notar que a matriz de massa consistente  $\mathbf{M}_c$  (2.46) é calculada de forma não usual, analiticamente como,

$$\begin{aligned} \mathbf{M}_c &= \int_{\Omega^e} \varphi \mathbf{N}^T \mathbf{N} d\Omega \\ &= \frac{1}{144} \varphi \begin{bmatrix} 4(r_1 + r_A) & 2(r_1 + r_B) & r_1 & 2r_1 + r_C \\ & 4(r_1 + r_D) & 2r_1 - r_C & r_1 \\ & & 4(r_1 + r_E) & 2r_1 - r_B \\ \text{sim} & & & 4(r_1 - r_D) \end{bmatrix} \end{aligned} \quad (2.49)$$

onde,

$$\begin{aligned} r_1 &= 2(x_{31} y_{42} - x_{42} y_{31}) \\ r_A &= x_{42}(y_{12} + y_{34}) - y_{42}(x_{12} + x_{34}) \\ r_B &= (x_{42} + x_{31})(y_{12} + y_{34}) - (y_{42} + y_{31})(x_{12} + x_{34}) \\ r_C &= (x_{42} - x_{31})(y_{12} + y_{34}) - (y_{42} - y_{31})(x_{12} + x_{34}) \\ r_D &= x_{31}(y_{34} + y_{12}) - y_{31}(x_{34} + x_{12}) \\ r_E &= y_{42}(x_{34} + x_{12}) - x_{42}(y_{34} + y_{12}) \end{aligned} \quad (2.50)$$

e,  $x_{ij} = x_i - x_j$ ;  $y_{ij} = y_i - y_j$ .

## Discretização Temporal

Aproximando-se a derivada no tempo pela regra trapezoidal generalizada,

$$\dot{\mathbf{c}} = \frac{c_{n+1} - c_n}{\gamma \Delta t} \quad (2.51)$$

tem-se o seguinte algoritmo preditor-multicorretor para o avanço no tempo de  $n$  a  $n + 1$ ,

Inicializa grandezas

$$\mathbf{p}_{n+1}^0 = \mathbf{p}_n^j ; \mathbf{v}_{n+1}^0 = \mathbf{v}_n^j$$

$$\mathbf{c}_{n+1}^0 = \mathbf{c}_n^j ; \dot{\mathbf{c}}_{n+1}^0 = \dot{\mathbf{c}}_n^j$$

Para,  $i = 0, 1, 2, 3, \dots$ , faça,

Resolve a equação da Pressão:

$$\mathbf{S}(\mathbf{c}_{n+1}^i) \mathbf{p}_{n+1}^{i+1} = \mathbf{q}_{n+1}$$

Calcula as velocidades:

$$\mathbf{v}_{n+1}^{i+1} = -\frac{k_{ij}}{\varphi \mu} \nabla \mathbf{p}_{n+1}^{i+1}$$

Resolve a equação de Transporte:

$$\mathbf{M}_{n+1}^* \Delta \dot{\mathbf{c}}_{n+1}^{i+1} = \mathbf{R}_{n+1}^{i+1}$$

onde,

$$\mathbf{M}_{n+1}^* = \mathbf{M} + \gamma \Delta t \mathbf{K}$$

$$\mathbf{R}_{n+1}^{i+1} = \mathbf{f}_{n+1} - \mathbf{M}(\dot{\mathbf{c}}_{n+1}^i) \dot{\mathbf{c}}_{n+1}^i - \mathbf{K}(\mathbf{v}_{n+1}^{i+1}, \mathbf{p}_{n+1}^{i+1}, \mathbf{c}_{n+1}^i) \mathbf{c}_{n+1}^i$$

Atualiza grandezas:

$$\mathbf{c}_{n+1}^{i+1} = \mathbf{c}_{n+1}^i + \gamma \Delta t \Delta \dot{\mathbf{c}}_{n+1}^{i+1}$$

$$\dot{\mathbf{c}}_{n+1}^{i+1} = \dot{\mathbf{c}}_{n+1}^i + \Delta \dot{\mathbf{c}}_{n+1}^{i+1}$$

Fim.

Nestas expressões,  $\Delta t$  é o passo de tempo da análise,  $\Delta \dot{\mathbf{c}}$  é a variação da derivada da concentração, e  $\gamma$  é o parâmetro de controle da estabilidade e precisão na integração no tempo. Neste trabalho adotou-se  $\gamma = \frac{1}{2}$ , o que leva a um método implícito incondicionalmente estável para o problema de transporte [27]. Vale ressaltar que quando  $\gamma = 1$ , tem-se o mesmo esquema utilizado em [30], escrito na forma preditor-multicorretor.

O processo iterativo continuará até que seja atingido um critério de convergência baseado na medida do erro não linear ( $NL$ )[32], que é avaliado empregando-se medidas de erro das variáveis de interesse, ou seja,

$$\begin{aligned}
e_p^{NL} &= \frac{\|\mathbf{p}_{n+1}^{i+1} - \mathbf{p}_{n+1}^i\|}{\|\mathbf{p}_{n+1}^{i+1}\|} \\
e_v^{NL} &= \frac{\|\mathbf{v}_{n+1}^{i+1} - \mathbf{v}_{n+1}^i\|}{\|\mathbf{v}_{n+1}^{i+1}\|} \\
e_{\dot{c}}^{NL} &= \frac{\|\Delta \dot{\mathbf{c}}_{n+1}^{i+1}\|}{\|\dot{\mathbf{c}}_{n+1}^{i+1}\|} \\
e_R^{NL} &= \frac{\|\mathbf{R}_{n+1}^{i+1}\|}{\|\mathbf{R}_{n+1}^i\|} \\
e_E^{NL} &= \left[ \frac{(\Delta \dot{\mathbf{c}}_{n+1}^{i+1})^T \mathbf{R}_{n+1}^{i+1}}{(\Delta \dot{\mathbf{c}}_{n+1}^i)^T \mathbf{R}_{n+1}^i} \right]^{\frac{1}{2}}
\end{aligned} \tag{2.52}$$

onde  $e_p^{NL}$ ,  $e_v^{NL}$  e  $e_{\dot{c}}^{NL}$  são os erros da pressão, velocidades e derivada no tempo da concentração, respectivamente. Já  $e_R^{NL}$  é a medida de erro do balanço de massa da equação de transporte e  $e_E^{NL}$  o erro do operador discreto na norma de energia.

A convergência será alcançada quando,

$$\frac{e_p^{NL}}{p_{tol}} \leq 1 \tag{2.53}$$

$$\frac{e_v^{NL}}{v_{tol}} \leq 1 \tag{2.54}$$

$$e^{NL} = \max \left[ \frac{e_{\dot{c}}^{NL}}{\dot{c}_{tol}}, \frac{e_R^{NL}}{R_{tol}}, \frac{e_E^{NL}}{E_{tol}} \right] \leq 1 \tag{2.55}$$

O sub-índice *tol* refere-se a valores de tolerância (geralmente 1%). Se a condição (2.53) ou a condição (2.54) é satisfeita, pressão e velocidade permanecerão inalteradas nas iterações não-lineares e o algoritmo atualizará somente as concentrações. Se somente uma única iteração for feita, o esquema é dito implícito-sequencial [6], onde as aproximações da pressão e da velocidade são tratadas de forma desacoplada da equação de transporte. Assim, resolve-se a equação de pressão, em seguida avalia-se as velocidades no centróide do elemento através da aplicação da Lei de Darcy, e

então é resolvida a equação de transporte em cada passo de tempo [30].

Devido à forte não-linearidade do sistema acoplado de equações, torna-se interessante a utilização de uma estratégia automática de seleção do passo de tempo, de forma a se obter uma melhoria na estabilidade do sistema. Neste trabalho, utiliza-se o controlador PID (*Proportional, Integral and Derivative Feedback*) para a seleção do passo de tempo [32], controlando-se a condição de CFL (número de *Courant-Friedrichs-Levy*), local [35], ou seja,

$$CFL = \frac{\|\mathbf{v}^e\|}{h^e} \Delta t^e \quad (2.56)$$

assim,

$$CFL_{n+1} = \left(\frac{e_{n-1}}{e_n}\right)^{k_P} \left(\frac{tol}{e_n}\right)^{k_I} \left(\frac{e_{n-1}^2}{e_n e_{n-2}}\right)^{k_D} CFL_n \quad (2.57)$$

Os parâmetros livres  $k_P$ ,  $k_I$  e  $k_D$  são ajustados de forma a minimizar o esforço computacional. Estudos paramétricos para a escolha destes parâmetros podem ser encontrados em Coutinho e Alves [32]. Com base nestes estudos adota-se neste trabalho os seguintes valores,  $k_P = 0.05$ ,  $k_I = 0.15$ , e  $k_D = 0.01$ . A medida de erro  $e$  é calculada como,

$$e = \max(e_p, e_v, e_c, e_{\dot{c}}) \quad (2.58)$$

onde  $e_p$ ,  $e_v$ ,  $e_c$  e  $e_{\dot{c}}$  são as mudanças normalizadas das pressões, velocidades, concentrações e derivadas no tempo das concentrações, respectivamente. Estes parâmetros são calculados como,

$$\begin{aligned} e_p &= \frac{\|\mathbf{p}_{n+1} - \mathbf{p}_n\|}{\|\mathbf{p}_{n+1}\| tol_p} \\ e_v &= \frac{\|\mathbf{v}_{n+1} - \mathbf{v}_n\|}{\|\mathbf{v}_{n+1}\| tol_v} \\ e_c &= \frac{\|\mathbf{c}_{n+1} - \mathbf{c}_n\|}{\|\mathbf{c}_{n+1}\| tol_c} \\ e_{\dot{c}} &= \frac{\|\dot{\mathbf{c}}_{n+1} - \dot{\mathbf{c}}_n\|}{\|\dot{\mathbf{c}}_{n+1}\| tol_{\dot{c}}} \end{aligned} \quad (2.59)$$

onde as tolerâncias  $tol_p$ ,  $tol_v$ ,  $tol_c$ , e  $tol_{\dot{c}}$  geralmente variam de 0.05 a 0.20.

O passo de tempo é calculado impondo-se a condição de CFL à malha,

$$\Delta t = \min(\Delta t^e) = \min\left(\frac{CFL_{n+1} h^e}{\|\mathbf{v}\|}\right) \quad (2.60)$$

Utiliza-se ainda limitadores com a função de prevenir um crescimento exagerado ( $CFL_{max}$ ) ou uma redução exagerada ( $CFL_{min}$ ) do passo de tempo. Se o valor de  $e$  calculado não for aceitável, o passo de tempo é rejeitado e um novo critério é adotado como  $\max(0, 5CFL_n, CFL_{min})$ . Este procedimento se repete até que se obtenha um valor aceitável. Outra observação importante diz respeito à convergência das iterações não-lineares. Caso ocorra uma taxa de convergência baixa, rejeita-se o passo de tempo e retoma-se o cálculo com um passo de tempo menor. Desta forma, melhora-se a taxa de convergência das iterações não-lineares, economizando-se tempo de processamento.

Para a solução dos dois sistemas de equações presentes na etapa de multicorreção, utiliza-se técnicas especiais de solução de sistemas. Para a solução da equação da pressão utiliza-se o método dos gradientes conjugados preconditionado (*Preconditioned Conjugate Gradient* - PCG) por ser efetivo para uma matriz de coeficientes simétrica positiva-definida como  $\mathbf{S}$ . Já na obtenção da concentração adotou-se o algoritmo GMRES (*Generalized Minimal Residual*) [36] mais indicado para uma matriz não-simétrica como é o caso das matrizes do sistema de equações de transporte. Ambos algoritmos utilizam pré-condicionadores elemento por elemento (EBE) do tipo Gauss-Seidel [38]. Estes últimos, visam aumentar o desempenho dos métodos iterativos, transformando cada sistema de equações em outro equivalente de mesma solução porém com propriedades espectrais mais favoráveis, de forma simples e com baixa demanda de armazenamento. O pré-condicionamento é então introduzido modificando-se os sistemas (2.32) e (2.45) da seguinte forma,

$$\mathbf{B}^{-1} \mathbf{A} \mathbf{u} = \mathbf{B}^{-1} \mathbf{b} \quad (2.61)$$

$$\mathbf{L}^{-1} \bar{\mathbf{A}} \mathbf{U}^{-1} \mathbf{y} = \mathbf{L}^{-1} \bar{\mathbf{b}} \quad (2.62)$$

onde,  $\mathbf{y} = \mathbf{U} \bar{\mathbf{u}}$ , e a forma particular das matrizes de pré-condicionamento  $\mathbf{B}$ ,  $\mathbf{L}$ , e  $\mathbf{U}$  são baseadas na decomposição de Gauss-Seidel das matrizes de elemento regularizadas. Os operadores  $\mathbf{A}$ ,  $\bar{\mathbf{A}}$ , os vetores incógnitos  $\mathbf{u}$ ,  $\bar{\mathbf{u}}$  e os vetores de termos independentes  $\mathbf{b}$ ,  $\bar{\mathbf{b}}$  são definidos como,

$$\begin{aligned} \mathbf{A} &= \mathbf{W}^{-\frac{1}{2}} \mathbf{S} \mathbf{W}^{-\frac{1}{2}} & ; \quad \bar{\mathbf{A}} &= \bar{\mathbf{W}}^{-\frac{1}{2}} \mathbf{M}^* \bar{\mathbf{W}}^{-\frac{1}{2}} \\ \mathbf{b} &= \mathbf{W}^{-\frac{1}{2}} \mathbf{f} & ; \quad \bar{\mathbf{b}} &= \bar{\mathbf{W}}^{-\frac{1}{2}} \mathbf{R} \\ \mathbf{u} &= \mathbf{W}^{\frac{1}{2}} \mathbf{p} & ; \quad \bar{\mathbf{u}} &= \bar{\mathbf{W}}^{\frac{1}{2}} \nabla \dot{\mathbf{c}} \end{aligned} \quad (2.63)$$

Para as matrizes de escalonamento,  $\mathbf{W} = \text{diag}(\mathbf{S})$  e  $\bar{\mathbf{W}} = \text{diag}(\mathbf{M}^*)$ , as matrizes de pré-condicionamento podem então ser definidas como,

$$\mathbf{B}^{-1} = \prod_{e=1}^{nel} \{\mathcal{L}^e\} \times \prod_{e=nel}^1 \{\mathcal{L}^{eT}\} \quad (2.64)$$

$$\mathbf{L}^{-1} = \prod_{e=1}^{nel} \mathcal{L}^e \quad (2.65)$$

$$\mathbf{U}^{-1} = \prod_{e=nel}^1 \mathbf{u}^e \quad (2.66)$$

onde  $\mathcal{L}^e$  e  $\mathbf{u}^e$  são calculadas a partir das matrizes de elemento escalonadas, conforme sugerido por Winget e Hughes [39], ou seja,

$$\begin{aligned} \mathcal{L}^e + \mathcal{L}^{eT} &= \mathbf{A}^e + \mathbf{I} \\ \mathcal{L}^e + \mathbf{u}^e &= \bar{\mathbf{A}}^e + \mathbf{I} \end{aligned} \quad (2.67)$$

As multiplicações matriz-vetor são calculadas a nível de elemento como,

$$\mathbf{A} \mathbf{u} = \sum_{e=1}^{nel} \mathbf{A}^e \mathbf{u}^e \quad \bar{\mathbf{A}} \bar{\mathbf{u}} = \sum_{e=1}^{nel} \bar{\mathbf{A}}^e \bar{\mathbf{u}}^e \quad (2.68)$$

onde  $\mathbf{A}^e$  e  $\bar{\mathbf{A}}^e$  são as matrizes de elemento e  $\mathbf{u}^e$  e  $\bar{\mathbf{u}}^e$  são os vetores das componentes de  $\mathbf{u}$  e  $\bar{\mathbf{u}}$  restritas aos graus de liberdade do elemento. As operações em (2.65) e (2.66) são implementadas como a retrossubstituição e a substituição para frente usando as matrizes de elemento definidas em (2.67).

## Capítulo 3

# Estratégia de Estabilização para Advecção-difusão

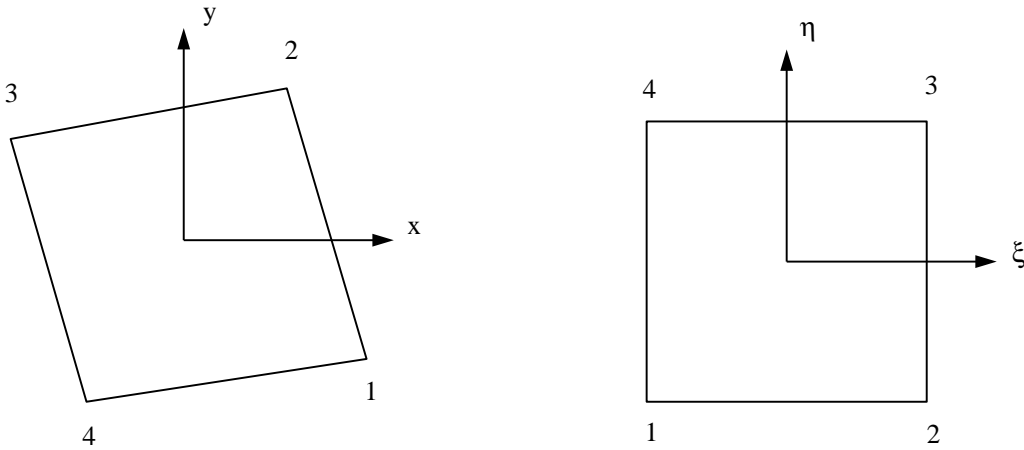
Como foi visto no capítulo anterior, na solução de problemas advectivos-difusivos pelo método dos elementos finitos, surgem integrais que podem ser avaliadas utilizando-se uma regra de integração numérica, geralmente a quadratura de Gauss. O custo computacional da avaliação destas integrais é proporcional ao número de pontos de integração utilizados. Para se obter elementos com melhor desempenho, particularmente em problemas de grande escala, pode-se subintegrar o elemento para tornar a sua avaliação mais rápida. Porém, a subintegração, ou integração reduzida, requer estabilização devido à possibilidade de surgimento de oscilações espúrias conhecidas como modos *hourglass*, modos cinemáticos ou modos de energia nula [40]. O controle destes modos é tópico de interesse de muitas pesquisas que visam a utilização segura da integração reduzida [18, 41, 42].

A subintegração não é muito popular na literatura acadêmica, mas é muito utilizada na indústria [40]. Atualmente, a integração reduzida vem sendo utilizada com sucesso, principalmente em problemas de mecânica dos sólidos, cascas e problemas predominantemente difusivos. Mais recentemente vem sendo utilizada em problemas

advectivos-difusivos [19, 20]. Antes de descrever-se a metodologia de estabilização adotada neste trabalho, será feito um resumo teórico sobre o elemento quadrilátero e as consequências da integração reduzida.

### 3.1 O Elemento Quadrilátero Bilinear

O elemento quadrilátero de 4 nós é definido na Figura 3.1, onde se pode observar o domínio do elemento no sistema físico de coordenadas  $(x, y)$ , e no sistema de referência, de coordenadas  $(\xi, \eta)$ .



**Figura 3.1:** Domínio do Elemento nos Sistemas Físico e de Referência

O mapeamento ou transformação do domínio físico para o domínio de referência, é dado por,

$$x_I = \sum_{i=1}^4 N_i x_{Ii} = \mathbf{N} \mathbf{x}_I \quad I = 1, 2 \quad (3.1)$$

onde,

$$\mathbf{N} = \begin{bmatrix} N_1 & N_2 & N_3 & N_4 \end{bmatrix}$$

$$\mathbf{x}_1^T = \mathbf{x}^T = \left\{ x_1 \ x_2 \ x_3 \ x_4 \right\} \quad (3.2)$$

$$\mathbf{x}_2^T = \mathbf{y}^T = \left\{ y_1 \ y_2 \ y_3 \ y_4 \right\}$$

para  $x_i, y_i$  coordenadas nodais, e  $N_i$  funções de forma (2.30) escritas no sistema de referência.

A matriz Jacobiana da transformação de coordenadas (3.1) é dada por,

$$\mathbf{J} = \begin{bmatrix} \frac{\partial x}{\partial \xi} & \frac{\partial y}{\partial \xi} \\ \frac{\partial x}{\partial \eta} & \frac{\partial y}{\partial \eta} \end{bmatrix} \quad (3.3)$$

com determinante,

$$|\mathbf{J}| = \frac{1}{8} [x_{24} y_{31} + x_{31} y_{42} + (x_{21} y_{34} + x_{34} y_{12}) \xi + (x_{14} y_{32} + x_{32} y_{41}) \eta] \quad (3.4)$$

onde,  $x_{ij} = x_i - x_j$ , e  $y_{ij} = y_i - y_j$ .

A matriz representando o gradiente discreto  $\mathbf{B}$ , é então dada por,

$$\mathbf{B} = \left\{ \begin{array}{c} \frac{\partial N_i}{\partial x} \\ \frac{\partial N_i}{\partial y} \end{array} \right\} = \frac{1}{|\mathbf{J}|} \begin{bmatrix} \frac{\partial y}{\partial \eta} & -\frac{\partial y}{\partial \xi} \\ -\frac{\partial x}{\partial \eta} & \frac{\partial x}{\partial \xi} \end{bmatrix} \left\{ \begin{array}{c} \frac{\partial N_i}{\partial \xi} \\ \frac{\partial N_i}{\partial \eta} \end{array} \right\} \quad i = 1, \dots, 4 \quad (3.5)$$

onde,

$$\begin{aligned} \frac{\partial x}{\partial \xi} &= \frac{1}{4} \sum_{i=1}^4 x_i \xi_i (1 + \eta \eta_i) \\ \frac{\partial x}{\partial \eta} &= \frac{1}{4} \sum_{i=1}^4 x_i \eta_i (1 + \xi \xi_i) \\ \frac{\partial y}{\partial \xi} &= \frac{1}{4} \sum_{i=1}^4 y_i \xi_i (1 + \eta \eta_i) \\ \frac{\partial y}{\partial \eta} &= \frac{1}{4} \sum_{i=1}^4 y_i \eta_i (1 + \xi \xi_i) \end{aligned} \quad (3.6)$$

Como as mesmas funções de forma Lagrangeanas (2.30) são usadas tanto para a interpolação das variáveis principais (2.29) e (2.44), como para o mapeamento (3.1), o elemento é dito isoparamétrico. E ainda, tanto as interpolantes como o mapeamento são bilineares em  $(\xi, \eta)$ .

Demonstra-se [40] que elementos isoparamétricos são linearmente completos e consistentes, e representam exatamente campos lineares. Então, quando os valores nodais são prescritos por um campo linear, a interpolante também é um campo linear e suas derivadas são constantes no elemento. O chamado *patch test*, que examina a estabilidade e a convergência do elemento, será satisfeito.

Para que um elemento possa ser usado com segurança é preciso ainda que o posto da matriz global tenha um valor adequado. Se seu posto for pequeno demais, a matriz global poderá ser singular ou quase singular, e assim, poderá exibir modos singulares espúrios. Se seu posto for grande demais, poderá não convergir ou convergir lentamente. Uma matriz é dita deficiente de posto quando seu posto é menor do que seu posto próprio, ou seja, a diferença entre a dimensão da matriz e o número de modos de corpo rígido. Assim, por exemplo, a matriz global  $\mathbf{S}$ , obtida com quadratura de Gauss  $2 \times 2$  (4 pontos de integração), tem posto igual a 3, que é o mesmo valor de seu posto próprio, logo não é deficiente de posto. A deficiência de posto pode causar dificuldades a menos que seja corrigida. Sendo assim, serão vistos à seguir, aspectos da integração reduzida e suas consequências no tocante ao posto das matrizes envolvidas.

### 3.2 A Integração Reduzida e suas Consequências

Na obtenção das matrizes de elemento pode ser grande a complexidade dos termos envolvidos. Estas integrais podem ser tão complexas que suas soluções exatas muitas vezes se tornam impossíveis de serem obtidas. Uma exceção notável é a matriz de massa (2.49) mostrada no capítulo anterior. Nestes casos, uma avaliação numérica aproximada destas integrais é utilizada, transformando a integração em um somatório de termos envolvendo o integrando, avaliados em pontos específicos do domínio, e multiplicados por uma ponderação apropriada [43]. Sendo assim, uma

integral pode ser avaliada numericamente como,

$$I = \int_{-1}^1 \int_{-1}^1 G(\xi, \eta) d\xi d\eta \cong \sum_{l=1}^{nint} \sum_{l=1}^{nint} G(\xi_l, \eta_l) w_l w_l \quad (3.7)$$

onde  $(\xi_l, \eta_l)$  denotam a posição dos pontos onde a solução exata pode ser determinada, e  $w_l$  são os pesos da integração numérica.

Chama-se integração completa a uma quadratura numérica suficiente para computar exatamente uma dada integral. A quadratura de Gauss necessita de  $2 \times 2$  pontos de integração ( $nint = 2$ ) para avaliar exatamente a integral (3.7), para um elemento quadrilátero bilinear. Já a chamada integração reduzida se refere a uma quadratura de ordem inferior. Quando se utiliza 1 (um) único ponto de quadratura em elementos quadriláteros, toma-se este ponto na origem do sistema de referência, onde  $\xi = \eta = 0$  (centróide do elemento). Como consequência imediata, o determinante da matriz Jacobiana (3.4) se reduz a,

$$|\mathbf{J}| = \frac{A}{4} \quad (3.8)$$

onde  $A$  é a área do elemento.

Podemos então avaliar o operador diferencial  $\mathbf{B}$  (3.5) no centróide do elemento,

$$\mathbf{B}_{(IR)} = \begin{Bmatrix} \mathbf{b}_1^T \\ \mathbf{b}_2^T \end{Bmatrix} \quad (3.9)$$

onde,

$$\begin{aligned} \mathbf{b}_1^T &= \frac{1}{2A} \begin{Bmatrix} y_{24} & y_{31} & y_{42} & y_{13} \end{Bmatrix} \\ \mathbf{b}_2^T &= \frac{1}{2A} \begin{Bmatrix} x_{42} & x_{13} & x_{24} & x_{31} \end{Bmatrix} \end{aligned} \quad (3.10)$$

Assim, podemos utilizar os resultados (3.8) e (3.9) para obter a matriz de elemento  $\mathbf{K}^e$  (2.46) avaliada com um ponto de quadratura. Tem-se então as seguintes parcelas de  $\mathbf{K}^e$  subintegradas ( de subíndice ( $IR$ )),

$$\mathbf{K}_{d(IR)}^e = A \varphi \mathbf{b}_i \mathcal{D} \mathbf{b}_j^T \quad i, j = 1, 2 \quad (3.11)$$

$$\mathbf{K}_{a(IR)}^e = \frac{A}{4} \varphi \mathbf{t} (v_i \mathbf{b}_i^T) \quad i = 1, 2 \quad (3.12)$$

$$\mathbf{K}_{pg(IR)}^e = A \tau \varphi (\mathbf{b}_j v_j v_i \mathbf{b}_i^T) \quad i, j = 1, 2 \quad (3.13)$$

$$\mathbf{K}_{cd(IR)}^e = A \tau_c (\mathbf{b}_j \bar{\mathbf{v}} \mathbf{b}_i^T) \quad i, j = 1, 2 \quad (3.14)$$

onde,  $\mathbf{t}^T = \left\{ \begin{array}{cccc} 1 & 1 & 1 & 1 \end{array} \right\}$ .

