

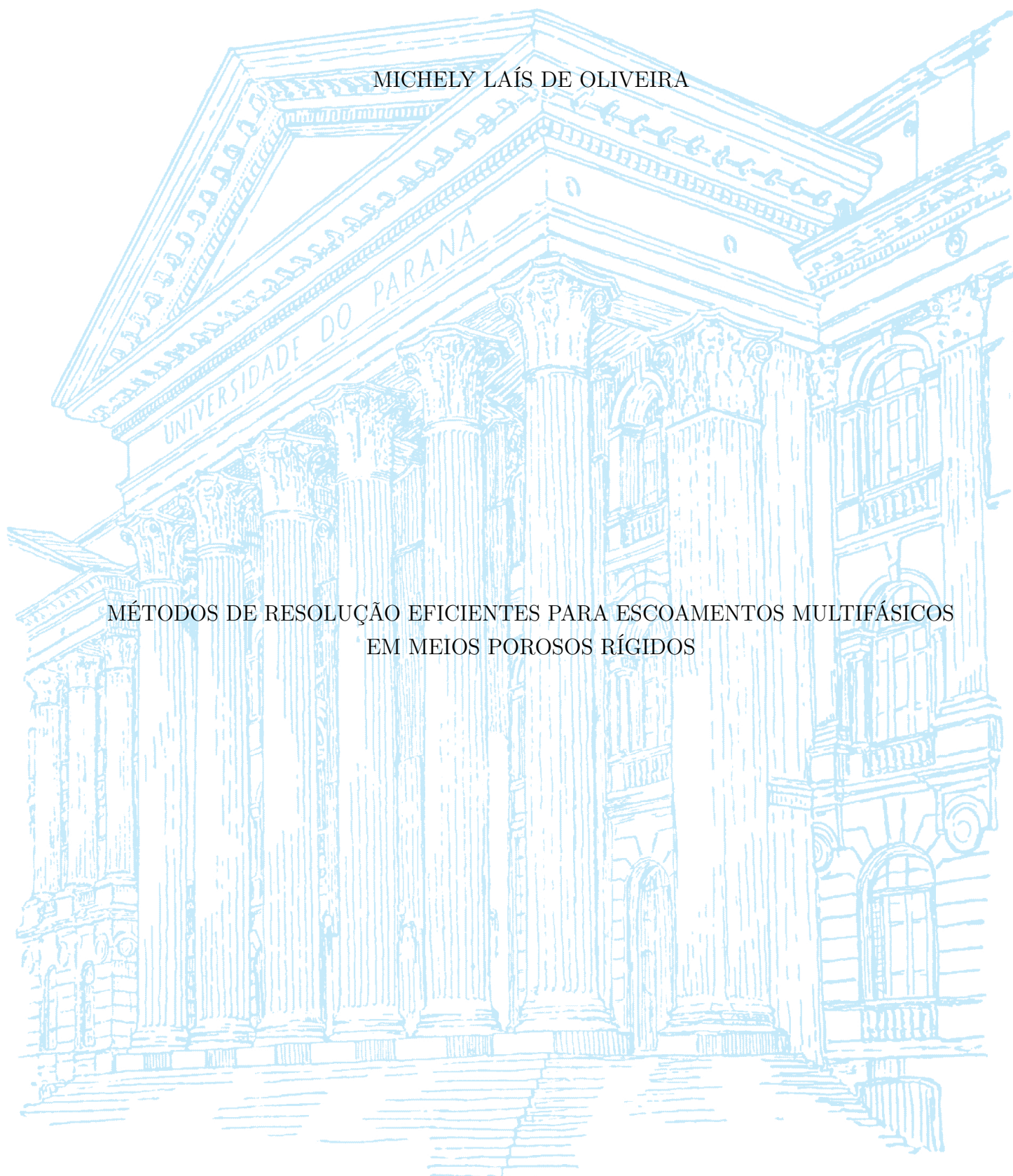
UNIVERSIDADE FEDERAL DO PARANÁ

MICHELY LAÍS DE OLIVEIRA

MÉTODOS DE RESOLUÇÃO EFICIENTES PARA ESCOAMENTOS MULTIFÁSICOS
EM MEIOS POROSOS RÍGIDOS

CURITIBA

2022



MICHELY LAÍS DE OLIVEIRA

MÉTODOS DE RESOLUÇÃO EFICIENTES PARA ESCOAMENTOS MULTIFÁSICOS
EM MEIOS POROSOS RÍGIDOS

Tese apresentada ao curso de doutorado em Métodos Numéricos em Engenharia (PPGMNE), Setor de Ciências Exatas e Tecnologia, Universidade Federal do Paraná, como requisito parcial à obtenção do título de Doutor em Métodos Numéricos em Engenharia.

Orientador: Prof. Dr. Marcio Augusto Villela Pinto
Coorientadora: Prof.^a Dr.^a Carmen Rodrigo Cardiel

CURITIBA

2022

DADOS INTERNACIONAIS DE CATALOGAÇÃO NA PUBLICAÇÃO (CIP)
UNIVERSIDADE FEDERAL DO PARANÁ
SISTEMA DE BIBLIOTECAS – BIBLIOTECA CIÊNCIA E TECNOLOGIA

Oliveira, Michely Laís de.

Métodos de resolução eficientes para escoamentos multifásicos em meios porosos rígidos. / Michely Laís de Oliveira. – Curitiba, 2022.

1 recurso on-line : PDF.

Tese (Doutorado) – Universidade Federal do Paraná, Setor de Ciências Exatas e Tecnologia, Programa de Pós-Graduação em Métodos Numéricos em Engenharia.

Orientador: Prof. Dr. Marcio Augusto Villela Pinto.

Coorientadora: Profa. Dra. Carmen Rodrigo Cardiel.

1. Engenharia. 2. Métodos numéricos. 3. Matemática - formulação. 4. Equações diferenciais. I. Pinto, Marcio Augusto Villela. II. Cardiel, Carmen Rodrigo. III. Universidade Federal do Paraná. Programa de Pós-Graduação em Métodos Numéricos em Engenharia. IV. Título.

Bibliotecário: Nilson Carlos Vieira Junior CRB-9/1797



MINISTÉRIO DA EDUCAÇÃO
SETOR DE CIÊNCIAS EXATAS
UNIVERSIDADE FEDERAL DO PARANÁ
PRÓ-REITORIA DE PESQUISA E PÓS-GRADUAÇÃO
PROGRAMA DE PÓS-GRADUAÇÃO MÉTODOS NUMÉRICOS
EM ENGENHARIA - 40001016030P0

TERMO DE APROVAÇÃO

Os membros da Banca Examinadora designada pelo Colegiado do Programa de Pós-Graduação MÉTODOS NUMÉRICOS EM ENGENHARIA da Universidade Federal do Paraná foram convocados para realizar a arguição da tese de Doutorado de **MICHELY LAIS DE OLIVEIRA** intitulada: **MÉTODOS DE RESOLUÇÃO EFICIENTES PARA ESCOAMENTOS MULTIFÁSICOS EM MEIOS POROSOS RÍGIDOS**, sob orientação do Prof. Dr. MARCIO AUGUSTO VILLELA PINTO, que após terem inquirido a aluna e realizada a avaliação do trabalho, são de parecer pela sua APROVAÇÃO no rito de defesa.

A outorga do título de doutora está sujeita à homologação pelo colegiado, ao atendimento de todas as indicações e correções solicitadas pela banca e ao pleno atendimento das demandas regimentais do Programa de Pós-Graduação.

Curitiba, 01 de Setembro de 2022.

Assinatura Eletrônica

02/09/2022 15:25:06.0

MARCIO AUGUSTO VILLELA PINTO

Presidente da Banca Examinadora

Assinatura Eletrônica

02/09/2022 17:36:22.0

SAULO POMONET OLIVEIRA

Avaliador Externo (UNIVERSIDADE FEDERAL DO PARANÁ)

Assinatura Eletrônica

05/09/2022 08:44:02.0

LEANDRO FRANCO DE SOUZA

Avaliador Externo (UNIVERSIDADE DE SÃO PAULO)

Assinatura Eletrônica

02/09/2022 15:36:08.0

SILVIO LUIZ DE MELLO JUNQUEIRA

Avaliador Externo (UNIVERSIDADE TECNOLÓGICA FEDERAL DO PARANÁ)

Assinatura Eletrônica

05/09/2022 09:56:56.0

ROSANE FERREIRA DE OLIVEIRA

Avaliador Externo (UNIVERSIDADE FEDERAL RURAL DO RIO DE JANEIRO)

Centro Politécnico - UFPR - Curitiba - Paraná - Brasil

CEP 81530-015 - Tel: (01) 0000-0000 - E-mail: ppgmne@ufpr.br

Documento assinado eletronicamente de acordo com o disposto na legislação federal Decreto 8539 de 08 de outubro de 2015.

Gerado e autenticado pelo SIGA-UFPR, com a seguinte identificação única: 219687

Para autenticar este documento/assinatura, acesse <https://www.prppg.ufpr.br/siga/visitante/autenticacaoassinaturas.jsp> e insira o código 219687

AGRADECIMENTOS

Agradeço a Deus, por tudo, pois sem Ele nada disso seria possível.

Agradeço ao meu orientador, Prof. Dr. Marcio Augusto Villela Pinto, por ter aceitado me orientar neste trabalho, por todo conhecimento compartilhado, ajuda, paciência, amizade e confiança em mim depositada.

Agradezco mucho a mi codirectora, Prof. Dra. Carmen Rodrigo Cardiel y el Prof. Dr. Francisco José Gaspar Lorenz por la oportunidad de estudio, por las enseñanzas que recibí durante mi estancia en la Universidad de Zaragoza (y sigo recibiendo).

Agradeço aos membros da banca examinadora, Prof. Dr. Leandro Franco de Souza, Prof. Dra. Rosane Ferreira de Oliveira, Prof. Dr. Silvio Luiz de Mello Junqueira e Prof. Dr. Saulo Pomponet Oliveira, pelo tempo dispensado à leitura deste trabalho.

Agradeço ao Programa de Pós-Graduação em Métodos Numéricos em Engenharia (PPGMNE) da Universidade Federal do Paraná (UFPR) e à Coordenação de Aperfeiçoamento de Pessoal de Nível Superior (CAPES) pela oportunidade de cursar o doutorado.

Agradeço aos colegas do PPGMNE pela amizade e disposição em ajudar.

Agradeço aos meus amigos e familiares que sempre me apoiaram e me incentivaram nesta caminhada.

Agradeço aos meus pais Waldemir e Eliane por serem meu porto seguro e que incansavelmente me apoiam em todas as minhas decisões. As minhas irmãs, Sabrina e Steffany, por todo amor e apoio.

*“Quanto mais aprendo, mais tenho
certeza de que, o que sei, é apenas
uma gota, diante do oceano do que
ainda preciso aprender”.*

Jose A. Barcelos

RESUMO

Neste trabalho estudamos métodos de resolução eficientes para problemas multifásicos em meios porosos rígidos uni (1D) e bi-dimensional (2D), no contexto da teoria de poro-elasticidade de Biot. Existem diferentes formulações quando se trabalha em problemas multifásicos, dependendo se a incógnita escolhida é a saturação ou a pressão. As equações que modelam esses problemas podem ser resolvidas de uma maneira monolítica, ou seja, resolver simultaneamente todo o sistema acoplado. Neste trabalho, a fim de fazer simulações de grande escala, propomos desenvolver métodos de resolução rápidos e robustos para resolver problemas 1D e 2D com solução analítica e um problema 2D mais realístico, sem solução analítica, em um meio poroso heterogêneo com permeabilidades randômicas, a partir do qual os poros são preenchidos com dois fluídos imiscíveis e incompressíveis que correspondem a um sistema de equações diferenciais parciais acopladas e fortemente não linear. Para isso, utilizamos a formulação matemática mista pressão-saturação, Método de Volumes Finitos e Euler implícito para as discretizações espacial e temporal, respectivamente. Os métodos de Picard modificado e L-esquema foram usados para a linearização do sistema. Com o sistema linear gerado, utilizamos Gauss-Seidel acoplado para resolvê-lo. Com o intuito de acelerar a convergência, utilizamos o método *multigrid*. Com a combinação das técnicas aplicadas nos problemas em meios porosos rígidos foi possível gerar um algoritmo eficiente e robusto até mesmo em um meio poroso randômico heterogêneo, convergindo nas primeiras iterações.

Palavras-chave: Problema acoplado. Métodos de linearização. *Multigrid*. Método de volumes finitos. Euler implícito.

ABSTRACT

In this work, we study efficient resolution methods of solving multiphase problems in one (1D) and two-dimensional (2D) in rigid porous media, in the context of Biot's poroelasticity theory. There are different formulations when working on multiphase problems, depending on whether the unknown chosen is saturation or pressure. The poroelasticity equations can be solved in a monolithic way, that is, simultaneously solve the whole coupled system. In this work, in order to do large scale simulations, we propose to develop fast and robust resolution methods to solve 1D and 2D problems, with analytical solution and a more realistic 2D problem, without analytical solution, in a heterogeneous porous medium with random permeabilities, from of which the pores are filled with two immiscible and incompressible fluid that correspond to coupled partial differential equations system and strongly nonlinear. For this, we use the mixed mathematical formulation, pressure-saturation formulation, Finite Volume Method, and implicit Euler for the discretization of the equation in space and in time, respectively. Modified Picard and L-scheme methods were used for the linearization of the system. The systems of linear equations generated were solved by the Gauss-Seidel solver in a coupled way. In order to accelerate convergence, we use the multigrid method. With the combination of the techniques applied to problems in rigid porous media, it was possible to generate an efficient and robust algorithm even in heterogeneous random porous media, converging in the first iterations.

Keywords: Coupled problem. Linearization methods. Multigrid. Finite Volume Method. Implicit Euler.

LISTA DE FIGURAS

FIGURA 1 – ILUSTRAÇÃO DE UM MEIO POROSO PREENCHIDO COM UM OU DOIS FLUIDOS.	28
FIGURA 2 – MATERIAIS POROSOS.	29
FIGURA 3 – REPRESENTAÇÃO DA RELAÇÃO ENTRE O VAZIO E VOLUME REV.	30
FIGURA 4 – ILUSTRAÇÃO DE MEIOS POROSOS (a) HETEROGÊNEO E (b) HOMOGÊNEO.	31
FIGURA 5 – FUNÇÃO DA PRESSÃO CAPILAR DE VAN GENUCHTEN EM ESCALA \log VERSUS S_w , PARA DIFERENTES PARÂMETROS n_{VG} , $p_e = 3$ E $S_{\alpha r} = 0$	35
FIGURA 6 – FUNÇÃO DA PERMEABILIDADE RELATIVA DE VAN GENUCHTEN PARA DIFERENTES PARÂMETROS E $S_{\alpha r} = 0$	36
FIGURA 7 – FUNÇÃO DA PRESSÃO CAPILAR DE BROOKS-COREY PARA DIFERENTES λ , $p_e = 2$ E $S_{\alpha r} = 0$	36
FIGURA 8 – FUNÇÃO DA PERMEABILIDADE RELATIVA DE BROOKS-COREY PARA DIFERENTES PARÂMETROS E $S_{\alpha r} = 0$	37
FIGURA 9 – FORMULAÇÕES EXPLÍCITA, SEMI-IMPLÍCITA E IMPLÍCITA PARA UM PONTO (i, m) EM RELAÇÃO A SUA POSIÇÃO ESPACIAL E TEMPORAL.	38
FIGURA 10 – MALHAS COM ARRANJOS (a) DESENCONTRADO E (b) COLOCALIZADO PARA AS VARIÁVEIS p_α E S_α	41
FIGURA 11 – DISPOSIÇÃO DE UM VOLUME DE CONTROLE P E SEUS VIZINHOS EM UMA MALHA UNIFORME UNIDIMENSIONAL (ESQUERDA) E BIDIMENSIONAL (DIREITA).	42
FIGURA 12 – CONDIÇÕES DE CONTORNO COM VOLUMES FICTÍCIOS NA FRONTEIRA.	44
FIGURA 13 – ORDENAÇÃO LEXICOGRÁFICA COMEÇANDO DO CANTO SUPERIOR ESQUERDO PARA O EMPREGO DO MÉTODO DE GAUSS-SEIDEL PONTO-A-PONTO.	46
FIGURA 14 – MODOS DE FOURIER.	47
FIGURA 15 – APLICAÇÃO DA RAZÃO DE ENGROSSAMENTO $re = 2$ PARA A MALHA FINA $N_x \times N_y = 8 \times 8$	49
FIGURA 16 – CICLO W COM 4 MALHAS.	50
FIGURA 17 – DISCRETIZAÇÃO 1D NO ESPAÇO.	56

FIGURA 18 – DISPOSIÇÃO DE UM VOLUME DE CONTROLE (i,j) E SEUS VIZINHOS EM UMA MALHA UNIFORME UNIDIMENSIONAL (ESQUERDA) E BIDIMENSIONAL (DIREITA).	57
FIGURA 19 – SATURAÇÃO ANALÍTICA E NUMÉRICA OBTIDA NO PRIMEIRO PASSO DE TEMPO COM $TOL_{lin} = 10^{-9}$ E EM DIFERENTES MALHAS: (A) $h = \tau = 0,1$, (B) $h = \tau = 0,05$, (C) $h = \tau = 0,025$ E (D) $h = \tau = 0,0125$.	62
FIGURA 20 – ORDENS APARENTE E EFETIVA <i>VERSUS</i> h PARA A NORMA INFINITO DO ERRO, COM PICARD MODIFICADO PARA O TESTE 1.	63
FIGURA 21 – ORDENS APARENTE E EFETIVA <i>VERSUS</i> h PARA A NORMA INFINITO DO ERRO, COM $L_s = 10^4$ PARA O TESTE 1.	65
FIGURA 22 – ORDENS APARENTE E EFETIVA <i>VERSUS</i> h PARA A NORMA INFINITO DO ERRO, COM $L_s(t) = 5\max(C_w(x,t))$ PARA O TESTE 1.	65
FIGURA 23 – ORDENS APARENTE E EFETIVA <i>VERSUS</i> h PARA A NORMA INFINITO DO ERRO, COM $L_s(t) = 5\max(C_w(x,t))$ PARA O TESTE 2.	66
FIGURA 24 – NORMA INFINITO DO ERRO NUMÉRICO COM $L_s = 10^4$ PARA O TESTE 1.	66
FIGURA 25 – NORMA INFINITO DO ERRO NUMÉRICO COM $L_s(t) = 5\max(C_w(x,t))$ PARA O TESTE 1.	67
FIGURA 26 – NORMA INFINITO DO ERRO NUMÉRICO COM $L_s = 10^2, 10^3$ E 10^4 PARA O TESTE 1.	68
FIGURA 27 – <i>diff</i> NO 1º PASSO DE TEMPO COM $L_s = 10^4$ para o Teste 1.	69
FIGURA 28 – NORMA INFINITO DO ERRO NUMÉRICO <i>VERSUS</i> $N_x = N_t$ PARA OS TESTES 1 E 2, COM PICARD MODIFICADO E L-ESQUEMA.	70
FIGURA 29 – SOLUÇÃO NUMÉRICA, ANALÍTICA E ERRO DE S_w PARA O TEMPO $t_f = 1$ COM $N_x = N_y = N_t = 20$.	71
FIGURA 30 – (a) SOLUÇÃO NUMÉRICA E (b) ANALÍTICA DE p_w OBTIDA NO PASSO DE TEMPO $t_f = 1$.	71
FIGURA 31 – (a) SOLUÇÃO NUMÉRICA E (b) ANALÍTICA DE p_n NO PASSO DE TEMPO $t_f = 1$.	72
FIGURA 32 – ORDENS APARENTE E EFETIVA <i>VERSUS</i> h PARA A NORMA INFINITO DO ERRO, COM PICARD MODIFICADO PARA O TESTE 3.	72

FIGURA 33 – NORMA INFINITO DO ERRO NUMÉRICO <i>VERSUS</i> $N_x = N_y =$ N_t PARA O TESTE 3.	73
FIGURA 34 – CAMPO DE PERMEABILIDADE k_{rw} , PARA $N_x \times N_y = 64 \times 64$. .	80
FIGURA 35 – CAMPO DE PERMEABILIDADE k_{rw} , PARA $N_x \times N_y = 64 \times 64$ PARA DOMÍNIO RETANGULAR.	83
FIGURA 36 – CAMPO DE PERMEABILIDADE k_{rw} , PARA $N_x \times N_y = 64 \times 512$. .	84

LISTA DE TABELAS

TABELA 1 – EXEMPLOS DE POROSIDADES.	31
TABELA 2 – PROPRIEDADES.	61
TABELA 3 – DADOS DE IMPLEMENTAÇÃO.	61
TABELA 4 – TEMPO DE CPU E <i>SPEEDUP</i> PARA O <i>MULTIGRID</i> E <i>SINGLE-GRID</i>	64
TABELA 5 – NÚMERO DE ITERAÇÕES DA LINEARIZAÇÃO COM L-ESQUEMA PARA O TESTE 1.	68
TABELA 6 – ITERAÇÕES DO PICARD MODIFICADO E L-ESQUEMA COM <i>MULTIGRID</i>	69
TABELA 7 – ERROS NA NORMA-2 DA PRESSÃO (\bar{p}) E SATURAÇÃO (S_w) ÚMIDA PARA DIFERENTES VALORES DOS PARÂMETROS DE DISCRETIZAÇÃO ESPACIAL E TEMPORAL COM $t_f = 1$ E OS DADOS DO TESTE 3.	74
TABELA 8 – ERROS NA NORMA-2 DAS PRESSÕES (p_w, p_n) E SATURAÇÃO (S_w) PARA DIFERENTES VALORES DOS PARÂMETROS DE DISCRETIZAÇÃO ESPACIAL E TEMPORAL, COM $t_f = 1$, PARA O TESTE 3.	74
TABELA 9 – ITERAÇÕES DOS MÉTODOS DE PICARD MODIFICADO E L-ESQUEMA PARA O TESTE 3.	75
TABELA 10 – ERROS NA NORMA-2 DA PRESSÃO (\bar{p}) E SATURAÇÃO (S_w) PARA DIFERENTES VALORES DOS PARÂMETROS DE DISCRETIZAÇÃO ESPACIAL E TEMPORAL, COM $t_f = 1$ E OS DADOS DO TESTE 4.	76
TABELA 11 – ERROS NA NORMA-2 DA PRESSÕES (p_w, p_n) E SATURAÇÃO (S_w) PARA DIFERENTES VALORES DOS PARÂMETROS DE DISCRETIZAÇÃO ESPACIAL E TEMPORAL, COM $t_f = 1$ PARA O TESTE 4.	76
TABELA 12 – ITERAÇÕES DO MÉTODO DE PICARD MODIFICADO PARA O TESTE 4.	77
TABELA 13 – ERROS NA NORMA-2 DA PRESSÃO (\bar{p}) E SATURAÇÃO (S_w) PARA DIFERENTES VALORES DOS PARÂMETROS DE DISCRETIZAÇÃO ESPACIAL E TEMPORAL, COM $t_f = 1$ E OS DADOS DO TESTE 5.	78
TABELA 14 – ERROS NA NORMA-2 DA PRESSÕES (p_w, p_n) E SATURAÇÃO (S_w) PARA DIFERENTES PASSOS NO TEMPO E TAMANHOS DE MALHAS, COM $t_f = 1$ PARA O TESTE 5.	78

