

ANÁLISE TÉRMICA TRANSIENTE E TRIDIMENSIONAL EM ROCHAS
SEDIMENTARES

Vanessa Pereira Spear King

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 MESTRE EM CIÊNCIAS EM ENGENHARIA
CIVIL.

Aprovada por:

Prof. Luiz Landau, D.Sc.

Prof. José Luis Drummond Alves, D.Sc.

Dr. Marcos André Duarte Martins, D.Sc.

Dr. Henrique Luiz de Barros Penteado, Ph.D.

RIO DE JANEIRO, RJ – BRASIL
JANEIRO DE 2003

KING, VANESSA PEREIRA SPEAR

Análise Térmica Transiente e Tridimensional
em Rochas Sedimentares [Rio de Janeiro] 2003

XIII, 73 p. 29,7 cm (COPPE/UFRJ, M. Sc.,
Engenharia Civil, 2002)

Tese – Universidade Federal do Rio de
Janeiro, COPPE

1. Método dos Elementos Finitos
2. Transiente Térmico
3. Rochas Sedimentares
4. Modelagem de Bacias

I. COPPE/UFRJ II. Título (série)

**Ao meu querido Peter,
e aos nossos filhos
Phil e Stephanie**

Agradecimentos

Ao professor Luiz Landau pela orientação, amizade e confiança que me foi depositada ao longo desses anos de convivência.

Ao professor José Luis Drummond Alves pela orientação, prestatividade e amizade adquirida ao longo do desenvolvimento desse trabalho.

Ao Dr. Marcos André Duarte Martins pela constante disponibilidade de repassar seus conhecimentos, bem como as incansáveis revisões e orientações sobre o programa.

Ao Geólogo João Cláudio de Jesus Conceição do Cenpes/Petrobrás pelo apoio e motivação inicial em desenvolver este tema.

À Agência Nacional do Petróleo (ANP) pelo apoio financeiro através da bolsa de estudos concedida, indispensável à realização deste trabalho.

Ao professor Ricardo Bedregal pela orientação na área de geologia.

Aos funcionários do LAMCE, em especial à Mônica Caruso Stoque, pela amizade, ajuda e apoio durante todo este período.

Aos amigos Guilherme, Arão, Denis, Lucia, Josias, Eldues, Joelma, Magda, Rosenil, Carlos Luiz, Luiz Fernando, Ricardo, Beth, Jaci, Alessandro, Paulo de Tarso entre outros pela convivência e amizade demonstrada durante este período.

Aos meus pais e irmãs pela confiança, apoio e incentivo essencial ao meu trabalho.

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

ANÁLISE TÉRMICA TRANSIENTE E TRIDIMENSIONAL EM ROCHAS SEDIMENTARES

Vanessa Pereira Spear King

Janeiro/2003

Orientadores: Luiz Landau

José Luis Drummond Alves

Programa: Engenharia Civil

Neste trabalho apresenta-se uma implementação de análise térmica transiente e tridimensional através de um programa computacional baseado no método dos elementos finitos utilizando malhas não-estruturadas compostas por elementos tetraédricos. Tal análise permite avaliar a história da temperatura de rochas sedimentares, colaborando de forma significativa na predição dos processos de geração e migração de hidrocarbonetos. A viabilidade deste tipo de estudo, que envolve um grande número de equações resultante de discretizações, é obtida através do conjunto de uma estrutura de dados baseada em arestas e o método iterativo para a solução do sistema de equações. Esta combinação proporciona a abordagem de problemas de grandes dimensões e detalhamento, aspectos fundamentais na análise em escala de bacias.

Palavras-chave: Método dos Elementos Finitos, Transiente Térmico, Rochas Sedimentares, Modelagem de Bacias.

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

TRIDIMENSIONAL AND THERMAL TRANSIENT ANALYSIS OF SEDIMENTARY
ROCKS

Vanessa Pereira Spear King

January/2003

Advisors: Luiz Landau

José Luis Drummond Alves

Department: Civil Engineering

This work presents the implementation of a finite element code for the thermal transient analysis of sedimentary rocks. This analysis provides means to assess the thermal history in sedimentary rocks, assisting the studies of hydrocarbon generation and migration processes. The unstructured 3D mesh of tetrahedral elements provides the discrete model. An iterative driver using an edge-by-edge data structure solves the resulting system of equations at each time step. This strategy provides considerable improvements in terms of CPU time and memory demand. This combination enables the study of complex 3D problems, a key issue to basin analysis.

Key words: Finite Element Method, Thermal Transient, Sedimentary Rocks, Basin Modelling.

Índice

Capítulo 1 – Introdução

1.1 – Motivação.....	1
1.2 – Objetivos.....	5
1.3 – Revisão bibliográfica.....	5
1.4 – Ambiente de desenvolvimento.....	7
1.5 – Organização do texto.....	7

Capítulo 2 – O problema de Condução de Calor

2.1 – Introdução.....	8
2.2 – Lei de Fourier	9
2.3 – Equação da condução de calor	11
2.4 – Cálculo da condutividade térmica na análise da distribuição da temperatura em bacias sedimentares.....	16

Capítulo 3 – Discretização espacial e temporal da equação de Condução de calor

3.1 – Introdução.....	20
3.2 – Descrição espacial via MEF.....	21

3.2.1 – Desenvolvimento das Matrizes do Elemento Tetraédrico.....	24
3.3 – Discretização Temporal utilizando o Método das Diferenças Finitas.....	27
3.4 – Solução do Sistema de Equações.....	28

Capítulo 4 - Método dos Elementos Finitos Utilizando Estrutura de Dados Baseada nas Arestas dos Elementos

4.1 – Introdução.....	32
4.2 – Estrutura de dados baseada nas arestas do elemento tetraédrico.....	33
4.2.1 – Matriz de condutividade térmica.....	38
4.2.2 – Matriz de massa.....	39
4.2.3 – Matriz de massa efetiva.....	40
4.3 – Multiplicação matriz-vetor.....	41
4.3.1 – Multiplicação matriz-vetor (aresta simples).....	41
4.3.2 – Multiplicação matriz-vetor (<i>superedge3</i>).....	43
4.3.3 – Multiplicação matriz-vetor (<i>superedge6</i>).....	45

Capítulo 5 – Exemplos Numéricos

5.1 – Introdução.....	48
5.2 – Exemplos de Validação.....	48
5.2.1 – Exemplo Unidimensional.....	48
5.2.2 – Exemplo bidimensional.....	50
5.3 – Exemplos Tridimensionais.....	55
5.3.1 – Bloco com 4 materiais.....	55
5.3.2 – Bacia Sedimentar com 2 materiais.....	59

Capítulo 6 – Conclusões 63

Referências Bibliográficas.....65

Apêndice A69

Índice de Figuras

Figura (1.1) – Geometria de um domo de sal-----	3
Figura (1.2) – Isotermas que destacam o efeito chaminé no domo de sal -----	3
Figura (2.1) – Mecanismos de transferência de calor -----	9
Figura (2.2) – Transferência unidimensional de calor por condução -----	10
Figura (2.3) – Volume de controle diferencial, $dx dy dz$, para a análise da condução de calor em coordenadas cartesianas -----	12
Figura (3.1) – Elemento tetraédrico - incidência nodal: $ijmp$ -----	24
Figura (4.1) – Matriz da aresta ij , que possui n elementos em comum, para $n=2$ -----	33
Figura (4.2) – Matriz das arestas a partir da matriz do elemento tetraédrico -----	34
Figura (4.3) – Agrupamento de <i>superedges</i> -----	36
Figura (4.4) – Disposição dos agrupamentos <i>superedges</i> para um cubo discretizado por tetraedros, segundo [22]-----	37
Figura (4.5) – Aresta Simples -----	42
Figura (4.6) – Grupo de 3 arestas -----	44
Figura (4.7) – Grupo de 6 arestas -----	46
Figura (5.1) – Esquema de figura unidimensional e parte da malha -----	49
Figura (5.2) – Solução em $x = 0,236m$ -----	50

Figura (5.3) – Malha utilizada pelo programa bidimensional, com 274 nós e 496 elementos-----	51
Figura (5.4) – Distribuição de temperatura obtida pelo programa bidimensional-----	51
Figura (5.5) – Esquema das camadas -----	52
Figura (5.6) – Malha computacional, com 6421 nós e 27040 elementos-----	53
Figura (5.7) – Vista da malha computacional -----	53
Figura (5.8) – Sequência de instantâneos da distribuição de temperatura para a análise térmica transiente do exemplo bidimensional -----	54
Figura (5.9) – Isotermas do exemplo analisado-----	55
Figura (5.10) – Protótipo do bloco tridimensional -----	56
Figura (5.11) – Malha do bloco tridimensional -----	56
Figura (5.12) – Sequência de instantâneos da distribuição de temperatura para a análise térmica transiente do bloco tridimensional -----	58
Figura (5.13) – Protótipo de uma Bacia Sedimentar com 2 materias -----	59
Figura (5.14) – Malha da Bacia com 5257 nós e 25001 elementos -----	60
Figura (5.15) – Sequência de instantâneos da distribuição de temperatura para a análise térmica transiente da bacia sedimentar com 2 materiais-----	61
Figura (A.1) – Malha utilizada pelo programa bidimensional -----	69
Figura (A.2) – Esquema das camadas -----	70
Figura (A.3) – Esquema dos principais pontos-----	70
Figura (A.4) – Malha computacional em 3 dimensões-----	72
Figura (A.5) – Vista da malha computacional tridimensional-----	73

Índice de Tabelas

Tabela (5.1) – Propriedade dos materiais (exemplo bidimensional)-----	52
Tabela (5.2) – Propriedade dos materiais (bloco com 4 materiais)-----	56
Tabela (5.3) – Propriedade dos materiais (bacia sedimentar com 2 materiais)-----	60
Tabela (A.1) – Coordenadas dos principais pontos-----	72

Índice de Quadros

Quadro (3.1) – Esquema do Método dos Gradientes Conjug. Pré-condicionado.....	31
Quadro (4.1) – Multiplicação matriz-vetor aresta por aresta, totalizando 6 operações de endereçamento indireto (e/i) e 8 operações de ponto flutuante (flops)-----	43
Quadro (4.2) – Multiplicação matriz-vetor para grupo de 3 arestas, totalizando 9 operações de endereçamento indireto (e/i) e 21 operações de ponto flutuante (flops)-----	45
Quadro (4.3) – Multiplicação matriz-vetor para grupo de 6 arestas, totalizando 12 operações de endereçamento indireto (e/i) e 40 operações de ponto flutuante (flops)-----	47

Capítulo 1

Introdução

1.1 Motivação

Motivações para se realizar uma Análise Térmica:

Atualmente na indústria do petróleo existe uma grande preocupação em otimizar o esforço exploratório visando minimizar os riscos, tais como danos ambientais e prejuízos financeiros, a ele inerentes.

Sendo assim, para se obter tal otimização, torna-se necessário um estudo mais aprofundado da quantificação dos processos de geração, migração e acumulação de petróleo.

A análise obtida a partir de programas computacionais, que avaliam a história da temperatura em rochas sedimentares, é um dos estudos que colaboram nessa otimização. Tais estudos geram importantes informações que influenciam na predição dos processos de geração e migração de petróleo, processos esses, essenciais para a existência de um sistema petrolífero, em uma bacia sedimentar.

Um sistema petrolífero é aquele que reúne os elementos e processos essenciais para a formação de uma acumulação de petróleo [20]. Os elementos incluem as rochas geradoras, reservatório e selante, e a trapa, enquanto os processos

compreendem a formação da trapa, a geração, migração e acumulação do petróleo. A simples existência dos elementos e atuação dos processos, entretanto, não garante a formação de uma acumulação do petróleo. Também são importantes uma relação espacial e temporal adequada entre geradores e trapa, bem como um balanço de massas positivo entre o volume de petróleo gerado e o volume de petróleo perdido durante a migração.

A partir de testemunhos obtidos durante a perfuração de poços, podem ser realizadas análises das variações dos parâmetros de maturação das rochas geradoras. A partir destas análises, tem-se indicação positiva ou negativa do processo de geração e/ou migração de hidrocarbonetos, dentre elas a temperatura máxima ($T_{máx}$) alcançada pelas rochas geradoras. Um dos métodos mais comuns de se medir o grau de maturação e temperatura máxima alcançados pela rocha geradora é o da análise da reflectância de vitrinite [2]. O Índice de Alteração Térmica [24] e Análise da $T_{máx}$ (obtida através da técnica de pirólise) [12] são métodos utilizados para se determinar o grau de maturação térmica alcançada pelas rochas geradoras. Através do programa computacional que faz a análise transiente da temperatura e com os resultados obtidos a partir de testemunhos obtidos durante a perfuração de poços é possível se fazer a calibração da temperatura e do fluxo de calor ao longo da seção modelada.

Existem fenômenos geológicos tais como domos de sal, diques e soleiras de diabásio, que causam anomalias térmicas em bacias sedimentares, proporcionando um aumento de temperatura em determinadas regiões. É interessante fazer a análise transiente da temperatura nessas regiões, podendo-se então obter regiões propícias à geração e expulsão de petróleo.

A anomalia térmica associada aos domos de sal tem uma significativa participação na modificação da temperatura e da estrutura de uma bacia sedimentar [4]. Dois fatores são responsáveis por essa anomalia térmica: a diferença entre a condutividade térmica do sal e das rochas adjacentes, e a geometria dos domos de sal.

Na figura (1.1) a seguir, tem-se a geometria de um domo de sal.

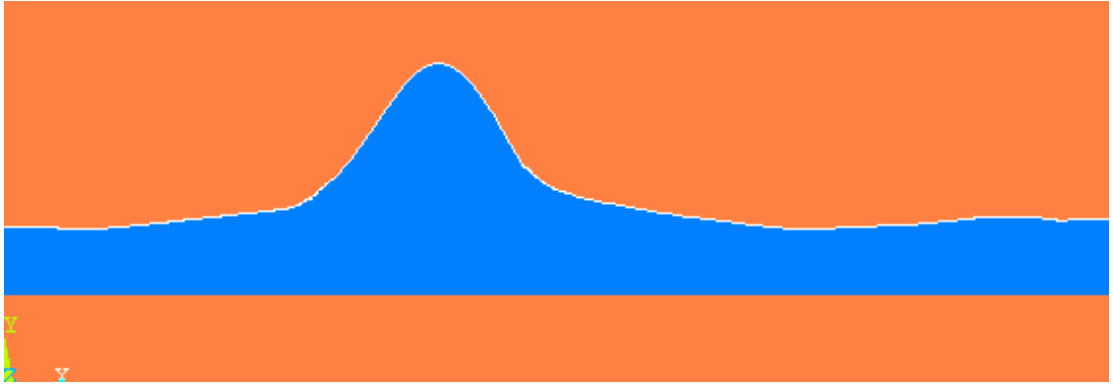


Fig (1.1) – Geometria de um domo de sal.

Foi observado, por causa da alta condutividade térmica do sal, que o gradiente geotérmico aumenta na parte superior do domo de sal e diminui na parte inferior, gerando assim o efeito chaminé, como mostra a figura (1.2) abaixo:

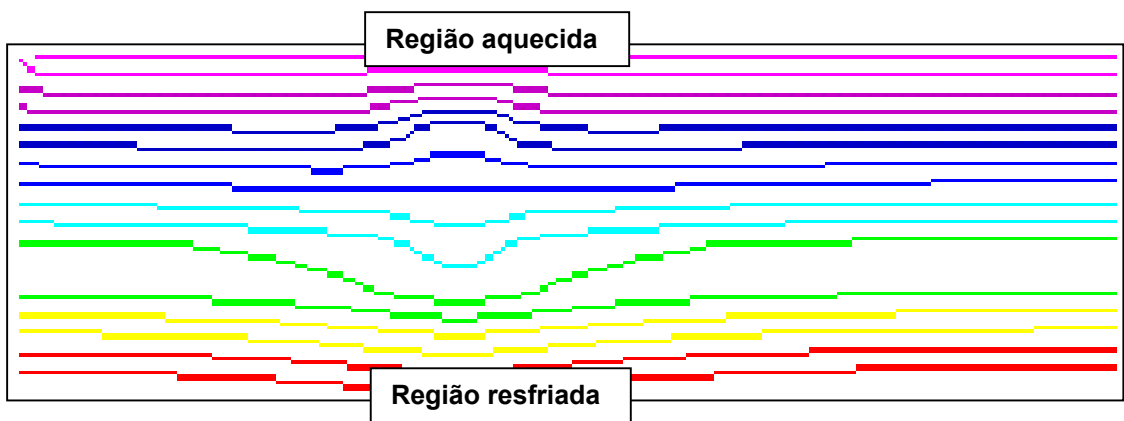


Fig (1.2) – Isotermas que destacam o efeito chaminé no domo de sal.

Em estudos anteriormente realizados [1], foi desenvolvida uma solução analítica para calcular a temperatura ao redor dos domos de sal, sugerindo então que as anomalias térmicas associadas às massas de sal causariam uma grande influência na história da maturação da matéria orgânica.

Os domos de sal possuem um papel muito importante na formação de trapas para óleo e gás em muitas bacias sedimentares. Em conjunto com a função de trapa, eles também possuem o importante papel de preservar, em termos de maturação, a matéria orgânica situada em grandes profundidades. Essa matéria orgânica, por estar

em grandes profundidades, seria superaquecida, tornando-se inadequada para a indústria do petróleo. Ao existir um domo de sal acima dessa matéria orgânica, o mesmo proporcionará um efeito dissipador do calor, evitando a sua maturação.

A intrusão de rochas ígneas é um outro fenômeno geológico que ocorre freqüentemente em bacias sedimentares [26]. Dois tipos de corpos ígneos são mais comuns em bacias sedimentares: os diques, que são intrusões perpendiculares ou inclinadas à camada sedimentar e que possuem uma razão entre comprimento e espessura pequena, e as soleiras, que são intrusões paralelas à camada sedimentar e que possuem normalmente uma grande razão entre comprimento e espessura.

Tendo como exemplo um dique de diabásio intrudindo numa seqüência sedimentar, existe uma preferência da direção do transporte de calor através do dique, proporcionando o efeito chaminé, como foi visto no domo de sal. A diferença entre eles é que o sal, por ter uma grande condutividade térmica, transfere rapidamente o calor de sua base ao seu topo, funcionando como um dissipador de calor, e as rochas intrusivas, por possuírem uma alta capacidade térmica, vão aquecendo a matéria orgânica que existe em toda sua volta, podendo causar a maturação.

Relevância da Análise Transiente:

Quando as equações diferenciais que regem a física do problema a ser analisado não dependerem do tempo, tal problema é dito estacionário ou permanente (steady-state), ao contrário, ele é classificado como transiente. Pode-se perceber que na natureza, os fenômenos existentes são transientes, mas em certos casos uma análise permanente poderia representá-los de uma forma eficaz. Em muitos problemas relacionados à indústria do petróleo, é necessário uma análise transiente e no caso do estudo da temperatura, tal análise proporciona um histórico da influência do fluxo térmico e de eventos térmicos nas diversas camadas que compõem a bacia, até chegar ao estado estacionário.

Relevância da Análise Tridimensional:

Como as estruturas geológicas possuem geometria e condições de contorno bastante complexas, além de litologias com propriedades muito diferentes umas das outras, o estudo tridimensional é a melhor forma de se obter uma análise mais consistente do problema. Por outro lado, a solução analítica para problemas

tridimensionais com tal grau de complexibilidade é difícil e às vezes até impossível de se obter, devendo-se então utilizar métodos numéricos para se obter uma solução aproximada do problema.