Os resultados acima também se aplicam à equação de pressão (2.33), já que  $\mathbf{S}^e$  é semelhante a  $\mathbf{K}_d^e$ , diferindo apenas na parte constitutiva. Além disso,  $\mathbf{M}_{pg}^e$  é semelhante a  $\mathbf{K}_a^e$ , trocando-se linhas por colunas. As matrizes acima são deficientes de posto, já que o posto de  $\mathbf{K}^e$  (igual a 2) é menor do que seu posto próprio (igual a 3), e por esta razão, podem ocorrer oscilações espúrias. De fato, tomando-se como exemplo o campo de pressões, se fizermos,

$$\mathbf{p} = \mathbf{h} = \left\{ \begin{array}{c} 1 \\ -1 \\ 1 \\ -1 \end{array} \right\} \quad (3.15)$$

Verifica-se que,

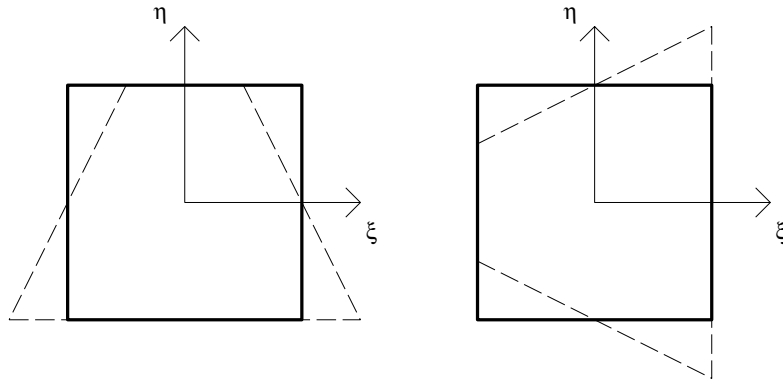
$$\mathbf{b}_1^T \mathbf{h} = 0 \quad (3.16)$$

$$\mathbf{b}_2^T \mathbf{h} = 0$$

Como consequência,

$$\mathbf{B}_{(IR)} \mathbf{h} = 0 \quad (3.17)$$

Logo, quando o campo de pressões  $\mathbf{p}$  for dado por  $\mathbf{h}, \mathbf{q} = 0$  em (2.32). Em elasticidade, um deslocamento nodal que apesar de não ser um movimento de corpo rígido resulta em uma deformação nula no elemento é um modo singular espúrio. Para elementos retangulares, os modos de deformação resultantes se assemelham a ampulhetas, o que deu origem ao nome modos *hourglass* [40] (ver Figura 3.2). Quando as contribuições dos elementos são acumuladas globalmente, a matriz global se torna singular, ou quase singular, e as soluções são oscilatórias, exibindo modos espúrios. Uma maneira de controlar o surgimento destes modos é aumentar o posto das matrizes sem contudo comprometer a consistência do elemento isoparamétrico. Isto pode ser feito de diversas maneiras, como por exemplo, através do chamado método de controle dos modos espúrios via técnica de perturbação.



**Figura 3.2:** Modos *Hourglass*

### 3.3 Método de Controle de Modos Espúrios via Técnica de Perturbação

Este método consiste basicamente na modificação do gradiente discreto a fim de recuperar-se o posto das matrizes de elemento subintegradas [41]. Assim, ao operador discreto  $\mathbf{B}_{(IR)}$  é adicionado um vetor  $\gamma$  de modo que  $\mathbf{K}^e$  passará a ter posto

igual a 3. Tem-se então,

$$\tilde{\mathbf{B}} = \begin{pmatrix} \mathbf{b}_1^T \\ \mathbf{b}_2^T \\ \boldsymbol{\gamma}^T \end{pmatrix} \quad (3.18)$$

Para se obter o vetor  $\boldsymbol{\gamma}$  utiliza-se algumas propriedades especiais de  $\tilde{\mathbf{B}}$ ,

1 - Os vetores  $\mathbf{b}_i$  são biortogonais a  $\mathbf{x}_j$ :

Verifica-se que,

$$\mathbf{b}_i^T \mathbf{x}_j = \delta_{ij} \quad i, j = 1, 2 \quad (3.19)$$

onde  $\delta_{ij}$  é a função delta de Kronecker.

2 - O vetores  $\mathbf{b}_i$ ,  $\mathbf{t}$  e  $\mathbf{h}$  são linearmente independentes:

Verifica-se as seguintes propriedades de ortogonalização,

$$\begin{aligned} \mathbf{b}_i^T \mathbf{t} &= 0 \\ \mathbf{b}_i^T \mathbf{h} &= 0 \quad i = 1, 2 \\ \mathbf{t}^T \mathbf{h} &= 0 \end{aligned} \quad (3.20)$$

A partir destas propriedades, demonstra-se que  $\mathbf{b}_i$ ,  $\mathbf{t}$  e  $\mathbf{h}$  são linearmente independentes [40].

Com estas duas propriedades do gradiente discreto é possível construir  $\boldsymbol{\gamma}$  como combinação linear dos vetores  $\mathbf{b}_i$ ,  $\mathbf{t}$  e  $\mathbf{h}$ ,

$$\boldsymbol{\gamma} = \beta_1 \mathbf{b}_1 + \beta_2 \mathbf{b}_2 + \beta_3 \mathbf{h} + \beta_4 \mathbf{t} \quad (3.21)$$

onde as constantes  $\beta_i$  são determinadas através da seguinte condição de consistência linear,

$$\boldsymbol{\gamma}^T \mathbf{u}^{lin} = 0 \quad \Rightarrow \quad \boldsymbol{\gamma}^T (\alpha_0 \mathbf{t} + \alpha_1 \mathbf{x} + \alpha_2 \mathbf{y}) = 0 \quad (3.22)$$

onde  $\mathbf{u}^{lin}$  é um campo linear qualquer.

Sendo assim, de (3.21) e (3.22) vem,

$$\begin{aligned} & \alpha_0 (\beta_1 \mathbf{b}_1^T \mathbf{t} + \beta_2 \mathbf{b}_2^T \mathbf{t} + \beta_3 \mathbf{h}^T \mathbf{t} + \beta_4 \mathbf{t}^T \mathbf{t}) + \\ & \alpha_1 (\beta_1 \mathbf{b}_1^T \mathbf{x} + \beta_2 \mathbf{b}_2^T \mathbf{x} + \beta_3 \mathbf{h}^T \mathbf{x} + \beta_4 \mathbf{t}^T \mathbf{x}) + \\ & \alpha_2 (\beta_1 \mathbf{b}_1^T \mathbf{y} + \beta_2 \mathbf{b}_2^T \mathbf{y} + \beta_3 \mathbf{h}^T \mathbf{y} + \beta_4 \mathbf{t}^T \mathbf{y}) = 0 \end{aligned} \quad (3.23)$$

Usando-se as propriedades (3.19) e (3.20),

$$\begin{aligned} \beta_4 \mathbf{t}^T \mathbf{t} &= 4\beta_4 = 0 \\ \beta_1 + \beta_3 \mathbf{h}^T \mathbf{x} &= 0 \\ \beta_2 + \beta_3 \mathbf{h}^T \mathbf{y} &= 0 \end{aligned} \quad (3.24)$$

Substituindo-se (3.24) em (3.21) vem,

$$\boldsymbol{\gamma} = \beta_3 [\mathbf{h} - (\mathbf{h}^T \mathbf{x}) \mathbf{b}_1 - (\mathbf{h}^T \mathbf{y}) \mathbf{b}_2] \quad (3.25)$$

Como  $\boldsymbol{\gamma}$  é ortogonal a todo campo linear,  $\beta_3$  permanece indeterminado.

Tomando-se  $\beta_3 = \frac{1}{A}$ ,

$$\boldsymbol{\gamma} = \frac{1}{A} [\mathbf{h} - (\mathbf{h}^T \mathbf{x}) \mathbf{b}_1 - (\mathbf{h}^T \mathbf{y}) \mathbf{b}_2] \quad (3.26)$$

É possível verificar que,

$$\begin{aligned} \boldsymbol{\gamma}^T \mathbf{x} &= \boldsymbol{\gamma}^T \mathbf{y} = \boldsymbol{\gamma}^T \mathbf{t} = 0 \\ \boldsymbol{\gamma}^T \mathbf{h} &= A \end{aligned} \quad (3.27)$$

Assim, o posto do gradiente discreto  $\tilde{\mathbf{B}}$  é igual a 3 e como consequência a matriz de elemento não será mais deficiente de posto. Este procedimento equivale a somar

à matriz subintegrada, uma matriz de estabilização, de subíndice ( $ESTAB$ ). Isto pode ser feito, substituindo-se  $\mathbf{B}$  por  $\tilde{\mathbf{B}}$ , de forma que cada um dos termos de  $\mathbf{K}^e$  pode ser dado pela soma,

$$\mathbf{K}^e = \mathbf{K}_{(IR)}^e + \mathbf{K}_{(ESTAB)}^e \quad (3.28)$$

onde,  $\mathbf{K}_{(IR)}^e$  é dada pelas equações (3.11) a (3.14), enquanto que  $\mathbf{K}_{(ESTAB)}^e$ , é dada por,

$$\mathbf{K}_{d(ESTAB)}^e = \varphi \boldsymbol{\gamma} \mathcal{D} \boldsymbol{\gamma}^T \int_{\Omega^e} \zeta_{,i} \zeta_{,i} d\Omega \quad i = 1, 2 \quad (3.29)$$

$$\mathbf{K}_{a(ESTAB)}^e = \varphi \mathbf{b}_j v_i \boldsymbol{\gamma}^T \int_{\Omega^e} x_{,j} \zeta_{,i} d\Omega \quad i, j = 1, 2 \quad (3.30)$$

$$\mathbf{K}_{pg(ESTAB)}^e = \tau \varphi \boldsymbol{\gamma} \mathbf{v} \otimes \mathbf{v} \boldsymbol{\gamma}^T \int_{\Omega^e} \zeta_{,i} \zeta_{,i} d\Omega \quad i = 1, 2 \quad (3.31)$$

$$\mathbf{K}_{cd(ESTAB)}^e = \tau_c \boldsymbol{\gamma} \bar{\mathbf{v}} \boldsymbol{\gamma}^T \int_{\Omega^e} \zeta_{,i} \zeta_{,i} d\Omega \quad i = 1, 2 \quad (3.32)$$

onde  $\zeta = \frac{1}{4} A \xi \eta$ . Estas parcelas de estabilização também podem ser obtidas da formulação fraca utilizando-se um funcional de Hu-Washizu [19, 20].

Note que para o cálculo do resíduo no interior do elemento  $L(c_h)$ , toma-se os termos avaliados no centróide. Desta forma, este termo também deve ser estabilizado através de uma correção semelhante à empregada em  $\mathbf{K}^e$ , onde novamente substitui-se  $\mathbf{B}$  por  $\tilde{\mathbf{B}}$ .

$$L(c_h) = \varphi \frac{\partial c_h}{\partial t} + \varphi v_i \tilde{\mathbf{B}} c_h - \frac{\partial}{\partial x_i} (\varphi \mathcal{D}_{ij} \tilde{\mathbf{B}} c_h) \quad (3.33)$$

Nas equações (3.29) a (3.32), as integrais constituem os chamados parâmetros de estabilização, de forma que,

$$\bar{\varepsilon}_1 = \varepsilon \int_{\Omega^e} x_j \zeta_{,i} d\Omega \quad (\text{para advecção}) \quad i, j = 1, 2 \quad (3.34)$$

$$\bar{\varepsilon}_2 = \varepsilon \int_{\Omega^e} \zeta_{,i} \zeta_{,i} d\Omega \quad (\text{demais casos})$$

E assim, o coeficiente livre  $\varepsilon$  nos dá a possibilidade de ajuste de precisão dos resultados. Quando  $\varepsilon = 1$ ,  $\mathbf{K}^e$  será exata para malhas de elementos retangulares e paralelogramos. Em Dias e Coutinho [20] encontra-se uma comparação entre as matrizes obtidas através do método de estabilização para diferentes valores de  $\varepsilon$  e as correspondentes moléculas de diferenças finitas. O cálculo detalhado dos parâmetros encontra-se em Mallet et al. [19] e Dias e Coutinho [20], e podem ser obtidos a partir de um princípio variacional de Hu-Washizu.

Observa-se que na determinação das matrizes de elemento para a equação de transporte utilizando-se a integração com  $2 \times 2$  pontos de quadratura, se faz necessária a obtenção de 4 matrizes ( $\mathbf{K}_d^e$ ,  $\mathbf{K}_a^e$ ,  $\mathbf{K}_{pg}^e$  e  $\mathbf{K}_{cd}^e$ ) avaliadas nos 4 pontos de integração, o que totalizam 16 avaliações de matrizes. Já com a utilização da integração reduzida, estas mesmas matrizes são avaliadas no centróide do elemento e estabilizadas, totalizando 8 avaliações de matrizes, o que a princípio diminui a metade o número de operações. Mas, como neste caso todos os termos das matrizes são conhecidos explicitamente, espera-se um ganho sobre a integração  $2 \times 2$  ainda superior caso sejam computados na implementação somente os termos diferentes entre si. Desta forma, o elemento quadrilátero passa a ser mais competitivo, exibindo as mesmas vantagens computacionais do elemento triangular, ou seja, todas as matrizes de elemento podem ser avaliadas em um único *loop* que pode ser vetorizado e paralelizado.

### 3.4 Resumo das Matrizes de Elemento

Apresenta-se a seguir (Tabela 3.1), o sumário com as matrizes de elemento desenvolvidas neste capítulo e que serão utilizadas nos demais capítulos da tese.

Matrizes de Elemento	Int. Reduzida	Estabilização
Difusão	$A \varphi \mathbf{b}_i \mathbf{D} \mathbf{b}_j^T$	$\varphi \boldsymbol{\gamma} \mathbf{D} \boldsymbol{\gamma}^T \int_{\Omega^e} \zeta_i \zeta_i d\Omega$
Advecção	$\frac{A}{4} \varphi \mathbf{t} (v_i \mathbf{b}_i^T)$	$\varphi \mathbf{b}_j v_i \boldsymbol{\gamma}^T \int_{\Omega^e} x_j \zeta_i d\Omega$
Petrov-Galerkin	$A \tau \varphi (\mathbf{b}_j v_j v_i \mathbf{b}_i^T)$	$\tau \varphi \boldsymbol{\gamma} \mathbf{v} \otimes \mathbf{v} \boldsymbol{\gamma}^T \int_{\Omega^e} \zeta_i \zeta_i d\Omega$
Captura Descontinuidades	$A \tau_c (\mathbf{b}_j \bar{\mathbf{v}} \mathbf{b}_i^T)$	$\tau_c \boldsymbol{\gamma} \bar{\mathbf{v}} \boldsymbol{\gamma}^T \int_{\Omega^e} \zeta_i \zeta_i d\Omega$

**Tabela 3.1:** Matrizes de Elemento

### 3.5 Método de Controle dos Modos Espúrios de Hansbo

Outros métodos de estabilização foram propostos na literatura, com destaque ao método apresentado por Hansbo [42] que foi estudado com detalhes. Este método é uma espécie de integração alternativa, onde a parte constitutiva, os termos fonte e a matriz Jacobiana  $\mathbf{J}$ , são avaliados no centróide do elemento, preservando-se o gradiente discreto. Assim temos,

$$\mathbf{K}_d^e = \int_{-1}^1 \int_{-1}^1 \varphi N_{b,j} \mathbf{J}_{(0,0)}^{-T} \mathbf{D}_{(0,0)} \mathbf{J}_{(0,0)}^{-1} N_{a,i} j_{(0,0)} d\xi d\eta \quad (3.35)$$

$$\mathbf{K}_a^e = \int_{-1}^1 \int_{-1}^1 \varphi N_b \mathbf{v}_{(0,0)} \mathbf{J}_{(0,0)}^{-1} \nabla N_a j_{(0,0)} d\xi d\eta \quad a, b = 1, \dots, 4; i, j = 1, 2 \quad (3.36)$$

$$\mathbf{K}_{pg}^e = \int_{-1}^1 \int_{-1}^1 \tau_{(0,0)} \varphi N_{b,j} \mathbf{J}_{(0,0)}^{-1} v_j \otimes v_i \mathbf{J}_{(0,0)}^{-1} N_{a,i} j_{(0,0)} d\xi d\eta \quad (3.37)$$

$$\mathbf{K}_{cd}^e = \int_{-1}^1 \int_{-1}^1 \tau_{c(0,0)} N_{b,j} \mathbf{J}_{(0,0)}^{-1} \bar{\mathbf{v}} \mathbf{J}_{(0,0)}^{-1} N_{a,i} j_{(0,0)} d\xi d\eta \quad (3.38)$$

Estas integrais podem ser resolvidas analiticamente, utilizando-se por exemplo, um *software* de algebra simbólica. Como resultado, obtemos um código de fácil implementação. Esta regra de quadratura também pode ser usada para gerar matrizes de estabilização, semelhantes as do caso anterior, podendo portanto ser encarada também como esquema de estabilização. A análise de convergência apresentada por Hansbo [42] para problemas difusivos utilizando a norma de energia, obteve boa taxa de convergência. Não há na literatura análise numérica do método em problemas de

advecção dominante, assim, o comportamento deste método foi observado através de testes numéricos. Observou-se que apesar de ter implementação mais vantajosa do que no caso anterior o método de controle via técnica de perturbação apresenta resultados mais próximos da solução analítica e melhor convergência, em particular em malhas distorcidas. Assim, a opção em se adotar a estratégia via técnica de perturbação se deve ao fato de que ela se apresentou mais robusta. Seu desempenho e convergência serão vistos com detalhes mais adiante nos exemplos de validação.

# Capítulo 4

## Cálculo do Campo de Velocidades

### 4.1 Estimativas de Erro

A presença de erro numérico nas simulações computacionais é inerente ao processo de discretização onde transforma-se o modelo mecânico contínuo em um equivalente capaz de ser administrado pelo computador. Este modelo numérico não pode capturar todas as informações do modelo contínuo uma vez que é caracterizado por equações diferenciais parciais. É possível no entanto assegurar a qualidade das simulações através de estimadores de erro *a priori* [26].

As estimativas de erro para as aproximações de elementos finitos são formuladas em termos de normas de Sobolev [27]. Considerando-se uma coleção de espaços de elementos finitos no domínio  $\Omega \subset \mathbb{R}^n$ ,  $n \geq 1$ , e assumindo-se que (2.28) é válida, e que cada malha de elementos isoparamétricos é tal que, a transformação  $\mathbf{x} = \mathbf{x}(\boldsymbol{\xi})$  é um polinômio linear em  $\boldsymbol{\xi} = (\xi, \eta)$ , e ainda, que as funções de forma do elemento são capazes de representar exatamente um polinômio completo do grau  $k$ . Utilizando-se propriedades de elipticidade, continuidade e consistência, e o truque de Nitsche, chega-se às seguintes estimativas de erro para pressões e gradientes das pressões,

$$\|p - p_h\|_0 \leq C h^{k+1} |p|_{k+1} \quad (4.1)$$

$$\| \nabla p - \nabla p_h \|_0 \leq C h^k |p|_{k+1} \quad (4.2)$$

válida para todo  $p \in \mathcal{H}^{k+1}$ ,  $C > 0$ , e  $h = \max(h^e)$ . Nestas equações,

$$\|u\|_0 = (u, u)^{\frac{1}{2}} \quad (4.3)$$

é a norma do espaço de Sobolev  $\mathcal{L}_2(\Omega) = \mathcal{H}^0(\Omega)$ , onde,

$$(u, w) = \int_{\Omega} u w \, d\Omega \quad (4.4)$$

é o produto interno em  $\mathcal{L}_2(\Omega)$ . A semi-norma em  $\mathcal{H}^{k+1}(\Omega)$  é definida como,

$$|u|_{k+1} = \left( \sum_{|\alpha|=k+1} \int_{\Omega} (D^{\alpha} u)^2 \, d\Omega \right)^{\frac{1}{2}} \quad (4.5)$$

onde,

$$D^{\alpha} = \frac{\partial^{|\alpha|}}{\partial x_1^{\alpha_1} \partial x_2^{\alpha_2}}, \quad \text{para } |\alpha| = \alpha_1 + \alpha_2 \quad (4.6)$$

Admitindo-se que velocidades são calculadas a partir da lei de Darcy, chega-se à taxa de convergência para as velocidades,

$$\| \mathbf{v} - \mathbf{v}_h \|_0 \leq C h^k |p|_{k+1} \quad (4.7)$$

Assim, para aproximações bilineares, espera-se convergência de segunda ordem para pressões e de primeira ordem para as velocidades [6]. Mesmo em soluções regulares, a taxa de convergência em  $\mathcal{L}_2(\Omega)$  do campo de velocidades é inferior à obtida para o campo de pressões.

**Observação:**

Hughes et al. em trabalho recente [55] demonstraram que o método de Galerkin, assim como o método estabilizado SUPG são localmente conservativos. As principais conclusões deste trabalho são que os fluxos nodais de elemento são conservativos.

## 4.2 Superconvergência

Como superconvergência denomina-se a existência local de pontos cuja ordem de convergência é superior à prevista pela estimativa de erro local para as derivadas ou gradientes calculados [44].

Quando a solução aproximada de um problema não é interpolatória, existem situações onde uma precisão excepcional, assim como taxas de convergência assintóticas de ordem superior ocorrem em certos pontos. Este fenômeno vem sendo chamado de superconvergência local, desde que a taxa de convergência local seja superior às taxas globais ótimas [45, 46].

Estudos matemáticos da superconvergência foram apresentados por Zlámal [47] para espaços de elementos finitos. A superconvergência das derivadas da solução aproximada de elementos finitos isoparamétricos quadriláteros nos pontos de quadratura de Gauss foi feito por Lesaint e Zlámal [48]. Mais tarde Mackinnon e Carey [49] apresentaram uma análise em séries de Taylor com a finalidade de estabelecer a localização geométrica dos pontos de superconvergência.

De forma a ilustrar estes conceitos, procede-se como em Mackinnon e Carey [49]. Seja o campo de velocidades  $v$ , aproximado por  $v_h$ , uma função unidimensional, usando-se elementos finitos unidimensionais lineares,

$$v_h = \sum_{i=1}^{nnoel} v_i N_i(x) \quad (4.8)$$

onde  $nnoel$  é o número de nós do elemento, a aproximação das derivadas para  $nnoel = 2$  será,

$$v_h' = \frac{v_2 - v_1}{h^e} \quad (4.9)$$

onde  $h^e = x_2 - x_1$  é o comprimento do elemento. Verifica-se que  $v_h'$  é constante no elemento. A aproximação por séries de Taylor para  $v_h$  em torno do ponto médio do elemento ( $\bar{x}$ ), usando diferenças centrais, é,

$$v_h'(\bar{x}) = \frac{v(x_2) - v(x_1)}{h^e} - \frac{h^{e2}}{24} v'''(\bar{x}) + O(h^4) \quad (4.10)$$

Assim,  $v'_h$  é excepcionalmente preciso no ponto médio de Gauss  $\bar{x} = \frac{x_1+x_2}{2}$ , com precisão  $O(h^2)$ .

Da mesma forma, para o caso bidimensional Mackinnon e Carey [49] mostraram que para o elemento retangular ( $nnoel = 4$ ) os pontos de superconvergência são os centróides dos elementos, onde as derivadas têm precisão de segunda ordem.

Em duas dimensões,

$$\frac{\partial v_h}{\partial x_i} = \sum_{j=1}^{nnoel} v_j \frac{\partial N_j}{\partial x_i} \quad i, j = 1, 2 \quad (4.11)$$

A expansão em séries de Taylor para  $v_j = v(x_j, y_j)$  em torno de  $x = \bar{x}, y = \bar{y}$  leva a,

$$\begin{aligned} v_j &= v(\bar{x}, \bar{y}) + v_x(\bar{x}, \bar{y})(x_j - \bar{x}) + v_y(\bar{x}, \bar{y})(y_j - \bar{y}) + \\ &+ v_{xx}(\bar{x}, \bar{y}) \frac{(x_j - \bar{x})^2}{2!} + v_{yy}(\bar{x}, \bar{y}) \frac{(y_j - \bar{y})^2}{2!} + v_{xy}(x_j - \bar{x})(y_j - \bar{y}) + \dots \\ &\dots + \frac{1}{n!} \left[ (x_j - \bar{x}) \frac{\partial}{\partial x} + (y_j - \bar{y}) \frac{\partial}{\partial y} \right]^n v(\bar{x}, \bar{y}) \end{aligned} \quad (4.12)$$

Assim,

$$\begin{aligned} \sum_{j=1}^{nnoel} v_j \frac{\partial N_j}{\partial x} &= \left( \sum_{j=1}^{nnoel} \frac{\partial N_j}{\partial x} \right) \bar{v} + \left( \sum_{j=1}^{nnoel} \frac{\partial N_j}{\partial x} (x_j - \bar{x}) \right) \bar{v}_x + \\ &+ \left( \sum_{j=1}^{nnoel} \frac{\partial N_j}{\partial x} (y_j - \bar{y}) \right) \bar{v}_y + \left( \sum_{j=1}^{nnoel} \frac{\partial N_j}{\partial x} \frac{(x_j - \bar{x})^2}{2!} \right) \bar{v}_{xx} + \\ &+ \left( \sum_{j=1}^{nnoel} \frac{\partial N_j}{\partial x} \frac{(y_j - \bar{y})^2}{2!} \right) \bar{v}_{yy} + \left( \sum_{j=1}^{nnoel} \frac{\partial N_j}{\partial x} (x_j - \bar{x})(y_j - \bar{y}) \right) \bar{v}_{xy} + \dots \\ &\dots + \frac{1}{n!} \left[ \sum_{j=1}^{nnoel} \frac{\partial N_j}{\partial x} (x_j - \bar{x}) \frac{\partial}{\partial x} + \sum_{j=1}^{nnoel} \frac{\partial N_j}{\partial x} (y_j - \bar{y}) \frac{\partial}{\partial y} \right]^n v(\bar{x}, \bar{y}) \end{aligned} \quad (4.13)$$

onde  $\bar{v} = v(\bar{x}, \bar{y})$ ,  $\bar{v}_x = v_x(\bar{x}, \bar{y})$ , e assim em diante para todas as derivadas na equação acima.