TABELA 15 – NÚMERO DE ITERAÇÕES DO <i>MULTIGRID</i> E DA LINEARIZAÇÃO DE PICARD MODIFICADO PARA DIFERENTES VALORES DOS PARÂMETROS DE DISCRETIZAÇÃO PARA O TESTE 5.	78
TABELA 16 – NÚMERO DE ITERAÇÕES MÉDIAS DE LINEARIZAÇÕES E <i>MULTIGRID</i> PARA O TESTE 6.	79
TABELA 17 – NÚMERO DE ITERAÇÕES PARA O TESTE 7.	80
TABELA 18 – NÚMERO MÉDIO DE ITERAÇÕES PARA A CONDIÇÃO DE CONTORNO DE NEUMANN NULA NA FRONTEIRA SUL PARA OS TESTES 8.1, 8.2 E 8.3.	81
TABELA 19 – NÚMERO MÉDIO DE ITERAÇÕES PARA CONDIÇÃO DE CONTORNO DE NEUMANN NÃO NULA NA FRONTEIRA SUL PARA OS TESTES 8.4, 8.5 E 8.6.	81
TABELA 20 – NÚMERO DE ITERAÇÕES MÉDIAS DO TESTE 9 - ANISOTROPIA GEOMÉTRICA.	82
TABELA 21 – NÚMERO MÉDIO DE LINEARIZAÇÕES E CICLOS DE <i>MULTIGRID</i> PARA O TESTE 10 - MALHA ISOTRÓPICA E DOMÍNIO RETANGULAR.	82
TABELA 22 – NÚMERO DE ITERAÇÕES MÉDIAS DE LINEARIZAÇÃO E <i>MULTIGRID</i> PARA ANISOTRÓPICA GEOMÉTRICA E DOMÍNIO RETANGULAR.	84
TABELA 23 – NÚMERO DE ITERAÇÕES PARA O <i>MULTIGRID</i> E PICARD MODIFICADO, JUNTAMENTE COM O FATOR DE CONVERGÊNCIA ASSINTÓTICO, PARA DIFERENTES PARÂMETROS DE DISCRETIZAÇÃO.	85

LISTA DE ABREVIATURAS E SIGLAS

CDS	<i>Central Differencing Scheme</i>
CPR	<i>Constrained Pressure Residual</i>
CS	<i>Correction Scheme</i>
EDPs	Equações Diferenciais Parciais
EDFA	<i>Explicit Decoupling Factor Approximation</i>
FAS	<i>Full Approximation Scheme</i>
GA	<i>Genetic Algorithm</i>
GS	Método de Gauss-Seidel
IMPES	<i>Implicit Pressure Explicit Saturation Method</i>
MDF	Método de Diferenças Finitas
MEF	Método de Elementos Finitos
MG	Método <i>multigrid</i>
MVF	Método de Volumes Finitos
REV	<i>Representative Elementary Volume</i>
SG	Método <i>singlegrid</i>
SOR	<i>Successive Over-Relaxation</i>
UDS	<i>Upwind Differencing Scheme</i>
VC	Volume de Controle
1D	Unidimensional
2D	Bidimensional

LISTA DE SÍMBOLOS

A	Matriz de coeficientes
D	Matriz diagonal
E_{γ}^i	Erro numérico com γ a variável correspondente
f	Vetor independente
F_{α}	Termo fonte da fase α
g	Vetor de aceleração gravitacional
h	Espaçamento entre os volumes de controle da malha
h_x	Tamanho da malha na direção x
h_y	Tamanho da malha na direção y
i, j	Contadores na direção espacial
it_{lin}	Número de iterações do método de linearização
$itme_{lin}$	Média do número iterações do método de linearização durante todo os passos de tempo
it_{MG}	Número de iterações do método <i>multigrid</i>
$itme_{MG}$	Média do número iterações do método <i>multigrid</i> durante todo os passos de tempo
I_h^{2h}	Operador de restrição
I_{2h}^h	Operador de prolongação
K	Permeabilidade absoluta [m^2]
K_{α}	Tensor da permeabilidade da fase α [m^2]
$k_{r\alpha}$	Permeabilidade relativa da fase α
L	Matriz triangular inferior
l	Número de níveis do <i>multigrid</i>
L_{\max}	Número máximo de níveis de malhas
L_s	Parâmetro do método L-esquema

L_x	Comprimento do domínio bidimensional: direção x
L_y	Comprimento do domínio bidimensional: direção y
m	Parâmetro de Van Genuchten
$medida(\Omega)$	Comprimento, área ou volume, dependendo da dimensão
N_x	Número de volumes de controle na direção x
N_y	Número de volumes de controle na direção y
N_t	Número de passos no tempo
n_{VG}	Parâmetro de Van Genuchten
p	Pressão do fluido $[Pa]$
p_c	Pressão capilar $[Pa]$
p_e	Pressão de entrada para a parametrização de Van Genuchten $[Pa]$
p_E	Ordem efetiva
p_L	Ordem assintótica
p_U	Ordem aparente
q	Velocidade do escoamento $[m/s]$
r	Vetor dos resíduos
$\ \cdot\ _\infty$	Norma do máximo (ou norma-infinito)
re	Razão de engrossamento
S	Saturação
\bar{S}	Saturação efetiva
$S_{\alpha r}$	Saturação residual da fase α
S_G	Matriz iteração de Gauss-Seidel
TOL_{lin}	Tolerância do método de linearização
TOL_{MG}	Tolerância do método <i>multigrid</i>
t_{CPU}	Tempo de CPU
t_0	Tempo inicial

t_f	Tempo final
U	Matriz triangular superior
u	Vetor das incógnitas
v	Aproximação da variável de interesse u
w_j	Modos de Fourier

Letras Gregas

Δ	Operador Laplaciano
∇	Operador gradiente
λ_α	Mobilidade do fluido na fase α $[(Pa \ s)^{-1}]$
λ	Parâmetro de Brooks-Corey
μ	Viscosidade do fluido $[Pa \ s]$
ν_0	Número de suavizações na malha mais grossa
ν_1	Número de pré-suavizações
ν_2	Número de pós-suavizações
Ω	Domínio
Ω^h	Malha fina
Ω^{2h}	Malha grossa com engrossamento padrão
ρ	Densidade do fluido $[Kg/m^3]$
ϕ	Porosidade do meio
ρ_M	Fator de convergência médio do <i>multigrid</i>
τ	Tamanho do passo de tempo
ϱ	Ciclo do <i>multigrid</i>
ζ	Função indicador de espaço vazio

subscritos

α	Fase do fluido
E	Volume localizado a leste do volume de controle central
i	Posição do volume de controle na direção y
j	Posição do volume de controle na direção x
h	Malha fina
$2h$	Malha grossa
N	Volume localizado ao norte do volume de controle central

n	Fase não-úmida do fluido
P	Volume de controle central
S	Volume localizado ao sul do volume de controle central
W	Volume localizado ao oeste do volume de controle central
w	Fase úmida do fluido

Sobrescritos

n	Iteração do passo de tempo
m	Iteração do método de linearização

SUMÁRIO

1	INTRODUÇÃO	20
1.1	Objetivos	22
1.2	Revisão Bibliográfica	22
1.2.1	Problemas multifásicos em meios porosos	22
1.2.2	Métodos de linearização	23
1.2.3	<i>Solvers</i>	25
1.3	Organização do texto	27
2	FUNDAMENTAÇÃO TEÓRICA	28
2.1	Propriedades básicas de escoamentos multifásicos	28
2.1.1	Equações governantes	32
2.1.2	Pressão capilar, permeabilidade relativa e suas parametrizações	34
2.2	Método de Euler Implícito	37
2.3	Métodos de Linearização	39
2.4	Método de Volumes Finitos	41
3	MÉTODOS ITERATIVOS BÁSICOS E <i>MULTIGRID</i>	45
3.1	Método <i>multigrid</i>	46
4	MODELOS MATEMÁTICOS	51
4.1	Modelo matemático 1D	51
4.2	Modelo matemático 2D	52
5	APROXIMAÇÕES NUMÉRICAS	53
5.1	Dicretização temporal	53
5.2	Linearização	54
5.3	Discretização espacial	55
6	EXPERIMENTOS NUMÉRICOS	60
6.1	Testes Numéricos com solução analítica	60
6.1.1	Exemplo 1D	60
6.1.2	Exemplos 2D	70
6.2	Testes numéricos realísticos	75
6.2.1	Exemplos 2D	75
7	CONSIDERAÇÕES FINAIS	86
7.1	Conclusões gerais	86
7.2	Principais contribuições	86
7.3	Propostas de trabalhos futuros	86

REFERÊNCIAS	88
APÊNDICE A – ARTIGO DO CILAMCE	95

1 INTRODUÇÃO

Numerosas aplicações importantes em Geomecânica, Engenharia de Petróleo, Hidrogeologia, Biomedicina, etc., são modeladas por meio de equações que envolvem problemas multifásicos. Para o estudo desses problemas são gerados diferentes modelos matemáticos que os representem, dependendo da pressão, saturação e permeabilidade relativa, sendo posteriormente resolvidos por meio de simulações numéricas. Independente da maneira que esses modelos são formulados, são gerados sistemas de equações diferenciais parciais (EDPs) acoplados e altamente não lineares. Portanto, um dos desafios é encontrar métodos robustos e eficientes para a solução numérica desses problemas.

Em todos os problemas estudados aqui, foram analisadas algumas técnicas já conhecidas em uma formulação muito utilizada, a formulação mista pressão-saturação, porém após linearização, o sistema é reescrito em um formato não tão comum a fim de se obter um sistema com as pressões como variáveis principais. Depois disso, utilizamos um método para acelerar a convergência, obtendo bons resultados com baixo custo computacional.

A equação de Richard foi usada para formular tais fenômenos. As duas equações do sistema (uma para cada fase) são acopladas devido a dependência da permeabilidade relativa, pressão e a saturação de ambas as fases. Para resolver numericamente as equações de escoamento acopladas, é necessário primeiro discretizá-las no tempo e espaço. Para isso, existem inúmeras técnicas para a discretização de EDPs. Em relação ao tempo, as mais comuns são os métodos de Euler e Crank-Nickson (BURDEN; FAIRES; BURDEN, 2015). Neste trabalho, nos concentramos apenas na primeira abordagem, suficiente para os nossos objetivos.

Antes de realizar a discretização no espaço, tratamos de linearizar o sistema de equações, para tal processo, podemos utilizar alguns métodos, como por exemplo, método de Newton (ILLIANO; POP; RADU, 2020), Picard, Picard modificado (CELIA; BINNING, 1992) ou L-esquema (POP; RADU; KNABNER, 2004; KARPINSKI; POP; RADU, 2017). Neste trabalho utilizamos e comparamos as duas últimas técnicas, pois além dos métodos de Picard modificado e L-esquema serem de fácil implementação, um dos focos deste trabalho foi utilizar o método *multigrid* que tem bom comportamento em sistema lineares com equações elípticas, que são resultante dessas linearizações, proporcionando assim um melhor desempenho ao *multigrid*.

Com o sistema linearizado, realizamos a discretização no espaço, sendo que os métodos mais comuns são: Método de Elementos Finitos (MEF) (HUGHES, 2000), Método de Diferenças Finitas (MDF) (FERZIGER; PERIĆ; STREET, 2002) e Método de Volumes Finitos (MVF) (MALISKA, 2004; VERSTEEG; MALALASEKERA, 2007). Usamos o MVF para a discretização no espaço. Algumas vantagens desse método é que ele pode

ser aplicado em qualquer tipo de malha, em geometrias complexas e diferentes sistemas coordenados (FERZIGER; PERIĆ; STREET, 2002), além do esquema resultante conservar integralmente as propriedades em questão através de qualquer grupo de volumes de controle e consequentemente, todo o domínio (PATANKAR, 2018). Portanto, mesmo em uma malha grosseira, a solução apresenta bons resultados.

Realizada a discretização espacial, obtemos uma sequência de sistemas de equações algébricas lineares, geralmente do tipo

$$Au = f, \quad (1.1)$$

onde, A é a matriz dos coeficientes, u é o vetor das incógnitas e f é o vetor do termo fonte, ou dos termos independentes. O sistema linear então pode ser resolvido por algum método de resolução de sistemas. As duas principais classificações desses métodos são: diretos e iterativos (aqui chamados de *solvers*). Devido a estes sistemas, em geral serem esparsos e de grande porte, neste trabalho utilizamos os métodos iterativos, mais especificamente o método de Gauss-Seidel de forma acoplada (GASPAR *et al.*, 2004).

Ao iniciar o processo de solução do sistema linear, o *solver* tem uma taxa de convergência relativamente alta, fazendo com que o erro diminua rapidamente, porém, com o passar das iterações essa taxa diminui e o erro tende a cair muito lentamente, ou, em alguns casos, até estabilizar (WESSELING, 2004; BRIGGS; HENSON; MCCORMICK, 2000; TROTTEBERG; OOSTERLEE; SCHÜLLER, 2001). Esse fraco desempenho se dá devido ao fato que, quando o erro é decomposto em modos de Fourier, no início do processo iterativo as componentes oscilatórias do erro (erros de alta frequência) são reduzidas rapidamente pelos *solvers* e com o passar do processo iterativo, permanecem apenas as componentes suaves do erro (erros de baixa frequência) (TROTTEBERG; OOSTERLEE; SCHÜLLER, 2001). Tais erros de alta frequência podem ser gerados por diferentes motivos, devido a: estimativa inicial, erro de discretização, erro de arredondamento, etc. Neste trabalho, os métodos iterativos (*solvers*) que possuem a propriedade de reduzir rapidamente os erros de alta frequência, serão tratados como suavizadores (*smoothers*).

Para acelerar a convergência dos suavizadores de forma eficiente, utilizamos o método *multigrid*. Sendo este desenvolvido para superar as dificuldades dos métodos iterativos, ou seja, reduzem rapidamente os erros de alta frequência nas primeiras iterações e posteriormente caem lentamente, chegando as vezes até estabilizar; e tratar adequadamente as componentes suaves do erro. Tal método consiste em transferir as componentes de erro de modos suaves de uma determinada malha para uma malha mais grossa (menor quantidade de volumes), onde os mesmos tornam-se mais oscilatórios (TROTTEBERG; OOSTERLEE; SCHÜLLER, 2001) e assim, o método iterativo pode ser aplicado. Portanto, o método *multigrid* é composto por um conjunto de diferentes malhas, as quais são

percorridas ao longo do processo iterativo, reduzindo eficientemente todas as componentes do erro.

A grande oportunidade de pesquisa encontrada neste trabalho foi a solução de problemas de escoamento de duas fases, com a combinação do método de linearização de Picard Modificado e um algoritmo do *multigrid*, que converge mesmo em meios aleatórios heterogêneos.

1.1 Objetivos

O objetivo geral deste trabalho é desenvolver métodos de resolução rápida e robusta para um problema acoplado bifásico com coeficientes realísticos, permeabilidade relativa randômica e em meio poroso rígido heterogêneo, considerando um domínio retangular.

Os objetivos específicos são:

- Construir um sistema de equações diferenciais na formulação mista saturação-pressão, que logo após a linearização, gere um sistema com as variáveis principais sendo as pressões;
- Discretizar no tempo e espaço pelos métodos de Euler implícito e Volumes Finitos, respectivamente, com malhas uniformes e colocadas;
- Analisar a eficiência dos métodos de linearizações: Picard modificado e L-esquema;
- Acelerar a convergência de suavizadores com o uso do método *multigrid*.

1.2 Revisão Bibliográfica

Nesta seção é detalhada uma revisão bibliográfica de forma geral sobre os problemas multifásicos, métodos de linearização e sobre o *multigrid*.

1.2.1 Problemas multifásicos em meios porosos

O estudo de simulações numéricas está cada vez mais presente em pesquisas de alto impacto no mundo, pois com modelos matemáticos condizentes com problemas reais, é possível prever e observar tanto fenômenos, quanto situações. Os problemas de escoamento multifásicos e transporte em meios porosos representam uma abrangência de aplicações em diversos ramos das Ciências e Engenharias. As equações governantes desses problemas são altamente não lineares, o que geralmente se torna um obstáculo para a simulação numérica. Uma forma de contornar esses obstáculos, quando possível, é fazer algumas simplificações no modelo. Por exemplo, no caso do escoamento bifásico, água e ar simultaneamente, em um solo insaturado, podemos supor que a fase do ar permanece constante, ou ainda,

igual à pressão atmosférica (CELIA; BOULOUTAS; ZARBA, 1990), assim, o sistema é reduzido à fase aquosa apenas. Esta abordagem é chamada de aproximação de Richard (RICHARD, 1931). Porém, em alguns casos essa abordagem não pode ser aplicada, pois a fase do ar interfere significativamente no movimento da fase de água, de modo que é necessário utilizar o modelo de duas fases.

Considerando um modelo de duas ou mais fases, o sistema de equações gerado é fortemente não linear, o que fez com que alguns trabalhos manipulassem as expressões que interferem nesse fato. Li e Horne (2006) compararam alguns métodos, como por exemplo, método de Purcell e Brooks-Corey, para calcular a permeabilidade relativa da pressão capilar em um meio poroso úmido consolidado. Pois, a escolha desses modelos devem ser representativa ao problema em estudo, para obter resultados satisfatórios.

Para uma previsão precisa das permeabilidades relativas, Adibifard *et al.* (2020) usaram dois algoritmos diferentes, GA (*Genetic Algorithm*) e Iter EnKF (*Iterative Ensemble Kalman Filter*), para estimar o conjunto ótimo de curvas de permeabilidade relativa de Corey, e concluíram que a diferença entre as soluções ótimas de ambos os algoritmos foram insignificantes. Em um estudo recente de Dana, Jammoul e Wheeler (2022), os autores analisaram o desempenho do algoritmo *fixed stress split* para um problema de escoamento de duas fases imiscíveis.

Esses problemas podem ser modelados por diferentes formulações matemáticas. As propriedades de cada formulação dependem da especificidade do problema. Contudo, em algumas formulações são usadas algumas novas variáveis (artificiais) que podem facilitar a resolução do sistema (BASTIAN, 1999). Formulação saturação-pressão da fase (BASTIAN; HELMIG, 1999), formulação saturação-pressão global, formulação mista e formulação pressão-pressão (ATAIE-ASHTIANI; RAEESI-ARDEKANI, 2010), são exemplos de formulações possíveis de serem aplicadas em problemas de duas fases, sendo as duas primeiras as mais comuns na literatura. Para uma introdução das diferentes formulações para as equações de escoamento multifásico ver também Chavent e Jaffré (1986), Helmig *et al.* (1997), Bastian (1999), Peaceman (2000).

1.2.2 Métodos de linearização

Para obter a solução numérica dos modelos de escoamento bifásicos devemos escolher uma maneira de resolver o sistema acoplado de equações não linear. Um dos métodos mais comuns para resolver esses modelos é o método IMPES (*Implicit Pressure Explicit Saturation*), implícito na pressão e explícito na saturação, apesar de seus problemas com instabilidade e necessidade de restrições no tamanho do passo de tempo. Versões melhoradas do esquema IMPES foram apresentadas em Chen, Huan e Ma (2006), Lu e Wheeler (2009), Kou e Sun (2010), Kvashchuk e Radu (2017), Chen *et al.* (2019). As principais alternativas ao IMPES são os esquemas totalmente implícito (FREPOLI;

MAHAFFY; OHKAWA, 2003; LACROIX *et al.*, 2003; GANIS *et al.*, 2014; RADU *et al.*, 2015; KARPINSKI; POP; RADU, 2017) que são mais confiáveis no que diz respeito à robustez, devido ao tratamento totalmente implícito e totalmente acoplado das equações governantes. Esses métodos evitam quaisquer restrições no passo de tempo, mas precisam de um algoritmo eficiente para resolver o sistema não linear resultante. Uma forma de resolver esse tipo de sistema é utilizar algumas técnicas de linearização, transformando-as em sequência de equações lineares e assim aplicar os métodos tradicionais de resolução de sistemas lineares.

O método de Newton (KUEPER; FRIND, 1991; KNABNER; ANGERMANN, 2003; BURDEN; FAIRES; BURDEN, 2015; GOLUB; ORTEGA, 2014) para resolução de sistemas algébricos não lineares é considerado muito preciso, com convergência quadrática, porém caro computacionalmente, devido ao alto custo com o cálculo das derivadas em cada iteração.

O L-esquema (RADU *et al.*, 2015; KARPINSKI; POP; RADU, 2017) é outro método de linearização extremamente comum devido à sua simplicidade, pois substitui a iteração de Newton por uma iteração de ponto fixo. Considerando o escoamento bifásico em meio poroso com efeitos de capilaridade dinâmica, Karpinski, Pop e Radu (2017) utilizaram o L-esquema, que não requer etapa de regularização, pois não utiliza cálculos de derivadas geradas pela linearização como o método de Picard e Newton. Por exemplo, no L-esquema a derivada da saturação é substituída por um valor constante. Esse procedimento de linearização foi apresentado por Pop, Radu e Knabner (2004) para resolver problemas não lineares elípticos. Sua robustez, no entanto, vem ao preço de uma convergência mais lenta (geralmente convergência linear).

Finalmente, as técnicas de Picard também são amplamente utilizadas. O método de Picard (GOLUB; ORTEGA, 2014) é mais barato computacionalmente, mas não é tão preciso devido à aproximação ser feita por uma parte linear e outra não linear. A linearização baseada na forma mista da equação, que permite a transição das zonas insaturadas para as saturadas e mantém a conservação da massa, a fim de manter seu baixo custo computacional (se comparado com Newton) e a tentativa de melhorar sua precisão, é chamada de método de Picard modificado. Foi introduzido por Celia, primeiro para a equação de Richard (CELIA; BOULOUTAS; ZARBA, 1990) e depois para o problema de escoamento bifásico em meios porosos (CELIA; BINNING, 1992).