Análise Térmica + Transiente + Tridimensional:

Sendo assim, o desenvolvimento de um simulador que contemple a análise térmica transiente e tridimensional de uma bacia sedimentar contribuirá de maneira significativa nos trabalhos dos geólogos nas suas funções de determinar os processos de geração, migração e acumulação de petróleo.

1.2 Objetivos

Este trabalho tem como objetivo o estudo, desenvolvimento e implementação de um simulador tridimensional, capaz de tratar a análise térmica transiente em rochas sedimentares, utilizando a estrutura de dados por aresta aliada à solução iterativa de sistemas de equações, oriundas da discretização de malhas não estruturadas, compostas por tetraedros, via método dos elementos finitos.

1.3 Revisão bibliográfica

Constatou-se que muitos conhecimentos e ferramentas necessários para a determinar a temperatura já existem na literatura. Tais conhecimentos e ferramentas são encontrados na maioria das vezes de maneira isolada, ou contemplando somente determinadas estruturas, formações ou eventos específicos, na maioria das vezes em 1 ou 2 dimensões.

Procurou-se neste trabalho fazer uma análise térmica transiente em 3 dimensões que tivesse uma aplicação geral para os casos de transferência de calor por condução, resolvendo de uma forma mais geral muitos dos problemas citados anteriormente, com a grande vantagem de solucionar problemas de grande porte. Tais modelos complexos e de grande porte eram analisados até então, de forma simplificada.

A definição da estrutura térmica de uma bacia, além de interesse acadêmico, possui um grande interesse econômico, tendo em vista a sua influência na diagênese das rochas sedimentares, na migração de fluidos e na maturação de hidrocarbonetos.

Existem programas comerciais que realizam a análise térmica transiente e tridimensional. Contudo, tais programas possuem uma grande dificuldade na parte do pré-processamento, onde as malhas das bacias sedimentares são criadas. Essas malhas, como já foi dito, possuem características geométricas e condições de contorno muito complexas.

Os modelos estudadas nos exemplos de grande porte deste trabalho, devido à complexidade da modelagem de uma bacia/reservatório, principalmente em três dimensões, foram obtidas através do programa comercial Gocad [13]. Tal programa realiza a construção dos modelos a serem analisados no programa de análise térmica tridimensional.

O programa Gocad [13] contém um módulo para modelagem de bacias/reservatórios. A construção do modelo compreende a definição da geometria da litologia e de suas propriedades físicas. Partes da estrutura geológica podem ser facilmente manipuladas, o que significa uma grande flexibilidade para incorporação de novas características ao modelo.

Na etapa da construção das malhas, a partir dos modelos obtidos anteriormente, foi utilizado o programa multimesh [8].

Essa classe de problemas gera uma grande demanda de memória e um excessivo número de operações de ponto flutuante, quando se utiliza método direto para se resolver o sistema de equações de malhas discretizadas via método dos elementos finitos. Na etapa de processamento, ou seja, na solução do sistema de equações, optou-se pela utilização do tratamento da estrutura de dados por arestas, como utilizado por Martins [21], em conjunto com um método iterativo. Tal combinação viabilizou a análise de problemas tridimensionais complexos e de grande escala, tal como a análise de bacias sedimentares.

1.4 Ambiente de desenvolvimento

A implementação da técnica para tratamento transiente térmico dos problemas de elementos finitos através da estrutura de dados baseada nas arestas dos elementos tetraédricos foi realizada tendo como base o código já existente em linguagem FORTRAN, desenvolvido por Martins [22]. Este código foi escrito para tratar problemas de elementos finitos utilizando a estrutura de dados por arestas no lugar da tradicional estrutura de dados por elementos. As análises foram realizadas num PC Pentium 4, com 2 GHz de processamento e 523.568 KB de memória RAM com sistema operacional Windows 2000. Foram utilizados também os programas Gocad [13], Multimesh [8] e Ansys para geração de malhas e os programas Ensignht e View 3D para visualização dos resultados.

1.5 Organização do texto

No capítulo 2 tem-se uma introdução sobre as formas de transferência de calor. Realiza-se uma revisão da teoria da condução de calor em três dimensões, e mostram-se os cálculos iniciais que são feitos a partir das propriedades das diferentes litologias que compõem as bacias sedimentares.

No capítulo 3 é apresentada a metodologia aplicada, a formulação discreta do Método dos Elementos Finitos, a implementação da análise transiente da condução de calor usando o Método Trapezoidal, além do método iterativo utilizado para resolver o sistema de equações.

No capítulo 4 é apresentado a aplicação da estrutura de dados baseada nas arestas dos elementos e a descrição da montagem das matrizes de massa, condutividade térmica e massa efetiva, bem como as vantagens dessa técnica.

No capítulo 5 são discutidos exemplos unidimensionais e bidimensionais de validação da metodologia e implementação, e em seguida exemplos tridimensionais, incluindo bacias sedimentares.

Finalmente, no capítulo 6 são apresentadas as conclusões obtidas.

Capítulo 2

O Problema de Condução de Calor

2.1 Introdução

A energia transferida pelo fluxo de calor não pode ser diretamente medida, mas está relacionada a uma quantidade chamada temperatura, que pode ser medida [17].

Quando existir uma diferença de temperatura num sistema existirá um fluxo de calor da região de maior temperatura para a região de menor temperatura. Isso significa que ao existir um gradiente de temperatura no sistema, o conhecimento da distribuição da temperatura neste sistema é bastante importante nos estudos da transferência de calor.

Existem três tipos de transferência de calor, como mostra a figura (2.1). São eles: condução, convecção e radiação. Na realidade, a distribuição da temperatura é a combinação do efeito desses três tipos de transferência de calor. Entretanto, para simplificar a análise, considera-se, por exemplo, a transferência de calor somente por condução quando as transferências por convecção e por radiação forem desprezíveis.

Condução é o tipo de transferência de calor onde a troca de energia ocorre a partir da região de maior temperatura em direção à região de menor temperatura, através da propagação da vibração das moléculas, em um meio sólido ou líquido.

A convecção ocorre quando um fluido está em movimento sobre um corpo sólido ou dentro de um canal e enquanto as temperaturas do sólido e do fluido forem diferentes.

Todos os corpos emitem continuamente energia por causa da sua temperatura, e essa energia emitida por eles é chamada de radiação térmica. A energia de radiação emitida por um corpo é transferida no espaço em forma de ondas eletromagnéticas, de acordo com a teoria clássica de Maxwell de ondas eletromagnéticas, ou em forma de fótons discretos de acordo com a hipótese de Planck. Na investigação de transferência de calor radioativo ambos conceitos são utilizados.

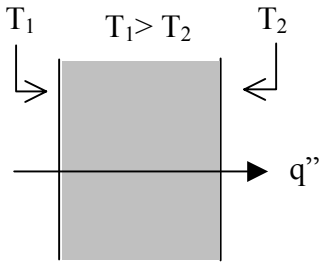
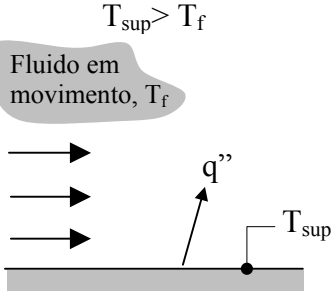
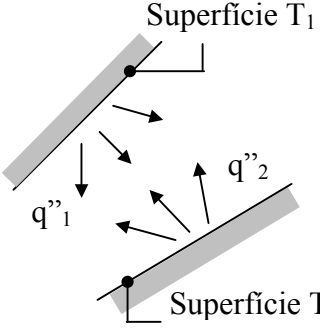
Condução através de um sólido ou fluido estacionário	Convecção de uma superfície para um fluido em movimento	Transferência de calor líquida por radiação entre duas superfícies
		

Fig (2.1) – Mecanismos de transferência de calor, segundo [17].

2.2 Lei de Fourier

Transferência de calor é a energia em trânsito devido a uma diferença de temperatura [17]. Sempre que existir uma diferença de temperatura em um meio ou entre meios diferentes haverá uma transferência de calor entre eles.

É possível quantificar os processos de transferência de calor em termos de equações de taxas de transferência de calor. Essas equações são usadas para calcular a quantidade de energia transferida por unidade de tempo. Para a condução de calor, a equação da taxa de transferência de calor é conhecida pela Lei de Fourier.

Para um objeto unidimensional, que apresenta uma distribuição de temperatura $T(x)$, a equação do fluxo de calor é dada por:

$$q_x = -k_x \frac{dT}{dx} \quad (2.1)$$

O fluxo de energia q_x é a taxa de transferência de calor na direção x por unidade de área perpendicular à direção da transferência, sendo proporcional ao gradiente de temperatura, dT/dx , nesta direção. A constante de proporcionalidade k é uma propriedade de transporte, que é uma característica do material do objeto, conhecida como condutividade térmica, na direção x . O sinal negativo é uma consequência do fato do calor ser transferido no sentido da diminuição da temperatura. Na figura (2.2), sob condições estacionárias, a distribuição de temperatura é linear e o gradiente de temperatura pode ser expresso como:

$$\frac{dT}{dx} = \frac{T_2 - T_1}{L} \quad (2.2)$$

E o fluxo de calor é, portanto:

$$q_x = -k_x \frac{T_2 - T_1}{L} \quad (2.3)$$

A equação (2.3) pode ser reescrita como:

$$q_x = -k_x \frac{T_2 - T_1}{L} = k_x \frac{\Delta T}{L} \quad (2.4)$$

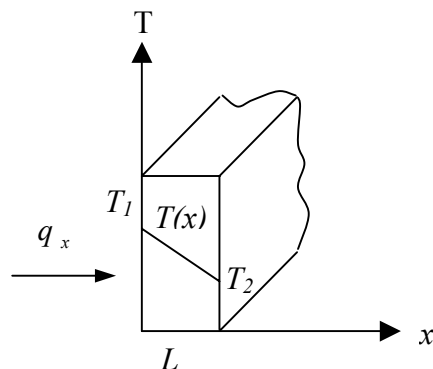


Figura (2.2) – Transferência unidimensional de calor por condução, segundo [17].

A Lei de Fourier, conforme descrita pela equação (2.1), deixa implícito que o fluxo térmico é uma grandeza direcional. A direção do fluxo térmico será sempre normal a uma superfície com temperatura constante, conhecida como superfície isotérmica. Sendo assim, tem-se a seguinte equação, já em 3 dimensões, para a Lei de Fourier:

$$\mathbf{q} = -\mathbf{k}\nabla T = -\left(k_x \frac{\partial T}{\partial x} + k_y \frac{\partial T}{\partial y} + k_z \frac{\partial T}{\partial z}\right) \quad (2.5)$$

onde ∇ é o operador vetorial gradiente, $T(x, y, z)$ representa em coordenadas cartesianas o campo escalar de temperatura, e \mathbf{k} é um tensor 3x3.

2.3 Equação da condução de calor

O principal objetivo nesta análise de condução de calor é determinar a distribuição da temperatura em um meio, resultante da imposição das condições de contorno.

Definindo-se então um volume de controle diferencial, como mostra a figura (2.3), identificam-se os processos de transferência de energia que são relevantes e substituem-se as equações das taxas de transferência de calor apropriadas. O resultado é uma equação diferencial cuja solução, para um dado conjunto de condições de contorno, fornece a distribuição da temperatura no meio.

Considere um meio homogêneo no interior do qual não existe movimento e onde a distribuição da temperatura $T(x, y, z)$ está representada em coordenadas cartesianas. Inicialmente definimos um volume de controle infinitesimalmente pequeno $dx dy dz$, conforme mostrado na figura (2.3).

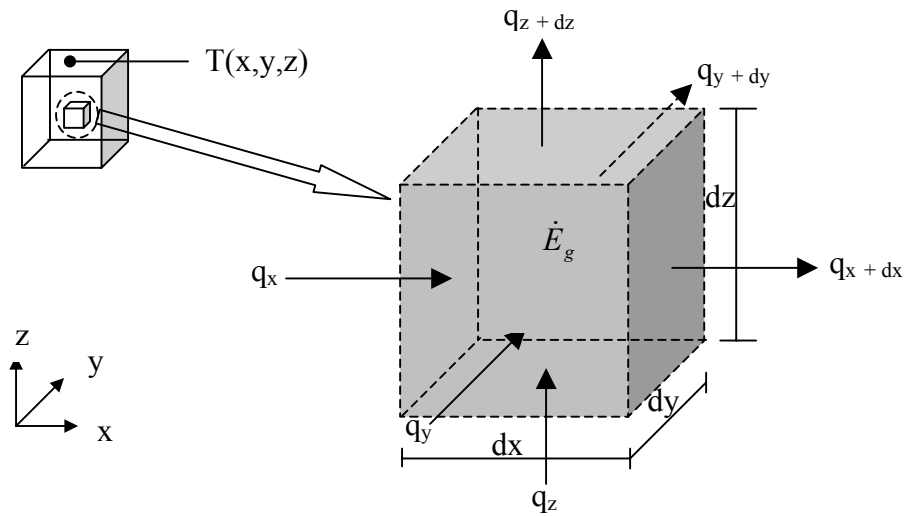


Figura (2.3) – Volume de controle infinitesimal, $dx dy dz$, para a análise da condução de calor em coordenadas cartesianas, segundo [17].

Se existirem gradientes de temperatura, a transferência de calor por condução irá ocorrer através de cada uma das superfícies de controle. Os fluxos de calor por condução perpendicular a cada uma das superfícies de controle nos pontos com coordenadas x , y e z são indicadas pelos termos q_x , q_y e q_z , respectivamente. As taxas de transferência de calor por condução nas superfícies opostas podem então ser expressas através de uma expansão em série de Taylor onde, desprezando-se os termos de ordem superior, têm-se:

$$q_{x+dx} = q_x + \frac{\partial q_x}{\partial x} dx \quad (2.6a)$$

$$q_{y+dy} = q_y + \frac{\partial q_y}{\partial y} dy \quad (2.6b)$$

$$q_{z+dz} = q_z + \frac{\partial q_z}{\partial z} dz \quad (2.6c)$$

No interior do meio pode haver também um termo para representar uma fonte de energia, que está associada à taxa de geração de energia térmica no volume de controle. Essa taxa é representada por:

$$\dot{E}_g = \dot{q}dxdydz \quad (2.7)$$

onde \dot{q} é a taxa na qual a energia é gerada por unidade de volume do meio. Além disso, também podem ocorrer variações na quantidade de energia interna térmica acumulada pela matéria no interior do volume de controle. Supõe-se que não há mudança de fase, o termo referente à taxa de acúmulo de energia, considerando ρ e c constantes, pode ser escrito da seguinte forma:

$$\dot{E}_{ac} = \rho c \frac{\partial T}{\partial t} dxdydz \quad (2.8)$$

onde ρ e c são respectivamente a densidade e o calor específico do material. A taxa $\rho c \partial T / \partial t$ é a taxa de variação com o tempo da energia térmica do meio, por unidade de volume.

Com base nas taxas mostradas acima, a forma da conservação da energia é:

$$\dot{E}_e + \dot{E}_g - \dot{E}_s = \dot{E}_{ac} \quad (2.9)$$

Assumindo que a taxa de condução de calor correspondente à entrada de energia é \dot{E}_e e a que corresponde à saída de energia é \dot{E}_s , substituindo as equações (2.7) e (2.8) na equação (2.9), obtém-se:

$$q_x + q_y + q_z + \dot{q}dxdydz - q_{x+dx} - q_{y+dy} - q_{z+dz} = \rho c \frac{\partial T}{\partial t} dxdydz \quad (2.10)$$

Substituindo as equações (2.6) na equação (2.10), obtém-se:

$$-\frac{\partial q_x}{\partial x} dx - \frac{\partial q_y}{\partial y} dy - \frac{\partial q_z}{\partial z} dz + \dot{q}dxdydz = \rho c \frac{\partial T}{\partial t} dxdydz \quad (2.11)$$

Utilizando a Lei de Fourier, têm-se para as taxas de transferência de calor por condução:

$$q_x = -k_x dydz \frac{\partial T}{\partial x} \quad (2.12a)$$

$$q_y = -k_y dx dz \frac{\partial T}{\partial y} \quad (2.12b)$$

$$q_z = -k_z dx dy \frac{\partial T}{\partial z} \quad (2.12c)$$

Substituindo as equações (2.12) na equação (2.11) e sendo o volume de controle ($dx dy dz$) arbitrário, obtém-se:

$$\frac{\partial}{\partial x} \left(k_x \frac{\partial T}{\partial x} \right) + \frac{\partial}{\partial y} \left(k_y \frac{\partial T}{\partial y} \right) + \frac{\partial}{\partial z} \left(k_z \frac{\partial T}{\partial z} \right) + \dot{q} = \rho c \frac{\partial T}{\partial t} \quad (2.13)$$

A equação (2.13), ao ser escrita de uma forma compacta, fica da seguinte forma:

$$\nabla \cdot \mathbf{k} \nabla T + \dot{q} = \rho c \frac{\partial T}{\partial t} \quad (2.14)$$

Tem-se então um problema de valor inicial e de contorno.

A partir da definição da equação diferencial que governa o problema de condução de calor em um domínio $\Omega \subset \mathbb{R}^3$, com contorno Γ , em um intervalo de tempo $[0, t_f]$, é necessário estabelecer as condições iniciais e de contorno apropriadas.

A condição inicial especifica a distribuição da temperatura na origem da coordenada tempo, ou seja, em $t = 0$.

As condições de contorno especificam a condição térmica na superfície de contorno Γ . Por exemplo, em uma dada superfície do contorno a distribuição da temperatura pode ser prescrita, ou a distribuição de um fluxo de calor pode ser especificada.

- 1º Tipo de condição de contorno: Temperatura Prescrita

Existem muitas aplicações em que a temperatura na superfície de contorno Γ_g é prescrita. Nos exemplos de análise de bacia, que serão mostrados no capítulo 5, considera-se a temperatura no topo da bacia ($y=L$) prescrita. No caso de bacias *off-shore*, a temperatura prescrita no topo é igual à temperatura no fundo do mar, e no caso de bacias *on-shore*, a temperatura prescrita no topo é a temperatura atmosférica. Tomando-se como exemplo uma temperatura de fundo do mar de 4°C e uma temperatura de superfície de 20°C, essa condição de contorno é escrita da seguinte forma:

$$T(x, y, z, t) \Big|_{y=L} \equiv T(x, L, z, t) = T_1 \quad \text{em } \Gamma_g \quad (2.15)$$

$$T_1 = 4^\circ C$$

ou

$$T_1 = 20^\circ C$$

Em casos mais gerais, a distribuição da temperatura na superfície do contorno é especificada como função da posição e do tempo. No exemplo de bacias sedimentares, no capítulo 5, a temperatura prescrita é constante em relação ao tempo.

- 2º Tipo de condição de contorno: Fluxo de Calor Prescrito

Em algumas situações, o fluxo de calor (q) numa superfície do contorno Γ_h é prescrito. No exemplo de análise de bacia, do capítulo 5, é prescrito um fluxo de calor na base da bacia ($y=0$). Essa condição de contorno é escrita da seguinte forma:

$$-k \frac{\partial T}{\partial y} \Big|_{y=0} = q \quad \text{em } \Gamma_h \quad (2.16)$$

Essa distribuição do fluxo térmico na superfície do contorno também é especificada como função da posição e do tempo. No caso da análise da bacia, considerou-se constante em relação ao tempo.