Utilizando-se algumas propriedades das funções de forma,

$$\sum_{j=1}^{nnoel} \frac{\partial N_j}{\partial x} (x_j - \bar{x}) = \sum_{j=1}^{nnoel} \frac{\partial N_j}{\partial y} (y_j - \bar{y}) = 1 \quad (4.14)$$

$$\begin{aligned}
\sum_{j=1}^{nnoel} \frac{\partial N_j}{\partial x_i} &= \sum_{j=1}^{nnoel} \frac{\partial N_j}{\partial x} (x_j - \bar{x})^2 = \sum_{j=1}^{nnoel} \frac{\partial N_j}{\partial y} (y_j - \bar{y})^2 = \\
&= \sum_{j=1}^{nnoel} \frac{\partial N_j}{\partial x} (y_j - \bar{y}) = \sum_{j=1}^{nnoel} \frac{\partial N_j}{\partial x} (y_j - \bar{y}) = 0
\end{aligned} \tag{4.15}$$

Após algumas manipulações chega-se a,

$$\begin{aligned}
\bar{v}_x &= \sum_{j=1}^{nnoel} \frac{\partial N_j}{\partial x} v_j - \left( \sum_{j=1}^{nnoel} \frac{\partial N_j}{\partial x} \frac{(x_j - \bar{x})^2}{2!} \right) \bar{v}_{xx} + \\
&- \left( \sum_{j=1}^{nnoel} \frac{\partial N_j}{\partial x} \frac{(y_j - \bar{y})^2}{2!} \right) \bar{v}_{yy} - \left( \sum_{j=1}^{nnoel} \frac{\partial N_j}{\partial x} (x_j - \bar{x})(y_j - \bar{y}) \right) \bar{v}_{xy} + O(h^2)
\end{aligned} \tag{4.16}$$

A expansão para  $\bar{v}_y$  é obtida de forma similar, trocando-se  $\frac{\partial N_j}{\partial x}$  por  $\frac{\partial N_j}{\partial y}$  na equação acima. A equação (4.16) leva á aproximação de  $v_x(\bar{x}, \bar{y})$  da ordem de  $O(h)$  exceto nos pontos onde os termos de primeira ordem são identicamente nulos ou são cancelados. Utilizando-se as propriedades (4.14) e (4.15) para  $nnoel = 4$ , e assumindo-se uma forma retangular para o elemento, verificam-se as seguintes propriedades quando  $\bar{v}_{xx} = \bar{v}_{yy} = \bar{v}_{xy} = 0$ ,

$$\begin{aligned}
\sum_{j=1}^{nnoel} \frac{\partial N_j}{\partial x} (x_j - \bar{x})^2 &= \sum_{j=1}^{nnoel} \frac{\partial N_j}{\partial x} (x_j - \bar{x})(y_j - \bar{y}) = \\
&= \sum_{j=1}^{nnoel} \frac{\partial N_j}{\partial x} (y_j - \bar{y})^2 = 0
\end{aligned} \tag{4.17}$$

Tem-se então que,

$$\sum_{j=1}^{nnoel} \frac{\partial N_j}{\partial x} (x_j - \bar{x})^2 = \sum_{j=1}^{nnoel} \frac{\partial N_j}{\partial x} x_j^2 - 2\bar{x} \tag{4.18}$$

Logo,

$$\begin{aligned}
\bar{x} &= \frac{1}{2} \sum_{j=1}^{nnoel} \frac{\partial N_j}{\partial x} x_j^2 \\
\bar{y} &= \sum_{j=1}^{nnoel} \frac{\partial N_j}{\partial x} x_j y_j \\
\sum_{j=1}^{nnoel} \frac{\partial N_j}{\partial x} y_j^2 &= 0
\end{aligned} \tag{4.19}$$

Como  $\frac{\partial N_j}{\partial x}$  é função de  $\bar{x}$ ,  $\bar{y}$  e desde que as funções de forma  $\mathbf{N}$  têm a forma  $N_j = b_0 + b_1 x + b_2 y + b_3 xy$ , então,  $\frac{\partial N_j}{\partial x} = b_1^j + b_3^j y$ . A partir de (4.19), chega-se às expressões abaixo,

$$\bar{x} - \frac{1}{2}\bar{y} \sum_{j=1}^4 b_3^j x_j^2 = \frac{1}{2} \sum_{j=1}^4 b_1^j x_j^2 \quad (4.20)$$

$$\bar{y} \left( 1 - \sum_{j=1}^4 b_3^j x_j y_j \right) = \sum_{j=1}^4 b_1^j x_j y_j \quad (4.21)$$

$$\bar{y} \left( \sum_{j=1}^4 b_3^j y_j^2 \right) = - \sum_{j=1}^4 b_1^j y_j^2 \quad (4.22)$$

Verifica-se que  $\bar{y}$  existe se e somente se (4.21) e (4.22) forem consistentes, ou seja, se e somente se,

$$\left( \sum_{j=1}^4 b_1^j x_j y_j \right) \left( \sum_{j=1}^4 b_3^j y_j^2 \right) + \left( \sum_{j=1}^4 b_1^j y_j^2 \right) \left( 1 - \sum_{j=1}^4 b_3^j x_j y_j \right) = 0 \quad (4.23)$$

Para um elemento retangular de lados  $0 \leq x \leq h_1, 0 \leq y \leq h_2$ ,

$$\begin{aligned} N_1 &= \left( \frac{h_1 - x}{h_1} \right) \left( \frac{h_2 - y}{h_2} \right), & N_2 &= \frac{x}{h_1} \left( \frac{h_2 - y}{h_2} \right) \\ N_3 &= \frac{x}{h_1} \frac{y}{h_2}, & N_4 &= \left( \frac{h_1 - x}{h_1} \right) \frac{y}{h_2} \end{aligned} \quad (4.24)$$

Desta forma, avaliando-se as derivadas  $\frac{\partial N_j}{\partial x_j}$ , tem

$$\sum_{j=1}^4 b_1^j y_j^2 = 0 = \sum_{j=1}^4 b_3^j y_j^2 \quad (4.25)$$

O que implica que (4.22) é válida para todo  $\bar{y}$ . A equação (4.21) vale para todo  $\bar{y}$  a partir de (4.20), assim  $\bar{x} = \frac{h_1}{2}$  é a linha onde os pontos têm precisão de segunda ordem para  $v_x$ . Da mesma forma, verifica-se que a linha  $\bar{y} = \frac{h_2}{2}$  define os pontos de precisão de segunda ordem para  $v_y$ . Logo o centróide  $(\frac{h_1}{2}, \frac{h_2}{2})$  define o local onde ambas derivadas têm precisão de segunda ordem.

### 4.3 Cálculo do Campo de Velocidades

O campo de velocidades é calculado a partir da lei de Darcy empregando-se o campo de pressões calculado utilizando-se a integração reduzida estabilizada apresentada no Capítulo 3,

$$\mathbf{v}^e = -\frac{k}{\varphi \mu} \nabla \mathbf{N}_{(IR)} p^e \quad (4.26)$$

onde  $p^e$  é o campo de pressões restrito aos graus de liberdade do elemento.

Ao contrário do que ocorre com o método de Galerkin tradicional, a precisão da avaliação do campo de velocidades é assegurada pela superconvergência, uma vez que  $\mathbf{v}$  é avaliado nos centróides dos elementos. Porém, em malhas distorcidas, o centróide pode não ser mais um ponto de convergência, e a precisão dos resultados, neste caso, não poderá ser assegurada. O inconveniente de se avaliar o campo de velocidades diretamente da lei de Darcy, mesmo no ponto de superconvergência é o fato de não podermos afirmar que as velocidades terão convergência ótima em todo o domínio, sendo mais prudente considerar neste caso que o campo de velocidades terá precisão da  $O(h)$ . Porém como estas são calculadas no ponto de superconvergência, terão boa precisão, como será atestado nos experimentos de validação do próximo capítulo. Uma alternativa interessante para se recuperar a ordem de convergência do campo de velocidades é a utilização de técnicas de pós-processamento [50, 51, 52]. Duas destas técnicas são descritas nos Apêndices deste trabalho, onde analisa-se a possibilidade da utilização desta técnica de integração reduzida estabilizada em conjunto com as mesmas.

Nos experimentos que se seguem optou-se em utilizar a avaliação das velocidades no centróide diretamente da lei de Darcy, já que em sua maioria estes experimentos utilizam malhas regulares e esta é a estratégia mais econômica possível para estes problemas. Por outro lado, nos experimentos que utilizam malhas não regulares obteve-se boas respostas com esta aproximação, como será visto nos próximos capítulos. Existem muitas outras técnicas que permitem a melhora da convergência dos gradientes, dentre elas desta-se o esquema compacto de alta ordem proposto por

Spotz e Carey [22] com precisão da  $O(h^4)$ , obtido a partir da aproximação padrão de diferenças centrais.

# Capítulo 5

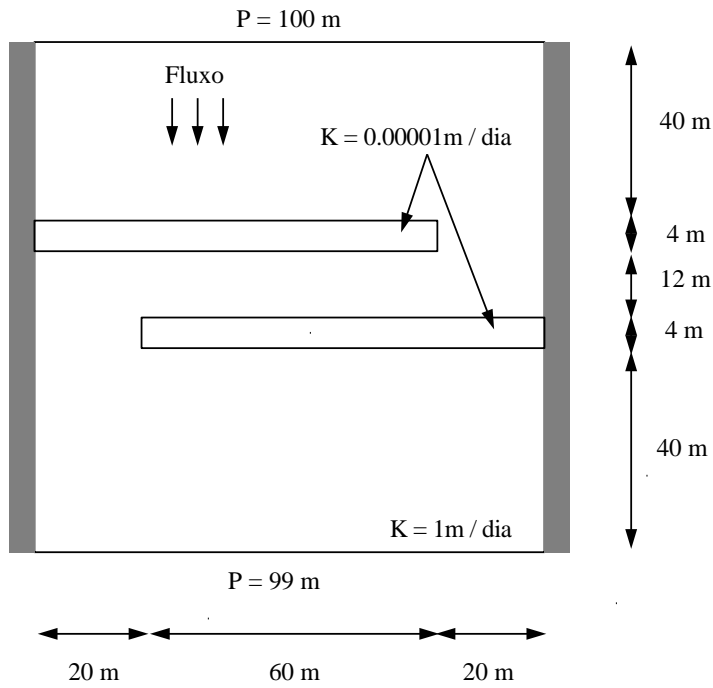
## Experimentos de Validação

São apresentados testes de validação das técnicas numéricas apresentada nos capítulos anteriores. O primeiro teste, trata de um escoamento com barreiras impermeáveis [53], e permite verificar a precisão do problema pressão-velocidade, além de analisar a conservação de massa. Em seguida, como segundo exemplo, apresenta-se um estudo da convergência do campo de pressão e de superconvergência para as velocidades avaliadas nos centróides, e ainda, a comparação entre os resultados obtidos com a integração reduzida com os da integração de Gauss  $2 \times 2$ .

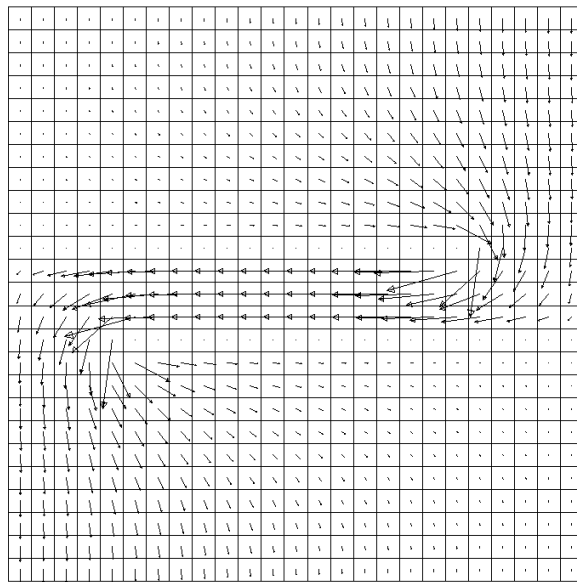
### 5.1 Escoamento com Barreiras Impermeáveis

O problema proposto por Mosé et al. [53] consiste em um escoamento provocado pela diferença de pressão no domínio apresentado na Figura 5.1. Nesta figura, vê-se que a condutividade hidráulica é igual a  $\mathcal{K} = 1 \text{ m/dia}$  no domínio, com exceção de duas regiões (barreiras) onde  $\mathcal{K} = 10^{-6} \text{ m/dia}$ . Estas barreiras criam uma espécie de corredor por onde o fluido deve passar. Neste problema o campo de pressão é solucionado com a utilização da integração reduzida estabilizada pelo método de controle dos modos espúrios via técnica de perturbação, enquanto o campo de velocidades é avaliado diretamente da lei de Darcy no ponto de superconvergência, usando-se

uma malha de  $25 \times 25$  elementos. A Figura 5.2 mostra o resultado obtido para o campo de velocidades.



**Figura 5.1:** Domínio e Condições de Contorno do Problema de Escoamento com Barreiras Impermeáveis.



**Figura 5.2:** Campo de Velocidades para o Problema de Escoamento com Barreiras Impermeáveis.

É importante notar a simetria da solução e a boa resposta junto à barreira de baixa condutividade hidráulica. As soluções estão em pleno acordo com as obtidas nas referências. Observa-se na Figura 5.3 (a) a solução das linhas de corrente encontradas em Mosé et al. onde foi utilizado o método misto [53], e na Figura 5.3 (b) a solução encontrada por Garcia com a técnica de pós-processamento global para velocidades [54]. É importante notar-se que as velocidades na Figura 5.2 foram obtidas nos centróides do elemento, enquanto que os da Figura 5.3 (b) foram obtidos nos nós do elemento.

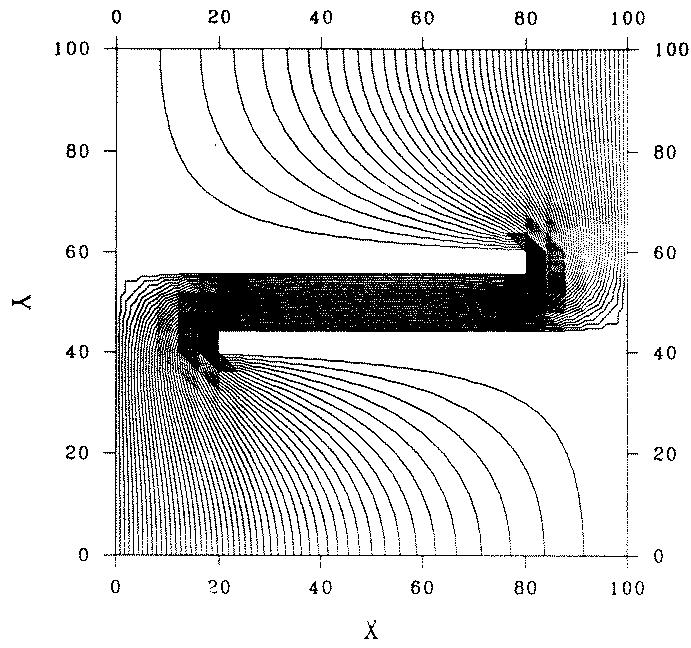
Para a análise da conservação de massa, totalizou-se a quantidade de fluido que passa pelo canal formado pelas barreiras de baixa condutividade, observando-se que 99.75% da massa é conservada durante a análise para a malha com  $25 \times 25$  elementos, resultado similar aos apresentados pela técnica de pós-processamento local acima citada [54]. A Figura 5.4 mostra a conservação de massa com o refinamento da malha ( $25 \times 25$ ,  $50 \times 50$ ,  $100 \times 100$  elementos), onde se pode ver que a conservação de massa da integração reduzida estabilizada com velocidades no centróide foi melhor do que a obtida na referência [54] para o pós-processamento global (cerca de 90% para a malha  $25 \times 25$ ), e equivalente a solução para o pós-processamento local.

Desta forma, verifica-se a boa aproximação do campo de velocidades obtido diretamente do gradiente de pressões no centróide do elemento, com baixo custo computacional.

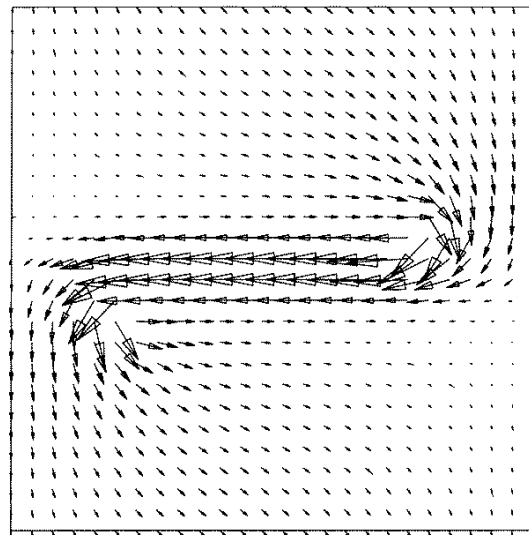
## 5.2 Análise do Problema Pressão-Velocidade

Para este exemplo, foi empregado o problema apresentado por Liu e Belytschko [41]. Trata-se de uma placa quadrada de lado unitário (Figura 5.5), modelada com 128 elementos (malha  $8 \times 16$ ), levando-se em consideração a simetria da placa. Este problema tem como solução analítica,

$$p = \sinh \pi (1.0 - y) \frac{\sin \pi x}{\sinh \pi} \quad (5.1)$$

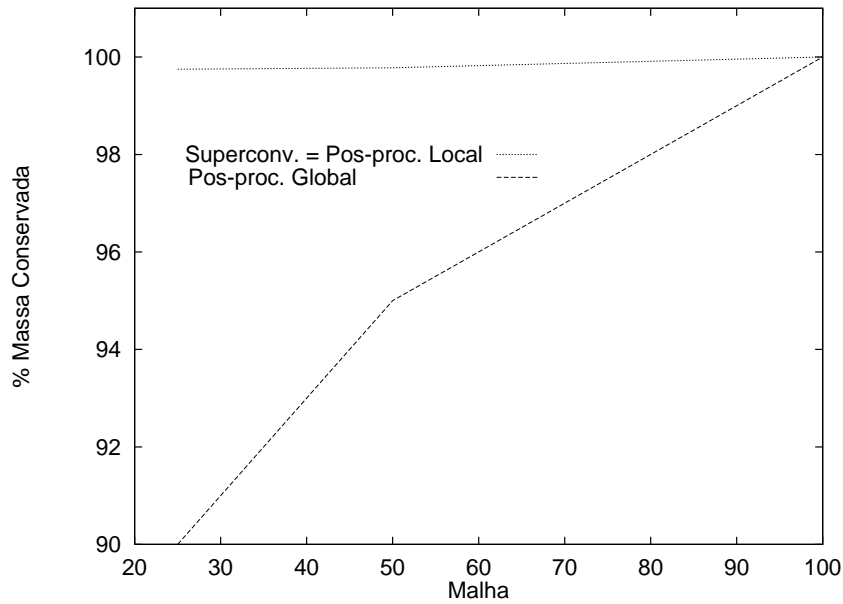


(a) Solução Método Misto [53]



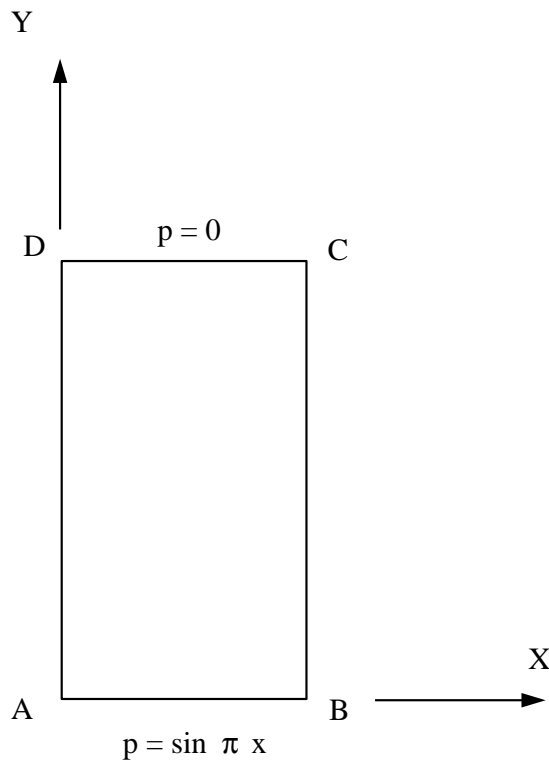
(b) Solução com Técnica de Pós-processamento Global [54].

**Figura 5.3:** Campo de Velocidades para o Problema de Escoamento com Barreiras Impermeáveis.

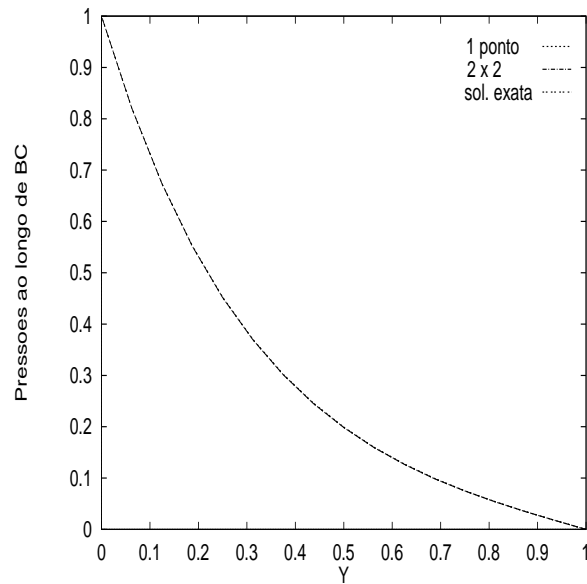


**Figura 5.4:** Conservação da Massa entre as Barreiras Impermeáveis.

A Figura 5.6 mostra a solução do problema pelo método dos elementos finitos com integração reduzida estabilizada, e com a integração de Gauss com  $2 \times 2$  pontos de quadratura, juntamente com a solução analítica.

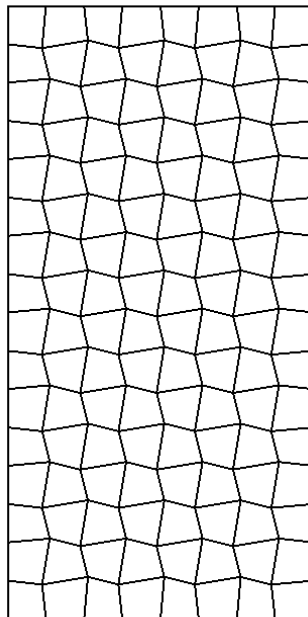


**Figura 5.5:** Domínio e Condições de Contorno do Problema de Liu e Belytschko [41].

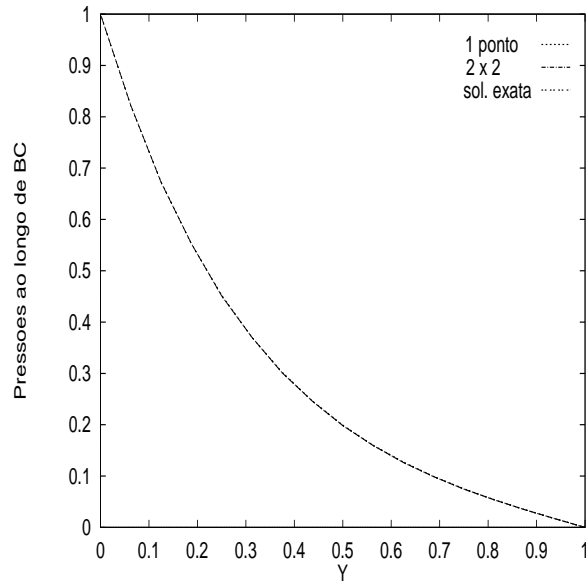


**Figura 5.6:** Solução do Problema de Liu e Belytschko [41] para Malha Regular.

Não há diferença visível entre os resultados, o que mostra a boa precisão do esquema de integração utilizado. O mesmo comportamento também pode ser observado quando se utiliza a malha distorcida da Figura 5.7. A Figura 5.8 apresenta os resultados desta nova análise.



**Figura 5.7:** Malha Distorcida para o Problema de Liu e Belytschko [41].



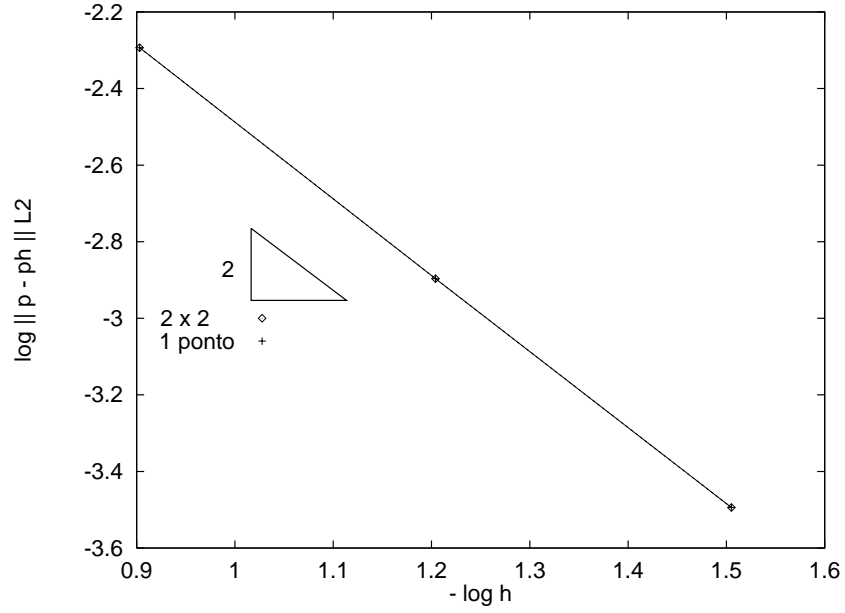
**Figura 5.8:** Solução do Problema de Liu e Belytschko [41] para Malha Distorcida.

Apresenta-se a seguir (Figura 5.9) o comportamento das taxas de convergência do campo de pressões para o exemplo acima. Para tanto, foram utilizadas malhas de  $4 \times 8$ ,  $8 \times 16$  e  $16 \times 32$  elementos. Para cálculo das normas foram utilizados  $10 \times 10$  pontos de quadratura.

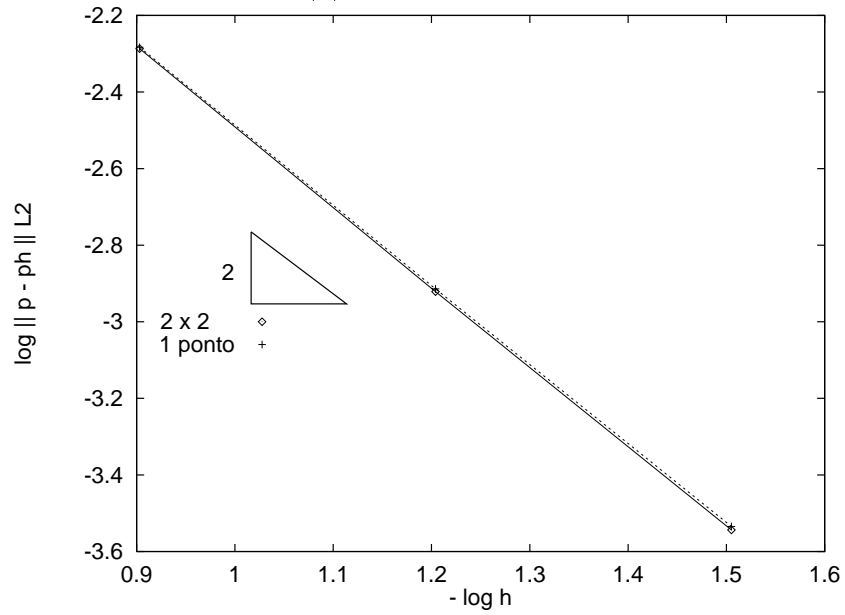
As taxas de convergência obtidas para a malha regular foram da ordem 2. A redução da regra de quadratura de  $2 \times 2$  para 1, não teve efeito significativo nas taxas de convergência. Em malhas distorcidas, a taxa se reduz um pouco (ordem de 1.98), e embora haja um aumento no erro absoluto, sua magnitude é insignificante em termos práticos.