Uma comparação entre as abordagens de Newton, Picard modificado e L-esquema, para a linearização do problema de transporte de um *surfactant* em meio poroso foi apresentada em Illiano, Pop e Radu (2020), os quais chegaram a conclusão de que, entre os métodos estudados, o Newton é o único com convergência quadrática, Picard e Newton geraram matrizes mal condicionada e os *solvers* baseados no L-esquema foram os mais robustos, pois produziram sistemas lineares bem condicionadas. Outra comparação de

métodos de linearização, em particular entre o L-esquema e o método de Picard modificado, foi realizado por (OLIVEIRA *et al.*, 2020), para um problema de escoamento bifásico unidimensional em meios porosos rígidos e combinando tais linearizações com o método *multigrid* para a solução do sistema de equações resultantes.

1.2.3 Solvers

O desenvolvimento de *solvers* iterativos eficientes para simulação totalmente implícita de problemas complexos de escoamento multifásico tem sido amplamente estudado nas últimas décadas. Uma das abordagens mais populares na comunidade de simulação de reservatórios é baseada na combinação de métodos de subespaço de Krylov com uma técnica de pré-condicionamento de Resíduo de Pressão Restrita (*Constrained Pressure Residual*, CPR) (WALLIS, 1983; WALLIS; KENDALL; LITTLE, 1985). Sua implementação padrão (LACROIX; VASSILEVSKI; WHEELER, 2001; SCHEICHL; MASSON; WENDEBOURG, 2003; CAO *et al.*, 2005; STÜBEN *et al.*, 2007; ZHOU; JIANG; TCHELEPI, 2013; GRIES *et al.*, 2014; LIU; WANG; CHEN, 2016) acopla um pré-condicionador *multigrid* algébrico (AMG) para o bloco de pressão geralmente elíptico e uma fatoração incompleta, que é efetiva para a parte hiperbólica. Além disso, diferentes variantes do pré-condicionamento da CPR têm sido propostas (CUSINI *et al.*, 2015; WANG *et al.*, 2017; BUI; WANG; OSEI-KUFFUOR, 2018). No entanto, outras alternativas podem ser encontradas na literatura. Em Singh, Pencheva e Wheeler (2018), os autores consideram uma construção Jacobiana aproximada como alternativa ao método convencional de Newton, com a construção Jacobiana exata, como um *solver* não linear.

Em Yang *et al.* (2018), foi proposto um *solver* altamente paralelo no qual o sistema não linear resultante que surge a cada passo de tempo é resolvido de forma acoplada usando um algoritmo do tipo Newton–Krylov–Schwarz. Recentemente, diferentes métodos baseados na Redução do Complemento de Schur foram apresentados (BUI; ELMAN; MOULTON, 2017; BÜSING, 2021). Em Nardean, Ferronato e Abushaikh (2021a), os autores consideram um pré-condicionador de bloco original que explora a estrutura de blocos da matriz Jacobiana enquanto lida com a natureza não simétrica dos blocos individuais. Os mesmos autores propõem em Nardean, Ferronato e Abushaikh (2021b) uma nova técnica de pré-condicionamento (*Explicit Decoupling Factor Approximation*, EDFA) baseada na aproximação dos fatores de desacoplamento da matriz do sistema usando operadores de restrição apropriados para o cálculo do complemento de Schur.

Neste trabalho, nosso foco está na solução iterativa dos sistemas lineares que surgem em uma discretização de volume finito, centrado na célula, totalmente implícito de um sistema de escoamento bifásico, com as fases sendo incompressíveis e imiscíveis, e a matriz não deformável. Algoritmos baseados na iteração de Picard modificado de (CELIA; BOULOUTAS; ZARBA, 1990) têm sido amplamente empregados como métodos

de solução iterativa eficientes para a equação de Richard. As vantagens deste método são a sua facilidade de implementação, uma vez que não requerem o cálculo de Jacobianos, bem como seus baixos requisitos de armazenamento. Aqui, consideramos uma combinação da extensão da iteração Picard modificado para problemas de escoamento de duas fases (CELIA; BINNING, 1992) e um método *multigrid* centrado em células para a solução do sistema linear resultante.

No âmbito de resoluções de sistemas de equações lineares, o método *multigrid* é uma das técnicas numéricas mais eficientes (BRIGGS; HENSON; MCCORMICK, 2000; TROTTEBERG; OOSTERLEE; SCHÜLLER, 2001; WESSELING, 2004) para acelerar a convergência de suas soluções. Como o próprio nome diz, esse método é composto por diversas malhas com diferentes graus de refino, as quais são percorridas durante um processo iterativo.

Há registros de que o *multigrid* começou a ser estudado por Fedorenko (1964) e Bakhvalov (1966), sendo reconhecido apenas uma década depois, pelos trabalhos de (BRANDT, 1977), onde apresentou o esquema de correção (*Correction Scheme*, CS) para problemas lineares e a razão de engrossamento mais recomendável sendo $re = 2$ (mais detalhes na seção 3.1). Nesse trabalho, Brandt (1977) apresentou também uma introdução ao esquema de aproximação completa (*Full Approximation Scheme*, FAS), específico para problemas não lineares. Como neste trabalho utilizamos métodos no intuito de linearizar nossas equações, então utilizamos somente o esquema de correção CS. Abaixo segue uma relação de alguns dos trabalhos onde podemos encontrar o uso do método *multigrid* com o esquema CS, como por exemplo: Kelkar (1990), Sathiyamurthy e Patankar (1994), Craig (1996), Karki, Sathiyamurthy e Patankar (1996), Tannehill, Anderson e Pletcher (1997), Trottenberg, Oosterlee e Schüller (2001) e Ferziger, Perić e Street (2002).

Dentre os diversos estudos do *multigrid*, foram Hortmann, Perić e Scheurer (1990) e Ferziger, Perić e Street (2002) que apresentaram uma análise onde o número de iterações independem do tamanho da malha para ocorrer convergência na malha mais fina. Além do método *multigrid* ter seu grande reconhecimento, decorrente a sua ampla capacidade de resolver rapidamente grandes sistemas de equações, demonstrando complexidade ótima, na resolução de muitos problemas, em diferentes áreas (OOSTERLEE; SCHULLER; TROTTEBERG, 2001).

Em trabalhos mais recentes, também é possível perceber a importância das aplicações do *multigrid*. Com o objetivo de acelerar da convergência dos *solvers*, o *multigrid* foi usado para resolver problemas com equações anisotrópicas (OLIVEIRA *et al.*, 2018; RUTZ; PINTO; GONÇALVES, 2019), equações de poroelasticidade (WIENANDS *et al.*, 2004; GASPAR; RODRIGO, 2017; LUO *et al.*, 2017; FRANCO *et al.*, 2018), sempre obtendo ótimos resultados.

No contexto de problemas de escoamento bifásico em meios porosos, o método *multigrid* foi aplicado, por um lado, para a solução da equação da pressão dentro de uma abordagem desacoplada (IMPES) em Scott (1985) e Dendy Jr (1987). Por outro lado, o *multigrid* também foi aplicado à abordagem totalmente acoplada e totalmente implícita em Brakhagen e Fogwell (1990), Molenaar (1995) e Bastian e Helmig (1999).

A solução de equações não lineares por *multigrid* é possível com duas abordagens diferentes: (i) onde uma abordagem de linearização global, geralmente pelo método de Newton, é realizada e as equações lineares resultantes são resolvidas com *multigrid* linear (CS), ou (ii) uma abordagem onde a não linearidade é tratada dentro do *multigrid* (*Full Approximation Scheme*, FAS). Embora seja possível essas duas abordagens diferentes para a não linearidade, Molenaar (1995) comparou ambas descobrindo que a primeira é computacionalmente mais eficiente. Aqui, seguimos a primeira abordagem e propomos o uso do algoritmo *multigrid* em malhas com arranjo colocalizado para resolver um sistema de equações lineares obtido após a linearização da formulação mista do problema por meio do Picard modificado.

É bem conhecido que o desempenho do *multigrid* depende fortemente da escolha de seus componentes e, portanto, eles devem ser cuidadosamente escolhidos. O algoritmo proposto considera Gauss-Seidel como suavizador, um operador de prolongação constante por partes e a média aritmética como a restrição, e uma técnica de discretização direta para definir os operadores discretos nas malhas grossas. Veremos que esse algoritmo *multigrid* converge bem, mesmo no contexto de campos heterogêneos aleatórios. Um algoritmo *multigrid* semelhante foi proposto por Kumar *et al.* (2020) para resolver a equação de Richard.

1.3 Organização do texto

Além deste primeiro capítulo introdutório, organizamos este texto em mais 5 capítulos, como segue. No Capítulo 2, apresentamos as propriedades básicas sobre os problemas de escoamentos multifásicos, o método de Euler implícito para a discretização temporal e o MVF para a discretização espacial das EDPs, além dos métodos de linearização. No Capítulo 3, apresentamos uma introdução aos métodos iterativos básicos e o método *multigrid*. Os modelos matemáticos são dados no Capítulo 4. O detalhamento dos modelos numéricos, assim como o processo de discretização das equações e as condições iniciais e de contorno empregadas, são apresentados no Capítulo 5. No Capítulo 6, são encontrados os experimentos numéricos, os detalhes computacionais, os resultados obtidos e sua discussão; enquanto que as conclusões, constam no Capítulo 7.

2 FUNDAMENTAÇÃO TEÓRICA

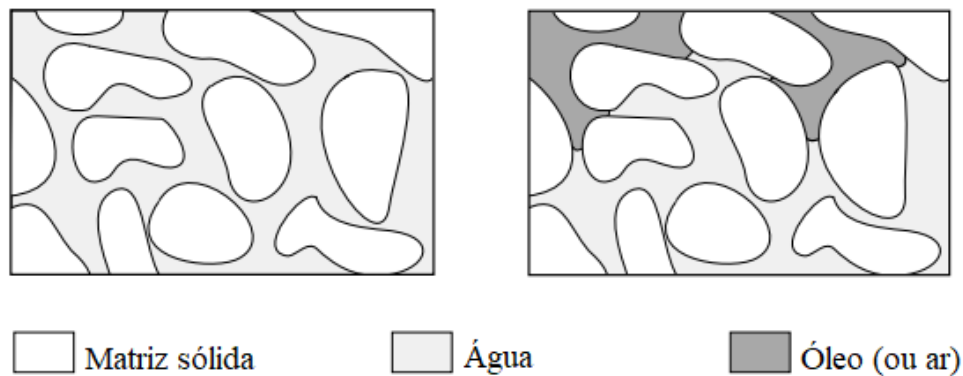
Neste capítulo realizamos uma fundamentação teórica sobre as propriedades básicas de problemas de escoamentos multifásicos, o método de Euler implícito para a discretização temporal e o MDF para a discretização espacial das EDPs, além dos métodos de linearização.

2.1 Propriedades básicas de escoamentos multifásicos

Nesta seção apresentamos as componentes físicas e matemáticas dos problemas multifásicos em meios porosos rígidos para os casos uni e bi-dimensional. Todas as informações foram baseadas nos livros de Bastian (1999), Chen, Huan e Ma (2006) e Nordbotten e Celia (2011).

O meio poroso é composto por uma parte sólida, chamada de matriz sólida, o restante do espaço vazio (ou espaço poroso) desse meio pode ser preenchido por um ou mais fluidos (por exemplo, água, óleo, ar e gás). No modelo multifásico o espaço vazio do meio é preenchido por dois ou mais fluidos que neste texto, são admitidos imiscíveis entre si, isto é, não se misturam (por exemplo, água e óleo). A FIGURA 1 mostra um meio poroso 2D (Bidimensional) completamente preenchido apenas por água (sistema monofásico, à esquerda) ou preenchido com água e óleo (sistema bifásico, à direita).

FIGURA 1 – ILUSTRAÇÃO DE UM MEIO POROSO PREENCHIDO COM UM OU DOIS FLUIDOS.

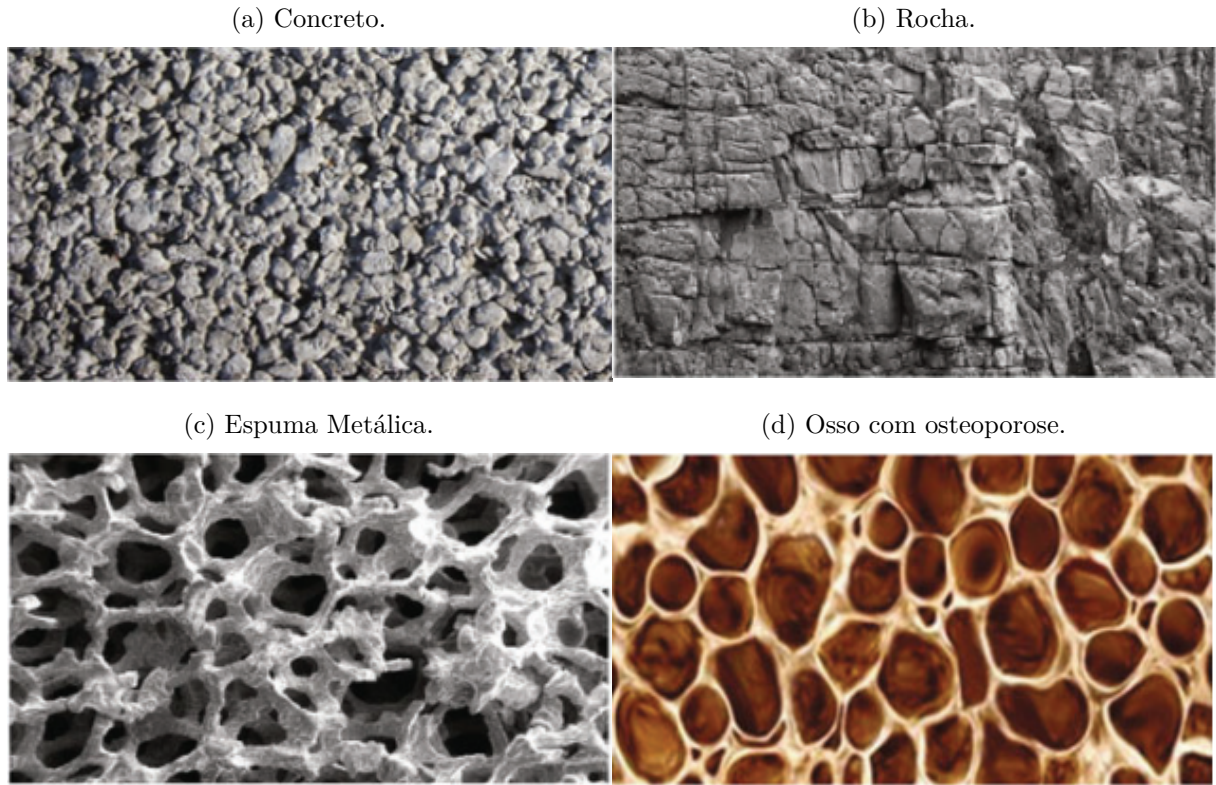


FONTE: Adaptada de Bastian (1999).

O material poroso assume muitas formas e meios. O concreto, material utilizado na construção civil, possui porosidade relativamente baixa. No entanto, a FIGURA 2a apresenta um concreto com alta porosidade. Este tipo de concreto é utilizado para pavimentos onde se deseja permear e armanezar água para reduzir o escoamento superficial

em caso de tempestade. A FIGURA 2b mostra uma formação rochosa fraturada, causadas muitas vezes pela mudança do ambiente. Essas formações são altamente permeáveis. A FIGURA 2c mostra uma espuma metálica, um material leve e muito usado para diversos fins, como amortecimento de vibrações, isolamento térmico e acústico, além de absorção de energia de impacto. Já na FIGURA 2d, temos um exemplo de material biológico como meio poroso, um osso humano com osteoporose.

FIGURA 2 – MATERIAIS POROSOS.



FONTE: Adaptada de Cheng (2016).

Outros exemplos bem comuns de meios porosos são: terra, areia, arenito, espuma de borracha, pão, pulmões, rins, entre outros.

Para conseguirmos diferenciar matematicamente os diversos meios porosos, existe uma quantidade chamada porosidade (ϕ). A porosidade $\phi(x_0)$ na posição x_0 com relação ao volume médio $\Omega_0(x_0)$ é definida como

$$\phi(x_0) = \frac{1}{\text{medida}(\Omega_0(x_0))} \int_{\Omega_0(x_0)} \zeta(x) dx, \quad (2.1)$$

onde $x_0 \in \Omega_0 \subset \Omega$, Ω é o domínio espacial, $\text{medida}(\Omega)$ é comprimento, área ou volume dependendo da dimensão, $\zeta(x)$ é a função indicador de espaço vazio em um nível microscópico,

definida pela expressão

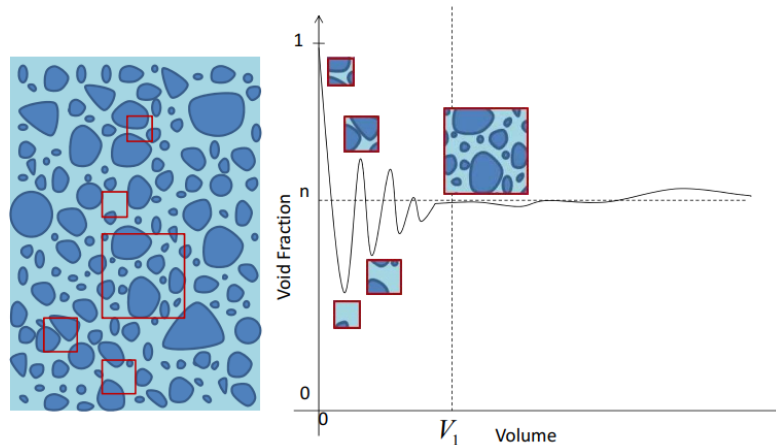
$$\zeta(x) = \begin{cases} 1, & x \in \text{espaço vazio} \\ 0, & x \in \text{matriz sólida} \end{cases}. \quad (2.2)$$

Assim, a porosidade é definida pela razão entre o volume do espaço vazio e o volume total. Essa quantidade é adimensional e está entre 0 e 1.

Geralmente o meio poroso tem uma geometria bastante complexa, por isso não pode ser descrito por um ponto, pois em cada ponto pode conter apenas sólido ou apenas fluido. Por isso, aqui vamos usar uma abordagem comum que ao invés de considerarmos um único ponto, consideramos o Volume Elementar Representativo (*Representative Elementary Volume*, REV). O REV é o menor volume possível que pode conter uma quantidade representativa de vazio e sólido de forma que possamos definir as propriedades com eles, as quais são detalhadas na subseção a seguir.

A FIGURA 3 mostra uma maneira que Kvashchuk e Radu (2017) apresentaram para escolher o tamanho de REV mais adequado. Se o REV for muito pequeno, poderá ter oscilações aleatórias em relação à parte vazia, ou seja, a região escolhida pode ter muitos espaços vazios ou poros, não representando o meio em análise. Por isso, é preciso aumentar o tamanho do REV para obter um equilíbrio. Por outro lado, segundo Bastian (1999), o tamanho do REV deve ser tal que, o valor da quantidade média (ou seja, o valor usado para a porosidade do meio, por exemplo) não dependa do tamanho do REV. Assim, o REV poderia ser escolhido em qualquer lugar do intervalo em questão.

FIGURA 3 – REPRESENTAÇÃO DA RELAÇÃO ENTRE O VAZIO E VOLUME REV.



FONTE: Kvashchuk (2015).

A TABELA 1 apresenta os valores aproximados esperados das porosidades em rochas sólidas e porosas sob várias condições.

TABELA 1 – EXEMPLOS DE POROSIDADES.

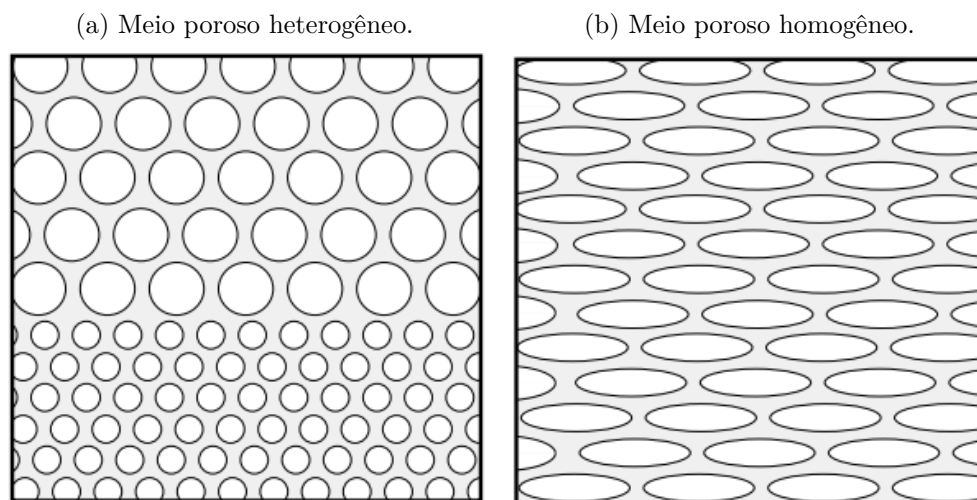
Concreto	0,02-0,07
Carvão	0,02-0,12
Arenitos	0,08-0,38
Cascalho	0,25-0,40
Areia	0,25-0,50
Lodo	0,35-0,50
Argila	0,40-0,70
Fibra de vidro	0,88-0,93
Espuma metálica	0,98

FONTE: Adaptada de Yu *et al.* (1993) e Kaviany (2012).

Segundo Bastian (1999), um meio poroso é homogêneo se a quantidade (média) macroscópica de um parâmetro for o mesmo valor em todo o domínio. Caso contrário, é chamado de heterogêneo.

Por exemplo, na FIGURA 4a é possível perceber que o meio tem poros diferentes com grãos grandes e pequenas, portanto, é heterogêneo em relação à porosidade. Entretanto, na FIGURA 4b os poros são todos iguais, portanto um meio homogêneo.

FIGURA 4 – ILUSTRAÇÃO DE MEIOS POROSOS (a) HETEROGÊNEO E (b) HOMOGÊNEO.



FONTE: Bastian (1999).

2.1.1 Equações governantes

Consideramos um meio poroso onde o espaço vazio será preenchido por duas fases de fluidos imiscíveis e incompressíveis, denotados por w e n , fase úmida e não úmida, respectivamente. Então a equação da conservação da massa dos fluidos pode ser escrita da forma (NORDBOTTEN; CELIA, 2011):

$$\frac{\partial (\rho_\alpha \theta_\alpha)}{\partial t} + \nabla \cdot (\rho_\alpha q_\alpha) = F_\alpha, \text{ em } \Omega \times [0, t_f]. \quad (2.3)$$

sendo Ω o domínio espacial, dado por $\Omega \subset R^d$, com $d = 1, 2$ e $[0, t_f]$ intervalo de tempo considerado, sendo t_f o o tempo final.