O tensor \mathbf{k} define as propriedades de condutividade térmica do material.

$$\mathbf{k} = \begin{bmatrix} k_{xx} & k_{xy} & k_{xz} \\ k_{yx} & k_{yy} & k_{yz} \\ k_{zx} & k_{zy} & k_{zz} \end{bmatrix} \quad (2.17)$$

De forma mais simplificada, foi adotada aqui a hipótese de materiais isotrópicos, ou seja, $k_{xx} = k_{yy} = k_{zz}$, e os termos fora da diagonal principal iguais a zero. Tem-se então um tensor da seguinte forma:

$$\mathbf{k} = \begin{bmatrix} k & 0 & 0 \\ 0 & k & 0 \\ 0 & 0 & k \end{bmatrix} \quad (2.18)$$

Tem-se ainda o vetor f , que é a fonte de calor distribuída no domínio.

Reescrevendo a equação (2.14) com uma notação mais usual na literatura de elementos finitos, que será o tema do próximo capítulo, onde a incógnita (temperatura) T passa a se chamar u , tem-se:

$$\nabla \cdot \mathbf{k} \nabla u + f = \rho c \frac{\partial u}{\partial t} \quad (2.19)$$

2.4 Cálculo da condutividade térmica na análise da distribuição da temperatura em bacias sedimentares

Ao se analisar a distribuição da temperatura em uma bacia sedimentar, é preciso levar em conta os diferentes tipos de litologias que compõem a bacia. As propriedades dessas litologias relevantes para a análise da distribuição da temperatura são as seguintes: condutividade térmica da fração sólida, porosidade inicial, constante de decaimento, densidade do grão, calor específico, condutividade térmica da água, densidade da água e profundidade média da camada sedimentar.

A partir das propriedades acima são feitos os seguintes cálculos:

- Cálculo da porosidade:

A relação de proporcionalidade inversa entre condutividade térmica e porosidade dos sedimentos eleva a importância da análise de porosidade e compactação para os estudos das variações térmicas em uma bacia sedimentar.

A porosidade do sedimento na época de sua deposição depende de fatores como tamanho dos grãos, uniformidade do tamanho e da forma, e do arranjo de empacotamento dos grãos [27]. Durante o soterramento, outros fatores adicionais determinam sua porosidade sendo que os principais são o rearranjo dos grãos, grau de fraturamento, granulometria, recristalização, crescimento secundário, cimentação e dissolução [27, 28].

A compactação pode ser definida como tendência de redução de volume dos sedimentos sob a aplicação de pressão, seja lateral ou vertical, com progressiva perda de fluidos (água) por todas as litologias, exceto o sal.

Analisando os valores da porosidade dos sedimentos em função da profundidade em inúmeros poços de diferentes bacias [27], foi definida uma relação exponencial entre a porosidade e a profundidade representada pela fórmula, de Athy (1930):

$$\phi(z) = \phi_0 e^{-c \cdot z} \quad (2.20)$$

sendo:

z = profundidade (m)

ϕ = porosidade (%)

c = constante de decaimento (1/m)

ϕ_0 = porosidade na superfície (%)

- Cálculo da condutividade térmica:

A condutividade térmica das rochas sedimentares é função da condutividade do grão que compõe esta rocha (k_r) e da condutividade do fluido intergranular (k_w), que geralmente é a água.

A condutividade térmica de uma unidade sedimentar pode ser calculada pela seguinte relação empírica, segundo [3]:

$$k(z) = k_r^{(1-\phi(z))} k_w^{\phi(z)} \quad (2.21)$$

onde:

z = profundidade (m)

ϕ = porosidade (%)

- Cálculo da densidade:

A densidade do material é calculada levando em consideração o valor da porosidade, da densidade da água e da densidade do grão de acordo com a expressão abaixo:

$$\rho(z) = \rho_w^{\phi(z)} \rho_g^{(1-\phi(z))} \quad (2.22)$$

onde:

ρ_w = densidade da água

ρ_g = densidade do grão

z = profundidade (m)

ϕ = porosidade (%)

Capítulo 3

Discretização espacial e temporal da equação de Condução de Calor

3.1 Introdução

Neste capítulo, inicialmente é apresentada a discretização espacial via Método dos Elementos Finitos (MEF) da equação que rege o transporte de calor por condução.

O MEF é um método numérico muito flexível, pois pode ser usado na solução de praticamente qualquer problema matematicamente expresso através de uma equação diferencial. Além disso, tem a possibilidade de simular objetos de forma e de contorno variados, devido à sua facilidade em tratar malhas bastante refinadas e não-estruturadas. Entende-se aqui por malhas não estruturadas como aquelas que não possuem uma lei de formação, concorrendo em cada nó um número arbitrário de elementos.

A aplicação do MEF na solução das equações diferenciais tais como as que regem deformações de sólidos, transferência de calor, fluxo de fluidos e problemas elétricos, é ampla na engenharia, enquanto que, na geologia, essas aplicações não são tão comuns.

No caso de análise tridimensional em bacias sedimentares, torna-se necessário o uso de um método numérico, pois uma solução analítica para o problema matemático pode ser muito difícil, e às vezes até inviável, de ser obtida, pois a análise de estruturas geológicas possui condições de contorno e geometria muito complexas. Além disso, as feições geológicas a serem modeladas possuem materiais com propriedades não tão uniformes quanto na engenharia. Essa não-uniformidade nas propriedades dos materiais é um dos aspectos mais importantes para se fazer uma análise em 3 dimensões.

Uma das causas de não se utilizar o MEF na geologia com muita frequência está no fato dos objetos geológicos serem heterogêneos, implicando em malhas com grande número de elementos, o que eleva por sua vez o consumo de memória e o tempo de CPU utilizado. Esta dificuldade foi resolvida com a utilização da estrutura de dados por arestas, que será mostrada no capítulo seguinte, em conjunto com um método iterativo para resolver o sistema de equações [21].

Ao final deste capítulo são apresentados a discretização no tempo, por diferenças finitas, utilizando-se o método implícito trapezoidal, e o método iterativo dos gradientes conjugados pré-condicionado, empregado para resolver o sistema de equações lineares resultantes.

3.2 Discretização Espacial Via MEF

Neste trabalho, a discretização espacial foi feita adotando o MEF, onde as variáveis contínuas são substituídas por variáveis discretas, definidas nos nós de uma malha de elementos finitos.

Existem duas formas de se obter a solução aproximada para o problema de valor de contorno: a forma fraca (ou variacional) e a forma forte. O problema matemático expresso pela equação (2.19) encontra-se na sua forma forte. Para se obter a solução aproximada para o problema de condução de calor, utilizando o MEF, deve-se obter a forma fraca do problema.

Para se obter a forma fraca do problema, torna-se necessário que se definam duas classes de funções. A primeira classe são as funções teste u , que devem

satisfazer às condições de contorno do problema e ter suas derivadas ao quadrado integráveis, ou seja:

$$\int_{\Omega} (\nabla u)^2 d\Omega < \infty \quad \text{e } u \in H^1 \quad (3.1)$$

O conjunto das funções teste é chamado de S , e é definido como:

$$S = \{ u \mid u \in H^1, u = g \text{ em } \Gamma \} \quad (3.2)$$

A segunda classe de funções é chamada de funções peso w . O conjunto dessas funções, chamado de V , deve conter todas as funções peso que satisfaçam às condições de serem nulas no contorno e também pertencerem a H^1 . O conjunto das funções peso V é definido como:

$$V = \{ w \mid w \in H^1, w = 0 \text{ em } \Gamma \} \quad (3.3)$$

A formulação variacional, ou seja, a forma fraca, pode ser obtida multiplicando-se a forma forte por uma função peso $w \in V$ e integrando-se, chegando então na equação abaixo:

$$\int_{\Omega} w \left(\rho c \frac{\partial u}{\partial t} - \nabla \cdot \mathbf{k} \nabla u - f \right) d\Omega = 0 \quad (3.4)$$

Sendo a integração por partes do termo difusivo expressa por:

$$\int_{\Omega} w \mathbf{k} \nabla^2 u d\Omega = \int_{\Gamma} w \mathbf{k} \nabla u n d\Gamma - \int_{\Omega} \nabla w \mathbf{k} \nabla u d\Omega \quad (3.5)$$

Na formulação clássica do MEF, originada na análise estrutural, utiliza-se o método dos resíduos ponderados de Galerkin [14], para se obter a discretização espacial do problema. Deve-se então, ao se utilizar o método de Galerkin, construir aproximações de dimensões finitas para S e V , denominadas de S^h e V^h , onde $S^h \subset S$ e $V^h \subset V$. O índice "h" se refere à associação a uma malha de elementos finitos de tamanho h , utilizada para discretizar o domínio Ω . Pode-se também definir as funções teste u^h e funções peso w^h , discretas tal que:

$$\text{Se } u^h \in S^h \text{ então } u^h \in S \quad (3.6)$$

$$\text{Se } w^h \in V^h \text{ então } w^h \in V \quad (3.7)$$

Se a função peso adotada for interpolada igual à função teste, pode-se dizer que a equação está na sua forma fraca de Galerkin. Sendo assim, após definir as funções aproximadas u^h e w^h , pode-se reescrever a equação (3.4), como:

$$\int_{\Omega} w^h L(u^h) d\Omega = 0 \quad (3.8)$$

onde

$$L(u^h) = \rho c \frac{\partial u^h}{\partial t} - \nabla \cdot \mathbf{k} \nabla u^h - f \quad (3.9)$$

Discretizando o domínio Ω em elementos e introduzindo-se funções de interpolação lineares definidas sobre cada elemento, a temperatura é aproximada por:

$$u^h = \sum_{i=1}^n N_i u_i = \mathbf{N} \mathbf{u} \quad (3.10)$$

onde u^h representa a aproximação de elementos finitos para a temperatura, u_i é o valor da temperatura em cada nó, n é o número de nós. N_i representa as funções de interpolação e $\mathbf{u}^h = \{u_1, \dots, u_n\}$ as temperaturas nodais.

Deste modo, substituindo-se a aproximação de elementos finitos da equação (3.9) na equação (3.10), obtém-se a formulação semi-discreta abaixo:

$$\mathbf{M} \dot{\mathbf{u}} + \mathbf{K} \mathbf{u} = \mathbf{f} \quad (3.11)$$

A matriz \mathbf{M} é a matriz de capacidade térmica, chamada daqui em diante de matriz de massa, a matriz \mathbf{K} é a matriz de condutividade térmica e \mathbf{f} é o vetor de termos independentes.

As matrizes \mathbf{M} e \mathbf{K} presentes na equação acima são matrizes globais construídas através das matrizes locais de todos os elementos da malha de elementos finitos, sendo \mathbf{A} o operador que faz essa construção [14]. O mesmo acontece com o vetor \mathbf{f} .

$$\mathbf{M} = \underset{e=1}{\overset{nel}{\mathbf{A}}} (m^e) \quad (3.12)$$

$$\mathbf{K} = \underset{e=1}{\overset{nel}{\mathbf{A}}} (k^e) \quad (3.13)$$

$$\mathbf{f} = \underset{e=1}{\overset{nel}{\mathbf{A}}} (f^e) \quad (3.14)$$

onde nel é o número de elementos da malha.

3.2.1 Desenvolvimento das Matrizes do Elemento Tetraédrico

Como se está analisando um problema tridimensional, foi adotado e implementado o elemento tetraedro linear [22]. Tal elemento foi escolhido por ser um elemento versátil na construção de malhas não estruturadas, descrevendo bem geometrias complexas.

Discretizando o domínio Ω em elementos tetraédricos, conforme a figura abaixo:

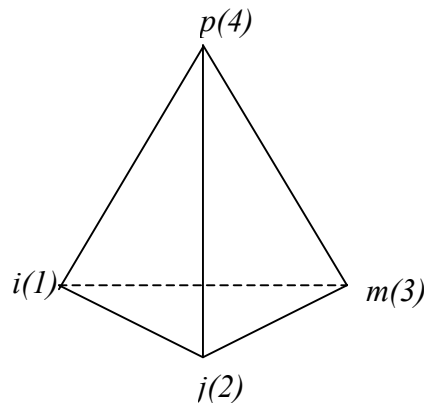


Figura 3.1 - Elemento tetraédrico - incidência nodal: $ijmp$

$$\mathbf{N} = [N_1 \quad N_2 \quad N_3 \quad N_4] \quad (3.15)$$

- Matriz de massa consistente de Galerkin (simétrica)

A matriz de massa utilizada foi a de forma consistente de Galerkin.

$$m^e = \rho c \int_{\Omega^e} \mathbf{N}^T \mathbf{N} d\Omega^e \quad (3.16)$$

$$\mathbf{M} = \frac{\rho c 6V}{120} \begin{bmatrix} 2 & 1 & 1 & 1 \\ 1 & 2 & 1 & 1 \\ 1 & 1 & 2 & 1 \\ 1 & 1 & 1 & 2 \end{bmatrix} \quad (3.17)$$

sendo ρ densidade, c calor específico e V volume.

- Matriz de condutividade térmica

A matriz \mathbf{K} , de condutividade térmica, é que a matriz de difusão de Galerkin, que possui a forma simétrica.

$$k^e = \int_{\Omega^e} \nabla^T \mathbf{N} \mathbf{k} \nabla \mathbf{N} d\Omega^e \quad (3.18)$$

Sendo \mathbf{B} , o operador diferencial discreto, dado por:

$$\mathbf{B} = \nabla \mathbf{N} = \begin{bmatrix} \frac{\partial N}{\partial x} \\ \frac{\partial N}{\partial y} \\ \frac{\partial N}{\partial z} \end{bmatrix} \quad (3.19)$$

Tem-se então:

$$k^e = \int_{\Omega^e} \mathbf{B}^T \mathbf{k} \mathbf{B} d\Omega^e \quad (3.20)$$

Pode-se então reescrever a equação (3.13) como:

$$k^e = \int_{V^e} \left(k_x \frac{\partial N_i}{\partial x} \frac{\partial N_j}{\partial x} + k_y \frac{\partial N_i}{\partial y} \frac{\partial N_j}{\partial y} + k_z \frac{\partial N_i}{\partial z} \frac{\partial N_j}{\partial z} \right) \quad (3.21)$$

onde N_i é a função de interpolação nodal linear para cada elemento, dada por:

$$N_i = \frac{a_i + b_i x + c_i y + d_i z}{6V^e} \quad (3.22)$$

com

$$a_i = \begin{vmatrix} x_j & y_j & z_j \\ x_m & y_m & z_m \\ x_p & y_p & z_p \end{vmatrix} \quad b_i = - \begin{vmatrix} 1 & y_j & z_j \\ 1 & y_m & z_m \\ 1 & y_p & z_p \end{vmatrix} \quad (3.23)$$

$$c_i = - \begin{vmatrix} x_j & 1 & z_j \\ x_m & 1 & z_m \\ x_p & 1 & z_p \end{vmatrix} \quad d_i = - \begin{vmatrix} x_j & y_j & 1 \\ x_m & y_m & 1 \\ x_p & y_p & 1 \end{vmatrix}$$

e com os outros coeficientes obtidos através da permutação cíclica dos subscritos na ordem p, i, j, m . O volume do elemento V^e é calculado por:

$$6V^e = \begin{vmatrix} 1 & x_i & y_i & z_i \\ 1 & x_j & y_j & z_j \\ 1 & x_m & y_m & z_m \\ 1 & x_p & y_p & z_p \end{vmatrix} \quad (3.24)$$

Aplicando-se as equações (3.22) e (3.23) na equação (3.21), obtém-se a matriz de condutividade térmica para o tetraedro, conforme:

$$\begin{aligned}
k^e = & \frac{k_x}{6V^e} \begin{bmatrix} b_i b_i & b_i b_j & b_i b_m & b_i b_p \\ & b_j b_j & b_j b_m & b_j b_p \\ & & b_m b_m & b_m b_p \\ sim. & & & b_p b_p \end{bmatrix} + \frac{k_y}{6V^e} \begin{bmatrix} c_i c_i & c_i c_j & c_i c_m & c_i c_p \\ & c_j c_j & c_j c_m & c_j c_p \\ & & c_m c_m & c_m c_p \\ sim. & & & c_p c_p \end{bmatrix} + \\
& + \frac{k_z}{6V^e} \begin{bmatrix} d_i d_i & d_i d_j & d_i d_m & d_i d_p \\ & d_j d_j & d_j d_m & d_j d_p \\ & & d_m d_m & d_m d_p \\ sim. & & & d_p d_p \end{bmatrix}
\end{aligned}
\tag{3.25}$$

3.3 Discretização Temporal utilizando o Método das Diferenças Finitas

Os algoritmos para discretização temporal são classificados como explícitos ou implícitos [14, 16, 25].

Os métodos explícitos são chamados de condicionalmente estáveis, pois necessitam de um passo de tempo menor que um certo passo de tempo crítico para que o algoritmo evolua corretamente sem divergir. Nesse método é necessário que se resolva um sistema de equações trivial, em cada passo de tempo, utilizando somente a solução do passo anterior para calcular a solução corrente.

Os métodos implícitos são ditos incondicionalmente estáveis. Neles pode-se utilizar passos de tempo maiores que os utilizados nos métodos explícitos. Apesar de se realizar uma análise mais rápida, no que diz respeito a passos de tempo, se comparada a um método explícito, para se obter a solução do passo de tempo corrente se necessita da solução do passo de tempo anterior e do atual, havendo a necessidade também de se solucionar um sistema de equações em cada passo de tempo.

Neste trabalho está sendo utilizado o método implícito, que irá oferecer vantagens computacionais e a viabilidade de se fazer uma análise em escala de bacia,

ao ser usado em conjunto com uma estrutura de dados por arestas, que será mostrada no próximo capítulo.

Dentre os métodos implícitos conhecidos, o que mais se adapta para resolver equações da forma abaixo é o método trapezoidal [14].

$$\mathbf{M}\dot{\mathbf{u}} + \mathbf{K}\mathbf{u} = \mathbf{F} \quad (3.26)$$

onde \mathbf{u} é o vetor temperatura e $\dot{\mathbf{u}}$ é a derivada da temperatura no tempo (t).

$$\tilde{\mathbf{u}}_1 = \mathbf{u}_0 + (1 - \alpha)\Delta t\dot{\mathbf{u}}_0 \quad (3.27)$$

$$\dot{\mathbf{u}}_1 = (\mathbf{M} + \alpha\Delta t\mathbf{K})^{-1}(\mathbf{F}_0 - \mathbf{K}\tilde{\mathbf{u}}_1) \quad (3.28)$$

$$\left\{ \begin{array}{l} \mathbf{M}_{\text{ef}} = \mathbf{M} + \alpha\Delta t\mathbf{K} \\ \mathbf{F} = \mathbf{F}_0 - \mathbf{K}\tilde{\mathbf{u}}_1 \end{array} \right. \quad \alpha = 1/2 \quad (3.29a)$$

$$(3.29b)$$

$$\mathbf{u}_1 = \tilde{\mathbf{u}}_1 + \alpha\Delta t\dot{\mathbf{u}}_1 \quad (3.30)$$

O valor inicial \mathbf{u}_0 é dado e o valor $\dot{\mathbf{u}}_0$ é calculado através da equação (3.27), como mostra a equação abaixo:

$$\mathbf{M}\dot{\mathbf{u}}_0 = \mathbf{F}_0 - \mathbf{K}\mathbf{u}_0 \quad (3.31)$$

3.4 Solução do Sistema de Equações

Seja o sistema de equações abaixo, semelhante ao sistema de equações (3.28):

$$\mathbf{A}\mathbf{x} = \mathbf{b} \quad (3.32)$$

onde \mathbf{A} é uma matriz esparsa, simétrica, positiva e definida, \mathbf{x} é o vetor de incógnitas nodais e \mathbf{b} é o vetor de termos independentes.