Uma vez que é conhecida a solução analítica do campo de pressões (5.1), por diferenciação simples é possível chegar-se às seguintes soluções analíticas para os gradientes da pressão,

$$\begin{aligned} \frac{\partial p}{\partial x} &= \pi \sinh(\pi(1-y)) \frac{\cos(\pi x)}{\sinh \pi} \\ \frac{\partial p}{\partial y} &= -\pi \cosh(\pi(1-y)) \frac{\sin \pi x}{\sinh \pi} \end{aligned} \quad (5.2)$$



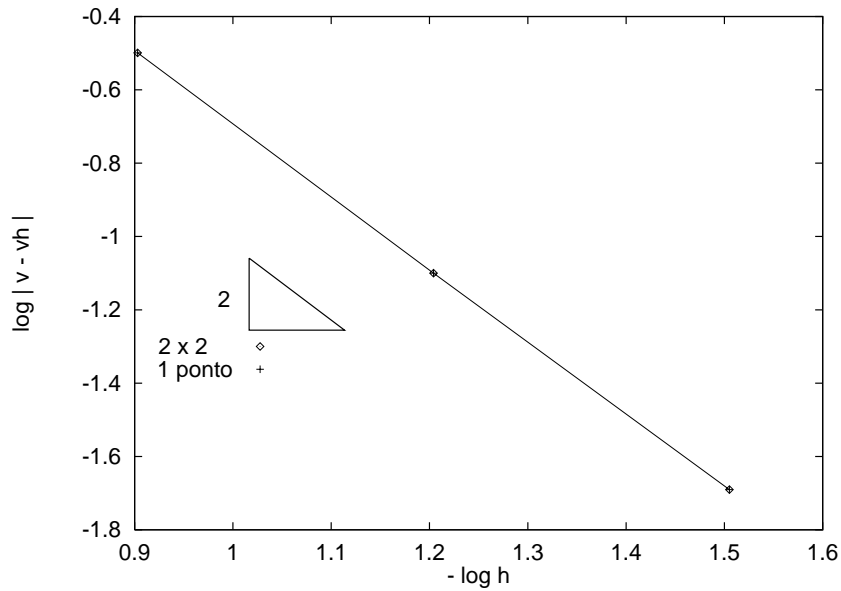
(a) Malha Regular



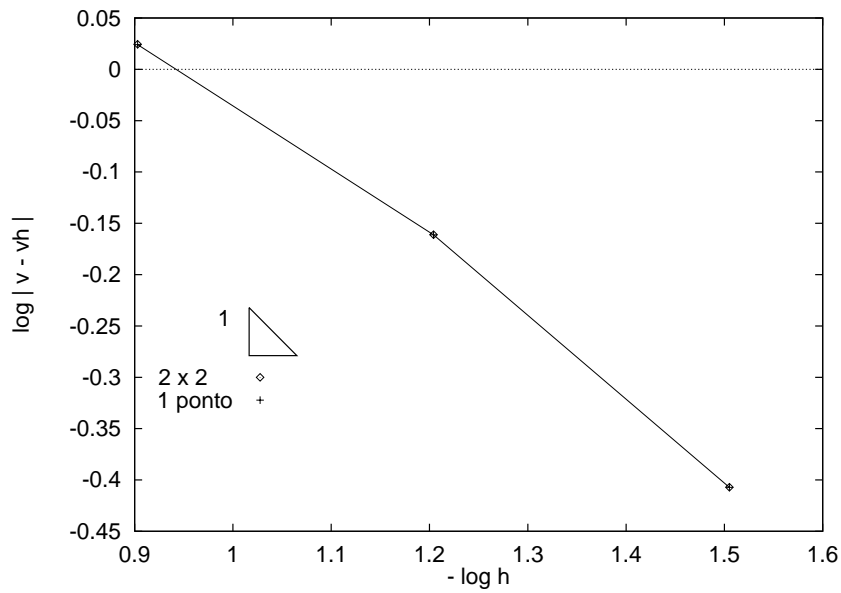
(b) Malha Distorcida

**Figura 5.9:** Convergência do Campo de Pressões para o Problema de Liu e Be-lytschko [41]

Através destas expressões, e usando-se a lei de Darcy, calcula-se as componentes da velocidade. A Figura 5.10 mostra o estudo da superconvergência das velocidades, onde utilizou-se a medida de erro pontual nos centróides dos elementos.



(a) Malha Regular

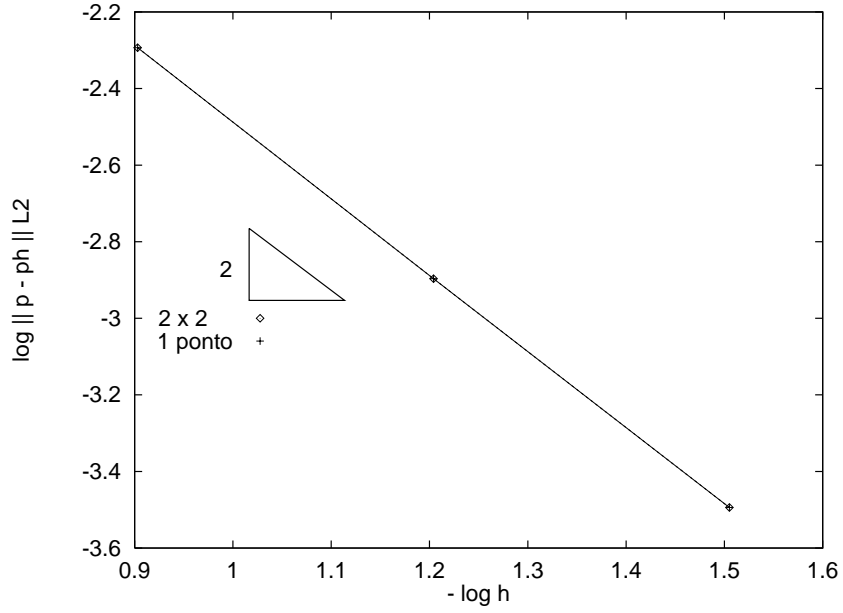


(b) Malha Distorcida

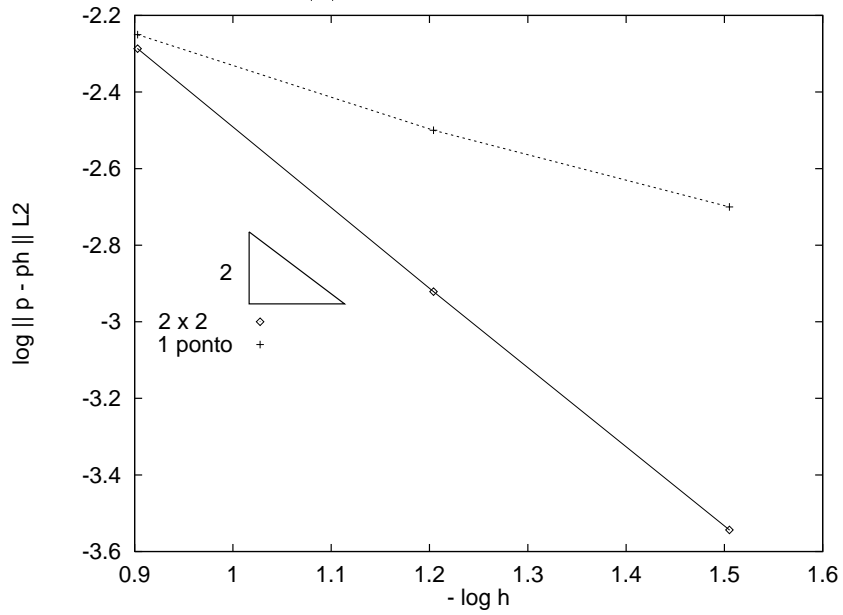
**Figura 5.10:** Superconvergência das Velocidades para o Problema de Liu e Be-lytschko [41].

Como pode ser visto, a velocidade tem taxa de convergência superior à teórica (4.7) quando calculada no centróide. Em malhas regulares tem-se taxas de  $O(h^2)$  uma vez que neste caso o centróide é um ponto de superconvergência, como visto no capítulo anterior. Em malhas distorcidas não foi obtida a convergência ótima. Este problema pode se agravar com uma maior distorção da malha.

Este mesmo exemplo foi considerado para teste da estratégia de estabilização de Hansbo [42] apresentada no capítulo 3. Os resultados para o campo de pressões mostraram que para malhas regulares a solução encontrada é a mesma para ambos os métodos de estabilização, com mesma taxa de convergência. Já em malhas distorcidas, o método de controle via técnica de perturbação obteve melhor convergência ( $O(h^2)$ ) do que com a integração alternativa proposta por Hansbo ( $O(h)$ ) para o campo de pressões, conforme mostra a Figura 5.11. Portanto, daqui em diante empregaremos somente o método de controle de modos espúrios via técnica de perturbação, já que se mostrou mais robusta.



(a) Malha Regular



(b) Malha Distorcida

**Figura 5.11:** Convergência do Campo de Pressões para o Problema de Liu e Be-lytschko [41] pelo Método de Hansbo [42].

# Capítulo 6

## Aplicações em Simulação de Reservatórios

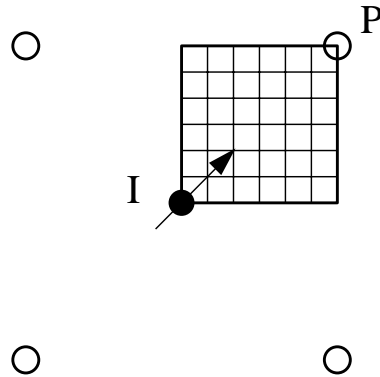
São apresentados exemplos numéricos que ilustram o desempenho da estratégia utilizada neste trabalho na simulação de processos de escoamentos miscíveis. O primeiro exemplo trata da simulação da injeção de traçadores em um reservatório. O tempo de chegada do traçador aos poços de produção bem como sua concentração, são informações importantes que ajudam a caracterizar o reservatório. Neste problema o elemento químico injetado tem características semelhantes às do fluido residente e deste modo, considera-se a razão de mobilidade da mistura unitária. Já o segundo exemplo visa a verificação da estabilidade da metodologia perante as dificuldades mais comumente apresentadas na simulação de processos de recuperação terciária, onde tem-se pequenos valores para o coeficiente de difusão e um grande valor para a razão de mobilidade.

Todas as análises foram feitas em uma máquina IBM-590 com processador POWER2 e 1 Gbyte de memória *Cache*. Os tempos de processamento foram medidos com a função *mclock* [37]. Para os exemplos tratados neste capítulo, foram utilizados 10 vetores para a base ortogonal para o espaço de Krylov [38]. Para os demais exemplos da tese foram utilizados 5 vetores. Em todos os casos utilizou-se

tolerância igual a  $10^{-6}$  para os métodos iterativos, e uma única iteração não-linear.

## 6.1 Injeção de Traçador ( $M = 1$ )

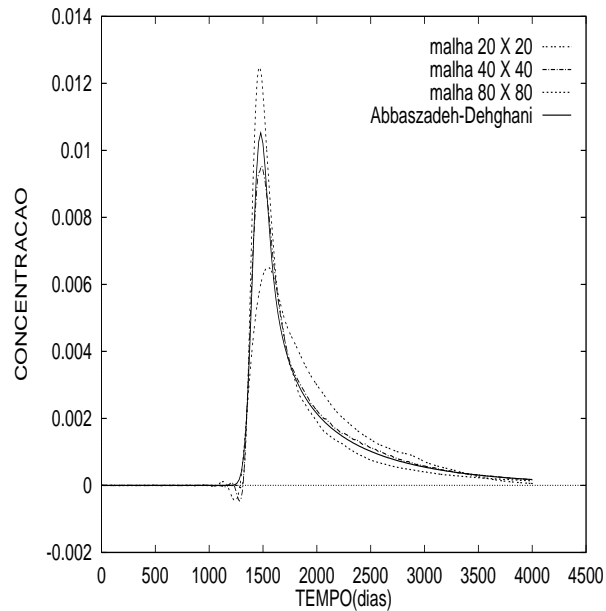
Trata-se da injeção de um traçador em um reservatório homogêneo. Este é um exemplo clássico de escoamento monofásico em um reservatório com uma distribuição de poços do tipo arranjo de cinco (5) poços. Na Figura 6.1 mostra-se a distribuição dos poços e a disposição dos elementos em relação aos poços produtores (círculos vazios) e injetores (círculo cheio), formando uma malha com orientação diagonal à direção do fluxo. O modelo utiliza a simetria do problema.



**Figura 6.1:** Modelo do Problema de Cinco Poços.

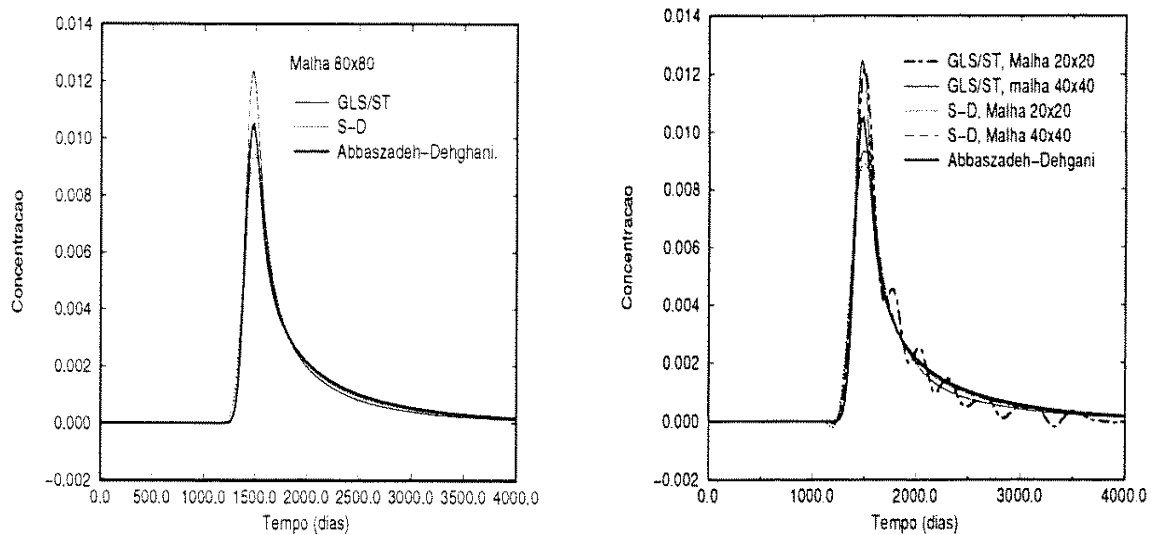
Supondo que o fluido injetado (traçador) possua as mesmas propriedades do fluido residente ( $M = 1$ ) este é portanto um problema linear, onde a equação de pressão é avaliada uma única vez. Este exemplo pode ser encontrado em diversas referências [54, 56, 57, 58, 59], porém neste trabalho são utilizados os dados encontrados em Sanabria Castro [58], onde a pressão é aproximada pelo método de Galerkin clássico, a velocidade é aproximada pela técnica de pós-processamento global (ver Apêndice A.2), enquanto que a concentração é obtida pelo método dos elementos finitos Galerkin/mínimos quadrados espaço-tempo (GLS/ST) com formulação variacional baseada no método de Galerkin descontínuo no tempo. O domínio considerado corresponde a um quarto do arranjo da Figura 6.1, de lado  $1000 \text{ ft}$ , onde o poço de injeção está localizado no canto de coordenadas  $(x = 0, y = 0)$ , e o de produção no canto  $(x = 1000, y = 1000)$  com uma taxa de escoamento de  $200 \text{ ft}^3/\text{dia}$ . O tensor

de permeabilidade é isotrópico com componentes  $k_x = k_y = 100 mD$ . A porosidade do meio é igual a 0.1, e as dispersividades longitudinal e transversal valem  $\alpha_L = 1.0 ft$ , e  $\alpha_T = 0.0 ft$  respectivamente; e  $\alpha_m = 0.0 ft$ . Utiliza-se malhas de  $20 \times 20$ ,  $40 \times 40$ , e  $80 \times 80$  elementos com intervalos de tempo correspondentes  $\Delta t = 5$ , 2.5 e 1.25 *dias*, respectivamente. Neste exemplo a injeção do soluto corresponde a 0.25% do volume poroso ( $250 ft^3$ ). A Figura 6.2 apresenta os resultados encontrados para as malhas consideradas, juntamente com os resultados de uma solução semi-analítica apresentada por Abbaszadeh-Dehghani e Brigham [60]. Estes resultados referem-se ao histórico no tempo da concentração do traçador no poço de produção, e podem ser comparados aos encontrados na referência [58] (Figura 6.3), onde são plotados os resultados para Galerkin/mínimos quadrados espaço-tempo (GLS/ST), a solução semi-analítica [60] e ainda uma solução semi-discreta (S-D) calculada com o método SUPG combinado com uma discretização implícita por diferenças finitas do tipo Euler para a variável temporal.



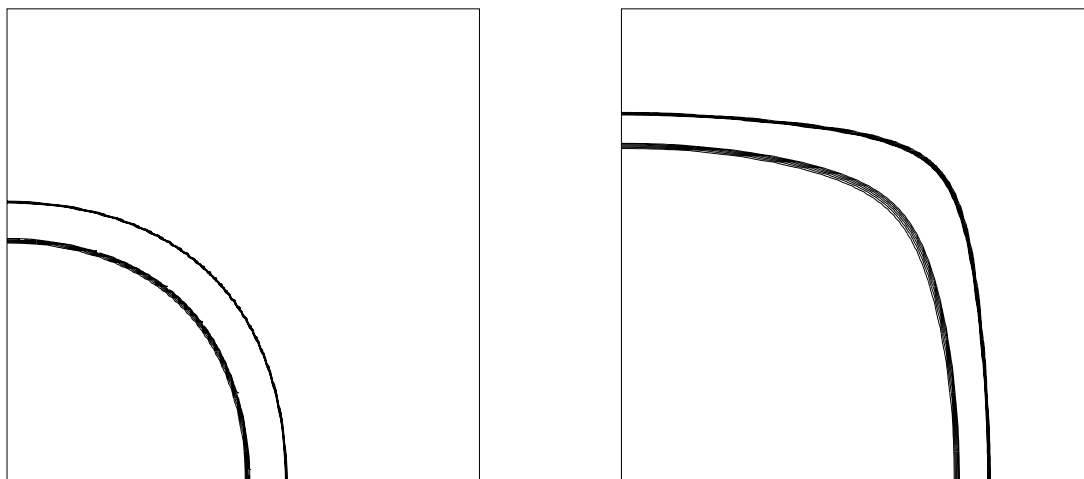
**Figura 6.2:** Comparação entre o Método dos Elementos Finitos com Integração Reduzida Estabilizada e a Solução Semi-analítica [60] para o Problema de Injeção de Traçadores na Configuração de Cinco Poços.

Da comparação entre os resultados verifica-se que a metodologia utilizada não gera oscilações espúrias e apresenta resultados comparáveis a solução semi-analítica e aos resultados apresentados na referência para o método de Galerkin/mínimos



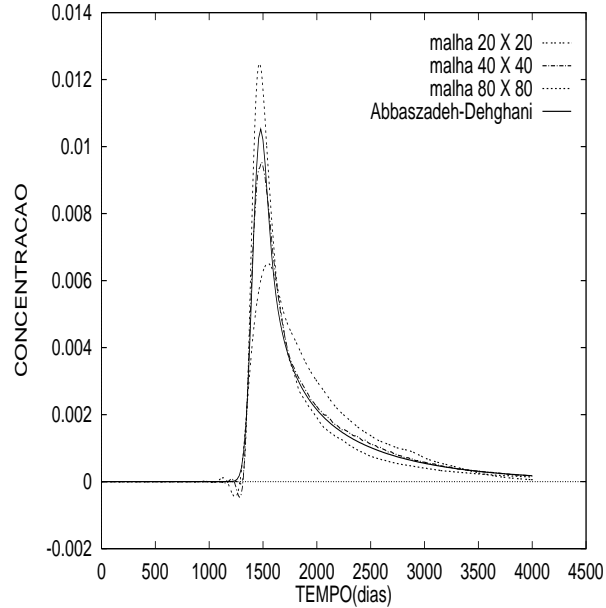
**Figura 6.3:** Resultados da Formulação Espaço-tempo [58], Solução Semi-analítica [60] e Solução Semi-discreta para o Problema de Injeção de Traçadores na Configuração de Cinco Poços.

quadrados espaço-tempo e a solução semi-discreta. A Figura 6.4 mostra os resultados (contorno das concentrações) nos instantes  $t = 500 \text{ dias}$  e  $t = 1000 \text{ dias}$  para a malha  $80 \times 80$ .



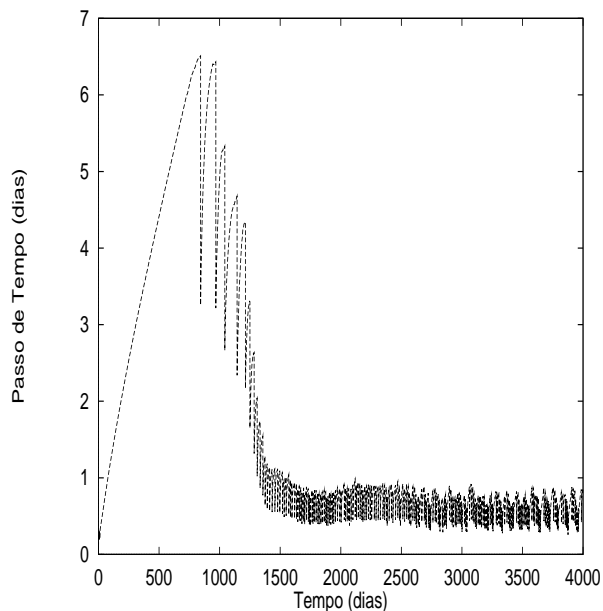
**Figura 6.4:** Contorno das Concentrações para a malha  $80 \times 80$ , em  $t = 500 \text{ dias}$  e  $t = 1000 \text{ dias}$  para o Problema de Injeção de Traçadores na Configuração de Cinco Poços.

A mesma análise pode ser feita com o passo de tempo variável segundo o critério de escolha apresentado no Capítulo 2, que utiliza o controlador PID e a condição de CFL (Figura 6.5), onde se pode notar a boa aproximação dos resultados com passo de tempo variável. Não há diferença visível entre estes resultados e os obtidos com passo de tempo fixo (Figura 6.2). A variação dos passos de tempo pode ser observada na Figura 6.6. Para este exemplo, os passos de tempo calculados variaram de 0.5 até 6.7 dias, para  $CFL_{min} = 0.5$ ,  $CFL_{max} = 80$ .



**Figura 6.5:** Comparação entre a Solução pelo Método dos Elementos Finitos com Integração Reduzida Estabilizada, e a solução Semi-analítica [60] com  $\Delta t$  variável para o Problema de Injeção de Traçadores na Configuração de Cinco Poços.

Para verificar a eficiência computacional obtida com a utilização da metodologia apresentada neste trabalho, a Tabela 6.1 mostra o tempo de processamento das análises, comparando-se a integração reduzida estabilizada com a integração de Gauss completa. Fica evidente o ganho computacional obtido com a utilização da estratégia aqui apresentada, cerca de 40% de economia de processamento em relação a integração tradicional. Para este exemplo, foi considerada uma malha de  $80 \times 80$  elementos com  $\Delta t$  fixo e variável. Completando esta análise, a Tabela 6.2 apresenta o desempenho dos solucionadores em relação tempo total do programa para o caso com passo de tempo fixo. Os solucionadores utilizaram o mesmo número de iterações tanto para a integração reduzida estabilizada, quanto para a integração de Gauss.



**Figura 6.6:** Variação do Passo de Tempo para o Problema de Injeção de Traçadores na Configuração de Cinco Poços.

Os tempos para a montagem das matrizes correspondentes a equação de transporte e ao algoritmo GMRES foram tratados como médias nos passos de tempo.

CPU (s)	$\Delta t$ fixo		$\Delta t$ variável	
	Gauss $2 \times 2$	I. R. Estab.	Gauss $2 \times 2$	I. R. Estab.
Pressão	0.140	0.029	0.130	0.029
Transporte	0.207	0.075	0.255	0.075
Total	1131.089	676.370	363.80	215.67

**Tabela 6.1:** Tempos de Processamento para o Problema de Injeção de Traçadores na Configuração de Cinco Poços.

Apresenta-se a seguir o desempenho das rotinas que apresentam os maiores gastos de CPU (Tabela 6.3). Nesta tabela, `quada2d` é a rotina para a geração das matrizes para a equação de transporte e `nsdrv` é o solucionador não-simétrico GMRES. Pode-se notar que para a integração reduzida estabilizada o custo da solução do problema é dominado pela solução não simétrica em `nsdrv`. Já para a integração

CPU (s)	Gauss $2 \times 2$	I. R. Estab.	n <sup>o</sup> médio de iterações
PCG	0.510	0.500	59
GMRES	0.128	0.124	12
Total	1131.089	676.370	-

**Tabela 6.2:** Desempenho dos Solucionadores para o Problema de Injeção de Traçadores na Configuração de Cinco Poços.

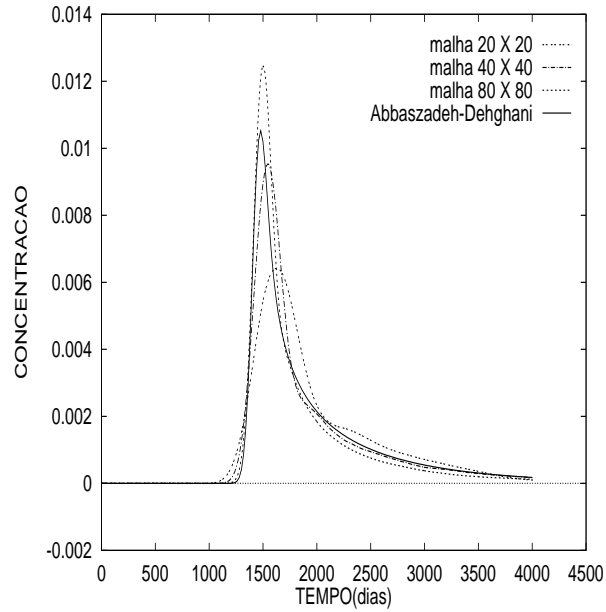
de Gauss tradicional, o custo da geração das matrizes de elemento foi superior ao tempo gasto pela rotina responsável pelo solucionador não-simétrico, e assim o ganho com a utilização de uma estratégia de integração reduzida estabilizada fica evidenciado com a comparação com a metodologia de Gauss tradicional.