A equação (2.3) mostra que a taxa de variação da massa do fluido em um volume de controle arbitrário $V \subseteq \Omega$ é igual ao escoamento líquido sobre a superfície ∂V e a contribuição das fontes dentro de V (BASTIAN, 1999).

As variáveis da equação (2.3) possuem os seguintes significados:

- $\theta_\alpha = \phi(x)S_\alpha(x, t)$ é adimensional, usada apenas como simplificação, é uma variável composta pela porosidade ($\phi(x)$) e saturação ($S_\alpha(x, t)$), que são explicadas a seguir;
- $\phi(x)$ é a porosidade do meio poroso. Em meios heterogêneos é uma função de posição. Essa variável pode depender da pressão do fluido ou do tempo (por exemplo, inchaço da argila);
- $S_\alpha(x, t)$ é a saturação da fase do fluido α . É uma quantidade adimensional definida como uma fração do espaço de poro ocupado pelo fluido α em REV. Assim, temos que $0 \leq S_\alpha(x, t) \leq 1$;
- $\rho_\alpha(x, t)$ é a densidade do fluido da fase α dado por $[kg/m^3]$. Neste trabalho como consideramos fluidos incompressíveis, a densidade é um valor constante;
- $q_\alpha(x, t)$ é o vetor de escoamento volumétrico do fluido da fase α , ou seja, velocidade do escoamento, dado por $[m/s]$;
- $F_\alpha(x, t)$ é o termo fonte da fase α com unidade $[kg/m^3s]$.

O vetor de escoamento volumétrico é dado pela Lei de Darcy multifásica estendida (BASTIAN, 1999), ou seja, generalizada para o caso multifásico

$$q_\alpha = -\frac{K_\alpha}{\mu_\alpha} (\nabla p_\alpha - \rho_\alpha g). \quad (2.4)$$

As novas variáveis na equação (2.4) representam as seguintes definições:

- $\mu_\alpha(x,t)$ é a viscosidade dinâmica do fluido da fase α dado por $[Pa \cdot s]$. A viscosidade representa a facilidade com que o fluido pode escoar, podendo depender do espaço e tempo, mas aqui vamos considerar como constante em todo o domínio;
- $p_\alpha(x,t)$ é a pressão do fluido α com unidades $[Pa] = [N/m^2]$. Nesta tese, esta é a função incógnita a ser determinada pela modelo;
- g é o vetor de aceleração gravitacional, com unidades $[m/s^2]$;
- K_α é o tensor simétrico da permeabilidade absoluta $[m^2]$, representado por

$$K_\alpha = k_{r\alpha}(S_\alpha)K, \quad (2.5)$$

isto é, um fator escalar adimensional, sendo $k_{r\alpha}(S_\alpha)$ a permeabilidade relativa do fluido da fase α e K a permeabilidade absoluta independente do fluido (BASTIAN, 1999).

Quando se trata de escoamentos bifásicos precisamos lidar com um sistema onde parte dos poros já estão ocupados com um fluido, o que obstrui o escoamento do outro fluido. Isso implica em menor permeabilidade para ambos os fluidos. Por isso, a necessidade da permeabilidade relativa $k_{r\alpha}$, que é diferente para cada fase α e obedece à restrição (2.6). Geralmente as permeabilidades relativas são anisotrópicas (KVASHCHUK, 2015).

$$0 \leq k_{r\alpha}(S_\alpha) \leq 1. \quad (2.6)$$

Inserindo a equação (2.5) na equação (2.4) obtemos

$$q_\alpha = -\frac{k_{r\alpha}}{\mu_\alpha} K (\nabla p_\alpha - \rho_\alpha g). \quad (2.7)$$

A quantidade $\lambda_\alpha = \frac{k_{r\alpha}}{\mu_\alpha}$ é frequentemente conhecida como mobilidade.

Substituindo a equação (2.7) na equação (2.3), considerando o caso incompressível e o vetor de aceleração gravitacional igual a zero, temos a equação simplificada:

$$\frac{\partial \theta_\alpha}{\partial t} - \nabla \cdot (\lambda_\alpha K \nabla p_\alpha) = \frac{F_\alpha}{\rho_\alpha}. \quad (2.8)$$

Além dessas equações, que valem para as fases $\alpha = w$ e n , temos algumas relações auxiliares (BASTIAN; HELMIG, 1999):

- Pressão capilar é a diferença entre as pressões de cada fase

$$p_c = p_n - p_w; \quad (2.9)$$

- A soma das saturações de cada fase é igual à 1

$$S_w + S_n = 1, \quad (2.10)$$

com isso temos que, $\theta_w + \theta_n = \phi$.

2.1.2 Pressão capilar, permeabilidade relativa e suas parametrizações

As formas mais comuns da pressão capilar (equação (2.9)) e permeabilidade relativa (equação (2.6)) são baseadas em experimentos laboratoriais. Assim, existem na literatura algumas parametrizações à respeito desses parâmetros, como por exemplo Van Genuchten e Brooks-Corey, que serão fornecidas a seguir.

Parametrização de Van Genuchten

Para o modelo de Van Genuchten a pressão capilar pode ser escrita dependendo da saturação efetiva, como vemos na equação (2.11).

$$p_c(S_\alpha) = p_e(\bar{S}_\alpha^{-1/m} - 1)^{1-m}, \quad (2.11)$$

onde p_e é a pressão de entrada e \bar{S}_α é a saturação efetiva da fase α . Se $p_c = 0$, então $\bar{S}_\alpha = 1$. Temos ainda que m depende de n_{VG} , $m = 1 - 1/(n_{VG})$ e apenas p_e e n_{VG} são parâmetros livres de Van Genuchten. Segundo Bastian (1999) os valores típicos de n_{VG} estão na faixa de 2 a 5. No caso particular de $\alpha = w$ (fase úmida), temos

$$\bar{S}_w = \frac{S_w - S_{wr}}{1 - (S_{wr} + S_{nr})}, \quad (2.12)$$

em que $S_{\alpha r}$ é a saturação residual da fase α (BASTIAN, 1999). A FIGURA 5 mostra a pressão capilar calculada pela função de Van Genuchten para diferentes valores de n_{VG} , $p_e = 3$ e $S_{\alpha r} = 0$.

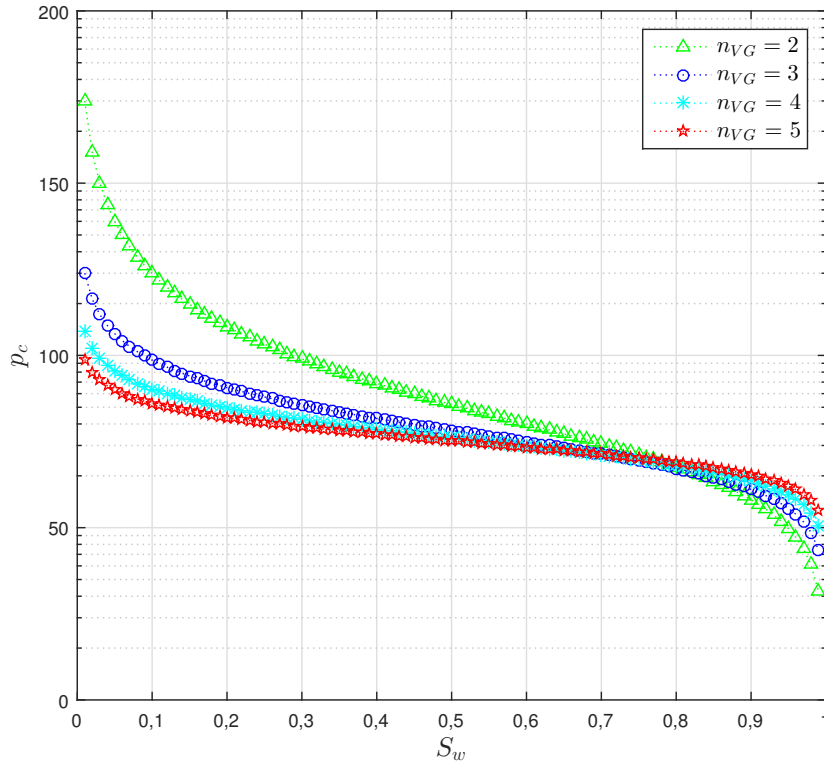
As funções de permeabilidade relativa de Van Genuchten para o sistema de duas fases (úmida w e não úmida n) são escritas dependendo da saturação efetiva:

$$\begin{aligned} k_{rw}(S_w) &= \sqrt{\bar{S}_w} (1 - (1 - \bar{S}_w^{1/m})^m)^2, \\ k_{rn}(S_w) &= \sqrt{1 - \bar{S}_w} (1 - \bar{S}_w^{1/m})^{2m}, \end{aligned} \quad (2.13)$$

onde m é o mesmo parâmetro definido para a equação (2.11) vista anteriormente. Na FIGURA 6 é apresentado a permeabilidade relativa calculada pela função de Van Genuchten para diferentes valores de n_{VG} e $S_{\alpha r} = 0$.

Parametrização de Brooks-Corey

FIGURA 5 – FUNÇÃO DA PRESSÃO CAPILAR DE VAN GENUCHTEN EM ESCALA \log VERSUS S_w , PARA DIFERENTES PARÂMETROS n_{VG} , $p_e = 3$ E $S_{ar} = 0$.



FONTE: A autora (2022).

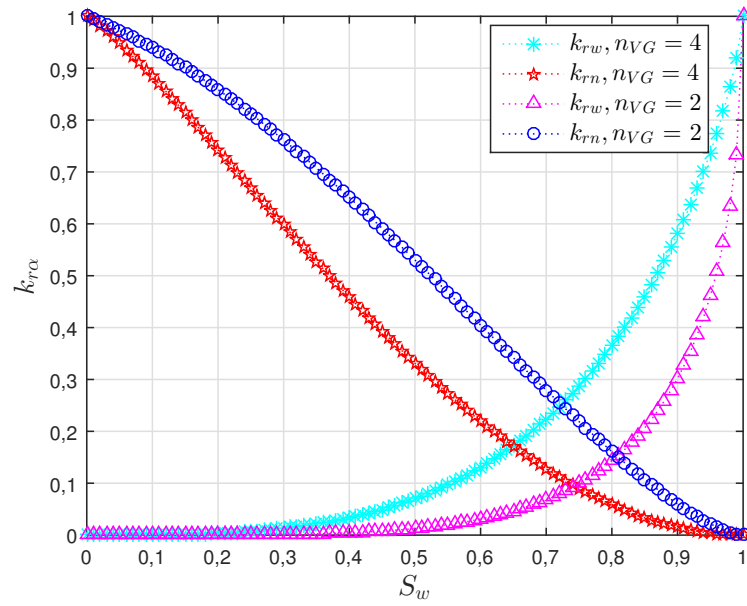
Para o modelo de Brooks-Corey, a pressão capilar pode ser escrita dependendo da saturação efetiva, como vemos na equação (2.14)

$$p_c(S_\alpha) = p_e \bar{S}_\alpha^{-\frac{1}{\lambda}}, \quad (2.14)$$

com p_e e λ sendo dois parâmetros de Brooks-Corey. Como descrito anteriormente, p_e é a pressão de entrada do meio poroso e λ está relacionado com a distribuição do tamanho dos poros (se mais ou menos uniforme, por exemplo). Assim, um material com um único tipo de grão tem um valor grande de λ e no caso de um material altamente não uniforme, λ tem um valor pequeno. Geralmente λ assume valores entre 0,2 e 3 (BASTIAN, 1999). A FIGURA 7 mostra a pressão capilar calculada pela função de Brooks-Corey para diferentes valores de λ , $p_e = 2$ fixo e $S_{ar} = 0$.

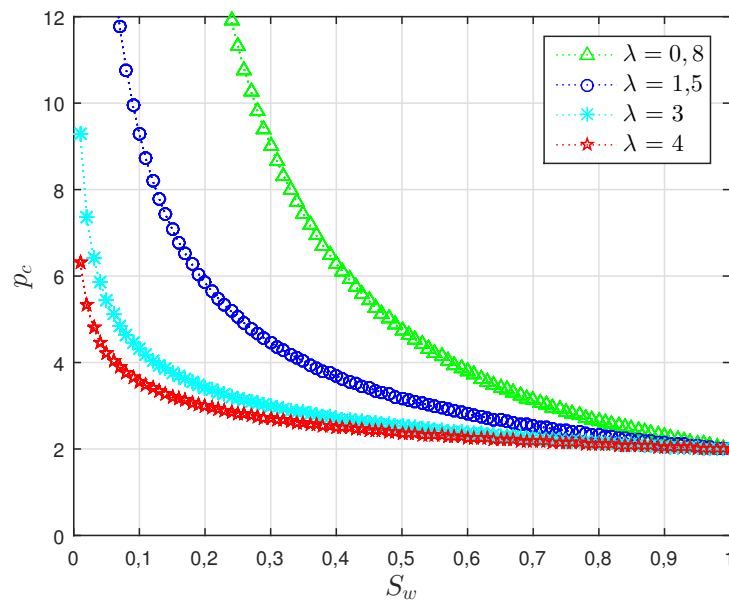
O modelo para a permeabilidade relativa proposto por Brooks-Corey dependente da saturação efetiva é dada por:

FIGURA 6 – FUNÇÃO DA PERMEABILIDADE RELATIVA DE VAN GENUCHTEN PARA DIFERENTES PARÂMETROS E $S_{or} = 0$.



FONTE: A autora (2022).

FIGURA 7 – FUNÇÃO DA PRESSÃO CAPILAR DE BROOKS-COREY PARA DIFERENTES λ , $p_e = 2$ E $S_{or} = 0$.

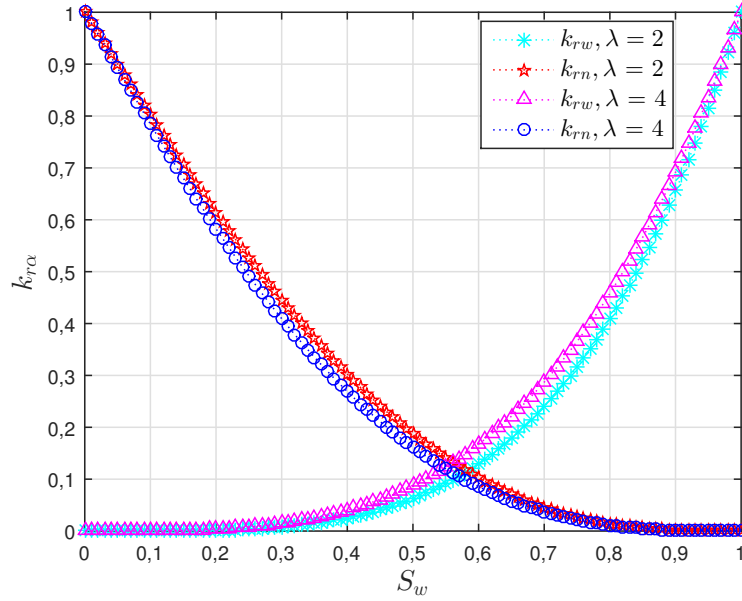


FONTE: A autora (2022).

$$\begin{aligned}
 k_{rw}(S_w) &= \bar{S}_w^{\frac{2+3\lambda}{\lambda}}, \\
 k_{rn}(S_w) &= (1 - \bar{S}_w)^2 (1 - \bar{S}_w^{\frac{2+\lambda}{\lambda}}).
 \end{aligned}
 \tag{2.15}$$

O parâmetro λ é o mesmo da pressão capilar. Na FIGURA 8 é apresentada a permeabilidade relativa calculada pela função de Brooks-Corey para diferentes valores de n e $S_{or} = 0$.

FIGURA 8 – FUNÇÃO DA PERMEABILIDADE RELATIVA DE BROOKS-COREY PARA DIFERENTES PARÂMETROS E $S_{or} = 0$.



FONTE: A autora (2022).

2.2 Método de Euler Implícito

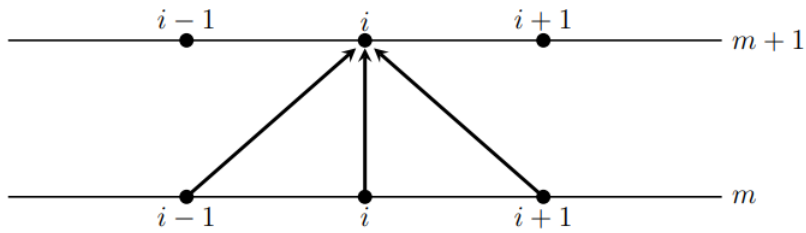
Quando temos uma derivada temporal, precisamos realizar a discretização em relação ao tempo. Para isso, existem inúmeras formulações na literatura, podendo ser divididas em três grupos de formulações: explícita, semi-implícita e implícita. Segundo Maliska (2004), temos a formulação explícita quando todas as incógnitas vizinhas do ponto i são analisadas no passo de tempo anterior m , ou seja, já conhecidas, conforme apresentamos na FIGURA 9a.

Quando todas as incógnitas vizinhas ao ponto i são avaliadas no passo de tempo atual $m + 1$, ou seja, não são conhecidas na sua totalidade, temos a formulação implícita (FIGURA 9b). E, no último caso, quando as incógnitas vizinhas ao ponto i são avaliadas nos passos de tempo atual $m + 1$ e anterior m , como apresentamos na FIGURA 9c, temos a formulação semi-implícita (Crank-Nicolson é um exemplo clássico desta formulação). Neste trabalho iremos usar apenas métodos de um passo na discretização temporal, ou seja, não usaremos métodos multi-passos (BURDEN; FAIRES; BURDEN, 2015).

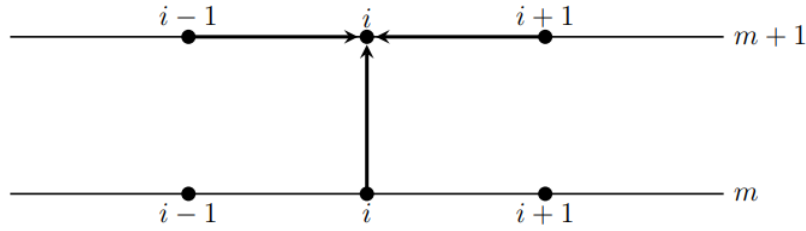
Segundo Burden, Faires e Burden (2015), para problemas lineares, o método explícito é condicionalmente estável, pois sua convergência depende de uma relação entre o tamanho do passo de tempo e a distância entre os nós na malha espacial; já os métodos semi-implícitos e implícitos são incondicionalmente estáveis, isto é, independem de tal relação; fazendo nossa escolha tender aos métodos semi-implícitos ou implícitos.

FIGURA 9 – FORMULAÇÕES EXPLÍCITA, SEMI-IMPLÍCITA E IMPLÍCITA PARA UM PONTO (i, m) EM RELAÇÃO A SUA POSIÇÃO ESPACIAL E TEMPORAL.

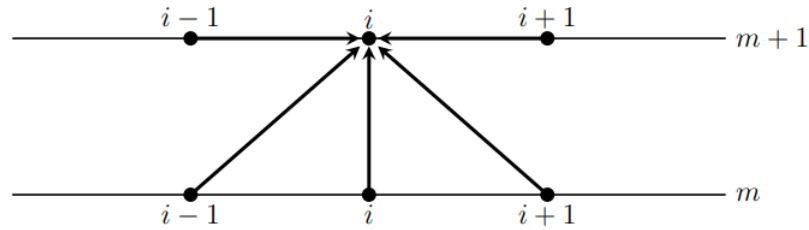
(a) Formulação explícita.



(b) Formulação implícita.



(c) Formulação semi-implícita.



FONTE: A autora (2022).

Dentre os métodos para a discretização temporal, utilizamos neste trabalho o método de Euler implícito, que apesar de ser um método de primeira ordem, ele é um método incondicionalmente estável, mais barato computacionalmente que o método de Crank-Nicolson e atende plenamente aos objetivos desta pesquisa.

Segundo Burden, Faires e Burden (2015), o objetivo do método de Euler implícito

é obter aproximações para a solução de um problema de valor inicial bem posto, dado por

$$\frac{du}{dt} = f, \quad (2.16)$$

com u e f funções das variáveis (x, t) , em que x está no domínio espacial, $t \in [t_0, t_f]$, onde t_0 e t_f representam o tempo inicial e final, respectivamente.

Aqui, vamos considerar um número positivo inteiro, N_t , de pontos no domínio temporal distribuídos uniformemente no intervalo $[t_0, t_f]$, gerando assim o que chamamos de malha temporal. Os pontos t desta malha são dados por

$$t_{m+1} = t_0 + (m + 1)\tau, \quad m = 0, 1, \dots, N_t - 1, \quad (2.17)$$

sendo $\tau = \frac{t_f - t_0}{N_t}$ o tamanho do passo de tempo.

Observamos que a derivada temporal é ordinária e apesar de depender dos valores espaciais x , considera-se x conhecidos durante o cálculo da variável temporal. Então, por simplicidade de notação, ao invés de escrevermos $u(x, t)$ usamos apenas por $u(t)$.

Consideramos $u(t) \in C^2[t_0, t_f]$ a única solução da equação (2.16), de forma que para cada m a sua expansão de Taylor é dada por

$$u(t_{m+1}) = u(t_m) + \tau \frac{du}{dt}(t_m) + \frac{\tau^2}{2} \frac{d^2u}{dt^2}(\epsilon_k), \quad (2.18)$$

para algum $\epsilon_k \in (t_0, t_f)$.

O método de Euler implícito constrói $v^m \approx u(t_m)$, sendo v uma aproximação da solução u , ao desconsiderar os termos de segunda ordem de aproximação. Assim, o método de Euler implícito é dado pela equação

$$v^{m+1} = v^m + \tau f(v^{m+1}, t_{m+1}). \quad (2.19)$$

Note que para obtermos o valor de v^{m+1} são necessários valores relacionados aos passos de tempo m e $m + 1$ em f (BURDEN; FAIRES; BURDEN, 2015).

Neste trabalho usamos o método de Euler, que será denominado por Euler Implícito.

2.3 Métodos de Linearização

Quando nos deparamos com um sistema não linear e precisamos resolvê-lo, uma das opções é utilizar algum método de linearização e assim aplicar um método para sistemas lineares, que é o mais usual. Neste trabalho analisamos dois esquemas: Picard

modificado e L-esquema. Nesta seção vamos dar apenas as noções básicas de ambos os métodos. Mais detalhes serão dados na seção 5.2.

Para entendermos como ocorre o processo de utilização desses métodos de linearização, nos baseamos no livro de Golub e Ortega (2014). Primeiro, consideramos uma equação a qual pode ser estendida para um sistema de equações

$$f_i(x_1, x_2, \dots, x_n) = 0, \quad i = 1, \dots, n, \quad (2.20)$$

onde f_1, f_2, \dots, f_n são funções das n variáveis x_1, x_2, \dots, x_n . Podemos reescrever esta equação na forma vetorial

$$F(x) = 0, \quad (2.21)$$

em que, F é uma função vetorial com as componentes f_1, f_2, \dots, f_n e x é um vetor contendo x_1, x_2, \dots, x_n .