Esse tipo de sistema normalmente é resolvido por um método direto de solução, como por exemplo, o método de Gauss. Entretanto, as estratégias adotadas em soluções diretas podem se tornar inviáveis para a análise de problemas que envolvem um grande número de equações devido ao enorme esforço computacional e demanda de memória [21].

Foi escolhido então o Método dos Gradientes Conjugados com o pré-condicionador de Jacobi [5, 15], para resolver o sistema de equações. Este método, combinado com a estrutura de dados por aresta, que será mostrada no capítulo seguinte, oferece vantagens computacionais bastante relevantes, quando se possui uma malha com um grande número de elementos.

O Método dos Gradientes Conjugados explora o fato de que a solução do sistema de equações (3.32) equivale à minimização do funcional quadrático ou funcional de energia

$$Q = \frac{1}{2} \mathbf{x}^T \cdot \mathbf{A}\mathbf{x} - \mathbf{x}^T \cdot \mathbf{b} \quad (3.33)$$

A convergência do Método dos Gradientes Conjugados é proporcional à razão entre o menor e o maior autovalor do espectro de \mathbf{A} , λ_n e λ_1 respectivamente. Ou seja, a grandeza

$$k(\mathbf{A}) = \frac{\lambda_n}{\lambda_1} \quad (3.34)$$

é denominada razão espectral ou número de condicionamento espectral, e mede a eficiência do método numérico. Quando $k(\mathbf{A}) \rightarrow 1$ o método é eficiente. Caso contrário, quando a razão espectral se apresenta muito maior que a unidade, torna-se necessário a utilização de uma técnica de pré-condicionamento. Esta técnica tem como efeito reduzir o número do condicionamento espectral, e com isso reduzir o número de iterações para obtenção da solução.

Portanto, com o objetivo de atingir uma convergência mais rápida, o Método dos Gradientes Conjugados pode ser aplicado a um sistema equivalente ao original que

tenha sido pré-condicionado. Pré-multiplicando-se a equação original do sistema pela matriz não singular \mathbf{B} ,

$$\mathbf{B}^{-1} \mathbf{A} \mathbf{x} = \mathbf{B}^{-1} \mathbf{b} \quad (3.35)$$

e aplicando-se o Método dos Gradientes Conjugados ao sistema pré-condicionado acima, obtém-se o algoritmo dos Gradientes Conjugados Pré-condicionado, cujos passos são apresentados no quadro a seguir:

Passo 1: Inicializar

$$k = 0$$

$$\mathbf{x}_0 = \text{dado (usualmente } x_0 = 0)$$

$$\mathbf{r}_0 = \mathbf{b} - \mathbf{A}\mathbf{x}_0$$

$$\mathbf{p}_0 = \mathbf{z}_0 = \mathbf{B}^{-1} \mathbf{r}_0$$

Passo 2: Atualizar solução e resíduo

$$k = k + 1$$

$$\alpha_k = \mathbf{r}_{k-1}^t \cdot \mathbf{z}_{k-1} / \left(\mathbf{p}_{k-1}^t \cdot \mathbf{A}\mathbf{p}_{k-1} \right)$$

$$\mathbf{x}_k = \mathbf{x}_{k-1} + \alpha_k \mathbf{p}_{k-1}$$

$$\mathbf{r}_k = \mathbf{r}_{k-1} - \alpha_k \mathbf{A}\mathbf{p}_{k-1}$$

Passo 3: Atualizar a direção conjugada

$$\mathbf{z}_k = \mathbf{B}^{-1} \mathbf{r}_k$$

$$\beta_k = \mathbf{r}_k^t \cdot \mathbf{z}_k / \left(\mathbf{r}_{k-1}^t \cdot \mathbf{z}_{k-1} \right)$$

$$\mathbf{p}_k = \mathbf{z}_k + \beta_k \mathbf{p}_{k-1}$$

Passo 4: Verificação da convergência

$$\text{Se } \left(\mathbf{r}_k^t \cdot \mathbf{z}_k \right)^{1/2} \leq \underline{\text{tolerância}} \cdot \left(\mathbf{r}_0^t \cdot \mathbf{z}_0 \right)^{1/2} \text{ então}$$

$$\text{Se } \left(\mathbf{r}_k^t \cdot \mathbf{r}_k \right)^{1/2} < \underline{\text{tolerância}} \cdot \left(\mathbf{r}_0^t \cdot \mathbf{r}_0 \right)^{1/2} \text{ então}$$

vá para o passo 2

fim se

Senão

vá para o passo 2

fim se

Quadro (3.1): Esquema do Método dos Gradientes Conjugados Pré-condicionado.

Capítulo 4

Método dos Elementos Finitos utilizando Estrutura de Dados baseada nas Arestas dos Elementos

4.1 Introdução

O método iterativo dos Gradientes Conjugados pré-condicionados, conforme descrito no final do capítulo anterior, faz o uso repetidas vezes da multiplicação matriz-vetor $A.p$. O rearranjo da estrutura de dados por aresta [9, 22] proporciona uma aceleração dessas operações matriz-vetor.

Apesar de termos um número de arestas maior que o número de elementos, na ordem de 1,5 vezes para malhas de tetraedros, e ainda ter que se montar essa estrutura internamente, como pré-processamento, o ganho nas operações matriz-vetor e redução de memória são significativos [22, 25].

Para fazer essa transição entre a estrutura de dados por elementos para a estrutura de dados por arestas, utilizam-se funções de espalhamento [18, 10] para montar as arestas de maneira eficiente, podendo-se então montar agrupamentos de superarestas [19] e finalmente blocos de arestas para agrupamentos de superarestas, conforme será mostrado ao longo deste capítulo.

Essa nova organização oferece um aumento do desempenho computacional, pois reduz o total de operações de ponto flutuante (*floating point operations* – flops) e endereçamento indireto (e/i). Com isso, as operações de avaliação do resíduo que são realizadas, ao utilizar um método iterativo para resolver o sistema de equações, são otimizadas.

4.2 Estrutura de dados baseada nas arestas do elemento tetraédrico

A matriz das arestas é calculada a partir da matriz dos elementos, da seguinte forma: acumulam-se as contribuições dos elementos para cada aresta, através dos coeficientes dos elementos que têm aquela aresta em comum [7].

A figura abaixo mostra, de forma simplificada para um elemento triangular, a contribuição de 2 elementos diferentes para uma mesma aresta.

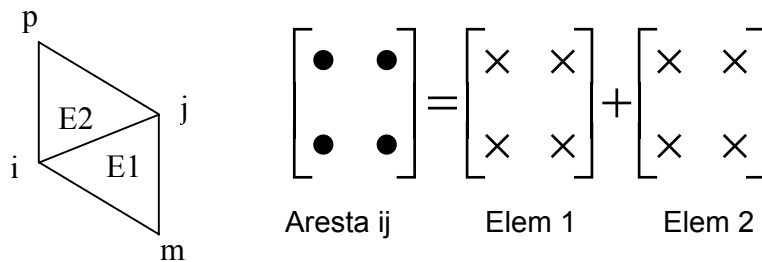
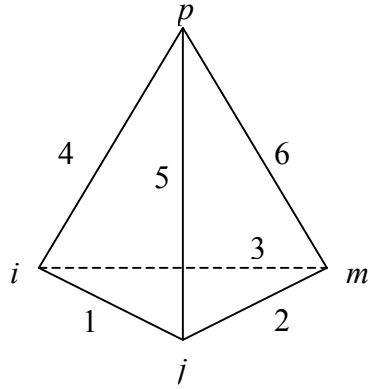


Figura 4.1 – Matriz da aresta ij, que possui n elementos em comum, para n=2:

Sendo assim, a matriz **ma** de uma aresta ij, é o somatório das contribuições das matrizes **me** dos elementos que possuem essa aresta em comum (nelare), sendo calculada segundo:

$$\mathbf{ma}_{ij} = \begin{bmatrix} \sum^{nelare} me_{ii} & \sum^{nelare} me_{ij} \\ \sum^{nelare} me_{ji} & \sum^{nelare} me_{jj} \end{bmatrix} \quad (4.1)$$

A figura a seguir mostra o desmembramento do elemento tetraédrico nas suas 6 arestas.



$$\begin{bmatrix} \bullet & \bullet & \bullet & \bullet \\ \bullet & \bullet & \bullet & \bullet \\ \bullet & \bullet & \bullet & \bullet \\ \bullet & \bullet & \bullet & \bullet \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} \times & \times & 0 & 0 \\ \times & \times & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 \end{bmatrix} + \begin{bmatrix} 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & \times & \times & 0 \\ 0 & \times & \times & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 \end{bmatrix} + \begin{bmatrix} \times & 0 & \times & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 \\ \times & 0 & \times & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 \end{bmatrix}$$

Elemento
Aresta1
Aresta2
Aresta3

$$+ \begin{bmatrix} \times & 0 & 0 & \times \\ 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 \\ \times & 0 & 0 & \times \end{bmatrix} + \begin{bmatrix} 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & \times & 0 & \times \\ 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & \times & 0 & \times \end{bmatrix} + \begin{bmatrix} 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & \times & \times \\ 0 & 0 & \times & \times \end{bmatrix}$$

Aresta 4
Aresta 5
Aresta 6

Figura 4.2 – Matriz das arestas a partir da matriz do elemento tetraédrico

No caso estático, ou seja, em regime permanente, a deficiência de posto observada nos operadores discretos permite que sejam armazenados apenas um coeficiente por aresta, aqueles fora da diagonal.

No caso transiente, a deficiência de posto não se verifica após a discretização temporal. Desta forma, para a correta representação da matriz de massa efetiva do sistema é necessário o armazenamento de dois coeficientes por arestas.

A geração da estrutura de dados por arestas a partir da estrutura de dados por elementos, como estudado por Martins [21], consiste em percorrer toda a malha pelos seus elementos, e para cada um pesquisar as incidências de suas arestas. Para isso ser feito sem se ter um grande esforço computacional, é utilizada uma tabela de espalhamento (*hash table*), que é uma técnica de endereçamento indireto, na qual o

endereço da posição do registro no arranjo é calculado através de uma função matemática [18], obtendo assim acesso direto ao vetor de arestas.

Como o Método dos Elementos Finitos é um método baseado em malhas não estruturadas, conseqüentemente, exige estruturas de dados calcadas em endereçamentos indiretos.

Para essa troca de estrutura ser realmente vantajosa, é necessário que se agrupem as arestas que possuem nós em comum, reduzindo assim repetições de e/i , ou seja, utilizando-se ao máximo os dados buscados na memória.

Conforme foi dito, temos um número de arestas, na ordem de 1,5 vezes, maior que o número de elementos para malhas de tetraedros. Ou seja, os valores para endereçamento direto e flops para uma aresta deve ser multiplicados por este coeficiente, considerando-se toda a malha. Esta multiplicação acarreta à igualdade da quantidade de endereçamento indireto mas, ainda, grande vantagem na quantidade de flops para o esquema aresta, comparativamente ao esquema por elementos. A redução das operações de endereçamento indireto se dá na medida em que, por exemplo, agrupando-se duas arestas que possuem nó em comum, em vez de 4 operações de endereçamento indireto, têm-se 3.

O objetivo do agrupamento então é o de promover uma redução de acessos à memória, frente ao volume de operações de ponto flutuante necessárias.

Três tipos de agrupamentos denominados *stars* (estrelas), *chains* (cadeias) e *superedges* (superarestas) foram propostos por Löhner [19]. Neste trabalho, o agrupamento utilizado foi o de superarestas (*superedges*). Tal agrupamento sugere a formação de polígonos ou poliedros, havendo um maior número de nós comuns às diferentes arestas, resultando em uma redução de e/i . O agrupamento de superarestas para tetraedros, conforme a figura (4.3), pode ser feito por três grupos distintos, denominados por Martins [21] de: grupos de 6 arestas (*superedge 6*), grupos de 3 arestas (*superedge 3*) ou arestas simples.

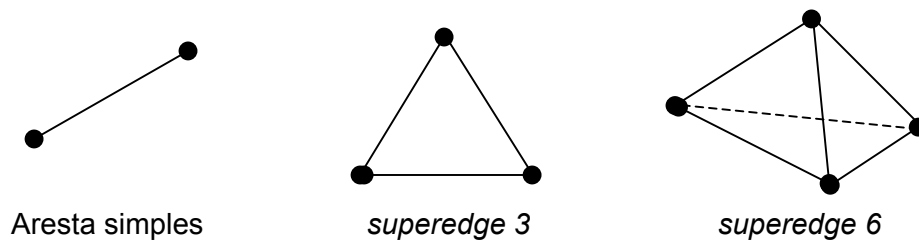


Figura 4.3 – Agrupamento de *superedges*

Em uma malha não estruturada é quase impossível que não haja arestas de algum dos três grupos acima citados, e, quanto mais arestas for possível se ter no grupo de *superedge 6*, seguido do *superedge 3* e por fim do grupo das arestas simples, mais eficiente será a execução do programa.

A montagem das arestas em agrupamentos de *superedges* é feita reordenando a lista de arestas. Para isso é necessário desmembrar os elementos em suas arestas, para assim gerar uma incidência de elementos por arestas.

Para montar os agrupamentos, verifica-se primeiramente se as arestas dos elementos formam algum agrupamento para então acrescentá-las ao agrupamento de *superedge 6*, tentando desta forma montar o máximo número possível de agrupamentos de *superedge 6*. Em seguida, verifica-se se as arestas do elemento já pertencem a algum agrupamento para então acrescentá-las ao agrupamento de *superedge 3*, senão acrescentá-las à lista de arestas simples.

Na figura (4.4) a seguir tem-se a disposição de agrupamentos de *superedge 6*, *superedge 3* e arestas simples, de um cubo discretizado por tetraedros.

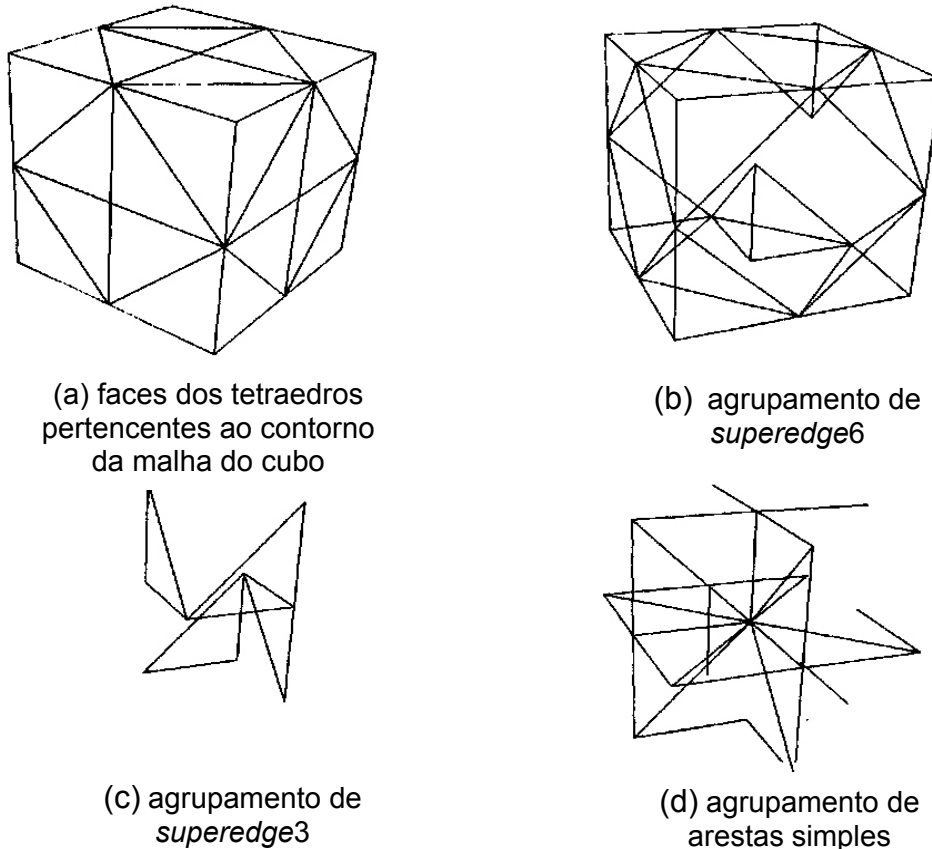


Figura 4.4 – Disposição dos agrupamentos *superedges* para um cubo discretizado por tetraedros, segundo [21].

Os algoritmos que realizam as operações de multiplicação matriz vetor, muito utilizada no método iterativo descrito no capítulo anterior, apresentam um inibidor natural de vetorização, que é a operação de espalhamento. Uma vez que diversos elementos podem concorrer no mesmo nó, introduz-se uma dependência recursiva nos dados. Para isso ser evitado, deve-se executar outra blocagem, desta vez montando os blocos dos agrupamentos *superedges* de arestas disjuntos pelos nós.

Para fazer tal blocagem, utiliza-se para cada um dos três agrupamentos de *superedges* a técnica da reordenação das arestas em blocos internamente disjuntos, para que nenhum bloco de arestas simples, de *superedge 3* ou *superedge 6* possua nós em comum. O bloco das arestas para cada agrupamento são montados de maneira semelhante ao dos elementos.

4.2.1 Matriz de condutividade térmica

A deficiência de posto observada nos operadores discretos, permite que sejam armazenados apenas os coeficientes fora da diagonal, um por aresta.

A partir do estudo do método combinado elementos finitos/volume de controle feito para elementos triangulares [11], foi considerado que o termo T_{ij} para cada aresta ij do elemento tetraédrico possui a seguinte propriedade:

$$T_{ij}^e = - \left(\frac{k_x b_i b_j + k_y c_i c_j + k_z d_i d_j}{36V^e} \right), \quad i \neq j \quad (4.2)$$

Verifica-se que $T_{ij}^e = T_{ji}^e$.