Tempo de CPU		
Rotina	Gauss $2 \times 2$	Integ. Reduzida Estab.
quada2d	662.80 s (58.6 %)	241.90 s (35.8 %)
nsdrv	414.80 s (36.7 %)	398.64 s (58.9 %)
outros	53.48 s (4.7 %)	53.36 s (7.8 %)
Total	1131.08 s	676.40 s

**Tabela 6.3:** Desempenho das Principais Rotinas para o Problema de Injeção de Traçadores na Configuração de Cinco Poços.

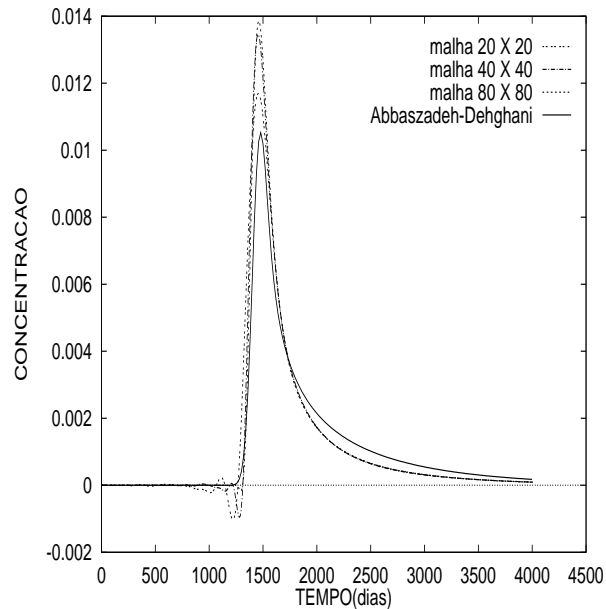
Uma nova análise é feita comparando-se os resultados obtidos com a utilização da matriz de massa consistente calculada pela equação (2.49), com a matriz de massa diagonal (Figura 6.7). Nestes resultados, nota-se que a matriz de massa diagonal conduz a uma resposta mais difusiva que a obtida com a matriz de massa consistente explícita. Nesta análise utilizou-se  $\Delta t$  fixo.

Analisa-se agora os resultados sem operador de captura de descontinuidades (Figura 6.8). Nesta análise utilizou-se as 3 malhas consideradas nos exemplos ante-



**Figura 6.7:** Resultados com Matriz de Massa Diagonal para o Problema de Injeção de Traçadores na Configuração de Cinco Poços.

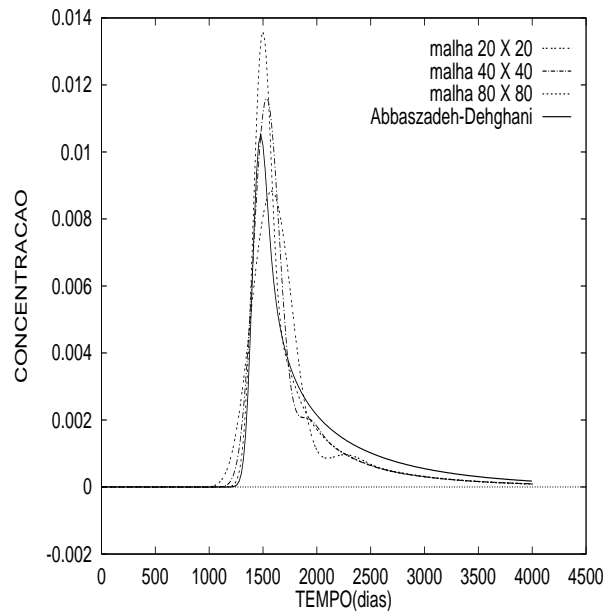
riores com  $\Delta t$  fixo. Pode-se notar que os resultados do método SUPG sem captura de descontinuidades leva a uma maior oscilação quando comparados com os resultados da Figura 6.2. Fica assim evidenciado o papel do operador de captura de descontinuidades na suavização dos efeitos transversais às linhas de corrente.



**Figura 6.8:** Resultados sem Operador de Captura de Descontinuidades para o Problema de Injeção de Traçadores na Configuração de Cinco Poços.

A Figura 6.9 mostra os resultados da análise sem operador de captura de des-

continuidades com matriz de massa diagonal. Novamente verifica-se que a resposta se torna mais difusiva com a utilização de uma matriz de massa diagonal.



**Figura 6.9:** Resultados sem Operador de Captura de Descontinuidades e com Matriz de Massa Diagonal para o Problema de Injeção de Traçadores na Configuração de Cinco Poços.

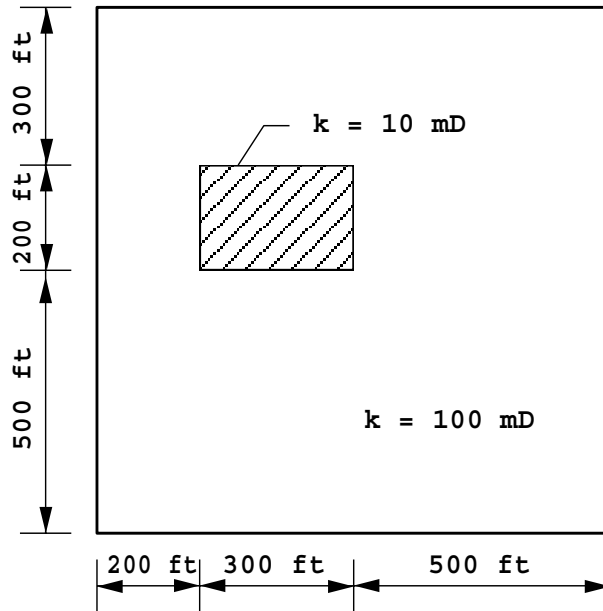
A Tabela 6.4 mostra o desempenho das principais rotinas sem operador de captura de descontinuidades. Da comparação entre as tabelas 6.3 e 6.4 nota-se que a integração reduzida estabilizada tem suas vantagens evidenciadas em problemas onde a avaliação das matrizes consome uma parcela significativa do tempo da análise, como no caso em questão onde o operador de captura de descontinuidades introduziu uma não-linearidade ao problema.

Um novo teste é feito considerando-se o meio heterogêneo da Figura 6.10, onde se tem os mesmos dados do exemplo anterior, porém com a permeabilidade variando de  $k = 10 \text{ mD}$  na região hachurada, a  $k = 100 \text{ mD}$  no restante do domínio.

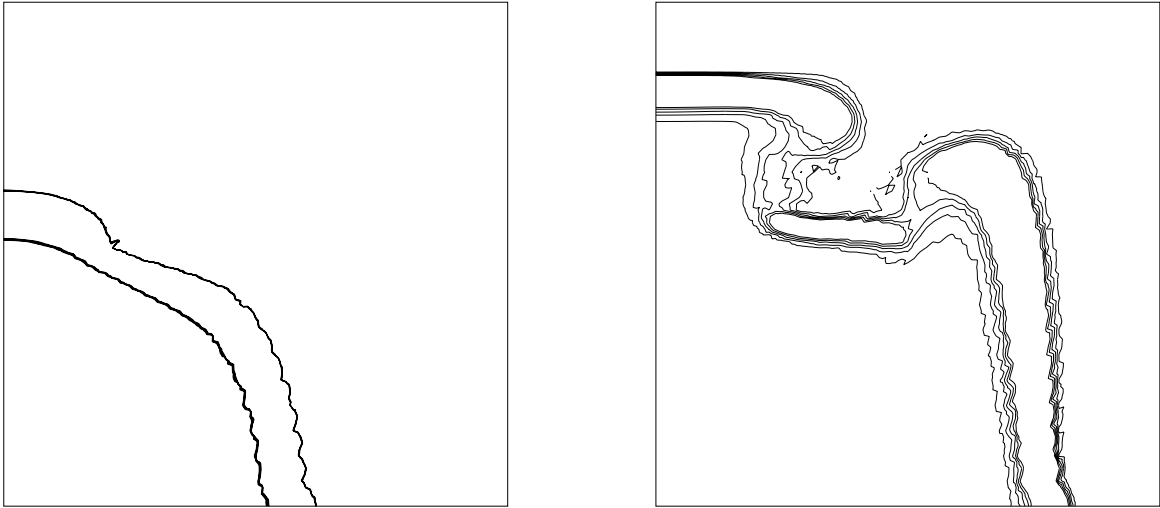
A Figura 6.11 mostra os resultados das concentrações em  $t = 500 \text{ dias}$  e  $t = 1000 \text{ dias}$ , onde pode-se verificar a perda da simetria da resposta devido à introdução da área com baixa permeabilidade.

Tempo de CPU		
Rotina	Gauss $2 \times 2$	Integ. Reduzida Estab.
quada2d	0.20 s (0.1 %)	0.07 s (0.02 %)
nsdrv	302.22 s (84.5 %)	304.17 s (86.3 %)
outros	55.02 s (15.4 %)	48.50 s (13.7 %)
Total	357.44 s	352.74 s

**Tabela 6.4:** Desempenho das Principais Rotinas para o Problema de Injeção de Traçadores na Configuração de Cinco Poços sem Operador de Captura de Descontinuidades.

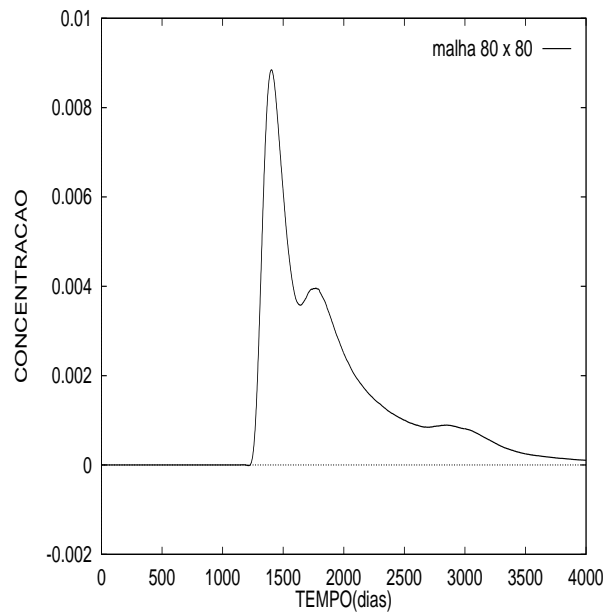


**Figura 6.10:** Domínio do Problema Heterogêneo de Injeção de Traçadores na Configuração de Cinco Poços.



**Figura 6.11:** Contorno das Concentrações em  $t = 500$  dias e  $t = 1000$  dias para o Problema Heterogêneo de Injeção de Traçadores na Configuração de Cinco Poços.

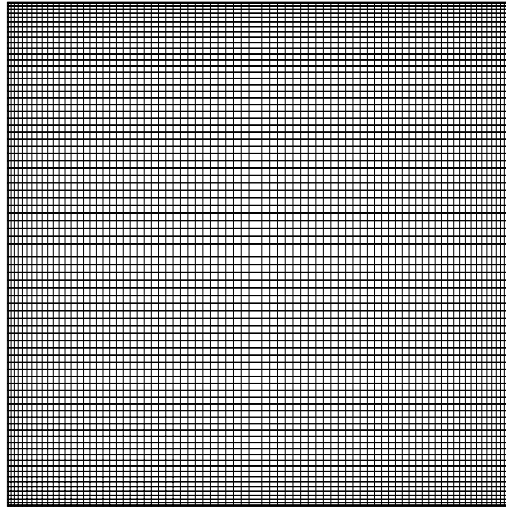
A Figura 6.12 mostra o gráfico das concentrações do traçador para este caso, onde nota-se a presença de dois picos. O primeiro está associado à direção preferencial do escoamento, enquanto que o segundo surge pela necessidade de se contornar a região de baixa permeabilidade. Estes resultados estão em acordo com os da referência [58].



**Figura 6.12:** Resultados do Problema Heterogêneo de Injeção de Traçadores na Configuração de Cinco Poços.

Analisa-se agora os resultados para a malha  $80 \times 80$  com refinamento logarítmico

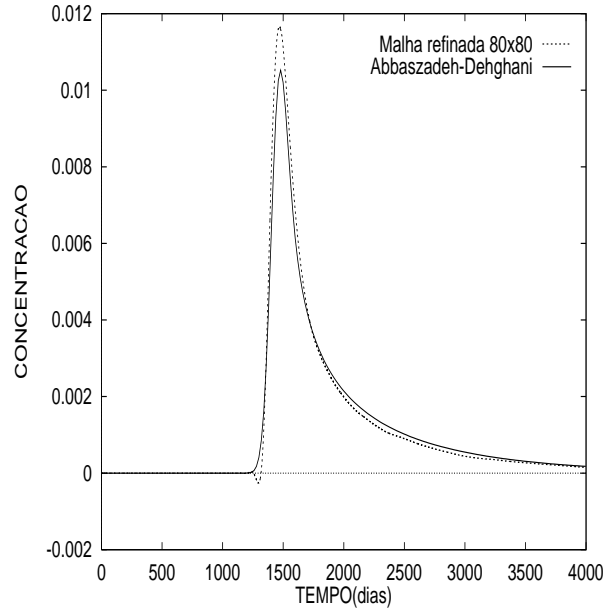
apresentada na Figura 6.13.



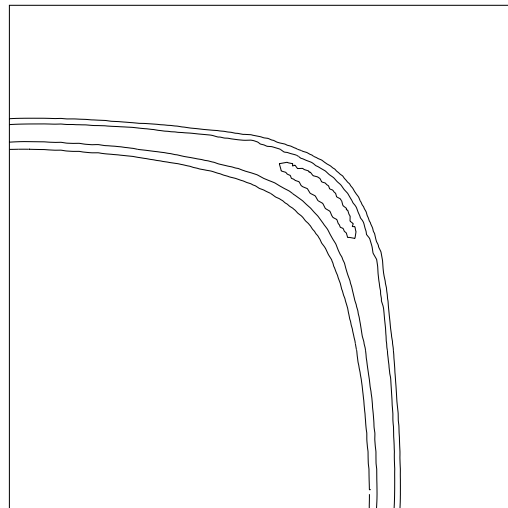
**Figura 6.13:** Malha com Refinamento Logarítmico para o Problema de Injeção de Traçadores na Configuração de Cinco Poços.

Encontram-se na Figura 6.14 os resultados obtidos com  $\Delta t = 0.2$  dias para a malha com refinamento. Verifica-se que os resultados são comparáveis aos da Figura 6.5. Já a Figura 6.15 mostra o contorno das concentrações em  $t = 1000$  dias. O refinamento não criou nenhuma dificuldade numérica, uma vez que a regularidade dos elementos foi preservada. Esta regularidade no entanto é perdida quando se utiliza a malha não-uniforme  $80 \times 80$  da Figura 6.16. Os resultados desta análise para passo de tempo igual a  $0.2$  dias, encontram-se na Figura 6.17, e a Figura 6.18 mostra o contorno das concentrações em  $t = 1000$  dias.

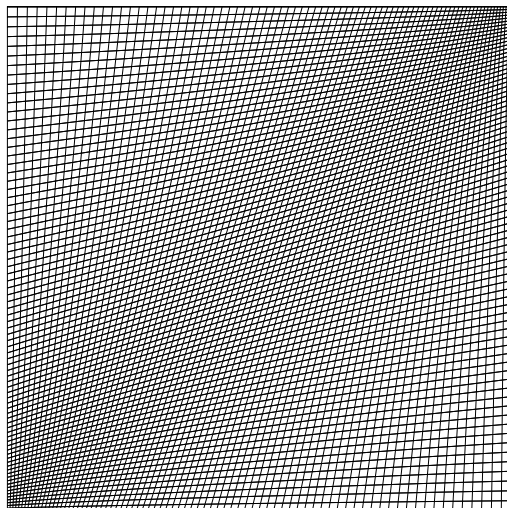
Os resultados apresentados nas Figuras 6.17 e 6.18 sugerem que mesmo sem a garantia da superconvergência do campo de velocidades é possível a obtenção de bons resultados, uma vez que o erro absoluto é pequeno, mesmo em problemas predominantemente advectivos. Uma vez que se trata de uma malha extremamente distorcida, não se pode ter nenhuma garantia de convergência para o campo de velocidades. Além disso, a estratégia de estabilização leva a resultados ótimos em malhas regulares com parâmetro de estabilização  $\varepsilon = 1$ . As tentativas de utilização de diferentes parâmetros de estabilização levou a soluções instáveis. Acredita-se que



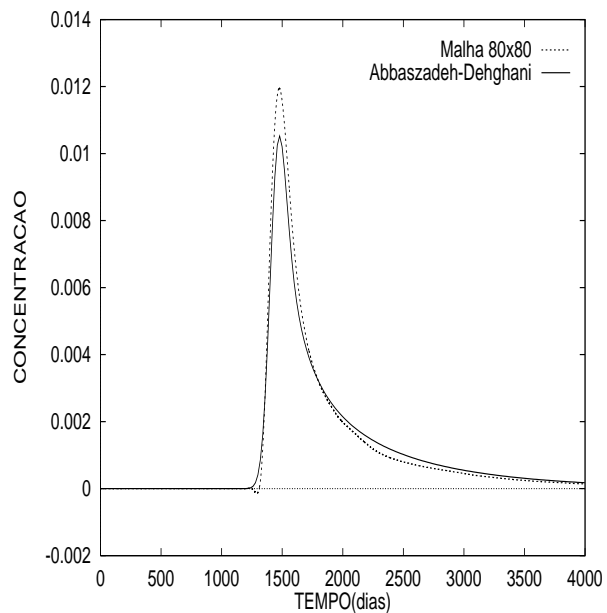
**Figura 6.14:** Resultados com Malha com Refinamento Logarítmico para o Problema de Injeção de Traçadores na Configuração de Cinco Poços.



**Figura 6.15:** Contorno das Concentrações em  $t = 1000$  dias para a Malha Refinada nos Poços, para o Problema de Injeção de Traçadores na Configuração de Cinco Poços.

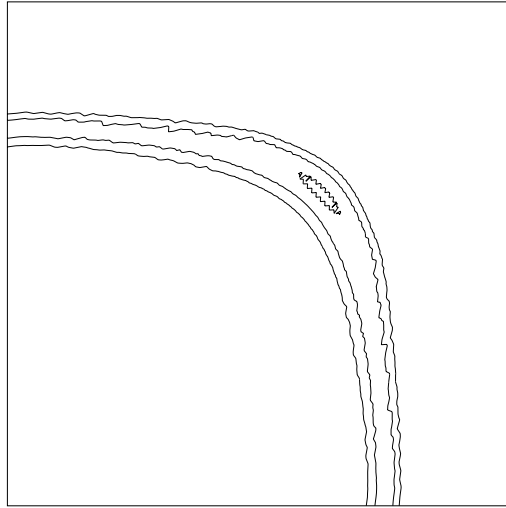


**Figura 6.16:** Malha Não-uniforme para o Problema de Injeção de Traçadores na Configuração de Cinco Poços.



**Figura 6.17:** Resultados com Malha Não-uniforme para o Problema de Injeção de Traçadores na Configuração de Cinco Poços.

o surgimento do contorno fechado (bolha) na frente de concentrações, observado nas figuras 6.15 e 6.18, deve-se a um efeito de malha.

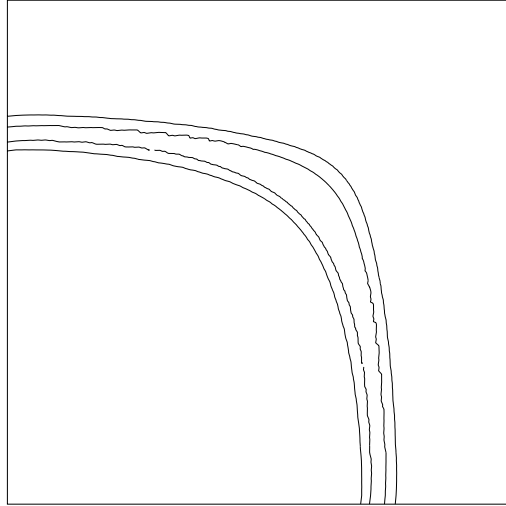


**Figura 6.18:** Contorno das Concentrações em  $t = 1000$  dias para a Malha Não-uniforme, para o Problema de Injeção de Traçadores na Configuração de Cinco Poços.

A análise é repetida com a utilização de matriz de massa diagonal (Figura 6.19) obtendo-se a suavização dos resultados (maior difusão) quando comparados aos resultados anteriores (Figura 6.18).

## 6.2 Simulação Numérica do Processo de Recuperação Terciária ( $M > 1$ )

A simulação numérica de processos de recuperação de hidrocarbonetos é uma atividade computacional das mais intensas, e a utilização de estratégias que diminuam o custo computacional destas análises é de grande relevância. Para se comprovar a eficácia da formulação apresentada nos capítulos anteriores para esta aplicação, considera-se a geometria do exemplo anterior (configuração dos cinco poços), com alta razão de mobilidade em um meio poroso homogêneo. Considera-se a viscosidade do fluido residente  $\mu(0) = 1$  cP, e as dispersividades longitudinal e



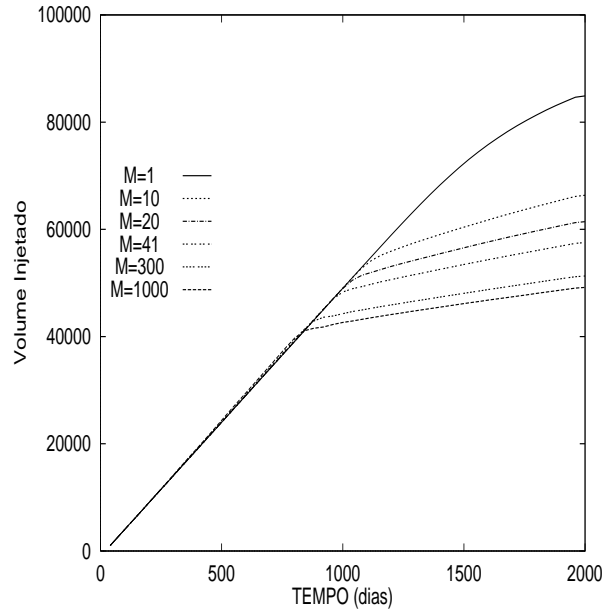
**Figura 6.19:** Resultados com Malha Não-uniforme e Matriz de Massa Diagonal para o Problema de Injeção de Traçadores na Configuração de Cinco Poços.

transversal  $\alpha_L = 10 \text{ ft}$  e  $\alpha_T = 1 \text{ ft}$ , respectivamente. A Figura 6.20 mostra as curvas de produção obtidas com diferentes valores para a razão de mobilidade ( $M = 1$ ,  $M = 10$ ,  $M = 20$ ,  $M = 41$ ,  $M = 300$ ,  $M = 1000$ ), utilizando-se uma malha de  $100 \times 100$  elementos com  $\Delta t = 40 \text{ dias}$ . Observa-se a influência da razão de mobilidade no tempo de chegada da frente de concentração no poço de produção.

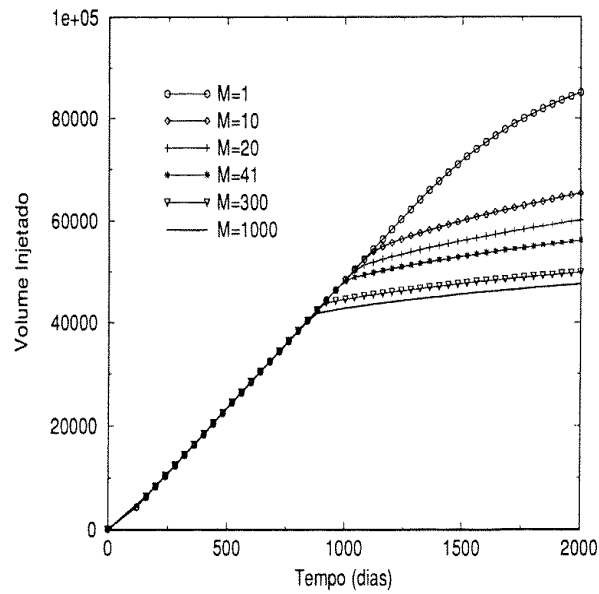
A Figura 6.21 mostra a curva de produção obtida pela formulação espaço-tempo [58], enquanto que a Figura 6.22 mostra a comparação entre a curva de recuperação para  $M = 41$  com os resultados de Coutinho e Alves [32], e Russel et al. [6]. Nota-se que a solução obtida está em boa concordância com as referências.

A Figura 6.23 mostra os resultados obtidos para  $M = 41$  em  $t = 500 \text{ dias}$  e  $t = 1000 \text{ dias}$ .

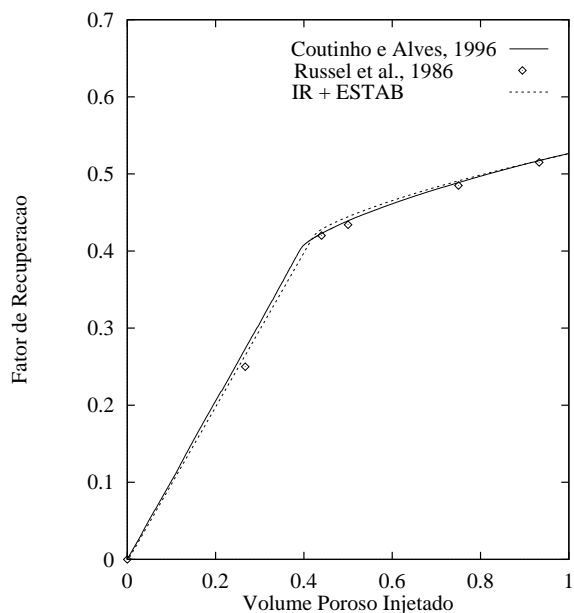
A análise do desempenho computacional pode ser vista na Tabela 6.5 onde se encontram os tempos de processamento para o caso anterior, utilizando-se a integração reduzida estabilizada, e o método de Gauss tradicional com  $2 \times 2$  pontos de quadratura. Todos os tempos foram considerados como tempos médios. Verifica-se que a montagem das matrizes para a equação da pressão com a integração reduzida estabilizada foi em média 5 vezes mais rápida do que com a quadratura de Gauss



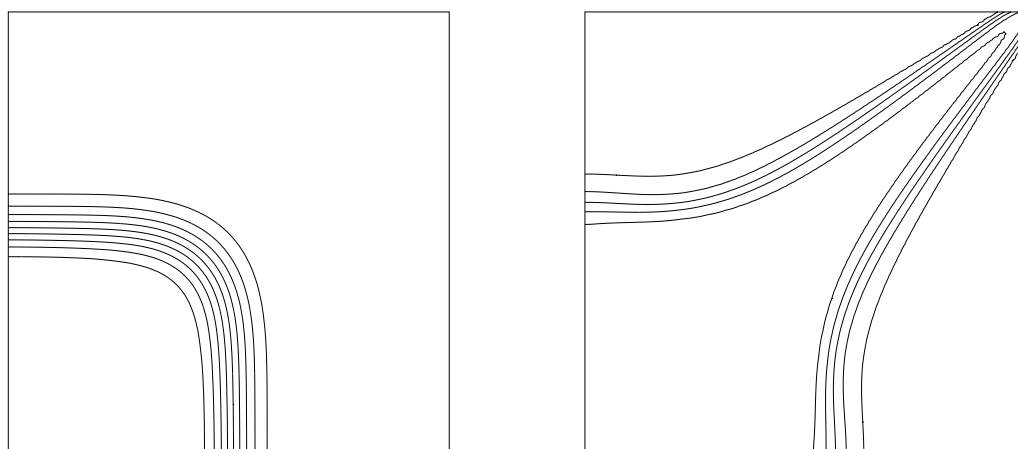
**Figura 6.20:** Curvas de Produção para Diferentes Valores de  $M$  para o Problema de Recuperação Terciária.