Quando $n = 1$, obtemos apenas uma equação não linear, não sendo necessário realizar nenhuma manipulação e pode ser resolvido por algum método de zeros de funções, como o método do ponto fixo, Newton, secante, etc (BURDEN; FAIRES; BURDEN, 2015). No caso em que $n \geq 2$, para verificar se o problema tem soluções, e quantas, geralmente é muito difícil. Aqui, consideramos que o tal sistema tenha pelo menos uma solução (hipóteses de existência e unicidade podem ser encontradas em Golub e Ortega (2014), Burden, Faires e Burden (2015)).

Em muitas situações o sistema representado pela equação (2.21) pode ser reescrito na forma

$$F(x) = Ax + H(x) = 0, \quad (2.22)$$

onde A é uma matriz não singular e H é um vetor de funções não lineares. Neste caso, um procedimento iterativo bem natural, porém não necessariamente bom, é

$$x^{m+1} = -A^{-1}H(x^m), \quad m = 0, 1, \dots, \quad (2.23)$$

em que, os superíndices indicam o processo iterativo. Tal processo iterativo é conhecido como iteração de Picard.

No método de linearização de Picard modificado, ao invés de todas as variáveis serem usadas como estimativa conhecida, apenas uma segue essa ideia e a outra variável é aproximada pela série de Taylor de segunda ordem. Já, o L-esquema, não requer etapa de regularização, além de não utilizar cálculos de derivadas como o método de Picard e Newton.

2.4 Método de Volumes Finitos

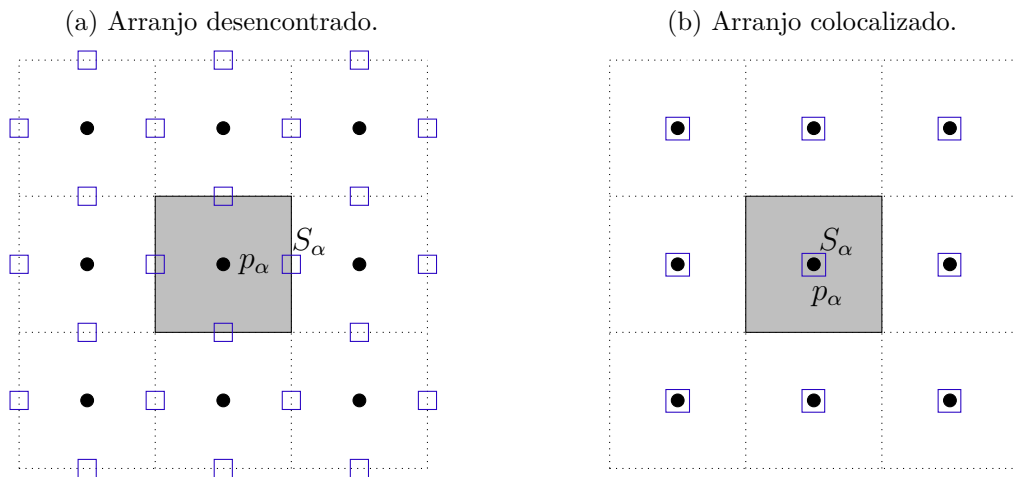
Um modelo matemático de equações ou sistema de equações diferenciais parciais (EDPs) pode ser resolvido numericamente, e para isso é necessário discretizar o domínio de cálculo, gerando uma malha de pontos ou volumes, onde os termos das equações diferenciais são aproximadas e assim recaindo na resolução de um sistema de equações algébricas.

Neste trabalho utilizamos o método de volumes finitos (MVF) para discretizar as equações diferenciais. Este método consiste em dividir o domínio de cálculo por subdomínios finitos, chamados de volumes de controle (VCs), envolvendo apenas um ponto nodal da malha, em que os valores da variável de interesse são calculados (PATANKAR, 2018). Posteriormente, cada EDP é integrada sobre cada VC e para as variáveis nas faces são utilizadas funções de interpolação em termos de valores nodais (PATANKAR, 2018).

Segundo Patankar (2018), no caso de sistemas de equações diferenciais, onde há mais de duas variáveis de interesse, existe duas possibilidades de posicionamento (arranjo) das variáveis. O primeiro é o arranjo colocalizado (veja a FIGURA 10b), onde todas as variáveis estão no centro do volume. O segundo é o arranjo desencontrado (veja a FIGURA 10a), onde algumas variáveis estão no centro e outras em suas faces.

Nesta tese utilizamos malhas colocalizadas, por simplicidade na implementação das condições de contorno e devido ao uso do método *multigrid*, que é mais viável com o uso deste tipo de arranjo.

FIGURA 10 – MALHAS COM ARRANJOS (a) DESENCONTRADO E (b) COLOCALIZADO PARA AS VARIÁVEIS p_α E S_α .

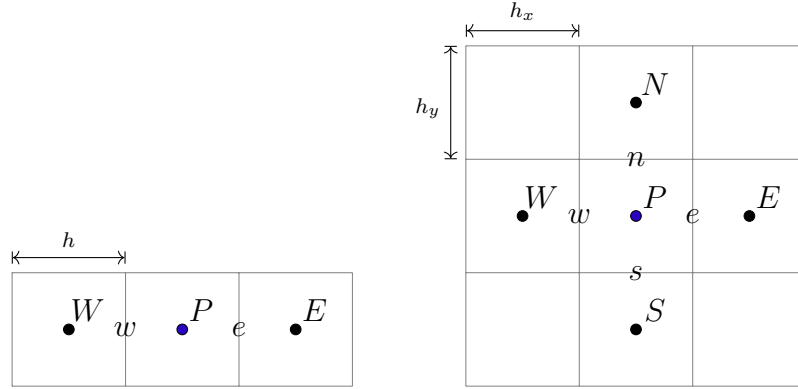


FONTE: A autora (2022).

A organização dos VCs em uma malha uni e bidimensional uniforme é apresentada na FIGURA 11, em que P, N, S, E e W representam o centro do volume e seus vizinhos

norte, sul, leste e oeste, respectivamente; e n, s, e e w representam as faces norte, sul, leste e oeste do VC, respectivamente. Nesta figura, h, h_x e h_y representam os tamanhos dos VCs nas direções indicadas.

FIGURA 11 – DISPOSIÇÃO DE UM VOLUME DE CONTROLE P E SEUS VIZINHOS EM UMA MALHA UNIFORME UNIDIMENSIONAL (ESQUERDA) E BIDIMENSIONAL (DIREITA).



FONTE: A autora (2022).

Para ilustrar a discretização de uma EDP, segundo o MVF, vamos considerar, como exemplo, um caso simples unidimensional. Seja

$$\frac{d}{dx} \left(\frac{du}{dx} \right) = 0, \quad (2.24)$$

onde u é uma função que depende somente de x . Integrando a equação (2.24) sobre cada VC, temos que

$$\iiint_{VC} \frac{d}{dx} \left(\frac{du}{dx} \right) dV = 0, \quad (2.25)$$

onde dV é o elemento de volume de controle de P .

Aplicando o teorema da Divergência de Gauss (PATANKAR, 2018) nesta equação, temos

$$\iint_A \frac{du}{dx} \cdot \vec{n} dA = 0, \quad (2.26)$$

sendo dA o elemento área da superfície do volume de controle P e \vec{n} o vetor unitário normal à superfície do elemento dA e apontando para fora de tal volume.

Calculando as integrais da equação (2.26) em relação ao volume de controle P , conforme a FIGURA 11, obtemos:

$$\iint_A \frac{du}{dx} \cdot \vec{n} dA \approx \frac{\left(\frac{du}{dx}\right)\bigg|_e - \left(\frac{du}{dx}\right)\bigg|_w}{h_x} h_x = 0, \quad (2.27)$$

ou seja,

$$\iint_A \frac{du}{dx} \cdot \vec{n} dA \approx \left(\frac{du}{dx}\right)\bigg|_e - \left(\frac{du}{dx}\right)\bigg|_w = 0. \quad (2.28)$$

Para aproximar as derivadas nas fases e e w do volume de controle P , podemos empregar algum método de interpolação. Maliska (2004) apresenta diversos esquemas para esta interpolação unidimensional, como por exemplo, o esquema central (*Central Differencing Scheme*, CDS), esquema a montante (*Upwind Differencing Scheme*, UDS) e Esquema exponencial. Neste exemplo, e ao longo desta tese, vamos usar o CDS por ser um esquema de 2ª ordem.

Considerando a posição dos VC na FIGURA 11, as aproximações na equação (2.28) são dadas por:

$$\left(\frac{du}{dx}\right)\bigg|_e = \frac{u_E - u_P}{h_x}, \quad (2.29)$$

$$\left(\frac{du}{dx}\right)\bigg|_w = \frac{u_P - u_W}{h_x}. \quad (2.30)$$

Note que as aproximações nas faces são calculadas com os valores nodais. Assim, podemos substituir as equações (2.29) e (2.30) na equação (2.28) e rearranjando os termos, obtemos um sistema linear do tipo

$$a_P u_P = a_W u_W + a_E u_E + b_P, \quad (2.31)$$

onde $a_P = \frac{2}{h_x}$, $a_W = a_E = \frac{1}{h_x}$ e $b_P = 0$. A extensão para o caso bidimensional é análoga, gerando um sistema do tipo

$$a_P u_P = a_W u_W + a_E u_E + a_N u_N + a_S u_S + b_P. \quad (2.32)$$

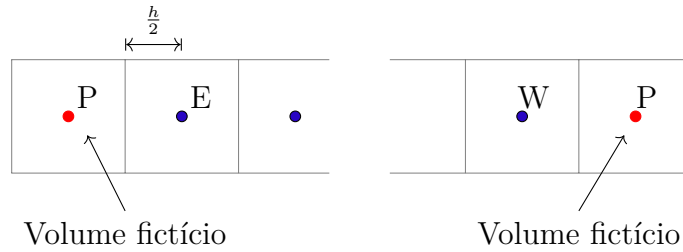
Note que as equações (2.31) e (2.32) são casos específicos da equação (1.1) e representam as equações discretizadas para um volume de controle interno. No caso

dos volumes que estão na fronteira dependem da condição de contorno estabelecida no problema, que pode ser Dirichlet, Neumann ou Robin (PATANKAR, 2018). Segundo Maliska (2004) existem algumas maneiras de aplicar essas condições, tais como: balanço para os volumes da fronteira, meio-volume ou volumes fictícios. Neste trabalho, utilizamos a técnica de volumes fictícios pelo fato de manter-se as mesmas equações/formulações para todos dos volumes internos e sua fácil aplicação apesar do aumento de incógnitas do sistema algébrico (GONÇALVES, 2013).

Nesta técnica precisamos adicionar volumes de controle ao redor do domínio físico, fazendo com que as condições de contorno originais do problema continuem sendo satisfeitas. Neste trabalho utilizamos tanto a condição de contorno de Dirichlet por conhecermos a quantidade de u_c na fronteira, como a condição de Neumann por conhecermos a derivada da quantidade du na fronteira. Na FIGURA 12 ilustramos os coeficientes dos volumes fictícios para o volume P . Como exemplo, considere a condição de contorno de Dirichlet u_c no lado esquerdo da FIGURA 12, assim temos

$$u_c = \frac{u_P + u_E}{2}. \quad (2.33)$$

FIGURA 12 – CONDIÇÕES DE CONTORNO COM VOLUMES FICTÍCIOS NA FRONTEIRA.



FONTE: A autora (2022).

Isolando a variável no volume de controle P , temos

$$u_P = -u_E + 2u_c. \quad (2.34)$$

Comparando esta equação com a equação (2.31), obtemos as expressões para os coeficientes e termo fonte do volume fictício

$$a_P = 1; a_E = -1; a_W = 0; b_P = 2u_c. \quad (2.35)$$

3 MÉTODOS ITERATIVOS BÁSICOS E *MULTIGRID*

Vimos pela seção anterior, que sistemas lineares esparsos e de grande porte são gerados na discretização das EDPs. Segundo Burden, Faires e Burden (2015), neste tipo de sistemas lineares, os métodos iterativos são mais eficientes computacionalmente do que os métodos diretos.

Para encontrarmos a solução desses sistemas de equações lineares a partir dos métodos iterativos, tanto para as equações específicas (2.31) e (2.32), como para a equação geral (1.1), é preciso de uma estimativa inicial e posteriormente as novas soluções são aproximadas com esta (hipóteses para a convergência podem ser encontradas em Golub e Ortega (2014), Burden, Faires e Burden (2015)). Esse processo é realizado sucessivamente até encontrarmos uma solução que atenda a certo critério de parada, que pode ser baseado no erro, resíduo, número de iterações, etc. Entre os vários métodos iterativos, podemos citar: Jacobi, Jacobi ponderado, Gauss-Seidel (GS), Sobre-Relaxação Sucessiva (*Successive Over-relaxation*, SOR), etc.

Reescrevemos a matriz A da equação (1.1) como:

$$A = D - L - U, \quad (3.1)$$

onde D é matriz que contém os elementos da diagonal de A , L guarda a parte inferior de A e U a parte superior. Substituindo a equação (3.1) na equação (1.1), e após um certo arranjo a fim de gerar o método GS, obtemos o processo iterativo

$$u^{k+1} = (D - L)^{-1}Uu^k + (D - L)^{-1}f, \quad (3.2)$$

onde $S_G = (D - L)^{-1}U$ é a matriz de iteração de Gauss-Seidel e $k + 1$ é a iteração atual. Nesta tese, temos um interesse especial pelo método de Gauss-Seidel por ele possuir boas propriedades de suavização, que serão explicadas logo a seguir, no contexto do método *multigrid*. Em particular, vamos utilizar o método GS ponto-a-ponto, ou seja, a atualização das variáveis é feita a cada volume separadamente, e não de forma coletiva por linhas ou por blocos, por exemplo.

Para tanto, necessitamos estabelecer uma ordem na leitura dessas informações. Em Trottenberg, Oosterlee e Schüller (2001) encontramos uma ordem lexicográfica começando no canto superior esquerdo (veja FIGURA 13). Esta será a ordem adotada neste trabalho e que será tratada simplesmente por “ordem lexicográfica”.

Assim, considerando o lado direito da FIGURA 11 e usando a ordenação lexicográfica (FIGURA 11) na equação (2.32), temos o método de Gauss-Seidel

$$u_P^{k+1} = (a_W u_W^{k+1} + a_E u_E^k + a_S u_S^{k+1} + a_N u_N^k - b_P) / a_P, \quad (3.3)$$

onde os superíndices representam as iterações e os subíndices a posição na malha.

Novamente considerando a FIGURA 11 e a ordenação lexicográfica (FIGURA 13), podemos notar que os volumes P, W, E, N e S corresponderão aos pontos $(i, j), (i, j - 1), (i, j + 1), (i - 1, j)$ e $(i + 1, j)$, respectivamente. Assim, usando esses volumes novamente na equação (2.32), temos o método Gauss-Seidel escrito em função dos subíndices i, j

$$u_{i,j}^{k+1} = (a_{i,j-1} u_{i,j-1}^{k+1} + a_{i,j+1} u_{i,j+1}^k + a_{i+1,j} u_{i+1,j}^{k+1} + a_{i-1,j} u_{i-1,j}^k - b_{i,j}) / a_{i,j}. \quad (3.4)$$

FIGURA 13 – ORDENAÇÃO LEXICOGRÁFICA COMEÇANDO DO CANTO SUPERIOR ESQUERDO PARA O EMPREGO DO MÉTODO DE GAUSS-SEIDEL PONTO-A-PONTO.

● 1	● 2	● 3	● 4	● 5
● 6	● 7	● 8	● 9	● 10
● 11	● 12	● 13	● 14	● 15
● 16	● 17	● 18	● 19	● 20
● 21	● 22	● 23	● 24	● 25

FONTE: A autora (2022).

3.1 Método *multigrid*

O *multigrid* é uma técnica muito eficiente usada para acelerar a convergência dos métodos iterativos (BRIGGS; HENSON; MCCORMICK, 2000; TROTTERBERG; OOSTERLEE; SCHÜLLER, 2001). Para compreendermos melhor a sua filosofia, vamos apresentar aqui os conceitos básicos para o caso unidimensional e algumas extensões para o caso bidimensional.

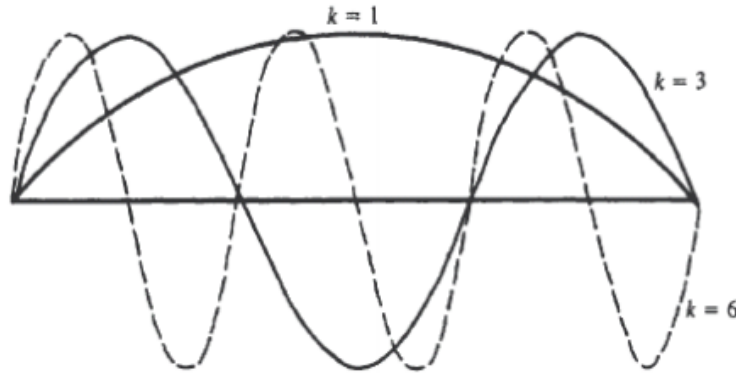
Primeiro, definimos os modos de Fourier (BRIGGS; HENSON; MCCORMICK, 2000):

$$w_j^h = \sin\left(\frac{jk\pi}{N}\right), \quad 1 \leq k \leq N-1, \quad 0 \leq j \leq N, \quad (3.5)$$

em que w_j^h é uma aproximação da solução no volume j de uma malha com h sendo o tamanho do volume, k sendo o número de ondas ou modos de Fourier e N sendo o número de pontos.

Na FIGURA 14 são ilustrados alguns modos de Fourier, com $k = 1$, $k = 3$ e $k = 6$. Podemos perceber que quanto menor o valor de k , mais longas e suaves são as ondas, enquanto que, se aumentarmos os valores de k , teremos ondas mais curtas e oscilatórias.

FIGURA 14 – MODOS DE FOURIER.



FONTE: Briggs, Henson e McCormick (2000).

Alguns métodos iterativos possuem a propriedade de redução rápida das componentes oscilatórias do erro, deixando apenas suas componentes suaves. Gauss-Seidel, por exemplo, possui esta propriedade, aqui chamada de propriedade de suavização. De acordo com Briggs, Henson e McCormick (2000), Trottenberg, Oosterlee e Schüller (2001), esses modos suaves tornam-se mais oscilatórios em malhas mais grossas. Nesse sentido, o método *multigrid* (que trabalha com vários níveis de refino de malha), leva as informações para diferentes e diversas malhas, fazendo com que o método convirja mais rapidamente por suavizar todas as componentes do erro.

O princípio básico do *multigrid* é a suavização e correção nessas diversas malhas, para tanto, necessitamos do conceito de equação residual, onde concentraremos o esforço do método *multigrid*.

A equação residual da equação (1.1) é dada por $Ae = r$, onde r é o resíduo, dado

por

$$r = f - Av, \quad (3.6)$$

com v sendo a solução aproximada de u e e o erro numérico, dado por

$$e = u - v. \quad (3.7)$$

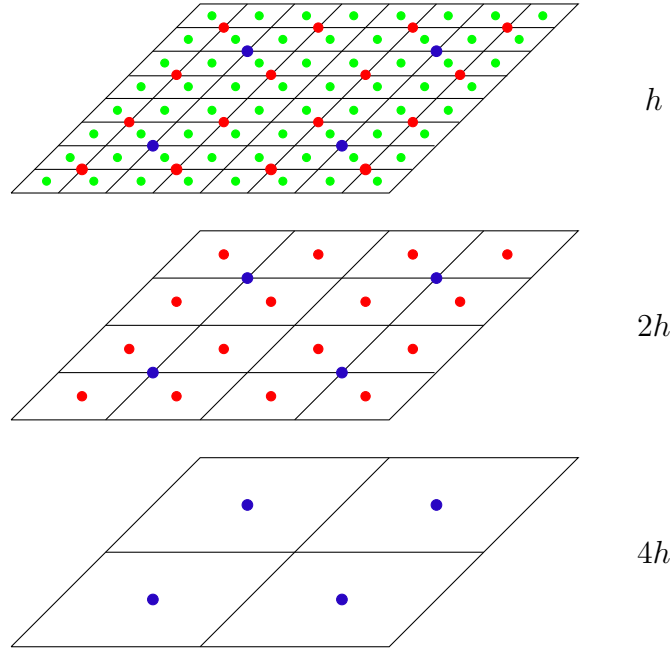
O algoritmo do *multigrid* pode ser construído segundo o esquema de correção (*Correction Scheme*, CS) ou o esquema de aproximação completo (*Full Approximation Scheme*, FAS). O esquema CS consiste em resolver o problema apenas na malha mais fina e a equação residual (correção) nas demais malhas grossas. No esquema FAS, além de se resolver o problema na malha mais fina, não se resolve a equação residual explicitamente na malha mais grossa, e sim, a equação discretizada em tal malha (completa). De acordo com essas informações, indicam-se os esquemas CS e FAS para se resolver, respectivamente, os problemas lineares e não lineares (BRANDT, 1977; BRIGGS; HENSON; MCCORMICK, 2000; TROTTEBERG; OOSTERLEE; SCHÜLLER, 2001). Como neste trabalho tratamos de problemas não lineares que tiveram que ser linearizados, usamos o esquema CS. Adicionalmente, as diferentes formas de percorrer as malhas dão origem a diferentes tipos de ciclos, por exemplo, ciclo V, W ou F.

Como o *multigrid* é composto por um conjunto de malhas é preciso utilizar alguma razão de engrossamento entre elas. Segundo Briggs, Henson e McCormick (2000), Brandt (1977) a razão $re = 2$ é a mais utilizada e mais recomendável, por isso, optamos em utilizar esta. Isto significa que o tamanho do volume de malha imediatamente mais grossa (Ω^H) é duas vezes o tamanho do volume na malha imediatamente mais fina (Ω^h), ou seja, $H = 2h$. Na FIGURA 15 podemos visualizar uma sequência de malhas com $re = 2$ para o caso bidimensional. Com esta razão definida, podemos determinar o número de malhas a serem percorridas para cada tamanho de problema. No nosso caso optamos por utilizar o maior número de malhas possível, chamando de L_{max} , por exemplo, para um problema de tamanho $N = 64 \times 64$ volumes, o maior conjunto de malhas possível será $N = 2 \times 2, 4 \times 4, 8 \times 8, 16 \times 16, 32 \times 32$ e 64×64 . Portanto, para este exemplo, temos $L_{max} = 6$.