Portanto a matriz de condutividade térmica (3.22) pode ser reescrita como:

$$K^e = \begin{bmatrix} T_{ij}^e + T_{im}^e + T_{ip}^e & -T_{ij}^e & -T_{im}^e & -T_{ip}^e \\ -T_{ij}^e & T_{ij}^e + T_{jm}^e + T_{jp}^e & -T_{jm}^e & -T_{jp}^e \\ -T_{im}^e & -T_{jm}^e & T_{im}^e + T_{jm}^e + T_{mp}^e & -T_{mp}^e \\ -T_{ip}^e & -T_{jp}^e & -T_{mp}^e & T_{ip}^e + T_{jp}^e + T_{mp}^e \end{bmatrix} \quad (4.3)$$

Pode-se definir uma parcela para cada aresta de cada elemento:

$$T_{ij}^e = \begin{bmatrix} T_{ij} & -T_{ij} \\ -T_{ij} & T_{ij} \end{bmatrix} \quad (4.4a)$$

$$T_{im}^e = \begin{bmatrix} T_{im} & -T_{im} \\ -T_{im} & T_{im} \end{bmatrix} \quad (4.4b)$$

$$T_{ip}^e = \begin{bmatrix} T_{ip} & -T_{ip} \\ -T_{ip} & T_{ip} \end{bmatrix} \quad (4.4c)$$

$$T_{jm}^e = \begin{bmatrix} T_{jm} & -T_{jm} \\ -T_{jm} & T_{jm} \end{bmatrix} \quad (4.4d)$$

$$T_{jp}^e = \begin{bmatrix} T_{jp} & -T_{jp} \\ -T_{jp} & T_{jp} \end{bmatrix} \quad (4.4e)$$

$$T_{mp}^e = \begin{bmatrix} T_{mp} & -T_{mp} \\ -T_{mp} & T_{mp} \end{bmatrix} \quad (4.4f)$$

Considerando-se a contribuição de n elementos vizinhos pela aresta ij , tem-se:

$$T_{ij}^A = \begin{bmatrix} \sum_{k=1}^n T_{ij}^k & -\sum_{k=1}^n T_{ij}^k \\ -\sum_{k=1}^n T_{ij}^k & \sum_{k=1}^n T_{ij}^k \end{bmatrix} \quad (4.5)$$

4.2.2 Matriz de massa

Para a análise transiente, utilizando o método proposto na seção (3.3), torna-se necessário a montagem das matrizes de massa e massa efetiva, por aresta, como mostra a equação (3.29a).

Para a montagem da matriz de massa, da mesma forma que na matriz de condutividade térmica, é possível armazenar somente um coeficiente por aresta.

A matriz de massa tem a forma mostrada na equação (3.17). Como neste trabalho estão se considerando apenas materiais isotrópicos, a matriz de massa pode ser reescrita da forma abaixo, assumindo-se que em cada nó chegam três arestas.

$$M^e = \begin{bmatrix} \frac{2}{3}(Tm_{ij}^e + Tm_{im}^e + Tm_{ip}^e) & Tm_{ij}^e & Tm_{im}^e & Tm_{ip}^e \\ Tm_{ij}^e & \frac{2}{3}(Tm_{ij}^e + Tm_{jm}^e + Tm_{jp}^e) & Tm_{jm}^e & Tm_{jp}^e \\ Tm_{im}^e & Tm_{jm}^e & \frac{2}{3}(Tm_{im}^e + Tm_{jm}^e + Tm_{mp}^e) & Tm_{mp}^e \\ Tm_{ip}^e & Tm_{jp}^e & Tm_{mp}^e & \frac{2}{3}(Tm_{ip}^e + Tm_{jp}^e + Tm_{mp}^e) \end{bmatrix} \quad (4.6)$$

Pode-se definir as seguintes parcelas para cada aresta de cada elemento:

$$Tm_{ij}^e = \frac{\rho c 6V}{120} \begin{bmatrix} 2/3 & 1 \\ 1 & 2/3 \end{bmatrix} = Tm_{im}^e = Tm_{ip}^e = Tm_{jm}^e = Tm_{jp}^e = Tm_{mp}^e \quad (4.7)$$

Considerando-se a contribuição de n elementos vizinhos pela aresta ij , tem-se:

$$Tm_{ij}^A = \begin{bmatrix} \frac{2}{3} \sum_{k=1}^n Tm_{ij}^k & \sum_{k=1}^n Tm_{ij}^k \\ \sum_{k=1}^n Tm_{ij}^k & \frac{2}{3} \sum_{k=1}^n Tm_{ij}^k \end{bmatrix} \quad (4.8)$$

Deve-se fazer a seguinte consideração para a forma da matriz de massa: no caso de se ter materiais ortotrópicos, a hipótese de que chegam 3 arestas em cada nó, então a diagonal é 2/3 da soma dos termos da mesma linha fora da diagonal, não deve ser utilizada. Deve-se utilizar para materiais ortotrópicos a montagem da diagonal proposta por Souza [25].

4.2.3 Matriz de massa efetiva

A matriz de massa é obtida quando se faz a análise no tempo, isto é, em regime transiente, como mostra a equação (3.29a). Após a discretização temporal, a deficiência de posto não mais se verifica. Desta forma, torna-se necessário o armazenamento de 2 coeficientes por aresta para representar a matriz de massa efetiva.

$$Mef^e = M^e + \alpha\Delta t K^e \quad (4.9)$$

$$Mef^e = \begin{bmatrix} \frac{2}{3}(Tm_{ij}^e + Tm_{im}^e + Tm_{ip}^e) & Tm_{ij}^e & Tm_{im}^e & Tm_{ip}^e \\ Tm_{ij}^e & \frac{2}{3}(Tm_{ij}^e + Tm_{jm}^e + Tm_{jp}^e) & Tm_{jm}^e & Tm_{jp}^e \\ Tm_{im}^e & Tm_{jm}^e & \frac{2}{3}(Tm_{im}^e + Tm_{jm}^e + Tm_{mp}^e) & Tm_{mp}^e \\ Tm_{ip}^e & Tm_{jp}^e & Tm_{mp}^e & \frac{2}{3}(Tm_{ip}^e + Tm_{jp}^e + Tm_{mp}^e) \end{bmatrix} + \alpha\Delta t \begin{bmatrix} T_{ij}^e + T_{im}^e + T_{ip}^e & -T_{ij}^e & -T_{im}^e & -T_{ip}^e \\ -T_{ij}^e & T_{ij}^e + T_{jm}^e + T_{jp}^e & -T_{jm}^e & -T_{jp}^e \\ -T_{im}^e & -T_{jm}^e & T_{im}^e + T_{jm}^e + T_{mp}^e & -T_{mp}^e \\ -T_{ip}^e & -T_{jp}^e & -T_{mp}^e & T_{ip}^e + T_{jp}^e + T_{mp}^e \end{bmatrix} \quad (4.10)$$

Considerando as contribuições para a aresta ij, tem-se:

$$Mef_{ij}^A = T_{ij}^A + \alpha\Delta t T_{ij}^A \quad (4.11)$$

4.3 Multiplicação matriz-vetor

O método iterativo dos Gradientes Conjugados pré-condicionados, conforme já foi mostrado, faz o uso repetidas vezes da multiplicação matriz-vetor $A.p$. Tal operação em conjunto com a estrutura de dados por aresta possui características que serão mostradas a seguir:

4.3.1 Multiplicação matriz-vetor (aresta simples)

Como foi mostrada na seção 3.4, a matriz A não chega a ser explicitamente formada, e o produto matriz-vetor aresta por aresta é calculado da seguinte forma [21]:

$$\mathbf{Ap} = \sum_{a=1}^{Nedges} \mathbf{A}_a \mathbf{p}_a \quad (4.12)$$

onde $Nedges$ é o número de arestas da malha, \mathbf{A}_a é a matriz da aresta e \mathbf{p}_a são as componentes de \mathbf{p} restritas aos graus de liberdade da aresta. Desta forma, a multiplicação matriz-vetor é efetuada, para cada aresta, da seguinte forma:

Deve-se primeiramente localizar as componentes do arranjo global \mathbf{p} para os graus de liberdade da aresta, ou seja, restrinja \mathbf{p} e \mathbf{p}_a .

Na multiplicação matriz-vetor de aresta simples tem-se então uma aresta apenas e dois nós, como mostra a figura (4.5).

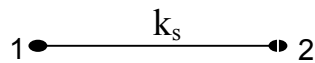


Figura 4.5 – Aresta Simples

Sendo assim o produto $\mathbf{A}_a \mathbf{p}_a$ fica da seguinte forma:

$$\begin{bmatrix} Tf(1, ks) & Tf(2, ks) \\ Tf(2, ks) & Tf(1, ks) \end{bmatrix} \begin{Bmatrix} p_1 \\ p_2 \end{Bmatrix} \quad (4.13)$$

$$ap1 = Tf(1, ks) * p_1 + Tf(2, ks) * p_2 \quad (4.14a)$$

$$ap2 = Tf(2, ks) * p_1 + Tf(1, ks) * p_2 \quad (4.14b)$$

Esse resultado \mathbf{ap}_a deve ser espalhado para os graus de liberdade globais do problema, ou seja, espalhar \mathbf{ap}_a para \mathbf{ap} , acumulando os resultados.

As operações de localização e espalhamento são efetuadas através de um arranjo $lm(2, Nedges)$. Este arranjo, que define o mapeamento entre os graus de liberdade locais de aresta e os graus de liberdade globais do problema, é semelhante ao usado na estrutura de dados elemento por elemento presente na maioria das implementações do Método dos Elementos Finitos.

O quadro (4.1) apresenta o algoritmo de multiplicação matriz-vetor aresta por aresta:

```

do ks = 1, nedges
c   localizar as componentes globais de 'p'
    neq1 = lm (1,ks)
    neq2 = lm (2,ks)
    p1 = p (neq1)
    p2 = p (neq2)
c   multiplicação matriz-vetor aresta por aresta para este bloco
    ap1 = Tf (1,ks)*p1 + Tf (2,ks)*p2
    ap2 = Tf (2,ks)*p1 + Tf (1,ks)*p2
c   espalhar e acumular 'ap' global
    ap (neq1) = ap (neq1) + ap1
    ap (neq2) = ap (neq2) + ap2
end do

```

Quadro 4.1 – Multiplicação matriz-vetor aresta por aresta, totalizando 6 operações de endereçamento indireto (e/i) e 8 operações de ponto flutuante (flops).

4.3.2 Multiplicação matriz-vetor (*superedge3*)

Neste tipo de agrupamento, a matriz \mathbf{A} também não é explicitamente calculada, sendo o produto matriz-vetor para o grupo de 3 arestas calculado como [21]:

$$\mathbf{Ap} = \sum_{a=1}^{Nedges,3} (\mathbf{A}_a \mathbf{p}_a + \mathbf{A}_{a+1} \mathbf{p}_{a+1} + \mathbf{A}_{a+2} \mathbf{p}_{a+2}) \quad (4.15)$$

onde o laço é executado sobre o total de arestas da malha ($Nedges$) de 3 em 3 arestas. \mathbf{A}_{a+i} são as matrizes de cada aresta formadora do grupo, \mathbf{p}_{a+i} são as componentes de \mathbf{p} restritas ao grau de liberdade de cada aresta formadora do grupo.

A multiplicação matriz-vetor é calculada então, para grupos de 3 arestas, da seguinte forma:

Deve-se primeiramente localizar as componentes do arranjo global \mathbf{p} para os graus de liberdade da arestas, ou seja, restrinja \mathbf{p} e $\mathbf{p}_{\text{grupo}}$.

No caso do grupo de 3 aresta, temos 3 arestas e 3 nós, como mostra a figura (4.6).

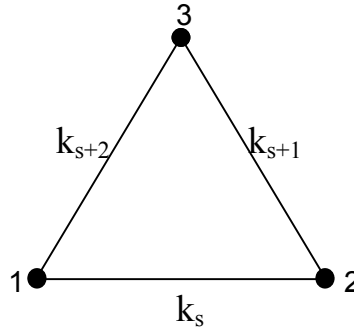


Figura 4.6 – Grupo de 3 arestas

Sendo assim o produto matriz-vetor do grupo $(\mathbf{A}_a \mathbf{p}_a + \mathbf{A}_{a+1} \mathbf{p}_{a+1} + \mathbf{A}_{a+2} \mathbf{p}_{a+2})$ fica da seguinte forma:

$$\begin{bmatrix} Tf(1, ks) + Tf(1, ks + 2) & Tf(2, ks) & Tf(2, ks + 2) \\ Tf(2, ks) & Tf(1, ks) + Tf(1, ks + 1) & Tf(2, ks + 1) \\ Tf(2, ks + 2) & Tf(2, ks + 1) & Tf(1, ks + 1) + Tf(1, ks + 2) \end{bmatrix} \begin{Bmatrix} p_1 \\ p_2 \\ p_3 \end{Bmatrix} \quad (4.16)$$

$$ap1 = (Tf(1, ks) + Tf(1, ks + 2))p_1 + Tf(2, ks)p_2 + Tf(2, ks + 2)p_3 \quad (4.17a)$$

$$ap2 = Tf(2, ks)p_1 + (Tf(1, ks) + Tf(1, ks + 1))p_2 + Tf(2, ks + 1)p_3 \quad (4.17b)$$

$$ap3 = Tf(2, ks + 2)p_1 + Tf(2, ks + 1)p_2 + (Tf(1, ks + 1) + Tf(1, ks + 2))p_3 \quad (4.17c)$$

Este resultado $\mathbf{ap}_{\text{grupo}}$ deve ser espalhado da mesma forma que foi feito para arestas simples.

Estas operações de localização e espalhamento são responsáveis pela ocorrência de endereçamentos indiretos. Nesta estratégia de agrupamento de 3 arestas, em vez de 6 operações de e/i para as 3 arestas, são realizadas apenas 3, visto que o grupo possui 3 nós. Estas duas operações caracterizam a grande

vantagem, em termos de processamento, da implementação de estrutura por aresta em relação à convencional por elemento.

O quadro (4.2) apresenta a multiplicação matriz-vetor para o grupo de 3 arestas.

```

do ks = iside+1, iside+nvec, 3
c  localizar as componentes globais de 'p'
    neq1 = lm(1, ks )
    neq2 = lm(2, ks )
    neq3 = lm(2, ks+1)
    p1  = p(neq1)
    p2  = p(neq2)
    p3  = p(neq3)
c  multiplicação matriz-vetor aresta por aresta para este bloco
    ap1 = (Tf(1,ks) + Tf(1,ks+2))*p1 + Tf(2,ks)*p2 + Tf(2,ks+2)*p3
    ap2 = Tf(2,ks)*p1 + (Tf(1,ks) + Tf(1,ks+1))*p2 + Tf(2,ks+1)*p3
    ap3 = Tf(2,ks+2)*p1 + Tf(2,ks+1)*p2 + (Tf(1,ks+1) + Tf(1,ks+2))*p3
c  espalhar e acumular 'ap' global
    ap(neq1) = ap(neq1) + ap 1
    ap(neq2) = ap(neq2) + ap 2
    ap(neq3) = ap(neq3) + ap 3
end do

```

Quadro 4.2 – Multiplicação matriz-vetor para grupo de 3 arestas, totalizando 9 operações de endereçamento indireto (e/i) e 21 operações de ponto flutuante (flops).

4.3.3 Multiplicação matriz-vetor (*superedge6*)

O produto matriz-vetor para o grupo de 6 arestas é calculado como [21]:

$$\mathbf{Ap} = \sum_{a=1}^{Nedges,3} (\mathbf{A}_a \mathbf{p}_a + \mathbf{A}_{a+1} \mathbf{p}_{a+1} + \mathbf{A}_{a+2} \mathbf{p}_{a+2} + \mathbf{A}_{a+3} \mathbf{p}_{a+3} + \mathbf{A}_{a+4} \mathbf{p}_{a+4} + \mathbf{A}_{a+5} \mathbf{p}_{a+5}) \quad (4.18)$$

onde o laço é executado sobre o total de arestas da malha (*Nedges*) de 6 em 6 arestas. \mathbf{A}_{a+i} são as matrizes de cada aresta formadora do grupo, \mathbf{p}_{a+i} são as componentes de \mathbf{p} restritas ao grau de liberdade de cada aresta formadora do grupo.

A multiplicação matriz-vetor é calculada então, para grupos de 6 arestas, da seguinte forma:

Deve-se primeiramente localizar as componentes do arranjo global \mathbf{p} para os graus de liberdade da aresta, ou seja, restrinja \mathbf{p} e $\mathbf{p}_{\text{grupo}}$.

No caso do grupo de 6 aresta, temos 6 arestas e 4 nós, como mostra a figura (4.7).

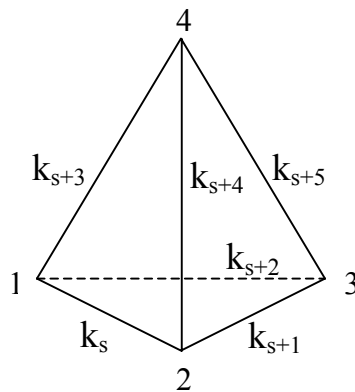


Figura 4.7 – Grupo de 6 arestas

Sendo assim o produto matriz-vetor do grupo $(\mathbf{A}_a \mathbf{p}_a + \mathbf{A}_{a+1} \mathbf{p}_{a+1} + \mathbf{A}_{a+2} \mathbf{p}_{a+2} + \mathbf{A}_{a+3} \mathbf{p}_{a+3} + \mathbf{A}_{a+4} \mathbf{p}_{a+4} + \mathbf{A}_{a+5} \mathbf{p}_{a+5})$ fica da forma do quadro (4.3):

Este resultado $\mathbf{ap}_{\text{grupo}}$ deve ser espalhado da mesma forma que foi feito para arestas simples.

Na estratégia de grupos de 6 arestas, em vez de 12 operações de e/i para as 6 arestas, são realizadas apenas 4, visto que o grupo possui 4 nós. Estas duas operações caracterizam a grande vantagem, em termos de tempo de processamento, da implementação da estrutura por aresta em relação à tradicional estrutura por elementos.

```

do ks = iside+1, iside+nvec, 6
c  localizar as componentes globais de 'p'
    neq1 = lm(1, ks )
    neq2 = lm(2, ks )
    neq3 = lm(2, ks+1)
    neq4 = lm(2, ks+3)
    p1  = p(neq1)
    p2  = p(neq2)
    p3  = p(neq3)
    p4  = p(neq4)
c  multiplicação matriz-vetor aresta por aresta para este bloco
    ap 1 = (Tf(1,ks)+Tf(1,ks+2)+Tf(1,ks+3))*p1+ Tf(2,ks)*p2+ Tf(2,ks+2)*p3+
Tf(2,ks+3)*p4
    ap 2 = Tf(2,ks)*p1+(Tf(1,ks)+Tf(1,ks+1)+ Tf(1,ks+4))*p2+ Tf(2,ks+1)*p3+
Tf(2,ks+4)*p4
    ap 3 = Tf(2,ks+2)*p1+ Tf(2,ks+1)*p2+ (Tf(1,ks+1)+Tf(1,ks+2)+Tf(1,ks+5))*p3+
Tf(2,ks+5)*p4
    ap 4 = Tf(2,ks+3)*p1 + Tf(2,ks+4)*p2 + Tf(2,ks+5)*p3 +
(Tf(1,ks+3)+Tf(1,ks+4)+Tf(1,ks+5))*p4
c  espalhar e acumular 'ap' global
    ap(neq1) = ap(neq1) + ap 1
    ap(neq2) = ap(neq2) + ap 2
    ap(neq3) = ap(neq3) + ap 3
    ap(neq4) = ap(neq4) + ap 4
end do

```

Quadro 4.3 – Multiplicação matriz-vetor para grupo de 6 arestas, totalizando 12 operações de endereçamento indireto (e/i) e 40 operações de ponto flutuante (flops).

Capítulo 5

Exemplos Numéricos

5.1 Introdução

Neste capítulo são apresentados, primeiramente exemplos unidimensionais e bidimensionais de validação da metodologia e da implementação e, em seguida, exemplos tridimensionais com aplicação à análise de bacias sedimentares.

5.2 Exemplos de Validação

5.2.1 Exemplo unidimensional

O exemplo unidimensional a seguir foi usado para validar a metodologia ao compará-lo com uma solução analítica [23]. Tal exemplo simula um espaço semi-infinito com temperatura uniforme prescrita na sua superfície. Sob tais condições o fluxo é unidimensional e há uma solução analítica para o problema.