**Figura 6.21:** Curvas de Produção pela Formulação Espaço-tempo com Diferentes Valores de  $M$  para o Problema de Recuperação Terciária.



**Figura 6.22:** Comparação entre a Curva de Recuperação pelo Método dos Elementos Finitos com Integração Reduzida Estabilizada, e os Resultados de Coutinho e Alves [32], e Russel et al. [6] para o Problema de Recuperação Terciária.



**Figura 6.23:** Respostas com  $M = 41$  em  $t = 500$  dias e  $t = 1000$  dias para o Problema de Recuperação Terciária.

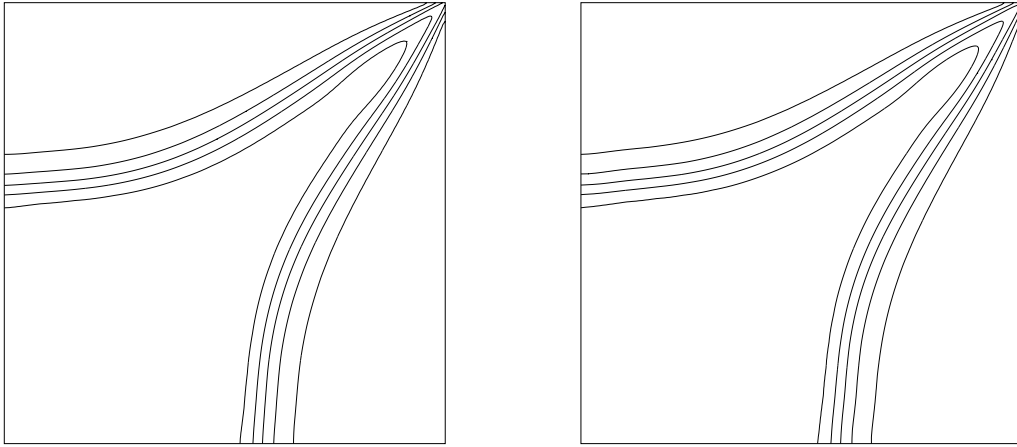
tradicional, enquanto que para a montagem das matrizes correspondentes à equação de transporte a integração reduzida se mostrou em média 4 vezes mais rápida. Em relação ao tempo total da análise, o programa com integração reduzida foi 20% mais rápido do que o com a integração de Gauss  $2 \times 2$ .

CPU (s)	Gauss $2 \times 2$	I. R. Estab.	n <sup>o</sup> médio de iterações
Pressão	0.207	0.040	-
PCG	1.514	1.546	155
Transporte	0.328	0.078	-
GMRES	0.327	0.333	23
Total	122.890	104.010	-

**Tabela 6.5:** Tempos de Processamento para o Problema de Recuperação Terciária.

Uma nova análise é feita considerando-se a malha não-uniforme da Figura 6.16 para  $M = 41$  em  $t = 1000$  dias. Os resultados desta análise podem ser observados na Figura 6.24. Novamente foi possível a obtenção de boa resposta em malha não-uniforme, mesmo sem a garantia da convergência ótima. Completando a análise a Tabela 6.6 mostra os tempos de processamento para o problema com malha não-uniforme. As relações entre os tempos foram semelhantes ao caso anterior.

Vale ressaltar o fato de que todos os resultados foram obtidos com avaliação das velocidades nos centróides dos elementos a partir do gradiente das pressões calculadas com integração reduzida estabilizada, ou com  $2 \times 2$  pontos de integração.



**Figura 6.24:** Respostas para a Malha Não-uniforme em  $t = 1000$  dias (a) Integração Reduzida Estabilizada, (b) Integração de Gauss  $2 \times 2$  para o Problema de Recuperação Terciária.

CPU (s)	Gauss $2 \times 2$	I. R. Estab.	n <sup>o</sup> médio de iterações
Pressão	0.208	0.040	-
PCG	1.680	1.710	173
Transporte	0.326	0.080	-
GMRES	0.603	0.602	43
Total	144.81	125.689	-

**Tabela 6.6:** Tempos de Processamento para a Malha Não-uniforme para o Problema de Recuperação Terciária.

# Capítulo 7

## Aplicações em Águas Subterrâneas

### 7.1 Transporte de Substâncias Não-reativas

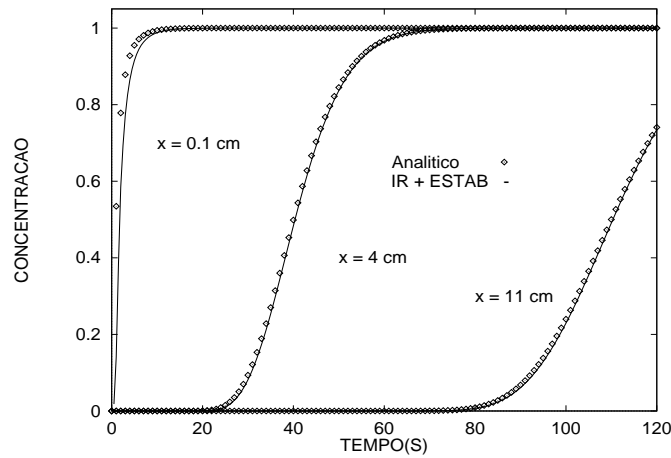
#### 7.1.1 Escoamento Unidimensional

Trata-se de um exemplo onde as mudanças no campo de concentrações de um componente químico dissolvido, no tempo, são causadas pelo transporte advectivo e dispersão hidrodinâmica. Os resultados são comparados com os obtidos com o modelo MOC3D [16], de escoamento em águas subterrâneas tridimensional, que utiliza o método das diferenças finitas na solução da equação da pressão e o método das características na solução da equação de transporte.

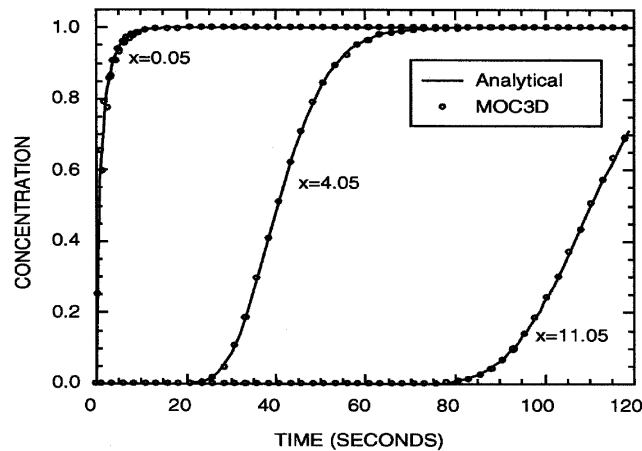
O problema consiste no escoamento unidimensional em um domínio de comprimento  $l = 12 \text{ cm}$ , sujeito às seguintes condições de contorno e inicial,

$$\begin{aligned} v c^* &= v c - \mathcal{D} \frac{\partial c}{\partial x} && \text{em } x = 0 \\ \frac{\partial c}{\partial x} &= 0 && \text{em } x = L \\ c(x, 0) &= 0 \end{aligned} \tag{7.1}$$

Assume-se que a concentração no ponto de injeção ( $x = 0$ ) é  $c^* = 1$ , e que  $v = 0.10 \text{ cm/s}$ . O domínio é dividido em 120 elementos finitos, de forma que  $h^e = 0.1 \text{ cm}$ , mesmo valor do espaçamento utilizado por Konikow et al. [16] para a malha do método das características. São dadas as dispersividades  $\alpha_L = \alpha_T = 0.1 \text{ cm}$ , e a porosidade  $\varphi = 0.1$ . As curvas da Figura 7.1 mostram as mudanças na concentração, ao longo do tempo, em 3 diferentes pontos do domínio ( $x = 0.1, x = 4, x = 11 \text{ cm}$ ), comparadas com os resultados da referência e com a solução analítica.



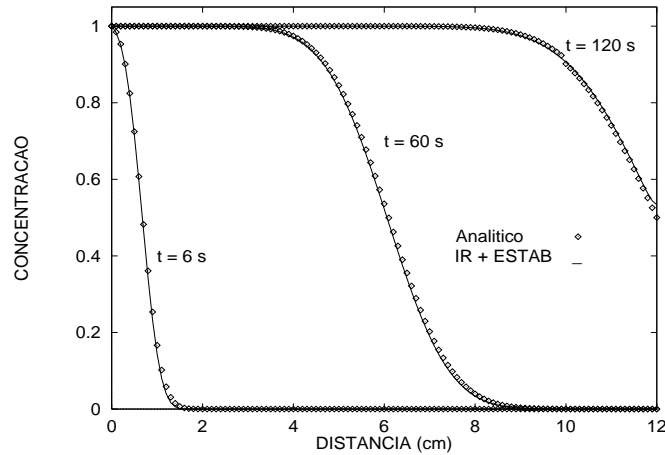
(a) Solução com Integração Reduzida Estabilizada e Solução Analítica



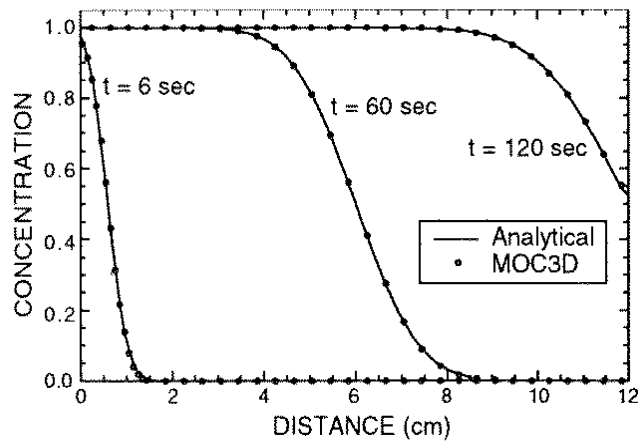
(b) Solução MOC3D [16] e Solução Analítica

**Figura 7.1:** Transporte em Diferentes Pontos do Domínio para o Problema de Escoamento Unidimensional.

A Figura 7.2 mostra a solução do problema em 3 diferentes instantes da análise ( $t = 6$ ,  $t = 60$ ,  $t = 120$  s). Da comparação entre os resultados, observa-se a concordância nas soluções obtidas utilizando-se o método dos elementos finitos com integração reduzida estabilizada para este problema.



(a) Solução com Integração Reduzida Estabilizada e Solução Analítica



(b) Solução MOC3D [16] e Solução Analítica

**Figura 7.2:** Transporte em Diferentes Tempos da Análise para o Problema de Escoamento Unidimensional.

**Observações:**

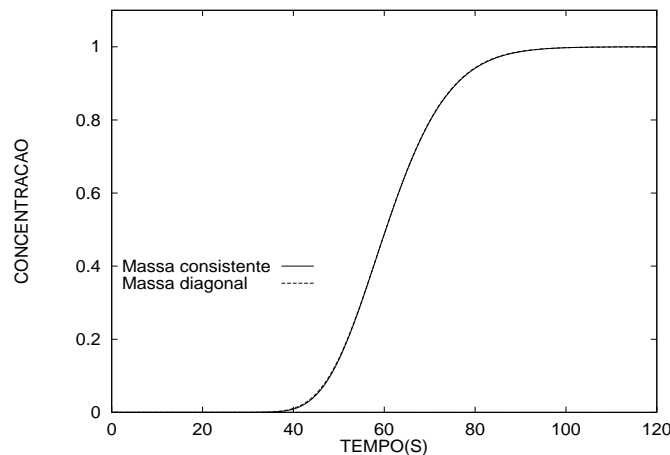
- 1 - A solução analítica, encontra-se em Wexler [61] e em Sun [23], e para o caso

em questão se reduz a,

$$c(x, t) = \frac{c^*}{2} \left\{ \operatorname{erfc} \left[ \frac{x - v_x t}{2\sqrt{\mathcal{D}t}} \right] + \exp \left( \frac{v_x x}{\mathcal{D}} \right) \operatorname{erfc} \left[ \frac{x + v_x t}{2\sqrt{\mathcal{D}t}} \right] \right\} \quad (7.2)$$

2- Na Figura 7.1 a pequena diferença na localização dos pontos se deve à utilização do método das características na referência [16].

Este exemplo também foi utilizado para comparar as soluções obtidas com a utilização da matriz de massa consistente (2.49), com a matriz de massa diagonalizada. Estes resultados encontram-se na figura 7.3, onde se verifica que não há grandes diferenças entre os resultados com a matriz de massa diagonal e aqueles obtidos com a metodologia aqui utilizada para uma malha regular (resultados em  $x = 4 \text{ cm}$ ). Isto se deve provavelmente à suavidade da solução. Em soluções não suaves espera-se que a matriz de massa diagonalizada leve a resultados mais difusivos dos que os encontrados com a utilização da matriz de massa consistente, conforme o ocorrido nos exemplos do capítulo anterior.



**Figura 7.3:** Resultados com Matriz de Massa Consistente e Matriz de Massa Diagonalizada para o Problema de Escoamento Unidimensional.

### 7.1.2 Escoamento Bidimensional Radial com Dispersão

Este problema é usado para comparar a solução obtida para o método dos elementos finitos com integração reduzida estabilizada com os resultados da referência

(MOC3D) e a solução analítica. Esta última, referente a injeção em um aquífero infinito bidimensional. As velocidades variam no espaço, e são inversamente proporcionais à distância do ponto de injeção. A equação governante do problema é [16],

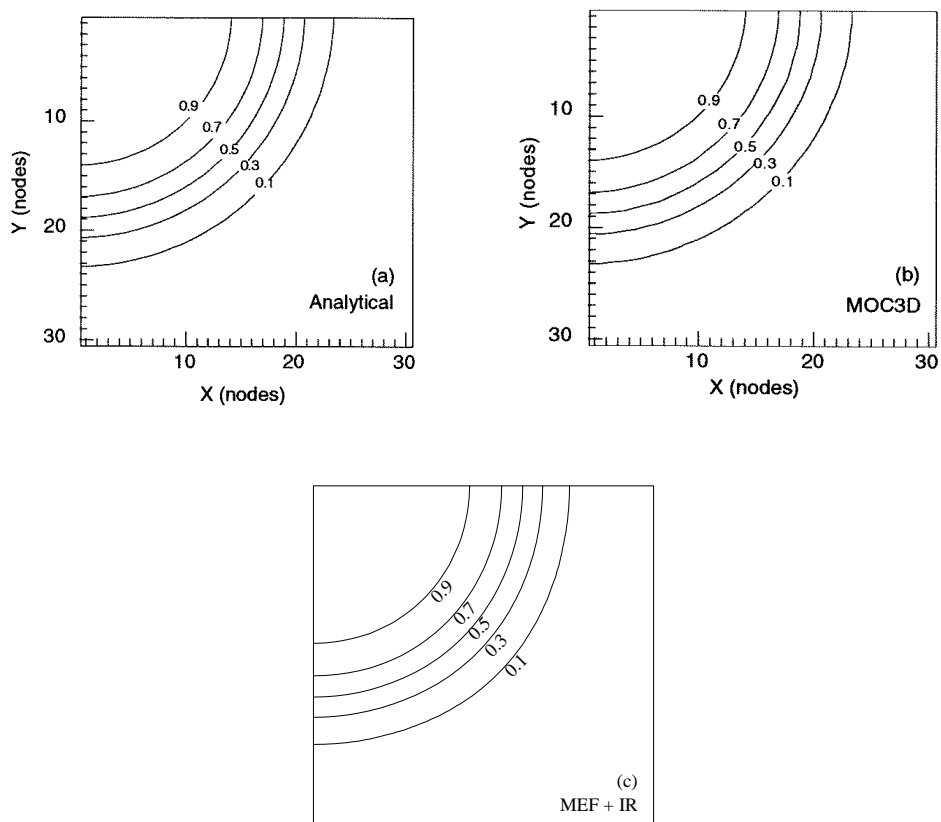
$$\frac{\partial c}{\partial t} + \frac{\mathcal{Z}}{r} \frac{\partial c}{\partial r} = \alpha_L \frac{\mathcal{Z}}{r} \frac{\partial^2 c}{\partial r^2} \quad t > 0 \quad (7.3)$$

onde,  $\mathcal{Z} = \frac{f}{2\pi b\varphi}$ ,  $r$  é a distância radial do ponto de injeção, e  $b$  é a espessura do aquífero. Esta equação é sujeita às seguintes condições de contorno e inicial,

$$\begin{aligned} c(r, 0) &= 0 \\ c^* &= 1.0 \quad t > 0 \\ c(r \rightarrow \infty, t) &\rightarrow 0 \quad t > 0 \end{aligned} \quad (7.4)$$

O problema foi modelado usando uma malha de  $30 \times 30$  elementos. A concentração inicial  $c^* = 1.0$  foi tomada no ponto de coordenadas  $(0, 0)$  onde  $f = 56.25 \text{ m}^3/h$ . São dados,  $\varphi = 0, 2$ ,  $\alpha_L = \alpha_T = 10 \text{ m}$ ,  $b = 10 \text{ m}$ . A Figura 7.4 apresenta os resultados do método dos elementos finitos com integração reduzida estabilizada em comparação com os resultados encontrados na literatura (MOC3D) e para a solução analítica. Através da comparação entre os resultados verifica-se a concordância entre os mesmos.

A Tabela 7.1 mostra a relação entre os tempos de processamento gastos na montagem das matrizes de elemento. Esta relação foi observada em todos os exemplos deste capítulo, onde nota-se a grande economia na utilização da integração reduzida estabilizada na montagem das matrizes de elemento. Economia esta que pode chegar a 25 % do tempo gasto pela quadratura de Gauss. Em particular para o exemplo acima, o tempo total de processamento para a análise foi de 17.28s para a quadratura de Gauss, enquanto para a integração reduzida estabilizada foi de 11.28s. Todas as análises deste capítulo foram feitas com a inclusão do termo de captura de descontinuidades, embora estes exemplos possuam soluções suaves.



**Figura 7.4:** Escoamento Bidimensional Radial Comparação entre Resultados da Integração Reduzida Estabilizada, com a Solução Analítica e MOC3D [16] para o Problema de Escoamento Radial.

Relação Entre Tempos de CPU		
Montagem das Matrizes	Gauss $2 \times 2$	Integ. Reduzida Estab.
Pressão (difusão)	1	0.25
Transporte (advecção-difusão)	1	0.50

**Tabela 7.1:** Relação entre Tempos de Processamento para as Rotinas de Montagem das Matrizes de Elemento.

## 7.2 Transporte de Substâncias Reativas

### 7.2.1 Mecanismos de Iteração, Transformação ou Decaimento

Nos capítulos anteriores, tratou-se somente do transporte de substâncias não-reativas (ou conservativas), isto é, do transporte de substâncias que não são sujeitas às mudanças, trocas ou reações enquanto atravessam o meio poroso. Neste capítulo trata-se do transporte com reações químicas.

Existem leis de interação entre a fase imóvel (fase sólida e o líquido imóvel que circunda os grãos por forças de atração molecular), e as substâncias transportadas. Alguns mecanismos de interação, transformação ou decaimento podem tornar o transporte não-conservativo [24]. De forma geral estes mecanismos são:

- Mecanismos Físicos - As substâncias transportadas podem ser bloqueadas (paralizadas) por uma espécie de filtragem física quando estas substâncias são muito menores do que o tamanho dos poros.

- Mecanismos Geoquímicos - Devido a combinações de ions e moléculas eletricamente neutras, reações ácido/base dependendo do pH do soluto e de que rochas este atravessa, reações de oxidação/redução, que condicionam o estado de valência dos ions transportados, precipitação/solução, que podem mobilizar ou dissolver as substâncias. E a adsorção/desorção, em particular as trocas iônicas, as quais tomam lugar na superfície de minerais argilosos ou coloidais.

- Mecanismos Radiológicos - O decaimento radioativo (anulamento de substâncias) e a criação de produtos (*daughter products*) por este decaimento (surgimento de novas substâncias).

- Mecanismos Biológicos - A atividade biológica no meio poroso pode decompor

ou transformar alguns elementos. Geralmente estes processos são representados por uma reação de decaimento, com uma meia-vida biológica.

A maioria das reações químicas que afetam o transporte do soluto podem ser divididas em dois grupos principais [23],

1 - Reações suficientemente rápidas e reversíveis, de forma que o equilíbrio local possa ser assumido;

2 - Reações insuficientemente rápidas e/ou irreversíveis, onde o equilíbrio local não pode ser assumido.

Estas reações podem ainda ser de superfície (sorção, troca iônica), ou reações clássicas (precipitação/dissolução, oxidação/redução, etc).

Os mecanismos representados nos modelos de transporte são ainda muito limitados às reações do tipo mais simples ou a representações simplificadas dos efeitos de reações mais complexas. Considera-se neste trabalho dois tipos de reações frequentemente incorporadas aos modelos de transporte advectivo-difusivo, a sorção com equilíbrio controlado e as reações irreversíveis de primeira ordem.

### **Sorção com Equilíbrio Controlado**

Quando um meio poroso saturado contém uma substância dissolvida, certos solutos são removidos da solução e imobilizados na matriz sólida do meio poroso por forças químicas e eletrostáticas. Este processo é conhecido como sorção, e inclui a chamada adsorção (aderência de espécies químicas na superfície da matriz porosa); a absorção (penetração mais ou menos uniforme das espécies químicas nos grãos sólidos) [25]; trocas iônicas, que se subdividem em catiônicas e aniônicas, onde as

primeiras descrevem o processo onde cátions são atraídos para regiões próximas à superfície de minerais de argila carregados negativamente e aí permanecem por forças eletrostáticas, e as segundas ocorrem em locais positivamente carregados em óxidos de ferro e alumínio nas arestas de minerais de argila; e ainda, a quimisorção, onde o soluto é incorporado à superfície de um sedimento, solo ou rocha por uma reação química [14].

Sendo  $\bar{c}$  a massa do soluto contido no material do aquífero por sorção ( $MM^{-1}$ ), e  $\rho_b$  a densidade volumétrica do material do aquífero ( $ML^{-3}$ ), e assumindo-se que a concentração do soluto  $c$  e a concentração sorvida estão em equilíbrio, ou seja, assumindo-se que o processo de sorção é muito rápido em relação à velocidade de fluxo, chama-se isoterma de equilíbrio de sorção a curva  $c \times \bar{c}$ . A curva recebe este nome porque os experimentos de adsorção geralmente são feitos a temperatura constante. Utiliza-se escalas do tipo *log-log* que permitem obter-se soluções gráficas retilíneas do tipo,

$$\log \bar{c} = a \log c + \log k_f \quad \text{ou} \quad \bar{c} = k_f c^a \quad (7.5)$$

onde a constante  $k_f$  e o expoente  $a$  dependem do componente químico e do meio poroso. A equação (7.5) é conhecida como isoterma de Freundlich. Para alguns componentes químicos em baixa concentração a sorção é governada por esta isoterma com  $a$  unitário. Nestes casos, a constante é chamada de coeficiente de distribuição  $k_d$ , que representa a partição da massa total do poluente, por unidade de volume do meio poroso, entre a quantidade adsorvida na superfície dos grãos e a quantidade que permanece em solução na fase fluida ( $L^3 M^{-1}$ ) [14]. Desta forma, neste caso a expressão (7.5) se reduz a,

$$\bar{c} = k_d c \quad (7.6)$$

Assim, o acúmulo na fase sorvida pode ser expresso como,

$$\frac{\partial}{\partial t}(\rho_b \bar{c}) = k_d \rho_b \frac{\partial c}{\partial t} \quad (7.7)$$

considerando-se que  $k_d$  e  $\rho_b$  são constantes no tempo.

A equação de transporte (2.11) pode ser reescrita expandindo-se os termos,

$$\begin{aligned} \frac{\partial(\varphi c)}{\partial t} &= \varphi \frac{\partial c}{\partial t} + c \frac{\partial \varphi}{\partial t} \\ \frac{\partial}{\partial x_i}(\varphi c v_i) &= \varphi v_i \frac{\partial c}{\partial x_i} + c \frac{\partial}{\partial x_i}(\varphi v_i) \end{aligned} \quad (7.8)$$

e somando-se  $f c$ , em ambos os lados, vem,

$$\begin{aligned} \varphi \frac{\partial c}{\partial t} + \frac{\partial}{\partial t}(\rho_b \bar{c}) + \varphi v_i \frac{\partial c}{\partial x_i} - \frac{\partial}{\partial x_i} \left( \varphi \mathcal{D}_{ij} \frac{\partial c}{\partial x_j} \right) + \\ - [f(c^* - c)] + \lambda(\varphi c + \rho_b \bar{c}) = -c \left[ \frac{\partial \varphi}{\partial t} + \frac{\partial}{\partial x_i}(\varphi v_i) - f \right] \end{aligned} \quad (7.9)$$

O lado direito da equação anterior corresponde à equação da continuidade. Se a continuidade do fluido é satisfeita, então este termo se anula, o que leva a ,

$$\begin{aligned} \frac{\partial c}{\partial t} + \frac{1}{\varphi} \frac{\partial}{\partial t}(\rho_b \bar{c}) + v_i \frac{\partial c}{\partial x_i} - \frac{1}{\varphi} \frac{\partial}{\partial x_i} \left( \varphi \mathcal{D}_{ij} \frac{\partial c}{\partial x_j} \right) + \\ - \frac{1}{\varphi} [f(c^* - c)] + \lambda \left( c + \frac{\rho_b \bar{c}}{\varphi} \right) = 0 \end{aligned} \quad (7.10)$$

que é a chamada equação de fluxo removido [16].