Para a transferência de informações entre malhas finas (Ω^h) e a malha imediatamente mais grossa (Ω^{2h}), precisamos utilizar alguns operadores, conhecidos como restrição e prolongação, representados por I_h^{2h} e I_{2h}^h , respectivamente.

Dentre os diversos operadores de restrição existentes na literatura (BRIGGS; HENSON; MCCORMICK, 2000; TROTTEBERG; OOSTERLEE; SCHÜLLER, 2001), aqui neste trabalho utilizamos a média aritmética dos valores das propriedades dos quatro

FIGURA 15 – APLICAÇÃO DA RAZÃO DE ENGROSSAMENTO $re = 2$ PARA A MALHA FINA $N_x \times N_y = 8 \times 8$.



FONTE: A autora (2022).

volumes da malha fina, definido pela equação (3.8) para o caso bidimensional e com a variável de interesse no centro do volume.

$$v_{ij}^{2h} = \frac{v_{2i-1,2j-1}^h + v_{2i-1,2j}^h + v_{2i,2j-1}^h + v_{2i,2j}^h}{4}. \quad (3.8)$$

com $1 \leq i \leq N_x$ e $1 \leq j \leq N_y$.

Em relação a prolongação, utilizamos a interpolação constante por partes, dada pela equação (3.9).

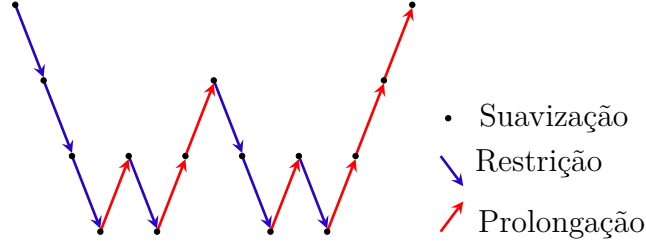
$$\begin{aligned} v_{2i-1,2j-1}^h &= v_{ij}^{2h}, \\ v_{2i-1,2j}^h &= v_{ij}^{2h}, \\ v_{2i,2j-1}^h &= v_{ij}^{2h}, \\ v_{2i,2j}^h &= v_{ij}^{2h}. \end{aligned} \quad (3.9)$$

com $1 \leq i \leq N_x$ e $1 \leq j \leq N_y$.

Como dissemos, as diferentes formas de percorrer as malhas dão origem a diferentes tipos de ciclos. Neste trabalho optamos em utilizar o ciclo $W(\nu_1, \nu_2)$ (veja a FIGURA 16), onde ν_1 e ν_2 são o número de pré- e pós-suavização, ou seja, o número de iterações no processo de restrição e prolongação, respectivamente. Como sabido, o ciclo W é um

pouco mais caro computacionalmente, se comparado com o ciclo V, mas ele é mais robusto (FRANCO, 2017).

FIGURA 16 – CICLO W COM 4 MALHAS.



FONTE: A autora (2022).

Com isto, temos o ALGORITMO 1, onde apresentamos o ϱ -ciclo para o método *multigrid*, que é aplicado de forma recursiva usando uma hierarquia de malhas (entre a malha fina e malhas mais grossas), dada por 2^{l+1} , $l = 1, 2, 3, \dots$, onde l é o nível da malha espacial. Por exemplo, se $\varrho = 1$, o algoritmo realiza um ciclo V e se $\varrho = 2$, o algoritmo executa um ciclo W.

Algoritmo 1: MG- ϱ -ciclo.

Input: $\varrho, v_0, v, f, h, \nu_1, \nu_2$

if $l = L_{max}$ *é o nível de malha mais grossa* **then**

Resolva $A^{(l)}u^{(l)} = f^{(l)}$ em $\Omega^{2^{l-1}h}$. **else**

Suavize $A^{(l)}u^{(l)} = f^{(l)}$, ν_1 vezes em $\Omega^{2^{l-1}h}$ com estimativa inicial $v_0^{(l)}$;

Calcule o resíduo $R^{(l)} = f^{(l)} - A^{(l)}v^{(l)}$;

Restrinja o resíduo da malha $\Omega^{2^{l-1}h}$ para a malha $\Omega^{2^l h}$: $f^{l+1} = I_{2^{l-1}h}^{2^l h} R^{2^{l-1}h}$.

for $ciclo = 1 : \varrho$ **do**

| Resolva no próximo nível: **MG- ϱ -ciclo** ($l + 1$).

end

Corrija $v^{(l)} \leftarrow v^{(l)} + I_{2^l h}^{2^{l-1}h} v^{(l+1)}$;

Suavize $A^{(l)}u^{(l)} = f^{(l)}$, ν_2 vezes em $\Omega^{2^{l-1}h}$ com estimativa inicial $v^{(l)}$.

end

end

4 MODELOS MATEMÁTICOS

Neste capítulo apresentamos os modelos matemáticos que serão tratados nesta tese, com seus domínios de cálculos, as condições de contorno e suas soluções analíticas.

Para isso, consideramos o problema não linear de escoamento bifásico em meios porosos rígidos cuja equação (2.8) pode ser reescrita para $\alpha = w, n$, ou seja, para a fase úmida (w) e não úmida (n):

$$\begin{cases} \frac{\partial \theta_w}{\partial t} - \nabla \cdot (\lambda_w K \nabla p_w) = \frac{F_w}{\rho_w} \\ \frac{\partial \theta_n}{\partial t} - \nabla \cdot (\lambda_n K \nabla p_n) = \frac{F_n}{\rho_n} \end{cases}, \quad (4.1)$$

no domínio espacial dado por $\Omega \subset R^d$, com $d \in \{1, 2\}$, sendo $x \in \Omega = [0, L]$ se $d = 1$ ou $\vec{x} = (x, y) \in \Omega = [0, L_x] \times [0, L_y]$ se $d = 2$. Temos ainda $t \in [0, t_f]$, o intervalo de tempo considerado. Nesta notação ∇ é o gradiente d -dimensional e $\nabla \cdot$ o divergente d -dimensional.

Consideramos $\theta_\alpha(x, t)$ e $p_\alpha(x, t)$ e supomos que as condições iniciais são dadas por

$$\begin{aligned} p_\alpha(x, 0) &= p_{\alpha ci}, \\ \theta_\alpha(x, 0) &= \theta_{\alpha ci}. \end{aligned} \quad (4.2)$$

Por enquanto, definimos as condições de contornos do tipo Dirichlet, isto é,

$$\begin{aligned} p_\alpha(x_{cc}, t) &= p_{\alpha cc} \\ \theta_\alpha(x_{cc}, t) &= \theta_{\alpha cc} \end{aligned}, \quad x_{cc} \in \partial\Omega, 0 < t \leq t_f. \quad (4.3)$$

No final desta tese iremos utilizar condições de contorno de Neumann e que serão definidas no momento oportuno.

Para realização dos nossos testes, exibiremos os modelos matemáticos 1D e 2D nas seções a seguir.

4.1 Modelo matemático 1D

Neste trabalho utilizamos a solução analítica do problema proposto por Illiano (2016) (seção 5.1, p. 37). Nesse trabalho, Illiano (2016) considera a formulação pressão-saturação da forma $\bar{p} = S_w$, onde $\bar{p} = \frac{p_w + p_n}{2}$. Neste caso, temos como solução analítica

$$f(x, t) = \bar{p}(x, t) = S_w(x, t) = xt(1 - x), \quad (4.4)$$

com domínio espacial $\Omega = [0, L]$ e temporal $[0, t_f]$ com $L = t_f = 1$. As condições iniciais e de contorno são dadas por $f(x, 0) = f(0, t) = f(1, t) = 0$.

A fim de se obter um sistema elíptico (onde é sabido que o método *multigrid* funciona bem), realizamos algumas modificações no sistema gerado pela formulação pressão-saturação a fim de reescrevê-lo em função das variáveis da pressão, p_w e p_n (detalhes desta modificação e consequentemente discretizações, serão dados no próximo capítulo).

Para tanto, tivemos que fazer algumas adaptações para usar p_w e p_n ao invés de \bar{p} de Illiano (2016). Com isso, utilizando a equação de pressão capilar ($p_c = p_n - p_w$) e \bar{p} , obtemos que

$$p_w = \bar{p} - \frac{p_c}{2} \quad \text{e} \quad p_n = \bar{p} + \frac{p_c}{2}, \quad (4.5)$$

em que $p_c(S_w) = 1 - \frac{1}{2}S_w^2$. Adicionalmente, utilizamos $\theta_\alpha = \phi S_\alpha$, logo $\theta_w = \phi\sqrt{2 - 2p_c}$ e $\theta_n = \phi - \theta_w$.

Utilizando essas expressões encontramos os termos fontes:

$$F_w = -\frac{1}{2}\rho_w[2\phi(x-1)x + K_w\lambda_w t(-4 + t - 6tx + 6tx^2)], \quad (4.6)$$

$$F_n = \frac{1}{2}\rho_n[2\phi(x-1)x + K_n\lambda_n t(4 + t - 6tx + 6tx^2)]. \quad (4.7)$$

4.2 Modelo matemático 2D

Para o caso 2D, usamos o problema proposto por Kvashchuk (2015) (seção 4.1, p.39). Nesse trabalho, Kvashchuk (2015) considera também a formulação pressão-saturação da forma $\bar{p} = S_w$, onde $\bar{p} = \frac{p_w + p_n}{2}$. Nesse caso, a solução analítica é dada por

$$\begin{aligned} \bar{p}(\vec{x}, t) &= tx(1-x)y(1-y), \\ S_w(\vec{x}, t) &= \frac{1}{2} + tx(1-x)y(1-y), \end{aligned} \quad (4.8)$$

com domínio espacial $\Omega = [0, L_x] \times [0, L_y]$ e temporal $[0, t_f]$ com $L_x = L_y = t_f = 1$. As condições iniciais e de contorno são dadas por $\bar{p}(\vec{x}, 0) = \bar{p}(0, y, t) = \bar{p}(1, y, t) = \bar{p}(x, 0, t) = \bar{p}(x, 1, t) = 0$ e $S_w(\vec{x}, 0) = S_w(0, y, t) = S_w(1, y, t) = S_w(x, 0, t) = S_w(x, 1, t) = \frac{1}{2}$.

Por razões análogas às explicadas na seção anterior, aqui também realizamos as adaptações na formulação pressão-saturação, ou seja, obtemos um sistema com as variáveis p_w e p_n , utilizando as equações (4.5) também para o caso 2D. Consequentemente, após algebrismo similar ao caso 1D, obtemos os termos fontes adequados que atendam ao sistema (4.1).

5 APROXIMAÇÕES NUMÉRICAS

Neste capítulo, vamos abordar os modelos numéricos, esquemas e procedimentos adotados no desenvolvimento do presente estudo computacional e que gerou a grande contribuição desta tese.

Para tanto, apresentamos detalhes sobre a discretização temporal, seguido do esquema de linearização (incluindo a manipulação para tornar as variáveis p_w e p_n como variáveis principais do sistema), discretização espacial, tipo de malha e, finalmente, o suavizador empregado.

Aqui, vamos abordar apenas o modelo matemático do caso 1D, pois a extensão para o caso 2D possui procedimentos análogos.

Por questões didáticas, vamos repetir aqui a equação (4.1) que será objeto de discretização:

$$\begin{cases} \frac{\partial \theta_w}{\partial t} - \nabla \cdot (\lambda_w K \nabla p_w) = \frac{F_w}{\rho_w} \\ \frac{\partial \theta_n}{\partial t} - \nabla \cdot (\lambda_n K \nabla p_n) = \frac{F_n}{\rho_n} \end{cases}.$$

Da equação (2.5) ($K_\alpha = k_{r\alpha} K$) e do fato que $\lambda_\alpha = \frac{k_{r\alpha}}{\mu_\alpha}$, podemos reescrever este sistema como

$$\begin{cases} \frac{\partial \theta_w}{\partial t} - \nabla \cdot \left(\frac{K_w}{\mu_w} \nabla p_w \right) = \frac{F_w}{\rho_w} \\ \frac{\partial \theta_n}{\partial t} - \nabla \cdot \left(\frac{K_n}{\mu_n} \nabla p_n \right) = \frac{F_n}{\rho_n} \end{cases}. \quad (5.1)$$

5.1 Discretização temporal

Primeiramente empregamos o método de Euler implícito para a discretização temporal deste sistema de equações, obtemos:

$$\begin{cases} \frac{\theta_w^{n+1} - \theta_w^n}{\tau} - \frac{\partial}{\partial x} \left[\frac{K_w^{n+1}}{\mu_w} \frac{\partial}{\partial x} (p_w^{n+1}) \right] = \frac{F_w^{n+1}}{\rho_w} \\ \frac{\theta_n^{n+1} - \theta_n^n}{\tau} - \frac{\partial}{\partial x} \left[\frac{K_n^{n+1}}{\mu_n} \frac{\partial}{\partial x} (p_n^{n+1}) \right] = \frac{F_n^{n+1}}{\rho_n} \end{cases}, \quad (5.2)$$

onde $n + 1$ representa o nível de tempo atual, $\tau = \frac{t_f}{N_t}$ é o tamanho do passo do tempo, onde, t_f é o tempo final e N_t é o número de pontos da discretização temporal.

5.2 Linearização

O próximo passo é linearizar o sistema representado pela equação (5.2). Para isso, criamos o processo iterativo para tal linearização, dado por

$$\begin{cases} \frac{\theta_w^{n+1,m+1} - \theta_w^n}{\tau} - \frac{\partial}{\partial x} \left[\frac{K_w^{n+1,m}}{\mu_w} \frac{\partial}{\partial x} (p_w^{n+1,m+1}) \right] = \frac{F_w^{n+1,m}}{\rho_w} \\ \frac{\theta_n^{n+1,m+1} - \theta_n^n}{\tau} - \frac{\partial}{\partial x} \left[\frac{K_n^{n+1,m}}{\mu_n} \frac{\partial}{\partial x} (p_n^{n+1,m+1}) \right] = \frac{F_n^{n+1,m}}{\rho_n} \end{cases}, \quad (5.3)$$

onde $m + 1$ representa a iterada atual e θ_α^n ($\alpha = w$ ou n) representa a solução convergida no passo de tempo anterior.

Neste trabalho usamos o esquema de linearização de Picard modificado (CELIA; BINNING, 1992) para termos um novo processo iterativo em que uma das variáveis de interesse (θ_α) será aproximada pela série de Taylor e a outra ($k_{r\alpha}$) será aproximada por uma condição inicial.

Com o intuito de isolar as variáveis p_w e p_n , a fim de se obter um sistema de equações elípticas após sua discretização, usamos a série de Taylor para calcular $\theta_\alpha^{n+1,m+1}$, que depende da pressão capilar p_c , como segue

$$\theta_\alpha^{n+1,m+1} = \theta_\alpha^{n+1,m} + \frac{\partial}{\partial p_c} (\theta_\alpha^{n+1,m}) [p_c^{n+1,m+1} - p_c^{n+1,m}] + O(\delta p_c^2). \quad (5.4)$$

Negligenciando os termos de alta ordem e considerando que para ambas as fases, as manipulações são análogas, podemos reescrever a equação (5.3) da seguinte forma

$$\begin{cases} \frac{1}{\tau} \left\{ \theta_w^{n+1,m} + \frac{\partial}{\partial p_c} (\theta_w^{n+1,m}) [\delta p_c^{n+1,m+1}] - \theta_w^n \right\} - \frac{\partial}{\partial x} \left[\frac{K_w^{n+1,m}}{\mu_w} \frac{\partial}{\partial x} (p_w^{n+1,m+1}) \right] = \frac{F_w^{n+1,m}}{\rho_w} \\ \frac{1}{\tau} \left\{ \theta_n^{n+1,m} + \frac{\partial}{\partial p_c} (\theta_n^{n+1,m}) [\delta p_c^{n+1,m+1}] - \theta_n^n \right\} - \frac{\partial}{\partial x} \left[\frac{K_n^{n+1,m}}{\mu_n} \frac{\partial}{\partial x} (p_n^{n+1,m+1}) \right] = \frac{F_n^{n+1,m}}{\rho_n} \end{cases}, \quad (5.5)$$

onde $\delta p_\alpha^{n+1,m+1} = p_\alpha^{n+1,m+1} - p_\alpha^{n+1,m}$. Organizando nossas equações, temos

$$\begin{cases} \frac{\theta_w^{n+1,m} - \theta_w^n}{\tau} + \frac{\partial}{\partial p_c} (\theta_w^{n+1,m}) \left[\frac{\delta p_c^{n+1,m+1}}{\tau} \right] - \frac{\partial}{\partial x} \left[\frac{K_w^{n+1,m}}{\mu_w} \frac{\partial}{\partial x} (p_w^{n+1,m+1}) \right] = \frac{F_w^{n+1,m}}{\rho_w} \\ \frac{\theta_n^{n+1,m} - \theta_n^n}{\tau} + \frac{\partial}{\partial p_c} (\theta_n^{n+1,m}) \left[\frac{\delta p_c^{n+1,m+1}}{\tau} \right] - \frac{\partial}{\partial x} \left[\frac{K_n^{n+1,m}}{\mu_n} \frac{\partial}{\partial x} (p_n^{n+1,m+1}) \right] = \frac{F_n^{n+1,m}}{\rho_n} \end{cases}, \quad (5.6)$$

A fim de resolvermos o sistema tendo as correções das pressões como variáveis principais, devemos realizamos alguns manipulações algébricas. Adicionamos $\frac{\partial}{\partial x} \left[\frac{K_\alpha^{n+1,m}}{\mu_\alpha} \frac{\partial}{\partial x} (p_\alpha^{n+1,m}) \right]$

em ambos os lados das igualdades e substituindo pelas correções da pressões, $\delta p_\alpha^{n+1,m+1} = p_\alpha^{n+1,m+1} - p_\alpha^{n+1,m}$, chegamos na expressão

$$\begin{cases} \frac{\theta_w^{n+1,m} - \theta_w^n}{\tau} + \frac{\partial}{\partial p_c}(\theta_w^{n+1,m}) \left[\frac{\delta p_c^{n+1,m+1}}{\tau} \right] - \frac{\partial}{\partial x} \left[\frac{K_w^{n+1,m}}{\mu_w} \frac{\partial}{\partial x} (\delta p_w^{n+1,m+1}) \right] = \\ \frac{\partial}{\partial x} \left[\frac{K_w^{n+1,m}}{\mu_w} \frac{\partial}{\partial x} (p_w^{n+1,m}) \right] + \frac{F_w^{n+1,m}}{\rho_w} \\ \frac{\theta_n^{n+1,m} - \theta_n^n}{\tau} + \frac{\partial}{\partial p_c}(\theta_n^{n+1,m}) \left[\frac{\delta p_c^{n+1,m+1}}{\tau} \right] - \frac{\partial}{\partial x} \left[\frac{K_n^{n+1,m}}{\mu_n} \frac{\partial}{\partial x} (\delta p_n^{n+1,m+1}) \right] = \\ \frac{\partial}{\partial x} \left[\frac{K_n^{n+1,m}}{\mu_n} \frac{\partial}{\partial x} (p_n^{n+1,m}) \right] + \frac{F_n^{n+1,m}}{\rho_n} \end{cases} \quad (5.7)$$

Usando $C_w = \frac{\partial \theta_w}{\partial p_c} = -\frac{\partial \theta_n}{\partial p_c}$ e a definição de pressão capilar ($p_c = p_n - p_w$), obtemos

$$\begin{cases} C_w^{n+1,m} \frac{\delta p_n^{n+1,m+1} - \delta p_w^{n+1,m+1}}{\tau} - \frac{\partial}{\partial x} \left[\frac{K_w^{n+1,m}}{\mu_w} \frac{\partial}{\partial x} (\delta p_w^{n+1,m+1}) \right] = \\ \frac{\partial}{\partial x} \left[\frac{K_w^{n+1,m}}{\mu_w} \frac{\partial}{\partial x} (p_w^{n+1,m}) \right] + \frac{F_w^{n+1,m}}{\rho_w} - \frac{\theta_w^{n+1,m} - \theta_w^n}{\tau} \\ -C_w^{n+1,m} \frac{\delta p_n^{n+1,m+1} - \delta p_w^{n+1,m+1}}{\tau} - \frac{\partial}{\partial x} \left[\frac{K_n^{n+1,m}}{\mu_n} \frac{\partial}{\partial x} (\delta p_n^{n+1,m+1}) \right] = \\ \frac{\partial}{\partial x} \left[\frac{K_n^{n+1,m}}{\mu_n} \frac{\partial}{\partial x} (p_n^{n+1,m}) \right] + \frac{F_n^{n+1,m}}{\rho_n} - \frac{\theta_n^{n+1,m} - \theta_n^n}{\tau} \end{cases} \quad (5.8)$$

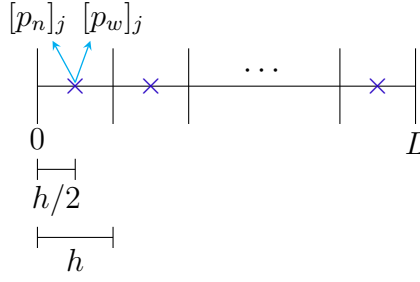
Neste trabalho também usamos o esquema de linearização chamado L-esquema (KARPINSKI; POP; RADU, 2017), para termos um processo iterativo menos custoso, se comparado com o método de Picard modificado. Para aplicar tal método, basta substituímos C_w por um L_s suficientemente grande, tal que $L_s \geq |C_w|$ (POP; RADU; KNABNER, 2004; KARPINSKI; POP; RADU, 2017; ILLIANO; POP; RADU, 2020).

5.3 Discretização espacial

Na sequência realizamos a discretização espacial com o MVF para o caso unidimensional, pois a extensão para o caso bidimensional é análoga.

Para isso, consideramos o nosso domínio como um segmento de comprimento L e consideramos a malha uniforme, $D_h = \{(x_j); x_j = (j - 1/2)h_x, j = 1, \dots, N_x\}$, sendo N_x número de volumes no espaço e $\Delta x = h_x = h = \frac{L}{N_x}$ a distância espacial das aproximações entre os volumes (veja FIGURA 17). Note que estamos usando o arranjo colocalizado da variáveis, ou seja, tais variáveis de interesse são posicionadas no centro do volume de controle.

FIGURA 17 – DISCRETIZAÇÃO 1D NO ESPAÇO.



FONTE: A autora (2022).