A solução analítica, para condução de calor, tem a forma da equação a seguir:

$$T(x, t) = \left[\operatorname{erf} \left(\frac{x}{2\sqrt{K_x t}} \right) \cdot (t_i - t_0) \right] + t_0 \quad (5.1)$$

onde t_0 é o valor da condição de contorno, constante no tempo, em $x = 0$ m, K_x é o coeficiente de condutividade térmica na direção x e erf é a função erro:

A condição de contorno adotada foi a seguinte:

$$\text{C.c.: } T(0, t) = 1^\circ\text{C}$$

E a condição inicial:

$$\text{C.i.: } T(x, 0) = 0^\circ\text{C}$$

Os dados adotados para essa análise foram $\Delta t = 0.05$ segundos (passo de tempo), $K_x = 1.0$ W/mK e tolerância de 10^{-6} . A figura abaixo mostra o protótipo da barra utilizada para análise. A malha deste protótipo é composta por 7911 nós e 29399 elementos.

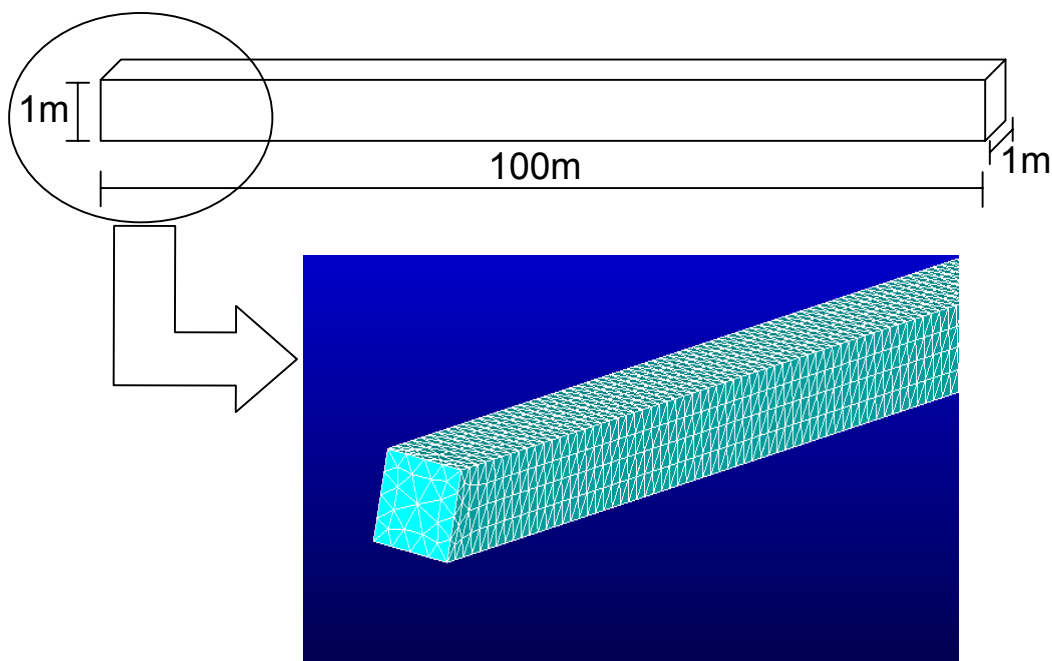


Figura 5.1 – Protótipo do exemplo unidimensional e parte da malha.

A equação analítica (5.1) utilizada para comparar os métodos de solução analítica e numérica é válida para espaços semi-infinitos. Sendo assim, para aplicá-la em um espaço finito, foi necessário escolher uma malha com uma grande dimensão na direção x , conforme mostrada na figura (5.1), e desenvolver a análise em $x=0.236\text{m}$. Desta forma, a condição de contorno de fluxo igual a zero em $x = 100\text{ m}$, existente no espaço finito, não influenciou a solução.

Solução em $x = 0,236\text{m}$

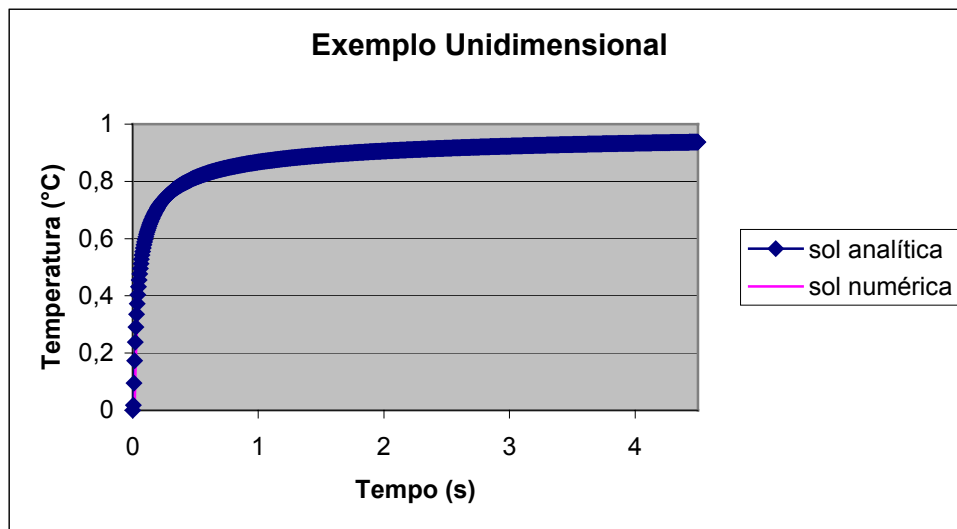


Figura 5.2 – Solução em $x = 0,236\text{m}$.

Como se pode observar no gráfico acima, a solução numérica obtida através do programa de elementos finitos foi coincidente com a solução analítica obtida através da equação (5.1).

5.2.2 Exemplo Bidimensional

Neste exemplo foi feita uma comparação entre a análise de um domo de sal em um programa bidimensional e no programa tridimensional atual.

Primeiramente foi feito a análise bidimensional da temperatura de uma malha já existente de uma estrutura salina, como mostra a figura (5.3). Tal análise foi obtida através do programa Heat [6], que faz a análise bidimensional da temperatura em perfis geológicos, e a análise da mesma estrutura geológica utilizando o programa atual.

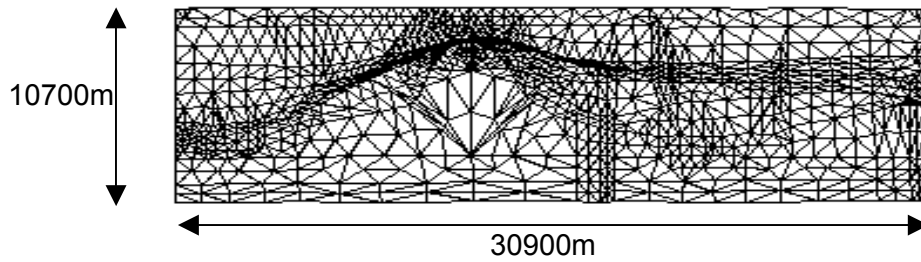


Figura 5.3 – Malha utilizada pelo programa bidimensional, com 1043 nós e 1984 elementos.

As condições de contorno adotadas foram as seguintes:

$$\text{C.c.: } T(x, 10700, t) = 0^\circ\text{C} \quad \text{e} \quad \dot{q}(x, 0, t) = 0.05296 \text{ W/m}^2$$

E a condição inicial:

$$\text{C.i.: } T(x, y, 0) = 0^\circ\text{C}$$

Os dados adotados para essa análise foram $\Delta t = 0.05$ milhões de anos (passo de tempo), nº de passos de tempo = 195, tolerância de 10^{-6} e o tempo de processamento, para se obter a solução abaixo, foi de 18s.

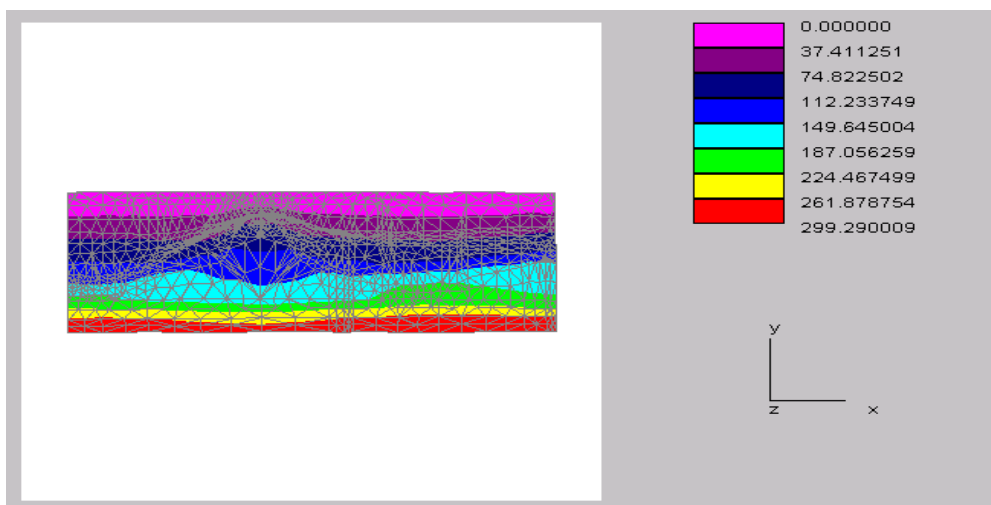


Figura 5.4 – Distribuição de temperatura, em $^\circ\text{C}$, obtida pelo programa bidimensional.

A partir da malha bidimensional utilizada anteriormente, foi feita uma malha tridimensional, considerando os mesmos materiais e geometria, mas tendo a dimensão máxima na direção $z = 1000$. Tal procedimento está explicado no Apêndice A.

A figura abaixo mostra o esquema das camadas e a seguir têm-se a tabela com as propriedades dos materiais .

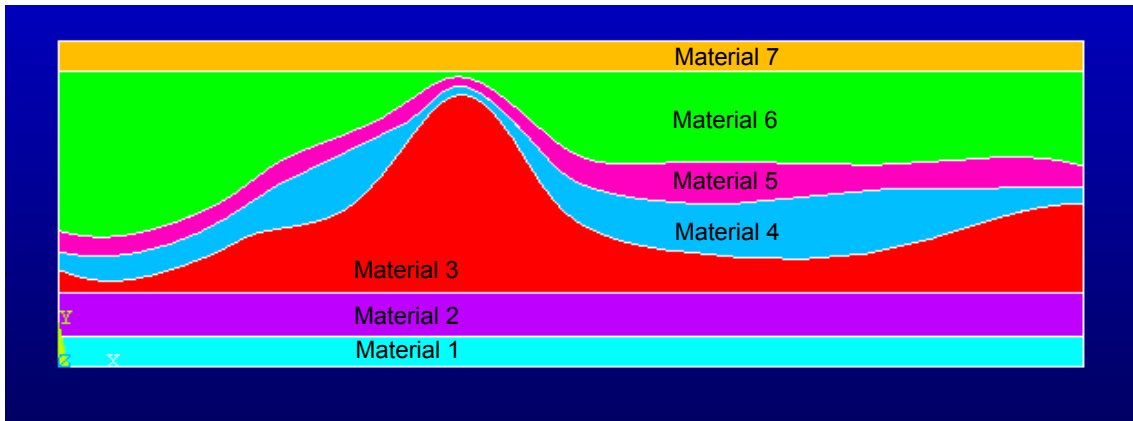


Figura 5.5 – Esquema das camadas.

Materiais	Condutividade Térmica	Densidade	Calor Específico
1	2.23 W/(mK)	2650 Kg/m ³	750 J/(kg.K)
2	2.86 W/(mK)	2650 Kg/m ³	750 J/(kg.K)
3	5.24 W/(mK)	2650 Kg/m ³	930 J/(kg.K)
4	2.86 W/(mK)	2650 Kg/m ³	750 J/(kg.K)
5	5.23 W/(mK)	2650 Kg/m ³	930 J/(kg.K)
6	5.23 W/(mK)	2650 Kg/m ³	930 J/(kg.K)
7	5.23 W/(mK)	2650 Kg/m ³	930 J/(kg.K)

Tabela 5.1 – Propriedade dos materiais (exemplo bidimensional).

A nova malha tridimensional, com as mesmas dimensões da malha bidimensional, mas com espessura na direção $z = 1000\text{m}$, com 6421 nós e 27040 elementos, está mostrada a seguir nas figuras (5.7) e (5.8).

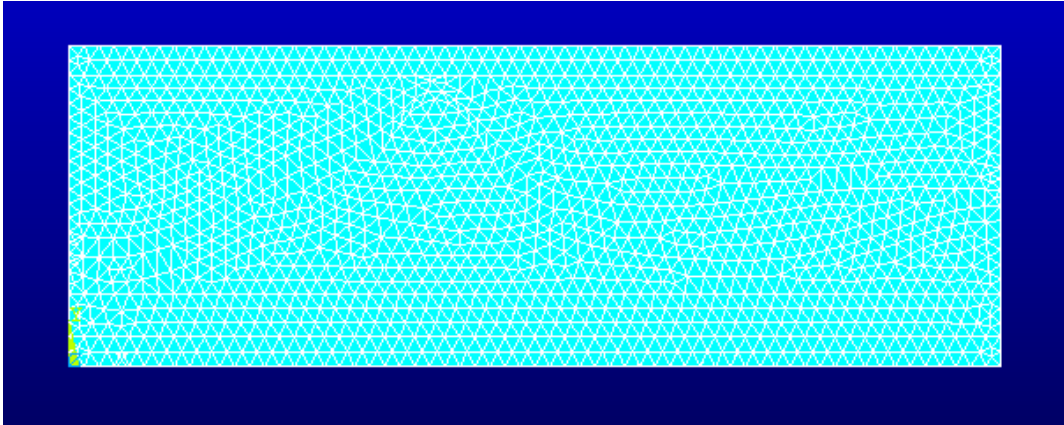


Figura 5.6– Malha computacional, com 6421 nós e 27040 elementos.

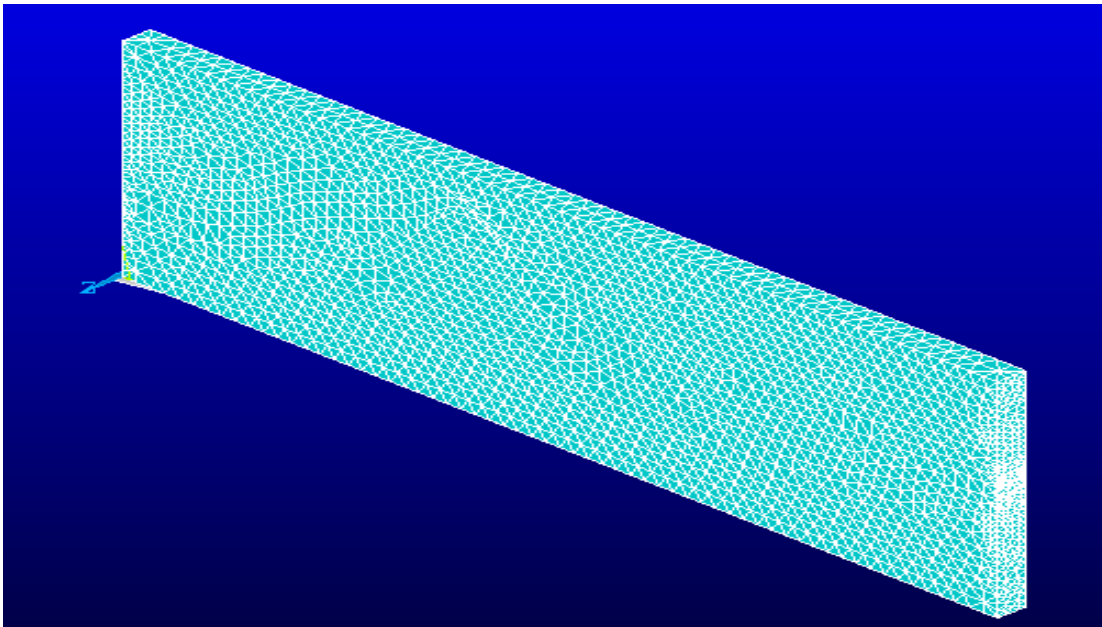


Figura 5.7 – Vista da malha computacional.

Esta malha foi submetida às mesmas condições de contorno e iniciais da malha bidimensional.

Os dados adotados para essa análise foram $\Delta t = 0.05$ milhões de anos (passo de tempo), nº de passos de tempo = 195, tolerância de 10^{-6} e o tempo de processamento, para se obter a solução abaixo, foi de 94.68s.

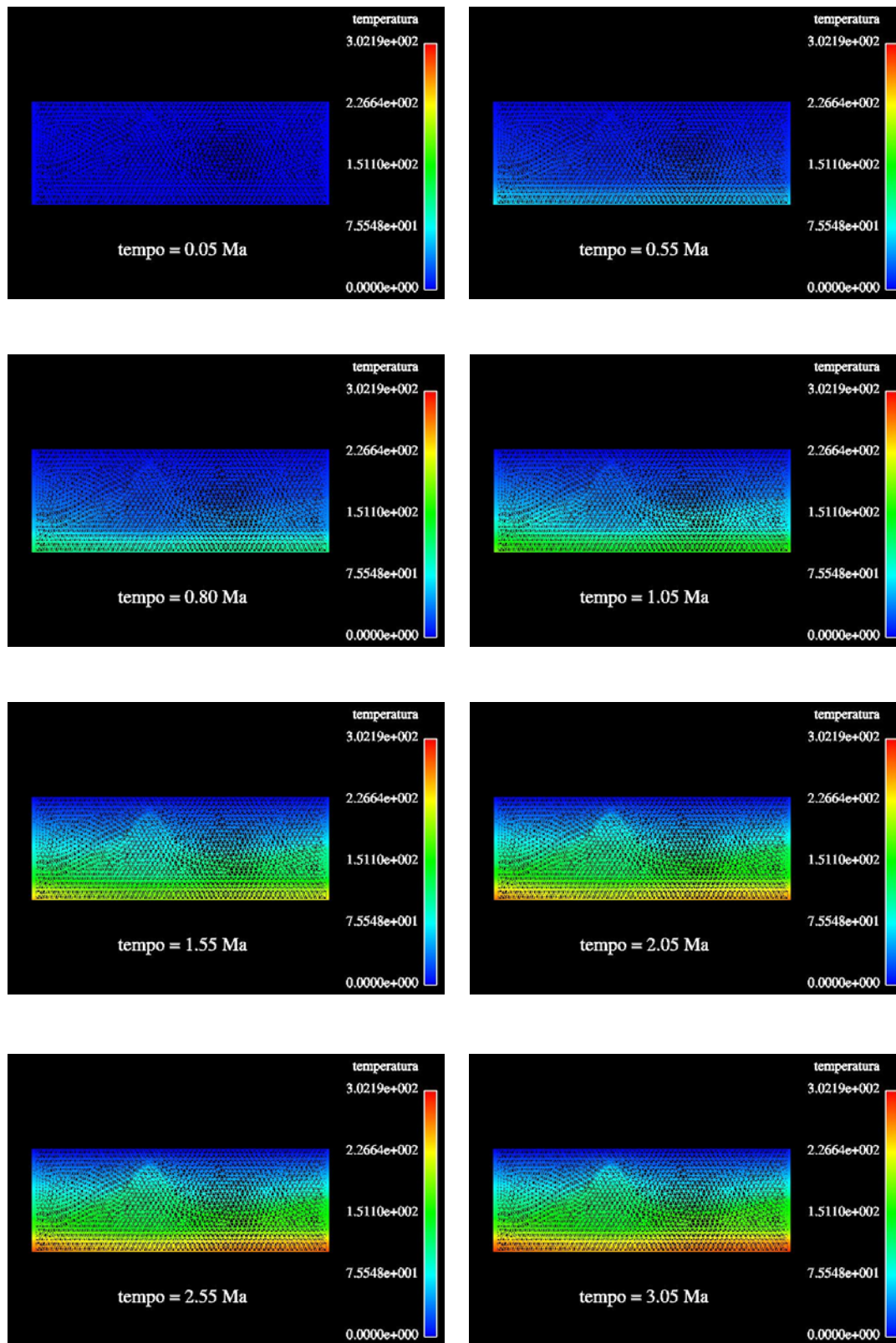


Figura 5.8 – Sequência de instantâneos da distribuição de temperatura, em °C, para a análise térmica transiente do exemplo bidimensional.