Substituindo-se (7.7) em (7.10), vem,

$$\begin{aligned} R_f \frac{\partial c}{\partial t} + v_i \frac{\partial c}{\partial x_i} - \frac{1}{\varphi} \frac{\partial}{\partial x_i} \left( \varphi \mathcal{D}_{ij} \frac{\partial c}{\partial x_j} \right) + \\ - \frac{1}{\varphi} [f(c^* - c)] + \lambda c R_f = 0 \end{aligned} \quad (7.11)$$

onde  $R_f$  é chamado fator de retardo, que é uma grandeza adimensional dada por,

$$R_f = 1 - \frac{\rho_b}{\varphi} k_d \quad (7.12)$$

Assumindo-se que  $R_f$  não varia no tempo e no espaço, podemos reescrever (7.11) como,

$$\begin{aligned} \frac{\partial c}{\partial t} + \frac{v_i}{R_f} \frac{\partial c}{\partial x_i} - \frac{1}{\varphi R_f} \frac{\partial}{\partial x_i} \left( \varphi \mathcal{D}_{ij} \frac{\partial c}{\partial x_j} \right) + \\ - \frac{1}{\varphi R_f} [f(c^* - c)] + \lambda c = 0 \end{aligned} \quad (7.13)$$

## Observações:

1 - A isoterma de Freundlich assume que a matriz sólida tem capacidade de sorção infinita. É possível se utilizar a chamada isoterma de Langmuir [25], que considera a capacidade de sorção máxima. Neste caso, como esta isoterma é não-linear, a equação de transporte resultante também será não-linear.

2 - O efeito da sorção sob uma isoterma linear, assumindo-se o equilíbrio instantâneo da sorção, é equivalente a retardar (tornar mais lento) o transporte advectivo-difusivo. A substância sorvida se move advectivamente com uma velocidade de percolação retardada ( $\mathbf{v}/R_f$ ), e o transporte difusivo é controlado por um coeficiente de dispersão reduzido ( $\mathcal{D}/R_f$ ) [25].

3 - Muitos solutos orgânicos são fortemente sorvidos pelo carbono orgânico sólido, o que tem aplicação prática no uso de filtros de carbono ativado na remoção de contaminantes orgânicos da água. Nestes casos, a sorção é geralmente descrita por uma isoterma linear, de forma semelhante a da equação (7.6).

4 - As isotermas são obtidas a partir de dados experimentais, no entanto, quando o mecanismo de sorção é bem conhecido, é possível se obter isotermas e fatores de retardo com base em princípios químicos, por exemplo, no caso de sorção devida a alguns tipos de troca iônica, onde é possível se estabelecer o equilíbrio isotérmico diretamente dos princípios termodinâmicos [25]. As isotermas de troca iônica podem ser incorporadas à equação de transporte da mesma forma que as isotermas de Freundlich e de Langmuir.

## Reações Irreversíveis de Primeira Ordem

Certas reações químicas como o decaimento radioativo, hidrólise e algumas formas de biodegradação podem ser caracterizadas como processos irreversíveis de primeira ordem. Este tipo de reação corresponde ao último termo na equação de transporte (7.13), que representa o equilíbrio de entrada/saída da massa de soluto. Neste termo, a constante  $\lambda$ , conhecida como taxa de decaimento ( $T^{-1}$ ), geralmente é expressa como uma reação de meia-vida, ou seja, o tempo necessário para que a concentração do soluto diminua à metade do seu valor original, sob a influência isolada de uma reação de decaimento,

$$\frac{\partial c}{\partial t} = -\lambda c \quad (7.14)$$

que tem como solução,

$$c(t) = c_0 e^{-\lambda t} \quad (7.15)$$

onde  $c_0$  é a concentração inicial. Assim, de (7.15), vem,

$$\lambda = \frac{\ln 2}{t_{\frac{1}{2}}} \quad (7.16)$$

onde  $t_{\frac{1}{2}}$  representa a reação de meia-vida. Deve-se salientar que o processo de biodegradação de moléculas orgânicas dissolvidas na água subterrânea é de grande interesse já que grande parte da contaminação dos aquíferos é causada por produtos químicos orgânicos, inclusive os hidrocarbonetos, que formam um substrato para o crescimento microbiológico [14].

### 7.2.2 Discretização de Elementos Finitos para o Transporte de Substâncias Reativas

Com a inclusão dos efeitos reativos à equação de transporte, tem-se uma nova formulação fraca aproximada em substituição a (2.35),

$$B(w_h, c_h) + \sum_{e=1}^{nel} \int_{\Omega} \tau \mathbf{v}_h \cdot \nabla w_h (L(c_h) - \frac{1}{R_f} c_h^* f) d\Omega + \quad (7.17)$$

$$+ \sum_{e=1}^{nel} \int_{\Omega} \tau_c \nabla w_h \cdot \bar{\mathbf{v}}_h \cdot \nabla c_h d\Omega = L(w_h)$$

onde,

$$\begin{aligned} B(w_h, c_h) &= \int_{\Omega} w_h L(c_h) d\Omega \\ L(w_h) &= \int_{\Omega} \frac{1}{R_f} w_h c_h^* f d\Omega \\ L(c_h) &= \varphi \frac{\partial c_h}{\partial t} - \frac{1}{R_f} \text{div}(\varphi \mathcal{D} \nabla c_h) + \frac{1}{R_f} \text{div}(\varphi \mathbf{v}_h c_h) + \frac{1}{R_f} \varphi \lambda c_h \end{aligned} \quad (7.18)$$

Da mesma forma como descrito no capítulo 2, chega-se à formulação de elementos finitos na forma matricial (2.45), onde a matriz dos coeficientes é agora formada por,

$$\mathbf{K} = \mathbf{K}_a + \mathbf{K}_d + \mathbf{K}_{pg} + \mathbf{K}_{cd} + \mathbf{K}_{dr} + \mathbf{K}_{drpg} \quad (7.19)$$

que se diferencia de (2.46) pela inclusão dos termos,

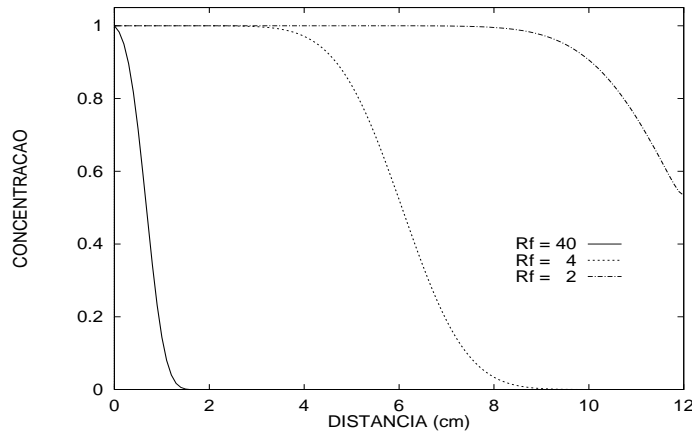
$$\begin{aligned} K_{dr_{ij}}^e &= \int_{\Omega^e} \lambda \varphi N_i \cdot N_j d\Omega \quad i, j = 1, \dots, 4 \\ K_{drpg_{ij}}^e &= \int_{\Omega^e} \lambda \tau \varphi \nabla N_i \cdot \mathbf{v} N_j d\Omega \end{aligned} \quad (7.20)$$

correspondentes a inclusão do efeito do decaimento radioativo (de índice  $dr$ ). Nota-se que estes termos são iguais aos encontrados para as matrizes de massa consistente e de Petrov-Galerkin (2.47), multiplicados pela taxa de decaimento  $\lambda$ . Assim, receberão o mesmo tratamento dado à matriz de massa consistente, calculada explicitamente, e à matriz de massa de Petrov-Galerkin, onde é feita a integração reduzida estabilizada.

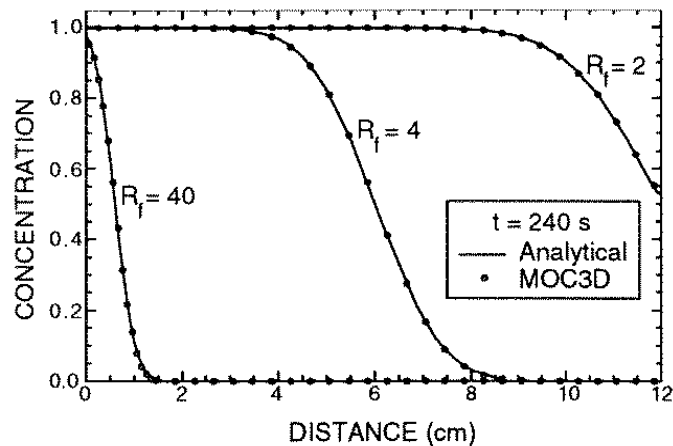
### 7.2.3 Escoamento Unidimensional com Substância Reativa

Para ilustrar o efeito da incorporação do fator de retardo representando um processo de sorção linear irreversível, o exemplo 7.1.1 (escoamento unidimensional) é novamente testado, desta vez com  $t = 240$  s. Três diferentes curvas são plotadas na Figura 7.5, correspondentes a três valores para o fator de retardo

( $R_f = 2, R_f = 4, R_f = 40$ ). Estes resultados são comparados aos apresentados na referência [16] para o programa MOC3D e a solução analítica. Verifica-se a concordância entre os mesmos. Vale ressaltar que por efeito do fator de retardo, as curvas apresentadas na Figura 7.5 para  $t = 240 s$  são idênticas aquelas encontradas na Figura 5.12 para tempos menores e  $R_f = 1$ .



(2) Integração Reduzida Estabilizada

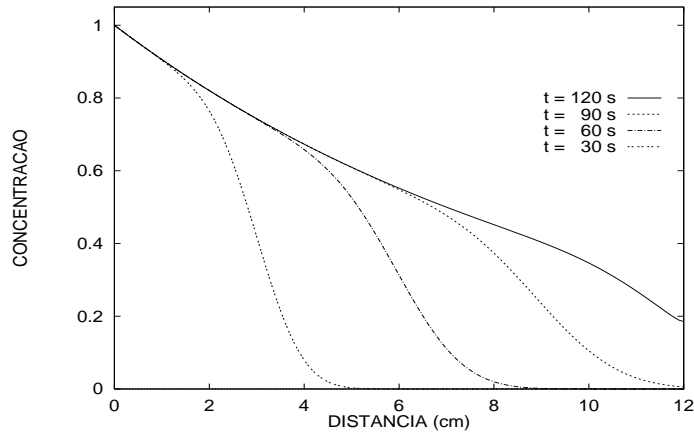


(b) MOC3D [16] e Solução Analítica

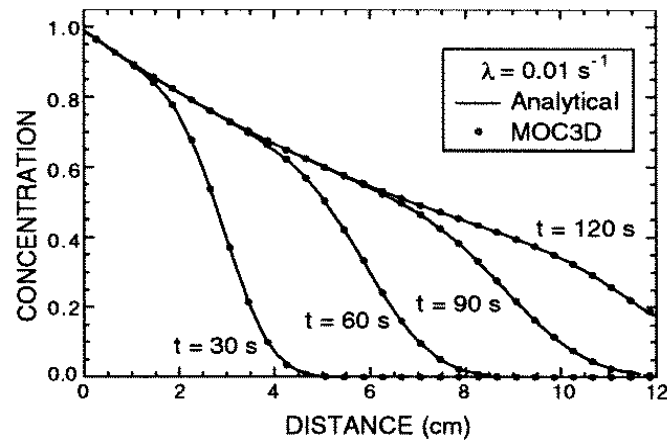
**Figura 7.5:** Transporte com Diferentes Valores de Fator de Retardo para o Problema de Escoamento Unidimensional com Substância Reativa.

O efeito do decaimento pode ser verificado, quando para o mesmo exemplo toma-se a taxa de decaimento  $\lambda = 0.01 s^{-1}$  (sem o efeito da sorção). A Figura 7.6 mostra a comparação entre os resultados da literatura e solução analítica [16] com os obtidos pelo método dos elementos finitos com integração reduzida estabilizada, em 4 diferentes instantes da análise ( $t = 30 s, t = 60 s, t = 90 s$  e  $t = 120 s$ ).

Verifica-se novamente a concordância entre os mesmos.



(a) Integração Reduzida Estabilizada



(b) MOC3D [16] e Solução Analítica

**Figura 7.6:** Transporte com Decaimento Radioativo para o Problema de Escoamento Unidimensional com Substância Reativa.

Vale acrescentar que uma descrição realística do transporte com várias reações químicas requer a consideração de componentes múltiplas no sistema. Se considerarmos que a interação entre componentes pode ser descrita como um equilíbrio químico deduzido de considerações termodinâmicas, desenvolve-se um sistema de equações diferenciais parciais (1 para cada componente). Surgem também equações diferenciais adicionais oriundas das relações de equilíbrio, de forma que este processo resulta em um conjunto acoplado de equações governantes para o transporte advectivo-difusivo-reativo. A modelagem deste problema é complexa. Uma alternativa é resolver-se separadamente as equações de transporte e de reações químicas,

de modo sequencial [25, 62, 63].

# Capítulo 8

## Conclusões

Este trabalho apresentou algumas técnicas que visam diminuir o custo computacional da avaliação das integrais provenientes da formulação de elementos finitos em diversos problemas não-lineares de transporte em meios porosos. Utilizou-se o elemento quadrilátero bilinear subintegrado, ou seja, com 1 ponto de quadratura, juntamente com uma técnica de estabilização capaz de evitar a formação de modos espúrios. Esta técnica foi então utilizada na determinação das matrizes dos coeficientes para os sistemas de equações envolvidos, que correspondem às equações de pressão e de transporte.

Foi visto através de experimentos de validação que a estratégia escolhida levou a resultados corretos, com boa convergência, e com grande economia, tanto para o campo de pressões quanto para o de concentrações. Foi utilizada com sucesso a avaliação direta do campo de velocidades a partir do gradiente de pressões no ponto de superconvergência.

Foram testados algumas variações de exemplos clássicos de recuperação terciária e injeção de traçadores, e ainda, a contaminação reativa e não-reativa em águas subterrâneas. Todos os exemplos foram comparados com resultados encontrados

na literatura. Da observação dos resultados pode-se concluir que a técnica de estabilização levou a bons resultados, precisos e comparáveis aos encontrados nas referências. O ganho computacional com a utilização desta metodologia foi bastante significativo quando comparado a integração Gaussiana tradicional, chegando em alguns casos a 25% desta última. Além disso, observou-se que a mudança de estratégia de integração não afetou o desempenho dos solucionadores.

Em vista dos resultados obtidos, acredita-se que a integração reduzida estabilizada poderá vir a ser uma opção muito interessante não só na simulação de problemas miscíveis, como naturalmente, em problemas bifásicos, e outras aplicações onde o custo da avaliação das matrizes pode ser significativo. Pretende-se a extensão da metodologia à problemas tridimensionais.

Outra consequência natural e imediata deste trabalho é o estudo e implementação de técnicas de recuperação da convergência do campo de velocidades, associadas à integração reduzida estabilizada, o que permitirá o uso desta metodologia em malhas com grandes distorções sem perda de precisão e convergência, e com grande economia computacional. Encontra-se nos Apêndices um estudo sobre a possibilidade de utilização da integração reduzida estabilizada junto à duas técnicas de pós-processamento para recuperação da ordem de convergência do campo de velocidades.

# Apêndices

## A.1 Técnica de Pós-processamento Local para Velocidades

A técnica de Pós-processamento local para cálculo do campo de velocidades [50] utiliza o resíduo de mínimos quadrados da equação de balanço de massa, uma condição de rotacional nulo, e a lei de Darcy avaliada nos pontos de superconvergência para os gradientes. Esta técnica leva a um problema local, a nível de macroelementos, ou conjuntos de elementos adjacentes. Assim, tem-se o seguinte problema,

Dado  $p_h$ , encontre  $\hat{\mathbf{v}}_h \in \mathcal{U}_h^k \in (\mathcal{Q}_h^k)$ , tal que,

$$\begin{aligned} (\Lambda^{-1} \hat{\mathbf{v}}, \mathbf{w}_h)_G + \delta_1 h^2 (\operatorname{div} \hat{\mathbf{v}}, \operatorname{div} \mathbf{w}_h)_H + \quad \forall \mathbf{w}_h \in \mathcal{U}_h^k \quad (\text{A.1}) \\ + \delta_2 h^2 (\operatorname{rot} (\Lambda^{-1} \hat{\mathbf{v}}, \operatorname{rot} (\Lambda^{-1} \mathbf{w}_h))_H = (\nabla p_h \mathbf{w}_h)_G - \delta_1 h^2 (f, \operatorname{div} \mathbf{w}_h)_H \end{aligned}$$

onde,  $\Lambda = \frac{k}{\mu \varphi}$ , e  $\mathcal{Q}_h^k$  é o subspaço de elementos finitos Lagrangeanos de  $\mathcal{L}_2(\Omega)$  de polinômios de grau  $k$  em cada elemento de classe  $\mathcal{C}^0$  em cada macroelemento e descontínuo nos contornos dos macroelementos. Na equação acima,

$$\begin{aligned} (f_h, g_h)_H &= \sum_{e=1}^{nel} \int_{\Omega^e} f_h^e g_h^e d\Omega \quad (\text{A.2}) \\ (f_h, g_h)_G &= \sum_{e=1}^{nel} \sum_{i=1}^{nint} \omega_i^e f_h^e(\mathbf{x}_i^e) g_h^e(\mathbf{x}_i^e) \end{aligned}$$

Estas equações descrevem o produto interno a nível de elemento ( $H$ ), e o produto interno calculado no ponto de superconvergência ( $G$ ), de coordenadas  $\mathbf{x}_i^e$ . Em (A.2)

$\omega_i^e$  representam os pesos associados ao ponto de superconvergência. Além disso,  $\delta_i$  são constantes positivas fixadas posteriormente.

Para malhas e soluções regulares, obtem-se a estimativa [50],

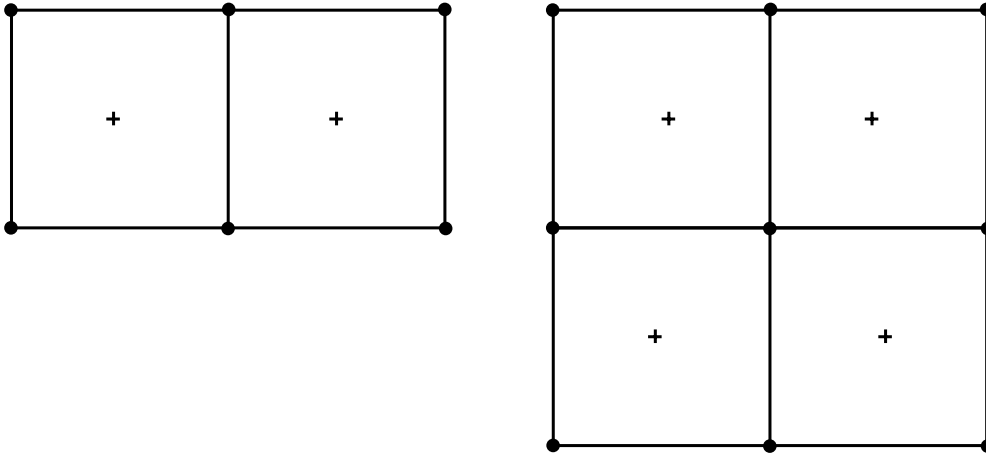
$$|\nabla p - \nabla p_h|_G \leq C h^{k+1} |p|_{k+2} \quad (\text{A.3})$$

onde,  $|\nabla p_h|_G^2 = (\nabla p_h, \nabla p_h)_G$ . E ainda a seguinte estimativa para as velocidades,

$$\|\mathbf{v} - \mathbf{v}_h\| \leq C h^{k+1} |\mathbf{v}|_{k+1} \quad (\text{A.4})$$

com a qual se obtem taxas de convergência ótimas para as velocidades.

Esta técnica é conhecida como pós-processamento local já que as definições são a nível de elemento ou de macroelementos construídos a partir de elementos adjacentes. Neste caso, a estabilidade e convergência da técnica dependerão da escolha do espaço de elementos finitos e da escolha dos macroelementos. Sabe-se que a técnica é estável sempre que  $k > 1$ , e que quando  $k = 1$  os macroelementos deverão conter ao menos 2 elementos adjacentes (ver Figura A.1).



**Figura A.1:** Macroelementos Estáveis em Duas Dimensões com 12 e 18 Graus de Liberdade [30]

O custo computacional da técnica de pós-processamento é fortemente influenciado pela necessidade de se resolver um sistema de equações bloco-diagonal proveniente da equação (A.1) formado pelos grupos de macroelementos. Em relação ao cálculo do campo de velocidades diretamente da Lei de Darcy (seção 4.3) este custo

é significativo. Sendo assim, se propõe a utilização da estratégia de integração reduzida estabilizada na obtenção dos termos da matriz dos coeficientes do sistema.

Assim, da equação (A.1) temos o seguinte sistema de equações diferenciais em forma matricial,

$$\mathbf{V}_l \hat{\mathbf{v}} = \mathbf{f}_l \quad (\text{A.5})$$

onde  $\mathbf{V}_l$  é a matriz dos coeficientes do sistema, composta pelas parcelas com divergente, rotacional e a parcela avaliada no ponto de superconvergência, de índices *div*, *rot* e *G*, respectivamente,  $\mathbf{f}_l$  é o vetor de cargas e  $\hat{\mathbf{v}} = \{\hat{v}_{x_1}, \hat{v}_{y_1}, \dots, \hat{v}_{y_4}\}$  é o vetor das velocidades pós-processadas. Assim, tem-se,

$$\mathbf{V}_l = \sum_{e=1}^{nel} \mathbf{V}_l^e \quad \mathbf{f}_l = \sum_{e=1}^{nel} \mathbf{f}_l^e \quad (\text{A.6})$$

onde,

$$\mathbf{V}_l^e = \mathbf{V}_{div}^e + \mathbf{V}_{rot}^e + \mathbf{V}_G^e \quad (\text{A.7})$$

$$\mathbf{f}_l^e = \mathbf{f}_{div}^e + \mathbf{f}_G^e \quad (\text{A.8})$$

onde,

$$\mathbf{V}_{div}^e = \delta_1 h^2 \int_{\Omega^e} \mathbf{D}^T \mathbf{D} d\Omega \quad (\text{A.9})$$

$$\mathbf{V}_{rot}^e = \delta_2 h^2 \int_{\Omega^e} (\Lambda^{-1})^2 A \mathbf{R}^T \mathbf{R} d\Omega \quad (\text{A.10})$$

$$\mathbf{V}_G^e = \sum_{e=1}^{nel} \Lambda^{-1} \mathbf{N}_{(IR)} \mathbf{N}_{(IR)} \quad (\text{A.11})$$

para,

$$\mathbf{D} = \left\{ \frac{\partial N_1}{\partial x} \quad \frac{\partial N_1}{\partial y} \quad \frac{\partial N_2}{\partial x} \quad \frac{\partial N_2}{\partial y} \quad \frac{\partial N_3}{\partial x} \quad \frac{\partial N_3}{\partial y} \quad \frac{\partial N_4}{\partial x} \quad \frac{\partial N_4}{\partial y} \right\} \quad (\text{A.12})$$

$$\mathbf{R} = \left\{ \frac{\partial N_1}{\partial y} \quad -\frac{\partial N_1}{\partial x} \quad \frac{\partial N_2}{\partial y} \quad -\frac{\partial N_2}{\partial x} \quad \frac{\partial N_3}{\partial y} \quad -\frac{\partial N_3}{\partial x} \quad \frac{\partial N_4}{\partial y} \quad -\frac{\partial N_4}{\partial x} \right\} \quad (\text{A.13})$$

$$\mathbf{N} = \begin{bmatrix} N_1 \mathbf{I} & N_2 \mathbf{I} & N_3 \mathbf{I} & N_4 \mathbf{I} \end{bmatrix} \quad (\text{A.14})$$

Utilizando-se a integração reduzida nas equações (A.9) e (A.10), vem,

$$\mathbf{V}_{div(IR)}^e = \delta_1 h^2 A \mathbf{d} \mathbf{d}^T \quad (\text{A.15})$$

$$\mathbf{V}_{rot(IR)}^e = \delta_2 h^2 (\Lambda^{-1})^2 A \mathbf{r} \mathbf{r}^T \quad (\text{A.16})$$

onde,

$$\mathbf{d}^T = \frac{1}{2A} \left\{ \begin{array}{cccccccc} y_{24} & x_{42} & y_{31} & x_{13} & y_{42} & x_{24} & y_{13} & x_{31} \end{array} \right\} \quad (\text{A.17})$$

$$\mathbf{r}^T = \frac{1}{2A} \left\{ \begin{array}{cccccccc} x_{42} & y_{42} & x_{13} & y_{13} & x_{24} & y_{24} & x_{31} & y_{31} \end{array} \right\} \quad (\text{A.18})$$

Os termos *div* e *rot* podem ser tratados como a soma de duas parcelas. Uma oriunda da integração reduzida, e outra que corresponde à estabilização. Para se obter a parcela de estabilização correspondente a cada termo, procede-se como no capítulo 3. Para o termo com divergente, um vetor  $\boldsymbol{\gamma}_d$  é então construído a partir da combinação linear dos vetores  $\mathbf{d}_i$ ,  $\mathbf{h}$ , e  $\mathbf{t}$ , da mesma maneira que na seção 3.3, já que neste caso continuam válidas as propriedades de ortogonalização (3.19) e (3.20). Assim este vetor será dado por,

$$\boldsymbol{\gamma}_d = \frac{1}{A} \left[ \mathbf{h} - (\mathbf{h}^T \mathbf{x}_i) \mathbf{d}_i \right] \quad (\text{A.19})$$

onde,

$$\mathbf{h}^T = \left\{ \begin{array}{cccccccc} 1 & -1 & 1 & -1 & 1 & -1 & 1 & -1 \end{array} \right\} \quad (\text{A.20})$$

$$\mathbf{x}_1^T = \left\{ \begin{array}{cccccccc} x_1 & 0 & x_2 & 0 & x_3 & 0 & x_4 & 0 \end{array} \right\} \quad (\text{A.21})$$

$$\mathbf{x}_2^T = \left\{ \begin{array}{cccccccc} 0 & y_1 & 0 & y_2 & 0 & y_3 & 0 & y_4 \end{array} \right\} \quad (\text{A.22})$$

$$\mathbf{d}_1^T = \frac{1}{2A} \left\{ \begin{array}{cccccccc} y_{24} & 0 & y_{31} & 0 & y_{42} & 0 & y_{13} & 0 \end{array} \right\} \quad (\text{A.23})$$

$$\mathbf{d}_2^T = \frac{1}{2A} \left\{ \begin{array}{cccccccc} 0 & x_{42} & 0 & x_{13} & 0 & x_{24} & 0 & x_{31} \end{array} \right\} \quad (\text{A.24})$$

$$\mathbf{d} = \mathbf{d}_1 + \mathbf{d}_2 \quad (\text{A.25})$$

O operador  $\mathbf{d}$  é modificado de forma a ter seu posto recuperado,

$$\tilde{\mathbf{d}} = \begin{bmatrix} \mathbf{d}_1 + \mathbf{d}_2 \\ \boldsymbol{\gamma}_d \end{bmatrix} \quad (\text{A.26})$$

e assim,

$$\mathbf{V}_{div(ESTAB)}^e = \delta_1 h^2 \boldsymbol{\gamma}_d \boldsymbol{\gamma}_d^T \int_{\Omega^e} \zeta_{,i} \zeta_{,i} d\Omega \quad i = 1, 2 \quad (\text{A.27})$$

Para a parcela do rotacional define-se,

$$\bar{\mathbf{x}}_1^T = \left\{ \begin{array}{cccccccc} y_1 & 0 & y_2 & 0 & y_3 & 0 & y_4 & 0 \end{array} \right\} \quad (\text{A.28})$$

$$\bar{\mathbf{x}}_2^T = \left\{ \begin{array}{cccccccc} 0 & x_1 & 0 & x_2 & 0 & x_3 & 0 & x_4 \end{array} \right\} \quad (\text{A.29})$$

$$\mathbf{r}_1^T = \frac{1}{2A} \left\{ \begin{array}{cccccccc} x_{42} & 0 & x_{13} & 0 & x_{24} & 0 & x_{31} & 0 \end{array} \right\} \quad (\text{A.30})$$

$$\mathbf{r}_2^T = \frac{1}{2A} \left\{ \begin{array}{cccccccc} 0 & y_{42} & 0 & y_{13} & 0 & y_{24} & 0 & y_{31} \end{array} \right\} \quad (\text{A.31})$$

$$\mathbf{r} = \mathbf{r}_1 + \mathbf{r}_2 \quad (\text{A.32})$$

De forma similar aos casos anteriores é possível calcular um vetor  $\boldsymbol{\gamma}_r$  a partir da biortogonalidade dos  $\mathbf{r}_i$  e do fato de que  $\mathbf{r}_i$ ,  $\mathbf{t}$  e  $\mathbf{h}$  serem linearmente independentes, de forma que temos,

$$\boldsymbol{\gamma}_r = \frac{1}{A} \left[ \mathbf{h} - (\mathbf{h}^T \bar{\mathbf{x}}_1) \mathbf{r}_1 + (\mathbf{h}^T \bar{\mathbf{x}}_2) \mathbf{r}_2 \right] \quad (\text{A.33})$$

e a parcela de estabilização é então dada por,

$$\mathbf{V}_{rot(ESTAB)}^e = \delta_2 h^2 (\Lambda^{-1})^2 \boldsymbol{\gamma}_r \boldsymbol{\gamma}_r^T \int_{\Omega^e} \zeta_{,i} \zeta_{,i} d\Omega \quad i = 1, 2 \quad (\text{A.34})$$

Da mesma forma que na obtenção das matrizes  $\mathbf{K}$  e  $\mathbf{S}$ , o cálculo da matriz  $\mathbf{V}_l$ , efetuado desta maneira deverá ser muito mais eficiente, obtendo-se uma grande economia de tempo de processamento.