Utilizando a discretização por MVF, primeiro precisamos integrar o sistema de equações. Vamos apresentar neste momento o desenvolvimento da discretização envolvendo apenas a primeira equação do sistema (5.8), ou seja, a equação para a fase úmida w , considerando os volumes internos. Para a fase não úmida n , o procedimento é análogo. Com isso obtemos

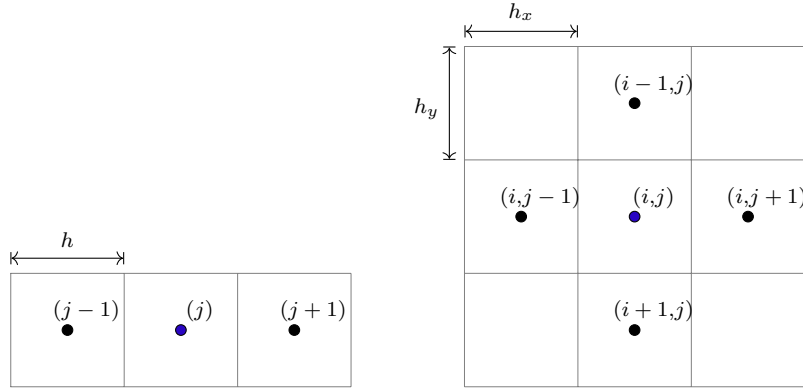
$$\begin{aligned} \iiint_{VC} \left\{ C_w^{n+1,m} \frac{\delta p_n^{n+1,m+1} - \delta p_w^{n+1,m+1}}{\tau} - \frac{\partial}{\partial x} \left[\frac{K_w^{n+1,m}}{\mu_w} \frac{\partial}{\partial x} (\delta p_w^{n+1,m+1}) \right] \right\} dV = \\ \iiint_{VC} \left\{ \frac{\partial}{\partial x} \left[\frac{K_w^{n+1,m}}{\mu_w} \frac{\partial}{\partial x} (p_w^{n+1,m}) \right] + \frac{F_w^{n+1,m}}{\rho_w} - \frac{\theta_w^{n+1,m} - \theta_w^n}{\tau} \right\} dV. \end{aligned} \quad (5.9)$$

Notemos que essa integral tripla, para o caso 1D, elimina automaticamente as integrais nas outras duas direções. Portanto, usando o teorema da divergência de Gauss (KREYSZIG, 2009), calculando as integrais e usando a localização dos volumes na forma matricial, como mostra a FIGURA 18, obtemos a expressão

$$\begin{aligned} \left[C_w^{n+1,m} \frac{\delta p_n^{n+1,m+1} - \delta p_w^{n+1,m+1}}{\tau} \right] \Big|_{(j)} h - \left[\frac{K_w^{n+1,m}}{\mu_w} \frac{\partial}{\partial x} (\delta p_w^{n+1,m+1}) \right] \Big|_{(j+\frac{1}{2})} - \\ \left[\frac{K_w^{n+1,m}}{\mu_w} \frac{\partial}{\partial x} (\delta p_w^{n+1,m+1}) \right] \Big|_{(j-\frac{1}{2})} = \left[\frac{K_w^{n+1,m}}{\mu_w} \frac{\partial}{\partial x} (p_w^{n+1,m}) \right] \Big|_{(j+\frac{1}{2})} - \\ \left[\frac{K_w^{n+1,m}}{\mu_w} \frac{\partial}{\partial x} (p_w^{n+1,m}) \right] \Big|_{(j-\frac{1}{2})} + \left[\frac{F_w^{n+1,m}}{\rho_w} - \frac{\theta_w^{n+1,m} - \theta_w^n}{\tau} \right] \Big|_{(j)} h. \end{aligned} \quad (5.10)$$

As aproximações nas faces para as pressões e suas correções são calculadas com os valores nodais conforme vimos nas equações (2.29) e (2.30). Assim, com essas aproximações obtemos uma expressão linear do tipo

FIGURA 18 – DISPOSIÇÃO DE UM VOLUME DE CONTROLE (i,j) E SEUS VIZINHOS EM UMA MALHA UNIFORME UNIDIMENSIONAL (ESQUERDA) E BIDIMENSIONAL (DIREITA).



FONTE: A autora (2022).

$$\begin{aligned}
 & [C_w]_j^{n+1,m} \left([\delta p_n]_j^{n+1,m+1} - [\delta p_w]_j^{n+1,m+1} \right) \frac{h}{\tau} - \left\{ [K_w]_{j+\frac{1}{2}}^{n+1,m} \left(\frac{[\delta p_w]_{j+1}^{n+1,m+1} - [\delta p_w]_j^{n+1,m+1}}{h} \right) - \right. \\
 & \left. [K_w]_{j-\frac{1}{2}}^{n+1,m} \left(\frac{[\delta p_w]_j^{n+1,m+1} - [\delta p_w]_{j-1}^{n+1,m+1}}{h} \right) \right\} \frac{1}{\mu_w} = \left\{ [K_w]_{j+\frac{1}{2}}^{n+1,m} \left(\frac{[p_w]_{j+1}^{n+1,m+1} - [p_w]_j^{n+1,m+1}}{h} \right) \right. \\
 & \left. - [K_w]_{j-\frac{1}{2}}^{n+1,m} \left(\frac{[p_w]_j^{n+1,m+1} - [p_w]_{j-1}^{n+1,m+1}}{h} \right) \right\} \frac{1}{\mu_w} + \left[\frac{[F_w]_j^{n+1,m}}{\rho_w} - \frac{[\theta_w]_j^{n+1,m} - [\theta_w]_j^n}{\tau} \right] h.
 \end{aligned} \tag{5.11}$$

Multiplicando toda a expressão por $\frac{\tau}{h}$ temos

$$\begin{aligned}
 & [C_w]_j^{n+1,m} \left([\delta p_n]_j^{n+1,m+1} - [\delta p_w]_j^{n+1,m+1} \right) - \left\{ [K_w]_{j+\frac{1}{2}}^{n+1,m} \left([\delta p_w]_{j+1}^{n+1,m+1} - [\delta p_w]_j^{n+1,m+1} \right) + \right. \\
 & \left. [K_w]_{j-\frac{1}{2}}^{n+1,m} \left([\delta p_w]_{j-1}^{n+1,m+1} - [\delta p_w]_j^{n+1,m+1} \right) \right\} \frac{\tau}{h^2 \mu_w} = \left\{ [K_w]_{j+\frac{1}{2}}^{n+1,m} \left([p_w]_{j+1}^{n+1,m+1} - [p_w]_j^{n+1,m+1} \right) \right. \\
 & \left. + [K_w]_{j-\frac{1}{2}}^{n+1,m} \left([p_w]_{j-1}^{n+1,m+1} - [p_w]_j^{n+1,m+1} \right) \right\} \frac{\tau}{h^2 \mu_w} + \frac{\tau [F_w]_j^{n+1,m}}{\rho_w} - [\theta_w]_j^{n+1,m} + [\theta_w]_j^n.
 \end{aligned} \tag{5.12}$$

Reorganizando esta equação com o intuito de resolver a variável da correção da pressão úmida δp_w e repetindo todo o processo para a equação da correção da pressão não úmida δp_n , obtemos o seguinte sistema linear que deve ser resolvido a cada linearização,

$$\begin{bmatrix} A_w & B \\ B & A_n \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \delta p_w \\ \delta p_n \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} f_w \\ f_n \end{bmatrix}, \quad (5.13)$$

sendo que,

$$A_\alpha = \begin{bmatrix} bc & & & & & & \\ [a_\alpha]_{j-1} & [a_\alpha]_j & [a_\alpha]_{j+1} & & & & \\ & [a_\alpha]_{j-1} & [a_\alpha]_j & [a_\alpha]_{j+1} & & & \\ & & \ddots & \ddots & \ddots & & \\ & & & [a_\alpha]_{j-1} & [a_\alpha]_j & [a_\alpha]_{j+1} & \\ & & & & [a_\alpha]_{j-1} & [a_\alpha]_j & [a_\alpha]_{j+1} \\ & & & & & & bc \end{bmatrix}, \quad (5.14)$$

$$B = \begin{bmatrix} bc & & & & & & \\ & c_j & & & & & \\ & & c_j & & & & \\ & & & \ddots & & & \\ & & & & c_j & & \\ & & & & & c_j & \\ & & & & & & bc \end{bmatrix}, \quad (5.15)$$

onde bc são condições de contorno e:

$$\begin{aligned} [a_\alpha]_j &= -[C_w]_j^{n+1,m} + \frac{\tau}{h^2 \mu_\alpha} \left([K_\alpha]_{j+\frac{1}{2}}^{n+1,m} + [K_\alpha]_{j-\frac{1}{2}}^{n+1,m} \right), \\ [a_\alpha]_{j+1} &= -\frac{\tau}{h^2 \mu_\alpha} [K_\alpha]_{j+\frac{1}{2}}^{n+1,m}, \\ [a_\alpha]_{j-1} &= -\frac{\tau}{h^2 \mu_\alpha} [K_\alpha]_{j-\frac{1}{2}}^{n+1,m}, \\ c_j &= [C_w]_j^{n+1,m}, \\ [f_\alpha]_j &= \frac{\tau}{h^2 \mu_\alpha} [K_\alpha]_{j+\frac{1}{2}}^{n+1,m} [p_\alpha]_{j+1}^{n+1,m} - \frac{\tau}{h^2 \mu_\alpha} \left([K_\alpha]_{j+\frac{1}{2}}^{n+1,m} + [K_\alpha]_{j-\frac{1}{2}}^{n+1,m} \right) [p_\alpha]_j^{n+1,m} + \\ &\quad \frac{\tau}{h^2 \mu_\alpha} [K_\alpha]_{j-\frac{1}{2}}^{n+1,m} [p_\alpha]_{j-1}^{n+1,m} + \frac{\tau}{\rho_\alpha} [F_\alpha]_j^{n+1,m} - [\theta_\alpha]_j^{n+1,m} + [\theta_\alpha]_j^n, \end{aligned} \quad (5.16)$$

onde $[K_\alpha]_{j-\frac{1}{2}}^{n+1,m}$ e $[K_\alpha]_{j+\frac{1}{2}}^{n+1,m}$ denotam a condutividade inter-bloco de cada fase, ou seja, a condutividade nas faces de cada volume, calculado pela média aritmética ou média harmônica, dependendo da efetividade em cada teste. Para o caso do método de linearização de L-esquema, basta trocar c_j por um L adequado.

Note que as expressões para todos os coeficientes valem apenas para os volumes internos. Vejamos agora como fica a discretização nos contornos. Para isso, utilizamos a ideia de volumes fictícios (veja a FIGURA 12).

Aqui vamos detalhar a condição de contorno de Dirichlet em $j = 1$, pois, para o outro contorno, os procedimentos são análogos. Assim, temos que:

$$\begin{aligned}
 [a_\alpha]_1 &= -[C_w]_1^{n+1,m} + \frac{\tau}{h^2\mu_\alpha} \left([K_\alpha]_{\frac{3}{2}}^{n+1,m} + 2[K_\alpha]_{\frac{1}{2}}^{n+1,m} \right), \\
 [a_\alpha]_2 &= -\frac{\tau}{h^2\mu_\alpha} [K_\alpha]_{\frac{3}{2}}^{n+1,m}, \\
 [a_\alpha]_0 &= 0, \\
 c_1 &= [C_w]_1^{n+1,m}, \\
 [f_\alpha]_1 &= \frac{\tau}{h^2\mu_\alpha} [K_\alpha]_{\frac{3}{2}}^{n+1,m} [p_\alpha]_2^{n+1,m} - \frac{\tau}{h^2\mu_\alpha} \left(2[K_\alpha]_{\frac{3}{2}}^{n+1,m} + [K_\alpha]_{\frac{1}{2}}^{n+1,m} \right) [p_\alpha]_1^{n+1,m} + \\
 &\quad \frac{2\tau}{h^2\mu_\alpha} [K_\alpha]_{\frac{1}{2}}^{n+1,m} [p_\alpha]_{cc} + \frac{\tau}{\rho_\alpha} [F_\alpha]_1^{n+1,m} - [\theta_\alpha]_1^{n+1,m} + [\theta_\alpha]_1^n,
 \end{aligned} \tag{5.17}$$

onde $[p_\alpha]_{cc}$ é a condição de contorno da pressão da fase α aplicada em $j = 1$.

6 EXPERIMENTOS NUMÉRICOS

6.1 Testes Numéricos com solução analítica

Nesta seção apresentamos a verificação do código para dois exemplos de problemas bifásicos em meios porosos rígidos. O primeiro caso é referente ao problema 1D e o segundo para o problema 2D. Para tal análise realizamos alguns testes utilizando *singlegrid* (método de malha única) ou *multigrid* (com os componentes algoritmos já estabelecidos na seção 3.1). Todos os algoritmos foram implementados no MATLAB R2018b com precisão dupla, em uma máquina com processador Intel Core i7 2.6 GHz, 8GB de memória RAM e sistema operacional Windows 10 com 64 bits.

O critério de parada dentro de cada passo de linearização no código usado é baseado na correção das variáveis de interesse, que no, nosso caso, são as variáveis correções das pressões úmida e não úmida, δp_w e δp_n , conforme apresentamos no sistema dado pela equação (5.13). O tal critério é o máximo, em módulo, destas correções, ou seja, $diff = \max(|\delta p_w|, |\delta p_n|)$, que deve ser menor ou igual a uma tolerância,

$$diff \leq TOL_{lin}, \quad (6.1)$$

em que TOL_{lin} é a tolerância para a linearização.

Como critério de parada do processo iterativo (*singlegrid* ou *multigrid*), utilizamos a norma infinito do resíduo adimensional pela estimativa inicial, isto é,

$$\|r^m\|_\infty / \|r^0\|_\infty \leq TOL, \quad (6.2)$$

em que r^m é o resíduo na iteração m e r^0 é o resíduo na estimativa inicial e $TOL = TOL_{MG} = TOL_{SG}$ é a tolerância adotada, em que, TOL_{MG}, TOL_{SG} , são a tolerância para o método *multigrid* e *singlegrid*, respectivamente.

Tanto para os casos unidimensionais, quanto bidimensionais, assumimos por simplificação em todas as simulações que as saturações residuais foram desconsideradas, ou seja, $S_{\alpha r} = 0$ e a viscosidade em ambos as fases é 1, isto é, $\mu_\alpha = 1$.

6.1.1 Exemplo 1D

A fim de verificarmos nosso código, realizamos alguns testes com os esquemas de linearização de Picard modificado e L-esquema. Illiano (2016) utilizou dados simplificados para obter cálculos fáceis, pois sua intenção também era de verificação. Tais dados são apresentados no Teste 1 da TABELA 2. Para obter de fato um meio poroso, realizamos a alteração da variável da porosidade (ϕ), para tal mudança, nominamos como Teste 2,

sendo apresentado também na TABELA 2. Em ambos os casos, as condições iniciais e de contorno foram dadas na seção 4.1.

TABELA 2 – PROPRIEDADES.

	λ_w	λ_n	K	ϕ	ρ_w	ρ_n
Teste 1 (ILLIANO, 2016)	1	2	1	1	1	1
Teste 2	1	2	1	0,9	1	1

FONTE: A autora (2022).

Para analisar a implementação do *multigrid* fizemos uma comparação com o *singlegrid*. Para o *singlegrid* e *multigrid* usamos o *solver* GS acoplado. Além disso, para o *multigrid* utilizamos o número máximo de níveis (L_{max}) e os seguintes operadores de transferência entre malhas: restrição através da média aritmética e prolongação através da interpolação constante por partes (TROTTERBERG; OOSTERLEE; SCHÜLLER, 2001). Neste exemplo, usamos os dados da TABELA 3, sendo que ν_1 e ν_2 representam o número de pré e pós-suavização; ν_0 , o número de suavizações na malha mais grossa; TOL , a tolerância para os ciclos W ou para o GS; e TOL_{lin} , a tolerância para a linearização.

TABELA 3 – DADOS DE IMPLEMENTAÇÃO.

ν_1	ν_2	ν_0	TOL	TOL_{lin}
5	5	5	$10e - 5$	$10e - 8$

FONTE: A autora (2022).

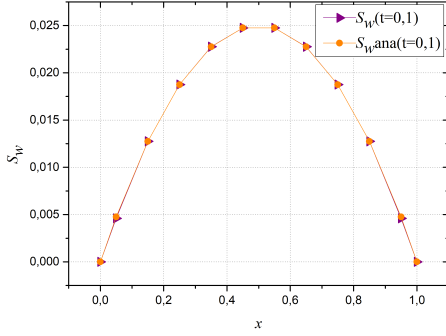
Picard modificado

Inicialmente reproduzimos a figura 5.1 de Illiano (2016) que apresenta a solução numérica e analítica (equação (4.4)) obtida da saturação para os dados do Teste 1 da TABELA 2 para diversos passos no tempo. Os gráficos gerados são apresentados na FIGURA 19, onde é possível perceber que todas as nossas soluções (para alguns tamanhos de malhas e em vários passos de tempo) estão próximas das soluções analíticas de Illiano (2016). Neste caso, o erro entre elas está na ordem do erro de máquina.

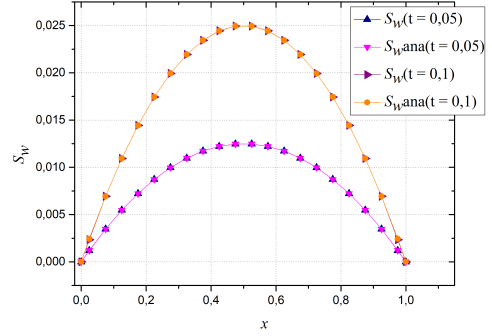
Como na grande parte dos problemas à serem resolvidos, a solução analítica não é conhecida e, conseqüentemente, o erro numérico também não. Nestes casos, uma forma de verificar a solução é mediante um estimador de erro, baseado na ordem aparente (p_U). Quando conhecemos a solução analítica, podemos calcular a ordem efetiva (p_E). Essas ordens são calculadas da seguinte maneira (MARCHI, 2001):

FIGURA 19 – SATURAÇÃO ANALÍTICA E NUMÉRICA OBTIDA NO PRIMEIRO PASSO DE TEMPO COM $TOL_{lin} = 10^{-9}$ E EM DIFERENTES MALHAS: (A) $h = \tau = 0,1$, (B) $h = \tau = 0,05$, (C) $h = \tau = 0,025$ E (D) $h = \tau = 0,0125$.

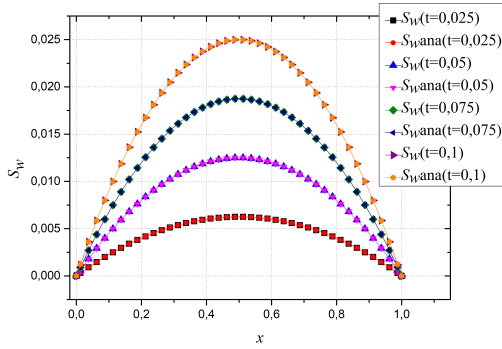
(a) S_w PARA $h = \tau = 0,1$.



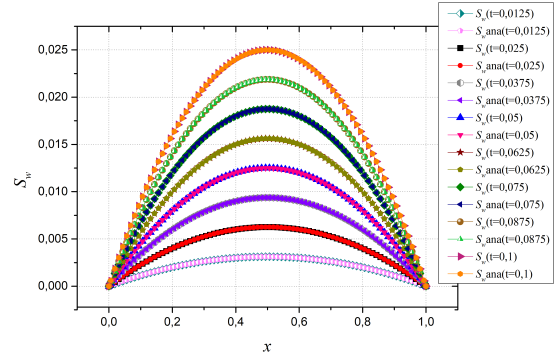
(b) S_w PARA $h = \tau = 0,05$.



(c) S_w PARA $h = \tau = 0,025$.



(d) S_w PARA $h = \tau = 0,0125$.



FONTE: A autora (2022).

$$p_U = \frac{\log\left(\frac{|\psi_2 - \psi_3|}{|\psi_1 - \psi_2|}\right)}{\log(q)} \quad e \quad p_E = \frac{\log\left(\frac{|\Psi - \psi_2|}{|\Psi - \psi_1|}\right)}{\log(q)}, \quad (6.3)$$

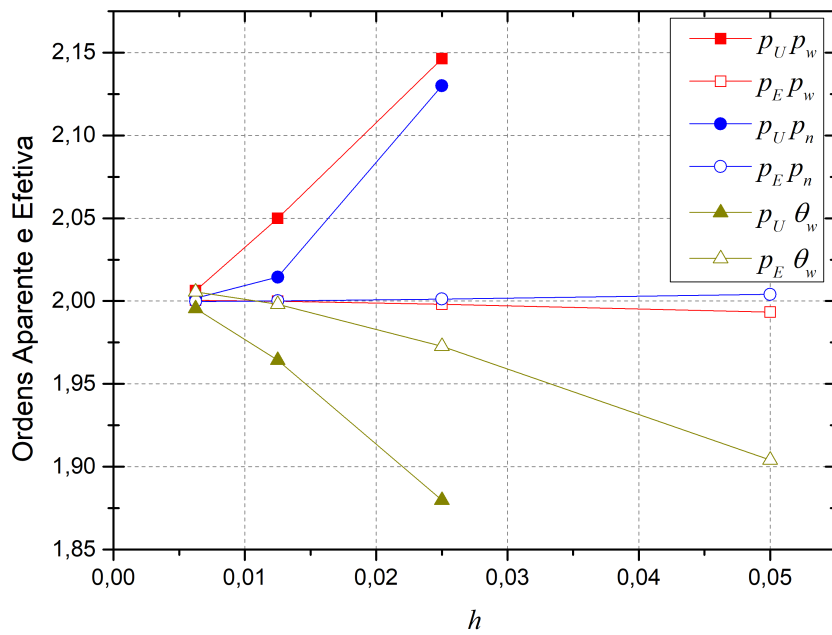
em que Ψ é a solução analítica, ψ_1 , ψ_2 e ψ_3 representam três soluções em três malhas distintas com volumes de tamanho h_1 , h_2 e h_3 , malhas fina, grossa e super grossa, respectivamente, e $q = h_2/h_1 = h_3/h_2$ é a razão de refinamento entre as malhas.

Consideramos a norma infinito do erro numérico como variável de interesse, buscamos verificar se as ordens efetiva (p_E) e aparente (p_U) do erro de discretização tendem à ordem assintótica, mediante o refinamento da malha. Para o problema considerado a ordem assintótica é $p_L = 2$, dado que utilizamos as aproximações espaciais de segunda ordem de acurácia, CDS (VERSTEEG; MALALASEKERA, 2007).

Na FIGURA 20 apresentamos os gráficos com os resultados obtidos para p_U e p_E com o Teste 1, utilizando o *singlegrid*. Com o intuito de se isolar apenas os efeitos do erro de discretização, utilizamos um método direto na resolução dos sistemas que surgem das

linearizações do método de Picard modificado, onde as simulações foram executadas até que o *diff* atingisse o erro de máquina (erro de arredondamento). Dessa forma, tentamos negligenciar o erro de iteração. Aqui as variáveis de interesse são as normas infinito dos erros numéricos de p_w , p_n e θ_w . Como podemos observar por esta figura, para as malhas analisadas, p_U e p_E estão se aproximando de $p_L = 2$, conforme esperado.