Observando a evolução da temperatura na figura (5.8), a partir de $t = 1.05$ Ma já se consegue visualizar a influência do domo de sal, caracterizando o efeito chaminé. Tal efeito provoca um aquecimento na região acima do domo de sal e um resfriamento na região abaixo do domo de sal. A figura (5.9) mostra as isothermas, caracterizando ainda mais o efeito chaminé.

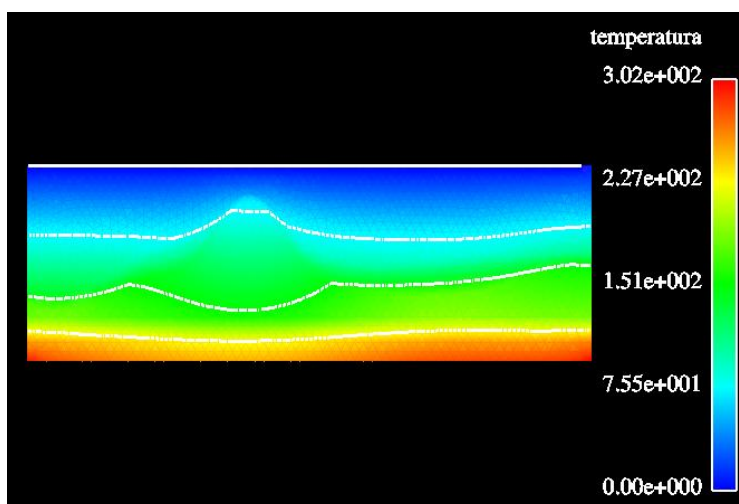


Figura (5.9) – Isothermas do exemplo analisado.

Os domos de sal possuem o papel de preservar, em termos de maturação, a matéria orgânica situada em grandes profundidades. Essa matéria orgânica, por estar em grandes profundidades, seria superaquecida, tornando-se inadequada para a geração de petróleo e gás natural. Ao existir um domo de sal acima dessa matéria orgânica, o mesmo proporcionará um efeito dissipador do calor, evitando seu superaquecimento.

Além disso, os domos de sal possuem um papel muito importante na formação de trapas para óleo e gás em muitas bacias sedimentares.

5.3 Exemplos Tridimensionais

5.3.1 Bloco com 4 materiais

Neste exemplo foi feita uma análise transiente em um bloco com 4 materiais, com as seguintes geometria e malha, conforme mostram as figuras (5.10) e (5.11):

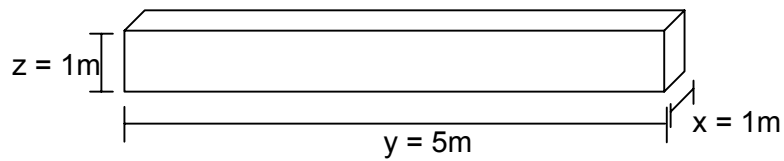


Figura 5.10 – Protótipo do bloco tridimensional.

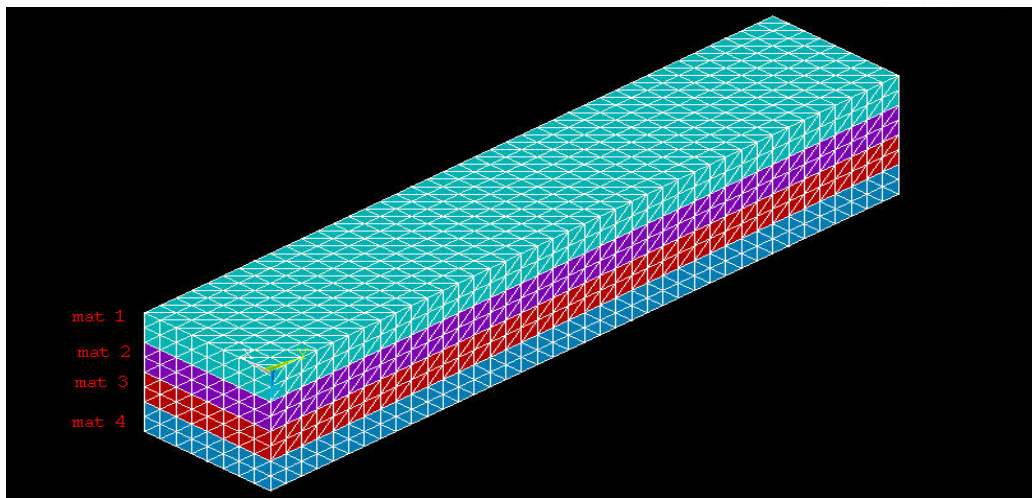


Figura 5.11 – Malha do bloco tridimensional.

Foi considerado os materiais folhelho, areia, sal e calcário como sendo respectivamente os materiais 1, 2, 3 e 4. Suas propriedades estão na tabela (5.2).

Material	Condutividade Térmica ($K_x = K_y = K_z$)	Densidade	Calor Específico
1 - Folhelho	1.93 W/(mK)	2680 Kg/m ³	900 J/(kg.K)
2 - Areia	5.57 W/(mK)	2650 Kg/m ³	850 J/(kg.K)
3 - Sal	6.43 W/(mK)	2200 Kg/m ³	855 J/(kg.K)
4 - Calcário	2.99 W/(mK)	2710 Kg/m ³	900 J/(kg.K)

Tabela 5.2 – Propriedade dos materiais (bloco com 4 materiais).

As condições de contorno adotadas para o estudo deste modelo foram:

$$\dot{q}(x,0,z,t) = 0,05296 \text{ W/m}^2 \text{ e } T(x,5,z,t) = 0 \text{ }^\circ\text{C}$$

E condição inicial de:

$$T(x,y,z,0) = 0 \text{ }^\circ\text{C}.$$

Os dados adotados para essa análise foram $\Delta t = 0.03$ milhões de anos (passo de tempo), n° de passos de tempo = 90 e tolerância de 10^{-6} . O tempo de processamento, para se obter a solução ilustrada a seguir, foi de 22.75s.

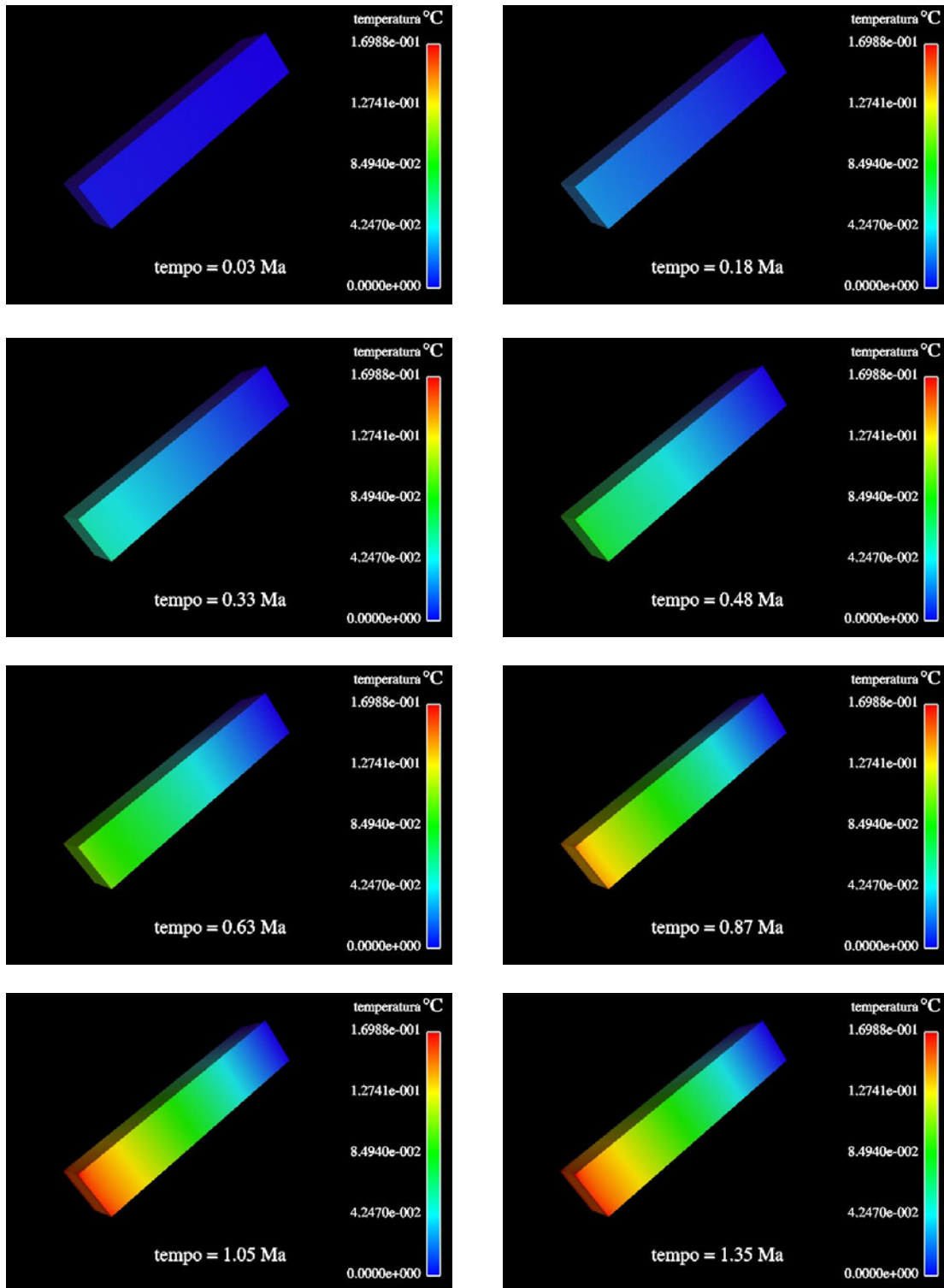


Figura 5.12 – Sequência de instantâneos da distribuição de temperatura para a análise térmica transiente do bloco tridimensional.

A figura (5.12) mostrou a evolução da temperatura no bloco com 4 materiais, e observou-se que o equilíbrio foi atingido em $t = 1.35 \text{ Ma}$.

A temperatura máxima obtida no estado de equilíbrio foi de 0.169°C . Sendo assim, a gradiente geotérmico obtido nesta análise foi de 33.8°C/m .

5.3.2 Bacia Sedimentar com 2 materiais

Neste exemplo foi feita a análise transiente de uma bacia sedimentar com 2 materiais. A geometria desta bacia está mostrada na figura (5.13).

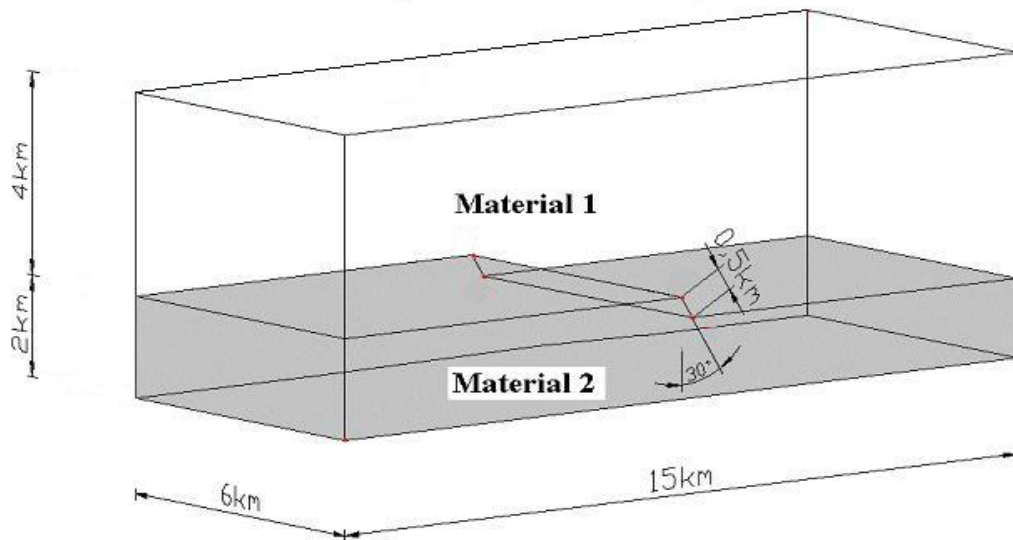


Figura 5.13 – Protótipo de uma Bacia Sedimentar com 2 materias.

A descontinuidade existente no limite superior do material 2 simula uma falha na estrutura geológica. Foi considerado o material 1 como um folhelho e o material 2 como uma areia. Suas propriedades estão na tabela (5.3).

As condições de contorno adotadas foram:

$$\dot{q}(x,0, z, t) = 0.05296 \text{ W/m}^2 \text{ e } T(x,6000, z, t) = 20^\circ\text{C}$$

E condição inicial:

$$T(x, y, z, 0) = 0^{\circ}\text{C}.$$

Os dados adotados para essa análise foram $\Delta t = 0.02$ milhões de anos (passo de tempo), n° de passos de tempo = 115 e tolerância de 10^{-6} .

Material	Condutividade térmica	Densidade	Calor específico
1 - Folhelho	$K = 1.93 \text{ W/(mK)}$	2680 Kg/m^3	900 J/(kg.K)
2 - Areia	$K = 5.57 \text{ W/(mK)}$	2650 Kg/m^3	850 J/(kg.K)

Tabela 5.3 – Propriedade dos materiais (bacia sedimentar com 2 materiais).

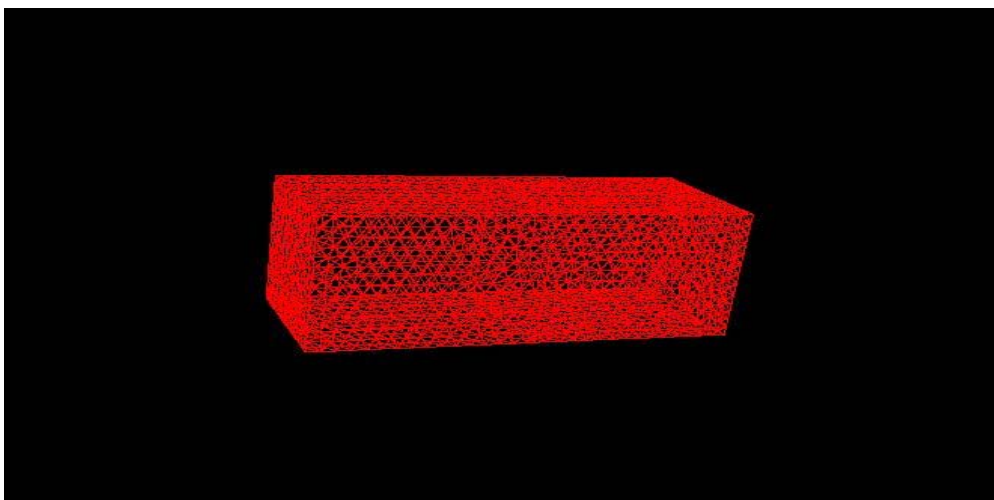


Figura 5.14 – Malha da Bacia com 5257 nós e 25001 elementos.

O tempo de processamento, para se obter a solução ilustrada a seguir, foi de 33.43s.

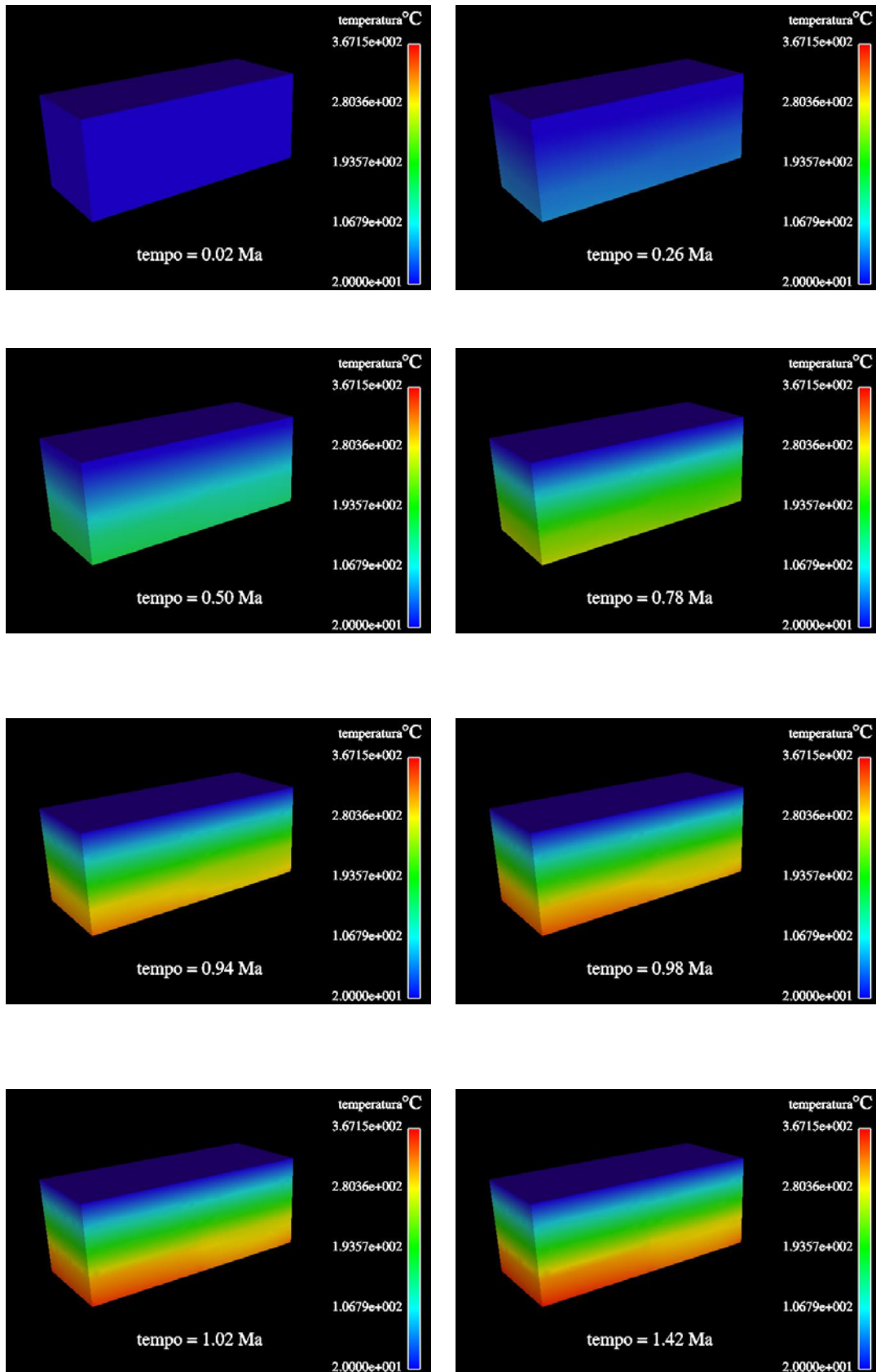


Figura 5.15 – Sequência de instantâneos da distribuição de temperatura para a análise térmica transiente da bacia sedimentar com 2 materiais.