Embora com a utilização da técnica de pós-processamento seja possível se obter uma melhor ordem de convergência para o campo de velocidades, o custo computacional da montagem e solução de mais um sistema de equações é significativo. Mesmo com a utilização da técnica de integração reduzida este custo deverá ser superior ao da avaliação da velocidade diretamente da lei de Darcy no ponto de superconvergência. Além disso, deve-se ressaltar que em malhas não-regulares, o centróide não é um ponto de superconvergência, logo não se poderá obter taxas ótimas em nenhum dos casos, uma vez que na obtenção dos termos de  $\mathbf{V}_l^e$  também se utiliza o ponto de superconvergência. Mesmo sem a garantia da taxa ótima, a implementação do cálculo do campo de velocidades descrita no capítulo 4 leva a bons resultados. A precisão, convergência e conservação de massa deste método foram avaliadas através dos experimentos numéricos dos capítulos anteriores. No entanto, quando se faz necessária a utilização de malhas não-uniformes pode-se obter taxas ótimas para o campo de velocidades utilizando-se por exemplo a técnica de pós-processamento global descrita a seguir, que não depende da existência de um ponto de superconvergência.

## A.2 Técnica de Pós-processamento Global para o Campo de Velocidades

A técnica de pós-processamento global que será tratada neste trabalho consiste na formulação variacional da lei de Darcy combinada com o resíduo da equação de balanço de massa [51, 52],

Dado  $p_h$ , encontre  $\hat{\mathbf{v}}_h \in \mathcal{U}_{0h}^{k+1}$ , tal que,

$$(\Lambda^{-1} \hat{\mathbf{v}}_h + \nabla p_h, \mathbf{w}_h) + \delta (\operatorname{div} \hat{\mathbf{v}}_h - f, \operatorname{div} \mathbf{w}_h) = 0 \quad \forall \mathbf{w}_h \in \mathcal{U}_{0h}^{k+1} \quad (\text{A.35})$$

onde  $\mathcal{U}_{0h}^{k+1} = \{\mathbf{w}_h \in \mathcal{U}_h; \mathbf{w}_h \cdot \mathbf{n} = 0 \text{ em } \partial\Omega\}$ , e  $\delta$  é uma constante positiva.

Aplicando-se a fórmula de Green obtem-se a equação,

$$\mathcal{A}_\delta(\hat{\mathbf{v}}_h, \mathbf{w}_h) = (\Lambda^{-1} \hat{\mathbf{v}}_h, \mathbf{w}_h) + \delta (\operatorname{div} \hat{\mathbf{v}}_h, \operatorname{div} \mathbf{w}_h) \quad (\text{A.36})$$

onde,

$$\mathcal{A}_\delta(\hat{\mathbf{v}}_h, \mathbf{w}_h) = (p_h, \operatorname{div} \mathbf{w}_h) + \delta (f, \operatorname{div} \mathbf{w}_h) \quad \forall \mathbf{w}_h \in \mathcal{U}_{0h}^{k+1} \quad (\text{A.37})$$

Uma vez que  $\Lambda$  é estritamente positiva e  $\Lambda^{-1}$  bem definida, e que a forma bilinear  $\mathcal{A}_\delta(\cdot, \cdot)$  é simétrica positiva-definida, para  $\delta$  fixa e positiva, o problema (A.36) tem solução única, e tem como estimativa [50],

$$\|\|\mathbf{v} - \hat{\mathbf{v}}\|\|_\delta \leq \|\|\mathbf{v} - \mathbf{w}_h\|\|_\delta + C (\delta^{-\frac{1}{2}} \|p - p_h\| + \|c - c_h\|) \quad (\text{A.38})$$

onde,

$$\|\|\mathbf{v}\|\|_\delta = \mathcal{A}_\delta(\mathbf{v}, \mathbf{v})^{\frac{1}{2}} \quad (\text{A.39})$$

para  $\mathcal{U}_h^{k+1} \in (\mathcal{H}^1(\Omega))^d \subset \mathcal{H}(\operatorname{div})$ , onde  $\mathcal{U}_h^{k+1} = (\mathcal{S}_h^{k+1})^d$  com  $\mathcal{S}_h^{k+1} \subset \mathcal{C}^0(\Omega)$ . Para  $\delta = O(1)$  tem-se a seguinte taxa de convergência para  $\hat{\mathbf{v}}$ ,

$$\|\|\mathbf{v} - \hat{\mathbf{v}}\|\| \leq C (h^{k+1} |\mathbf{v}|_{k+1} + \|c - c_h\|) \quad (\text{A.40})$$

$$\|\|\operatorname{div} \mathbf{v} - \operatorname{div} \hat{\mathbf{v}}\|\| \leq C (h^{k+1} |\mathbf{v}|_{k+1} + \|c - c_h\|) \quad (\text{A.41})$$

onde se tem a mesma ordem de convergência obtida para o campo de pressões, porém com uma ordem de interpolação mais alta para as velocidades ( $k + 1$ ).

**Observação:**

É possível se obter diferentes taxas para diferentes escolhas de  $\delta$  e da ordem de interpolação [52].

O custo computacional da técnica de pós-processamento global é superior aos das técnicas anteriores uma vez que neste caso se faz necessária a montagem e a solução de um sistema global com o dobro de equações em relação aos sistemas principais (pressão e transporte). Para diminuir este custo, sugere-se a utilização da integração reduzida estabilizada na obtenção dos coeficientes da matriz global. Proceda-se como na seção anterior para o seguinte sistema de equações,

$$\mathbf{V}_g \hat{\mathbf{v}} = \mathbf{f}_g \quad (\text{A.42})$$

onde  $\mathbf{V}_g$  é a matriz dos coeficientes do sistema global, dadas por,

$$\mathbf{V}_g = \sum_{e=1}^{nel} \mathbf{V}_g^e \quad \mathbf{f}_g = \sum_{e=1}^{nel} \mathbf{f}_g^e \quad (\text{A.43})$$

onde,

$$\mathbf{V}_g^e = \mathbf{V}_{div}^e + \mathbf{V}_v^e \quad (\text{A.44})$$

$$\mathbf{f}_g^e = \mathbf{f}_{div}^e + \mathbf{f}_p^e \quad (\text{A.45})$$

onde,

$$\mathbf{V}_{div}^e = \delta \int_{\Omega^e} \mathbf{D}^T \mathbf{D} \, d\Omega \quad (\text{A.46})$$

$$\mathbf{V}_v^e = \int_{\Omega^e} \Lambda^{-1} \mathbf{N}^T \mathbf{N} \, d\Omega \quad (\text{A.47})$$

Tratando-se o termo (A.46) como a soma das parcelas correspondentes à integração reduzida e à estabilização, tem-se,

$$\mathbf{V}_{div(IR)}^e = \delta A \mathbf{d} \mathbf{d}^T \quad (\text{A.48})$$

$$\mathbf{V}_{div(ESTAB)}^e = \delta \boldsymbol{\gamma}_d \boldsymbol{\gamma}_d^T \int_{\Omega^e} \zeta_{,i} \zeta_{,i} d\Omega \quad i = 1, 2 \quad (\text{A.49})$$

Já para o termo (A.47) procede-se como a matriz de massa  $\mathbf{M}_c^e$  (2.49) obtida explicitamente. Assim temos,

$$\mathbf{V}_v^e = \frac{\Lambda^{-1}}{144} \begin{bmatrix} [4(r_1 + r_A)] \mathbf{I} & [2(r_1 + r_B)] \mathbf{I} & [r_1] \mathbf{I} & [2r_1 + r_C] \mathbf{I} \\ & [4(r_1 + r_D)] \mathbf{I} & [2r_1 - r_C] \mathbf{I} & [r_1] \mathbf{I} \\ & & [4(r_1 + r_E)] \mathbf{I} & [2r_1 - r_B] \mathbf{I} \\ \text{sim} & & & [4(r_1 - r_D)] \mathbf{I} \end{bmatrix} \quad (\text{A.50})$$

onde,  $r_1$ ,  $r_A$ ,  $r_B$ ,  $r_C$ ,  $r_D$  e  $r_E$  são dadas por (2.50).

Desta maneira, assegura-se a boa convergência do campo de velocidades, mas cria-se uma nova dificuldade computacional com o surgimento de um novo sistema de equações que embora com a utilização da integração reduzida deve ainda levar a um aumento do tempo de processamento em comparação ao tempo utilizado pela avaliação direta do campo de velocidades. Os estudos de Loula et al. [30] sugerem que o custo da avaliação deste problema é baixo, sendo portanto uma alternativa interessante principalmente quando se necessita de malhas não uniformes onde não se conhece o ponto de superconvergência.

Podemos comparar as técnicas apresentadas acima do ponto de vista do número de avaliações de matrizes necessárias a cada uma das técnicas. Em primeiro lugar, quando se avalia as velocidades diretamente do gradiente de pressões, obviamente não há nenhum sistema de equações a ser resolvido, conseqüentemente esta é a opção mais econômica possível. Uma vez feita a opção pela técnica de pós-processamento local, surge então a necessidade de se resolver o sistema (A.5) onde a matriz  $\mathbf{V}_i^e$  deverá ser computada pela soma das 3 parcelas em (A.9) a (A.11), onde as 2 primeiras tradicionalmente são avaliadas nos 4 pontos de integração de Gauss, o que totaliza 9 avaliações de matrizes. Com a utilização da técnica de integração reduzida estas mesmas matrizes são avaliadas uma única vez (1 ponto de quadratura) porém a estas são acrescentadas as respectivas parcelas de estabilização (A.27) e (A.34), totalizando 5

avaliações de matrizes, conseguindo-se desta forma uma economia de cerca de 45% com a utilização da integração reduzida estabilizada. O mesmo raciocínio pode ser feito para a técnica de pós-processamento global onde o sistema (A.42) deverá ser resolvido para a matriz de coeficientes  $\mathbf{V}_g^e$  dada em (A.43) composta de 2 parcelas que geralmente são avaliadas nos 4 pontos de quadratura de Gauss, somando assim 8 avaliações de matrizes. Com a proposta de utilização da técnica de integração reduzida estabilizada, são necessárias apenas 3 avaliações, sendo uma delas analítica (A.50). Com isso, é possível obter-se uma economia de 63% no número de avaliações de matrizes. Da mesma forma que no caso do sistema advectivo-difusivo tratado no capítulo 3, estes ganhos podem ainda ser maiores já que os coeficientes das matrizes são conhecidos explicitamente.

# Referências Bibliográficas

- [1] Oden, J. T., Belytschko, T., Babuska, I., Hughes, T. J. R., *Research Directions in Computational Mechanics*, United States National Committee on Theoretical and Applied Mechanics Report, September 2000.
- [2] Ewing, R. E., “ Problems Arising in the Modeling of Process for Hydrocarbon Recovery”, In: Ewing, R. E. (ed), *Mathematics of Reservoir Simulation*, 1 ed., chapter 1, Philadelphia, USA, SIAM, 1983.
- [3] Watts, J. W., *Reservoir Simulation: Past, Present and Future*, Society of Petroleum Engineering Report, n. 38441, pp. 333-341, 1997.
- [4] Thakur, G. C., *What is Reservoir Management ?*, Society of Petroleum Engineering Report, n. 26289, pp. 520-525, 1996.
- [5] Peaceman, D. W., “ Survey of Problems in Numerical Reservoir Simulation”. In: Fitzgibbon, W. E. (ed), *Mathematical and Computational Methods in Seismic Exploration and Reservoir Modeling*, 1 ed., chapter 6, Philadelphia, USA, SIAM, 1986.
- [6] Russel, T. F., Wheeler, M. F., “ Finite Element and Finite Difference Methods for Continuous Flow in Porous Media ”. In: Ewing, R. E. (ed), *Mathematics of Reservoir Simulation*, 1 ed., chapter 2, Philadelphia, USA, SIAM, 1983.
- [7] Raviart, P. A., Thomas, J. M., “A Mixed Finite Element Method for Se-

- cond Order Elliptic Problems', *Lectures Notes in Mathematics*, pp. 292-315, Berlin, Springer-Verlag, 1975.
- [8] Yeh, G. T., "On the Computation of Darcian Velocity and Mass Balance in Finite Elements Modeling of Groundwater Flow", *Water Resources Reserch*, v. 17, n. 5, pp. 1529-1534, 1981.
- [9] Chavent, G., Jaffré, J, *Mathematical Models and Finite Element for Reservoir Simulation*, North-Holland, Amsterdam, 1986.
- [10] Durlofsky, L. J., "Accuracy of Mixed and Control Volume Finite Element Approximations to Darcy Velocity and Related Quantities", *Water Resources Reserch*, v. 30, n.4, pp. 965-973, 1997.
- [11] Wang, H., Liang, D., Ewing, R. E., Lyons, S. L., Qin, G., " An Approximation to Miscible Fluid Flow in Porous Media with Point Sources and Sinks by an Eulerian-Lagrangian Localized Adjoint Method and Mixed Finite Element Methods", *SIAM Journal of Scientific Computing*, v. 22, n. 2, pp. 561-581, 2000.
- [12] Douglas Jr., J., Frías, D., Henderson, N., Pereira, F., " Simulation of Single-Phase Multicomponent Flow Problems in Gas Reservoirs by Eulerian-Lagrangian Techniques", *Transport in Porous Media*, to appear, 2001.
- [13] Biswas, D., Carey, G. F., " A Least-Squares Mixed Scheme for the Simulation of Two-phase Flow in Porous Media on Unstructured Grids", *Transport in Porous Media*, v. 32, n.1, pp. 75-95, 1998.
- [14] Manoel Filho, J., "Contaminação de Águas Subterrâneas", In: Feitosa, F. A. C., Manoel Filho, J. (eds), *Hidrogeologia - Conceitos e Aplicações*. CPRM - Serviço Geológico do Brasil, Fortaleza, 1997.
- [15] Wang, H. F., Anderson, M. P., *Introdution to Groundwater Modeling*, Academic Press, 1982.

- [16] Konikow, L. F., Goode, D. J., *A Three-Dimensional Method-of-Characteristics Solute-Transport Model (MOC3D)*. In: Water-Resources Investigations Report 96-4267, U.S. Geological Survey, Virginia, 1996.
- [17] Hayes, L. J., “Practical Stability Test for Finite Elements with Reduced Integration”, *International Journal for Numerical Methods in Engineering* v. 17, pp. 1689-1695, 1981.
- [18] Belytschko, T., Ong, J. S. J., Liu, W. K., Kennedy, J. M. “Houglass Control in Linear and Nonlinear Problems”, *Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering* v. 43, pp. 251-276, 1984.
- [19] Mallet, M., Poirier, C., Shakib, F. “A New Finite Element Formulation for Computational Fluid Dynamics : Development of an Houglass Control Operator for Multidimensional Advective-diffusive Systems”, *Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering* v. 94, pp. 429-442, 1992.
- [20] Dias, C. M., Coutinho, A. L. G. A. “Integração Reduzida para Problemas Advectivos-difusivos Escalares Discretizados pela Formulação SUPG com Operador de Captura de Descontinuidades”, *Revista Internacional de Métodos Numéricos para Cálculo y Diseño en Ingeniería* v. 14, n. 2, pp. 145-166, 1998.
- [21] Malta, S. M. C., Loula, A. F. D., Garcia, E. L. M. “A Post-processing Technique to Approximate the Velocity Field in Miscible Displacement Simulations”, *Contemporary Mathematics* v. 8, pp. 239-268, 1995.
- [22] Spatz, W. F., Carey, G. F., “High-order Compact Scheme for the Steady Stream-function Vorticity Equations”, *International Journal for Numerical Methods in Engineering*, v. 38, pp. 3497-3512, 1995.
- [23] Sun, N. Z., *Mathematical Modeling of Groundwater Pollution*. 1 ed, New York, Springer-Verlag, 1996.
- [24] Marsily, G., *Quantative Hydrogeology*. 1 ed, California, Academic Press, 1986.

- [25] Zheng, C., Benett, G. D., *Applied Contaminant Transport Modeling*. 1 ed., New York, Van Nostrand Reinhold, 1995.
- [26] Ainsworth, M., Oden, J. T., “ A Posteriori Error Estimation in Finite Element Analysis”, *Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering* v. 142, pp. 1-88, 1997.
- [27] Hughes, T. J. R., *The Finite Element Method*. 2 ed, New Jersey, Prentice-Hall International Inc., 1987.
- [28] Brooks, A. N., Hughes, T. J. R. “ Streamline Upwind Petrov-Galerkin Formulation for Convection Dominated Flows with Particular Emphasis on the Incompressible Navier-Stokes Equation ”, *Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering* v. 32, pp. 199-259, 1982.
- [29] Codina, R. “ A Discontinuity-Capturing Crosswind-Dissipation for the Finite Element Solution of the Convection-Diffusion Equation ”, *Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering* v. 110, pp. 325-342, 1993.
- [30] Loula, A. F. D., Garcia, E. L. M., Coutinho, A. L. G. A. “ Miscible Displacement Simulation by Finite Element Methods in Distributed Memory Machines ”, *Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering* v. 174, pp. 339-354, 1999.
- [31] Codina, R., Oñate, E., Cervera, M. “ The Intrinsic Time for the Streamline Upwind/Petrov-Galerkin Formulation Using Quadratic Elements ”, *Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering* v. 94, pp. 239-262, 1992.
- [32] Coutinho, A. L. G. A., Alves, J. L. D. “ Parallel Finite Element Simulation of Miscible Displacement in Porous Media ”, *Society of Petroleum Engineering Journal* v. 1, n. 4, pp. 487-500, 1996.
- [33] Galeão, A. C., Carmo, E. G. D. “ A Consistent Approximate Upwind Petrov-

- Galerkin Method for Convection-Dominated Problems ”, *Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering* v. 68, pp. 83-95, 1988.
- [34] Cook, R. D., Malkus, D. S., Plesha, M. E., *Concepts and Applications of Finite Element Analysis*. 3 ed, John Wiley & Sons Inc., 1989.
- [35] Coutinho, A. L. G. A., Alves, J. L. D. “ Finite Element Simulation of Non-linear Viscous Fingering in Miscible Displacements with Anisotropic Dispersion and Nonmonotonic Viscosity Profiles”. *Computational Mechanics*. v. 23, n. 2, pp. 108-116, 1999.
- [36] Saad, Y., Schultz, M. H., “ GMRES: Generalized Minimal Residual Algorithm for Solving Non-Symmetric Systems”. *SIAM Journal of Scientific and Statistical Computing*, v. 7, pp. 856-869, 1996.
- [37] IBM Corp., *XL Fortran for AIX - Language Reference*, v. 5.1, 1 ed, 1997.
- [38] Shakib, F., Hughes, T. J. R., Johan, Z. “A Multi-element Group Preconditioned GMRES Algorithm for Nonsymmetric Systems Arising in Finite Element Analysis”. *Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering* v. 75, pp. 415-456, 1989.
- [39] Winget,, J. M., Hughes, T. J. R., “Solution Algorithms for Nonlinear Transient Heat Conduction Analysis Employing Element-by-Element Iterative Strategies”, *Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering* v. 52, pp. 711-815, 1985.
- [40] Belytschko, T., Liu, W. K., Moran, B., *Nonlinear Finite Element for Continua and Structures*. 1 ed, UK, John Wiley & Sons, 2000.
- [41] Liu, W. K., Belytsckho, T. “ Efficient Linear and Nonlinear Heat Conduction with a Quadrilateral Element ”, *International Journal for Numerical Methods in Engineering* v. 20, pp. 931-948, 1984.

- [42] Hansbo, P. “ A New Approach to Quadrature for Finite Elements Incorporating Houghlass Control as a Special Case ”, *Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering* v. 158, n. 3-4, pp. 301-309, 1998.
- [43] Zienkiewicz, O. C., Morgan, K., *Finite Elements and Approximation*, 1 ed., UK, John Wiley & Sons, 1983.
- [44] Irons, B.M., Razzaque, A., “Experience with the Patch Test for Convergence of Finite Elements ”. In Aziz, A. K. (ed), *The Mathematical Foundations of the Finite Element Method with Applications to Partial Differential Equations*, 1 ed., New York, Academic-Press, 1972.
- [45] Carey, G. F., *Computational Grids. Generation, Adaptation and Solution Strategies*. 1 ed., Washington, Taylor & Francis, 1997.
- [46] Wahlbin, L. B. *Superconvergence in Galerkin Finite Element Methods*, Lecture Notes in Mathematics. 1 ed.,Berlin, Springer-Verlag, 1995.
- [47] Zlámal, M., “ Superconvergence and Reduced Integration in the Finite Element Method ”, *Mathematics of Computation*, v. 32, n. 143, pp. 663-685, 1978.
- [48] Lesaint, P., Zlámal, M., “ Superconvergence of the Gradient of Finite Element Solutions ”, *Revue Française D’Automatique D’Informatique et de Recherche Opérationnelle - Analyse Numerique*, v. 13, n.2, pp. 139-166, 1979.
- [49] Mackinnon, R. J., Carey, G. F., “ Superconvergent Derivatives: a Taylor Series Analysis ”. *International Journal for Numerical Methods in Engineering*, v. 28, pp. 489-509, 1989.
- [50] Loula, A. F. D., Rochinha, F. A., Murad, M. A., “Higher Order Gradient Post-processing for Second Order Elliptic Problems ”. *Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering*, v. 128, pp. 361-381, 1995.
- [51] Toledo, E. M., *Novos Métodos de Elementos Finitos com Pós-processamento*. Tese de D. Sc., COPPE/UFRJ, Rio de Janeiro, RJ, Brasil, 1990.

- [52] Malta, S. M. C., Loula, A. F. D., “Numerical Analysis of Finite Element Methods for Miscible Displacement in Porous Media”, *Numerical Methods in Partial Differential Equations*, n.14, pp. 519-548, 1998.
- [53] Mosé, R., Siegel, P., Ackerer, P., Chavent, G., “ Application of the Mixed Hybrid Finite Element Approximation in a Groundwater Flow Model: Luxury or Necessity ?”, *Water Resources Research*, n. 30, v. 11, pp. 3001-3012, 1994.
- [54] Garcia, E. L. M., *Formulação de Elementos Finitos Bi e Tridimensionais para Simulação em Paralelo de Escoamentos em Reservatórios de Petróleo*. Tese de D. Sc., COPPE/UFRJ, Rio de Janeiro, RJ, Brasil, 1997.
- [55] Hughes, T. J. R., Engel, G., Mazzei, L., Larson, M. G., “The Continuous Galerkin Methods is Locally Conservative”, *Journal of Computational Physics*, v. 163, pp. 467-488, 2000.
- [56] Douglas Jr, J., Wheeler, M. F., Darlow, B. L., Kendall, R. P. “Self-Adaptive Finite Element Simulation of Miscible Displacement in Porous Media”, *Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering* v. 47, pp. 131-159, 1984.
- [57] Coutinho, A. L. G. A., Alves, J. L. D., “Parallel Finite Element Simulation of Tracer Injection in Oil Reservoirs”. In: *Anais do VII Simpósio Brasileiro de Arquitetura de Computadores - Processamento de Alto Desempenho*, pp. 199-211, Canela, RS, 1995.
- [58] Sanabria Castro, R. G. *Análise Numérica de Formulações de Elementos Finitos Espaço-tempo para Escoamentos Miscíveis*. Tese de D. Sc., COPPE/UFRJ, Rio de Janeiro, RJ, Brasil, 1999.
- [59] Sanabria Castro, R. G., Malta, S. M. C., Loula, A. F. D., Landau, L., “Numerical Analysis of Space-Time Finite Element Formulations for Miscible Displacements”, *Computational Geosciences*, v.5, n.4, 2001.

- [60] Abbaszadeh-Dehghani, M., Brigham, W. E., *Analysis of Unit Mobility Well-to-well Tracer Flow to Determine Reservoir Heterogeneity*. Technical Report Stanford University, December, 1982.
- [61] Wexler, E. J., *Analytical Solutions for One-, two-, and three-dimensional Solute Transport in Ground-water Systems with Uniform Flow*. In: U. S. Geological Survey Techniques of Water-Resources Investigations, book 3, chapter B7, 1992.
- [62] Valli, A. M. P., Carey, G. F., Coutinho, A. L. G. A., “Control Strategies for Timestep Selection in Simulation of Coupled Viscous Flow and Heat Transfer”, *Communications in Numerical Methods in Engineering*, aceito para publicação, 2001.
- [63] Valli, A. M. P., Carey, G. F., Coutinho, A. L. G. A., “Finite Element Simulation and Control of Nonlinear Flow and Reactive Transport”, In: *Proceedings of 10<sup>th</sup> International Conference of Finite Element in Fluids*, pp. 450-455, Tucson, Arizona, USA, 1998.