A figura (5.15) mostra a análise transiente da temperatura numa bacia sedimentar com 2 materiais diferentes. O material da base da bacia é uma areia e o do topo um folhelho. Até $t = 0.94 \text{ Ma}$, a presença dos 2 diferentes materiais não é muito percebida. A partir daí é que se pode visualizar melhor os 2 diferentes materiais e a falha existente entre eles.

A temperatura máxima obtida no estado de equilíbrio é de 367°C . Sendo assim, a gradiente geotérmica obtida nesta análise foi de 46.3° C/m .

Capítulo 6

Conclusões

A implementação da estrutura de dados por arestas no problema de condução de calor em regime transiente, se mostrou eficiente quanto aos objetivos de otimização computacional de consumo de memória e tempo de CPU, de acordo com os resultados obtidos, viabilizando aplicações para problemas de grande escala, como os de escala de bacia, uma vez que as análises realizadas em tal área são muito detalhadas, possuindo um grande número de elementos.

Esta implementação pode ser vista como uma forma alternativa de manipulação e armazenamento das matrizes de elemento de forma mais econômica, gerando uma grande redução do número de endereçamento indiretos.

Conforme observado nos resultados obtidos, a utilização de uma estrutura de dados por arestas é justificada devido à diminuição do tempo de processamento, tornando viáveis análises transientes em malhas com um grande número de elementos. No caso de se necessitar modelos mais detalhados ainda, o supercomputador Cray existente na Coppe está apto para fazer tal análise, como concluíram Martins [21] e Souza [25].

Desta forma, estruturas geológicas que possuem geometrias complexas, que anteriormente eram analisadas em duas dimensões, podem agora ser estudadas de forma mais completa, em três dimensões, contemplando regiões que eram anteriormente simplificadas, obtendo uma análise mais consistente para o problema.

Outro resultado importante que se pode obter diz respeito às análises de fenômenos geológicos tais como domos de sal, diques e soleiras, que causam anomalias térmicas em bacias sedimentares, colaborando na definição de possíveis áreas de geração e migração de petróleo, bem como a geração de mapas de isotermas.

Portanto, de maneira resumida, neste trabalho foi estudada e implementada a técnica de análise no tempo da equação de condução de calor, juntamente com uma estrutura de dados por arestas, promovendo assim uma significativa otimização computacional do código fonte. Foram realizados, com sucesso, comparações das análises numérica e analítica de um modelo unidimensional. Outro resultado obtido foi a comparação entre 2 malhas semelhantes, uma em 2 dimensões e outra em 3 dimensões. O resultado obtido em 2 dimensões, utilizando o programa Heat que realiza a análise térmica transiente em 2 dimensões foi semelhante ao resultado obtido utilizando o programa desenvolvido que realiza a análise térmica transiente em 3 dimensões. Além disso, foram testados exemplos de problemas tridimensionais de condução de calor em bacias sedimentares numa escala de reservatório. Desta forma foi validado o código e testada a eficiência da metodologia.

Referências Bibliográficas

- [1] ALLEN, P. A., ALLEN, J. R., *Basin Analysis – Principles and Applications*, London, Blackwell Scientific Publications, 1990.
- [2] ARAI, M., “Princípio da Análise Reflectométrica em Vitrinitas”. In: *Geoquímica do Petróleo*, Rio de Janeiro, Petrobrás, pp 97-113, 1984.
- [3] ATHY, L. F., Density, porosity and compaction of sedimentary rocks. *Am. Assoc. Petrol. Geologists Bull.*, v.14, pp 1-24.
- [4] BARBOSA, M. S. C., *Influência de um Diápiro de Sal na História Térmica de uma Bacia Sedimentar: um Exemplo na Bacia de Santos*, Tese de M.Sc., Universidade Federal de Ouro Preto, Ouro Preto, MG, 1990.
- [5] BARRET, R., BERRY, M., CHAN, T., et al., *Templates for Solution of Linear Systems: Building Blocks for Iterative Methods* - SIAM, Philadelphia, 1991.
- [6] BENDER, A. A., KIANG, C. H., BEDREGAL, R. P., COUTINHO, A. L. G. A. et al., *Simulação Numérica de Eventos Térmicos em Regime Permanente e Transiente pelo Método de Elementos Finitos* - Rio de Janeiro - CENPES/SUPLEX/DIVEX/SETEC - Relatório Final do Projeto, 1993.

- [7] CATABRIGA, L., *Soluções Implícitas das Equações de Euler empregando Estrutura de Dados por Arestas*, Tese de D.Sc., COPPE/UFRJ, Rio de Janeiro, RJ, 2000.
- [8] CAVALCANTI, P. R., MELLO, U. T., “Challenges in the generation of 3D unstructured mesh for simulation of geological process”. In: *International Geological Congress 31*, 2000. CD-ROM
- [9] COUTINHO, A. L. G. A., MARTINS, M. A. D., ALVES, J. L. D., “Parallel iterative solution of finite element systems of equations employing edge-based data structures”, *7th SIAM - Conference on Parallel Processing for Scientific Computing*, SIAM, Philadelphia, 1997.
- [10] ELMASRI, R., NAVATHE, S., *Fundamentals of Database Systems*, The Benjamin/Cummings, 2nd Edition, 1994.
- [11] FUNG, L. S. K., HIEBERT, A. D. NGHIEM, L. X., “Reservoir Simulation with a Control-Volume Finite-Element Method”, *SPE Reservoir Engineering*, pp. 349-357, 1992.
- [12] GAGLIANONE, P. C., TRINDADE, L. A. F., “Pirólise”. In: *Geoquímica do Petróleo*, Rio de Janeiro, Petrobrás, pp 75-83, 1984.
- [13] GOCAD. Disponível em <http://www.gocad.com>. Acesso dia 10 dez. 2002.
- [14] HUGHES, T. J. R., *The Finite Element Method – Linear Static and Dynamic Finite Element Analysis*, Englewood Cliffs, NJ, Prentice-Hall, 1987.
- [15] HUGHES, T. J. R., FERENCZ, R. M., HALLQUIST, J. O., “Large Scale Vectorized Implicit Calculations in Solid Mechanics on a Cray X-MP/48 Utilizing EBE Preconditioned Conjugate Gradients”, *Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering*, v. 61, pp. 215-248, 1987.

- [16] HUGHES, T. J. R., PISTER, K. S., TAYLOR, R. L., "Implicit-Explicit finite Elements in Nonlinear Transient Analysis", *Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering*, v. 17-18, pp. 159-182, 1978.
- [17] INCROPERA, F. P., DEWITT, D. P., *Fundamentos de Transferência de Calor e de Massa* – 4ª ed., Rio de Janeiro, Livros Técnicos e Científicos Editora, 1998.
- [18] KNUTH, D. E., *The Art of Computer Programming*, Vol. 3, Sorting and Searching, Addison Wesley Publishing Company, 1973.
- [19] LÖHNER, R., "Edges, Stars, Superedges and Chains", *Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering*, v. 111, pp. 255-263, 1994.
- [20] MAGOON, L., DOW, W. G., "The Petroleum System". In: *AAPG Memoir 60*, Austin, pp. 3-24, 1994.
- [21] MARTINS, M. A. D., *Solução Iterativa em Paralelo de Sistemas de Equações do Método dos Elementos Finitos Empregando Estrutura de Dados por Arestas*, Tese de M.Sc., COPPE/UFRJ, Rio de Janeiro, RJ, 1996.
- [22] MARTINS, M. A. D., *Estrutura de Dados por Arestas para Solução de problemas de Plasticidade Computacional*, Tese de D.Sc., COPPE/UFRJ, Rio de Janeiro, RJ, 2001.
- [23] ÖZISIK, M. N., *Heat Transfer – A Basic Approach* – 1ª ed., New York, McGraw-Hill Book Company, 1985.
- [24] QUADROS, L. P., "Índice de Alteração Térmica". In: *Geoquímica do Petróleo*, Rio de Janeiro, Petrobrás, pp 93-96, 1984.
- [25] SOUZA, D. A. F., *Algoritmo Adaptativo Implícito/Explícito por Arestas para Solução de Problemas de Transporte Tridimensionais*, Tese de M.Sc., COPPE/UFRJ, Rio de Janeiro, RJ, 2002.

[26] TURCOTTE, D. L., SCHUBERT, G., *Geodynamics – Applications of Continuum Physics to Geological Problems*, New York, John Wiley & Sons, 1982.

[27] WELLER, J. M., Compaction of sediments. *Am. Assoc. Petrol. Geologists Bull.*, v.43, pp 273-310,1958.

[28] WOODSIDE, W. & MESSMER J. R., Thermal conductivity of porous media, I - unconsolidated sands. *Jour. Applied Physics*, v.32, pp 1688-1706, 1961.

[29] ZIENKIEWICZ, O. C., TAYLOR, R. L., *The Finite Element Method - Vol. 1*, 4th ed., London, McGraw-Hill International Editions, 1989.

Apêndice A

Neste apêndice será mostrado como foi obtida a malha tridimensional da seção (5.2), a partir da malha bidimensional.

A malha bidimensional analisada pelo programa Heat está mostrada na figura abaixo:

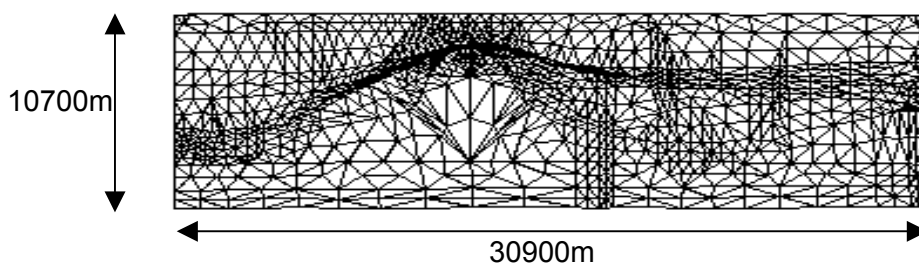


Figura A.1 – Malha utilizada pelo programa bidimensional.

Esta malha possui 7 diferentes materiais.

A partir desta malha, marcou-se os principais pontos referentes ao contorno da malha e aos diferentes tipos de materiais. A figura (A.2) mostra o esquema das camadas, e a figura (A.3) tem-se os esquemas dos principais pontos. Em seguida tem-

se a tabela com as coordenadas dos principais pontos para se obter a geometria semelhante ao modelo bidimensional.

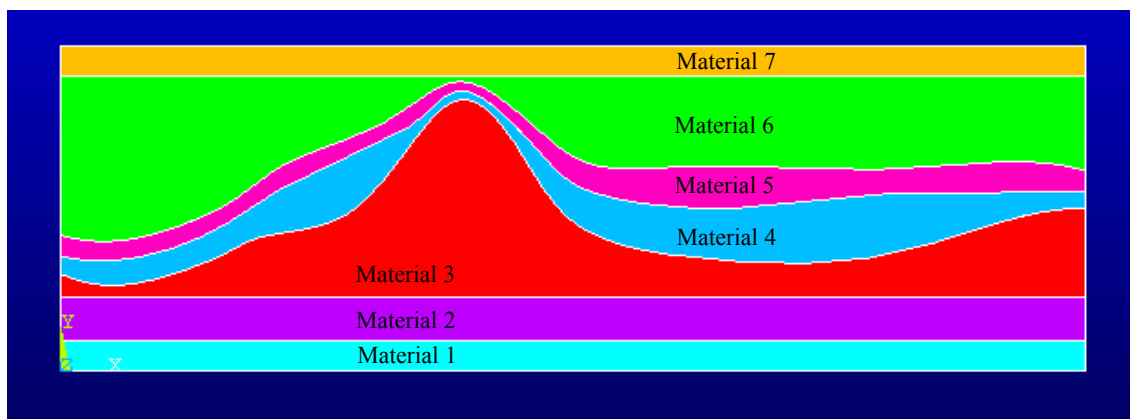


Figura A.2 – Esquema das camadas.

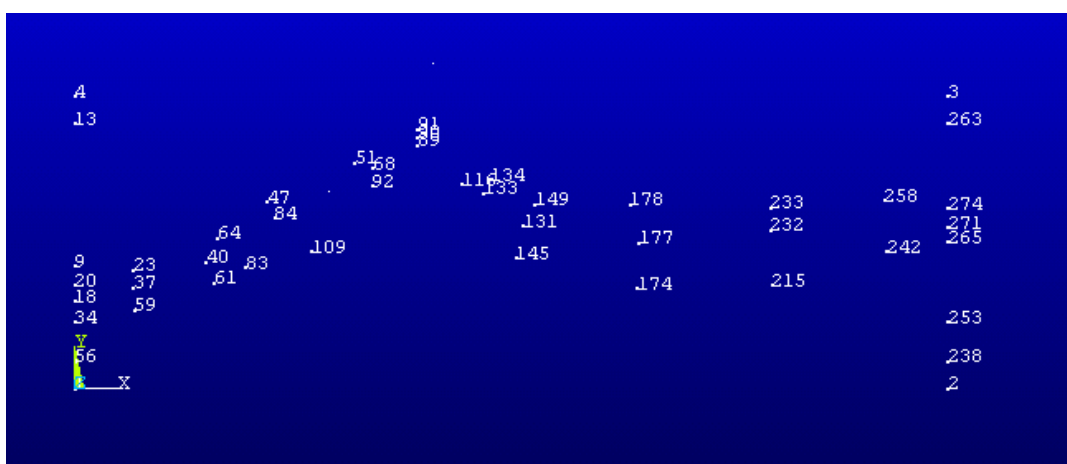


Figura A.3 – Esquema dos principais pontos.

Ponto	X	Y
1	0	0
2	0	10700
3	30900	10700
4	0	30900
9	0	4475
13	0	9707
18	0	3196
20	0	3722
23	2074	4336
34	0	2430
37	2072	3703
40	4652	4630
47	6818	6827
51	9915	8261
56	0	1000
59	2105	2868
61	4950	3864
64	5049	5504
68	10562	8057
83	6070	4418
84	7089	6252
89	12148	8917
90	12148	9200
91	12148	9500
92	10530	7400
109	8400	5020
116	13713	7462
131	15871	5947
133	14465	7162
134	14702	7645
145	15602	4792
149	16291	6727
174	19900	3654

177	19974	5347
178	19642	6748
215	24672	3777
232	24618	5813
233	24599	6624
238	30900	1000
242	28731	5024
253	30900	2430
258	28646	6885
263	30900	9707
265	30900	5351
271	30900	5878
274	30900	6596

Tabela A.1 – Coordenadas dos principais pontos.

Utilizando o programa comercial Ansys, foi reproduzida a malha 2D adotando uma espessura unitária para o eixo z equivalente à 1000m. Deste modo foi obtida a malha 3D, semelhante à malha utilizada na análise bidimensional.

A nova malha tridimensional, com as mesmas dimensões da malha bidimensional, mas com espessura na direção z = 1000m, está mostrada a seguir nas figuras (A.3) e (A.4).

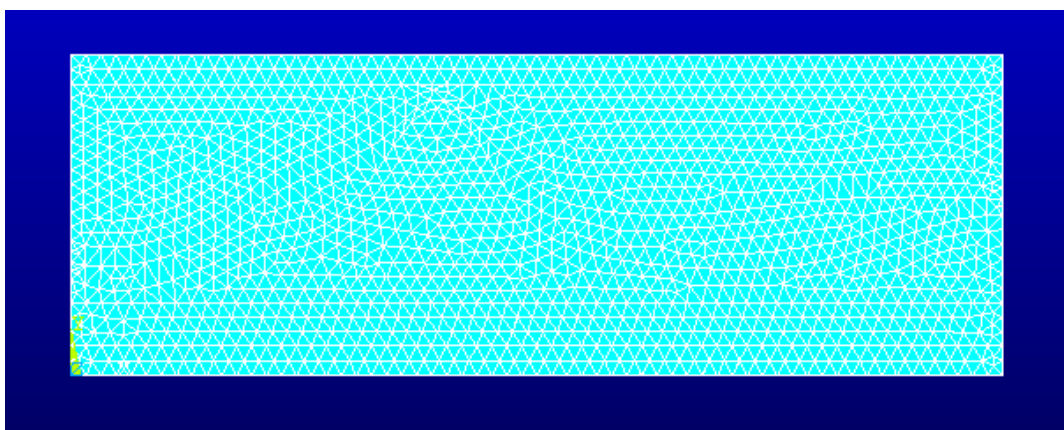


Figura A.4 – Malha computacional em 3 dimensões.

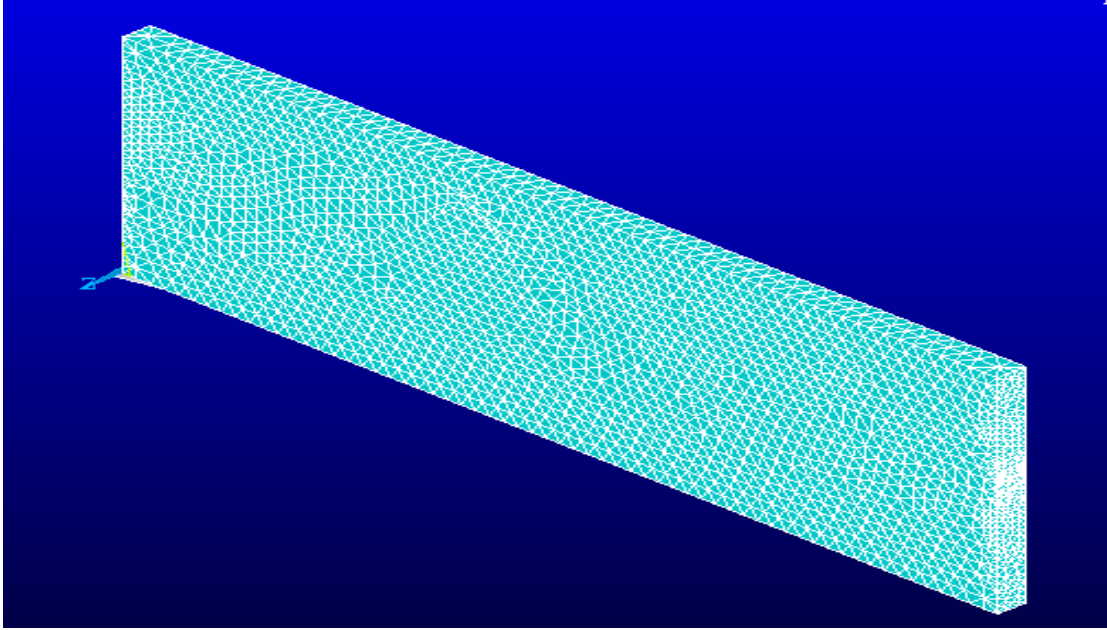


Figura A.5 – Vista da malha computacional tridimensional.