FIGURA 20 – ORDENS APARENTE E EFETIVA *VERSUS* h PARA A NORMA INFINITO DO ERRO, COM PICARD MODIFICADO PARA O TESTE 1.



FONTE: A autora (2022).

Na TABELA 4 apresentamos o tempo de CPU (t_{CPU}) total necessário (que leva em consideração todos os passos de tempo e suas respectivas linearizações necessárias) para cada um dos métodos e seu *speedup* S . S representa quantas vezes o *multigrid* é mais rápido que o *singlegrid*, ou seja, $S = \frac{t_{CPU-SG}}{t_{CPU-MG}}$. Aqui, optamos apenas pelo refino espacial, que já é suficiente para verificar as propriedades desejáveis do *multigrid* diante do *singlegrid*. Note que $S > 1$ em todos os casos, ou seja, o *multigrid* sempre é mais rápido que o *singlegrid*. E ainda mais, a medida que refinamos a malha, S vai ficando cada vez maior, o que significa que o *multigrid* vai ficando cada vez mais eficiente, característica altamente desejável.

Realizamos também um ajuste geométrico do tipo $t_{CPU} = c(N_x)^p$ (BURDEN; FAIRES; BURDEN, 2015) para analisar o desempenho do método, onde c é uma constante

TABELA 4 – TEMPO DE CPU E *SPEEDUP* PARA O *MULTIGRID* E *SINGLEGRID*.

N_t	N_x	$t_{CPU} - SG$	$t_{CPU} - MG$	S
16	16	24,860	3,630	6,848
16	32	175,394	10,013	17,516
16	64	1310,780	27,618	47,460
16	128	9892,466	62,690	157,799

FONTE: Adaptado de Oliveira *et al.* (2020).

relativa ao método e p representa a ordem de complexidade do algoritmo, que no caso do *multigrid*, deve estar próximo da unidade (TROTTERBERG; OOSTERLEE; SCHÜLLER, 2001). Considerando o primeiro passo de tempo e a primeira linearização em diferentes malhas, $N_x = 4, 8, 16, 32, 64, 128, 256, 512$ e 1024 , obtemos $c = 0,0127$ e $p = 1,1103$, estando de acordo com a literatura.

L-esquema

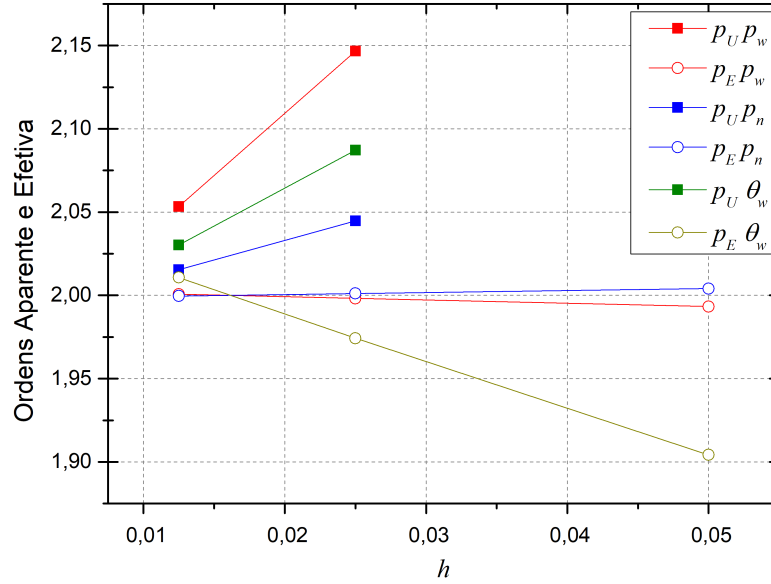
Nas FIGURAS 21 e 22 apresentamos os gráficos com p_U e p_E obtidos pela equação (6.3) referente aos dados do Teste 1 da TABELA 3, utilizando o *singlegrid*, o método de linearização *L*-esquema com $L_s = 10^4$ e $L_s(t) = 5\max(|C_w(x,t)|)$, respectivamente. Note que estas escolhas de L_s atendem aos critérios estabelecidos por Illiano, Pop e Radu (2020).

Como podemos observar nessas figuras, p_U e p_E tendem à $p_L = 2$, conforme esperado. Como o comportamento para os dois valores de L_s são semelhantes e notamos que para o $L_s(t)$ a convergência foi ligeiramente mais rápida, utilizamos apenas o caso de $L_s(t)$ para avaliar o Teste 2 (veja dados nas TABELAS 2 e 3), onde novamente p_U e p_E , tendem à $p_L = 2$, conforme podemos ver na FIGURA 23. Assim, verificamos que para ambos os Testes para o problema 1D, as ordens aparentes e efetivas tendem à 2, conforme esperado.

Realizamos ainda alguns testes variando a escolha do L_s no *L*-esquema, pois neste momento o objetivo era analisar o comportamento do método de linearização. Por isso, para os primeiros testes optamos em utilizar o método direto para a resolução dos sistemas lineares gerados. Na FIGURA 24, escolhemos um $L_s = 10^4$ fixo para todos os volumes de controle e para todos os passos de tempo. Na FIGURA 25, escolhemos $5\max(|C_w(x,t)|)$ para qualquer volume em cada passo de tempo. Finalmente, na FIGURA 26 foram escolhidos os valores fixos para cada malha, ou seja, $L_s = 10^2, 10^3$ e 10^4 para as malhas $N_x = N_t = 10, 20$ e 40 , respectivamente. Nessas figuras (FIGURA 24, 25 e 26), é possível perceber que o erro diminui com o refino da malha, como é esperado.

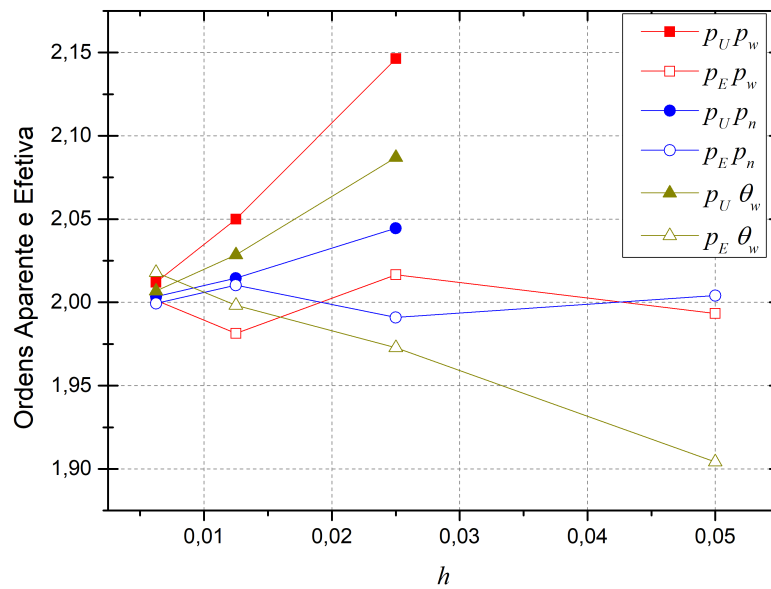
Podemos perceber que entre as três escolhas para L_s , $L_s(t) = 5\max(|C_w(x,t)|)$ obteve melhores resultados, pois a ordem do erro é menor (veja FIGURA 25).

FIGURA 21 – ORDENS APARENTE E EFETIVA *VERSUS* h PARA A NORMA INFINITO DO ERRO, COM $L_s = 10^4$ PARA O TESTE 1.



FONTE: A autora (2022).

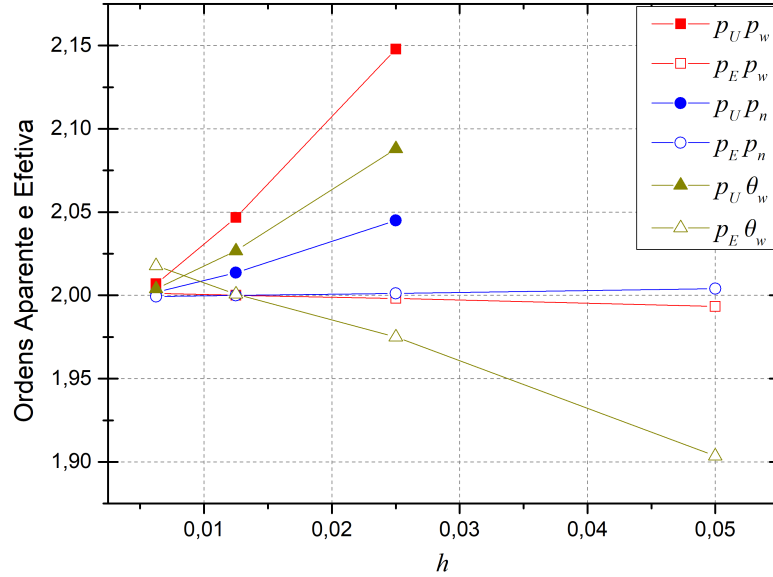
FIGURA 22 – ORDENS APARENTE E EFETIVA *VERSUS* h PARA A NORMA INFINITO DO ERRO, COM $L_s(t) = 5\max(|C_w(x,t)|)$ PARA O TESTE 1.



FONTE: A autora (2022).

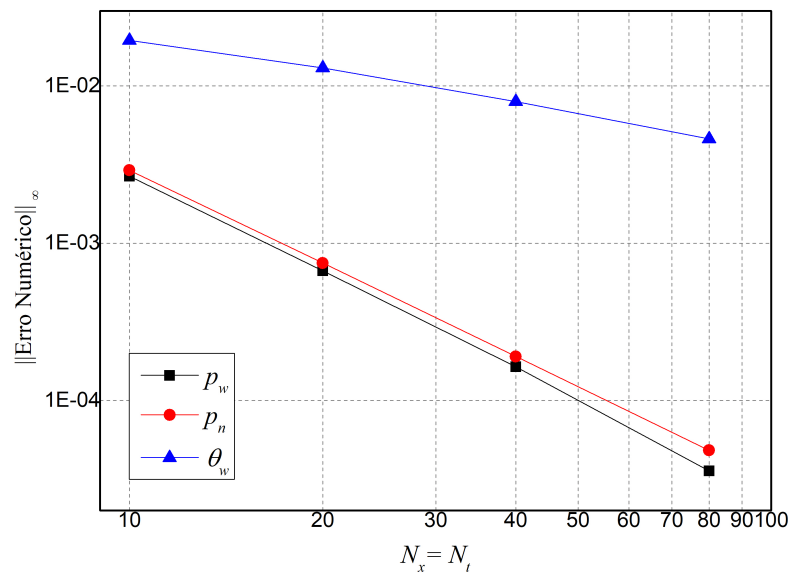
Na FIGURA 27 é apresentado o *diff* em relação ao número de linearizações (it_{lin})

FIGURA 23 – ORDENS APARENTE E EFETIVA *VERSUS* h PARA A NORMA INFINITO DO ERRO, COM $L_s(t) = 5\max(|C_w(x,t)|)$ PARA O TESTE 2.

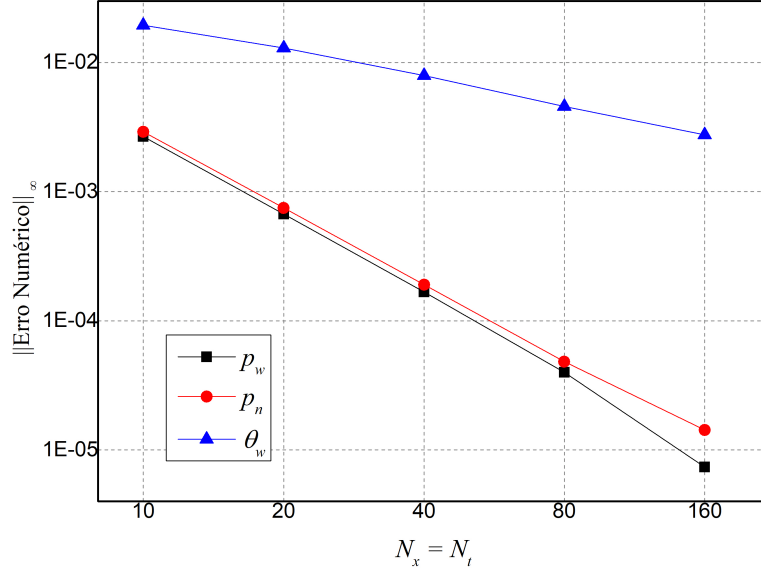


FONTE: A autora (2022).

FIGURA 24 – NORMA INFINITO DO ERRO NUMÉRICO COM $L_s = 10^4$ PARA O TESTE 1.



FONTE: A autora (2022).

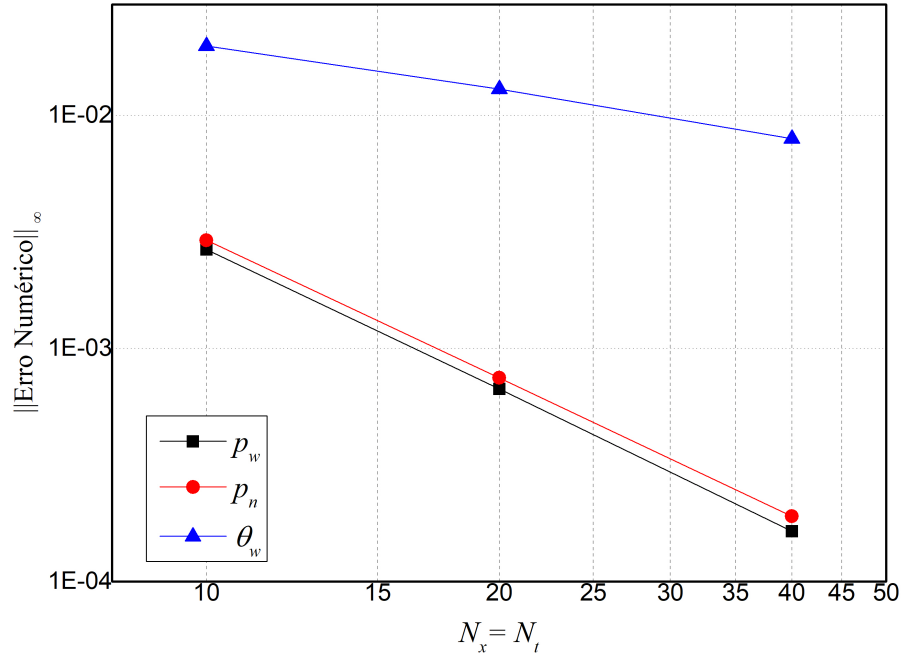
FIGURA 25 – NORMA INFINITO DO ERRO NUMÉRICO COM $L_s(t) = 5\max(|C_w(x,t)|)$ PARA O TESTE 1.

FONTE: A autora (2022).

para alguns tamanhos de malhas e $L_s = 10^4$ para o Teste 1. Notamos que na primeira linearização, o *diff* diminuiu abruptamente e depois mais suavemente. Em relação ao tamanho de malha, podemos perceber que foi necessário mais linearizações para malhas mais grosseiras.

Na TABELA 5 é possível percebermos o número de linearizações no último passo de tempo (it_{lin}) e a média de linearizações no tempo ($itme_{lin}$) para as diferentes escolhas de L_s no L-esquema para o Teste 1 até que o critério de parada $TOL_{lin} = 10^{-9}$ fosse atingindo. Comparando tais escolhas de L_s , percebemos que uma boa escolha é utilizar $L_s(t) = 5\max(|C_w(x,t)|)$, pois foi a escolha onde o número de iterações se manteve mais estável e necessitou menor número médio de linearizações para convergir.

Portanto, após essas análises e segundo as pesquisas recentes encontradas na literatura sobre a escolha de L_s (RADU *et al.*, 2018; ILLIANO; POP; RADU, 2020; SABATINI *et al.*, 2020), optamos por utilizar $L_s = \max(|C_w(x,t)|)$, pois atende ao critério de convergência indicado por Illiano (2016) ($L_s \geq |C_w(x,t)|$), aos testes realizados por Sabatini *et al.* (2020) e é uma forma de não se obter valores tão grandes para L_s . Assim, para obter os próximos resultados, realizamos várias simulações, comparamos os métodos de linearizações, Picard modificado e L-esquema com $L_s = \max(|C_w(x,t)|)$, com o número máximo de linearizações $itmax_{lin} = 500$ e o uso do método *multigrid* com as componentes algorítmicas apresentadas na seção 3.1. Os demais dados usados estão na TABELA 3.

FIGURA 26 – NORMA INFINITO DO ERRO NUMÉRICO COM $L_s = 10^2, 10^3$ E 10^4 PARA O TESTE 1.

FONTE: A autora (2022).

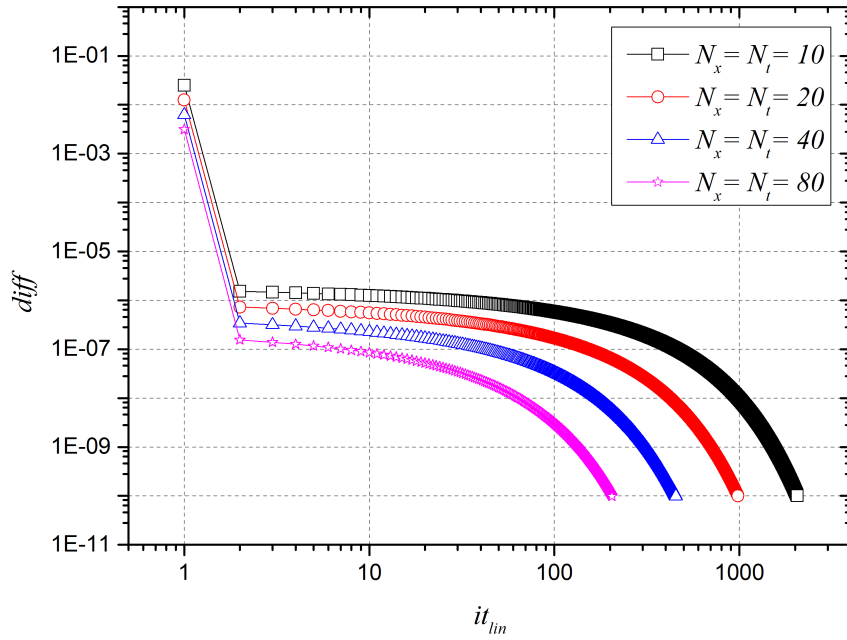
TABELA 5 – NÚMERO DE ITERAÇÕES DA LINEARIZAÇÃO COM L-ESQUEMA PARA O TESTE 1.

$N_x = N_t$	$L_s = 10^4$		$L_s(t) = 5\max(C_w(x,t))$		$L_s = 10^2, 10^3 \text{ e } 10^4$	
	it_{lin}	$itme_{lin}$	it_{lin}	$itme_{lin}$	it_{lin}	$itme_{lin}$
10	18.823	10.815,7	286	288,3	272	10.152
20	19.106	10.361,1	553	540,85	2.383	1.292,5
40	18.767	9.846,58	1.041	990,77	18.767	9.846,58
80	17.974	9.240,51	1.907	1.766,63	—	—
160	—	—	3.391	3.048,48	—	—

FONTE: A autora (2022).

Comparação entre as linearizações de Picard modificado e L-esquema

Mostramos na TABELA 6 a média de linearizações, $itme_{lin}$, e a média de ciclos do *multigrid*, $itme_{MG}$. Assim, podemos notar que o número de iterações necessários no *multigrid* é sempre pequeno em relação aos métodos de linearizações. Se compararmos os resultados da coluna $itme_{lin}$ de $L_s(t) = 5\max(|C_w(x,t)|)$ da TABELA 5 com a coluna Teste 1 de L-esquema da TABELA 6 é possível perceber que no segundo caso, o número de iterações média para a linearização foi menor, isso se deve principalmente ao fato de

FIGURA 27 – $diff$ NO 1º PASSO DE TEMPO COM $L_s = 10^4$ para o Teste 1.

FONTE: A autora (2022).

estarmos utilizando $L_s(t) = \max(|C_w(x,t)|)$ e não $L_s(t) = 5\max(|C_w(x,t)|)$. Percebemos também que para esse problema, o Picard modificado necessita de um número bem menor de iterações que o L-esquema, tornando-se bem mais eficiente. Estes resultados também podem ser vistos em Oliveira *et al.* (2020) (Anexo A).

TABELA 6 – ITERAÇÕES DO PICARD MODIFICADO E L-ESQUEMA COM *MULTIGRID*

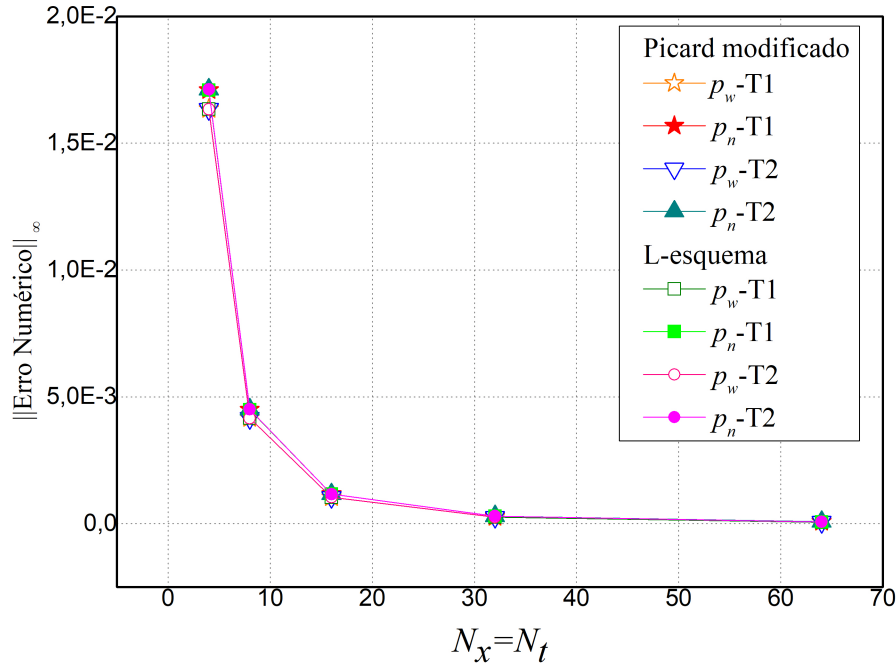
$N_x = N_t$	Picard modificado				L-esquema			
	Teste 1		Teste 2		Teste 1		Teste 2	
	$itme_{lin}$	$itme_{MG}$	$itme_{lin}$	$itme_{MG}$	$itme_{lin}$	$itme_{MG}$	$itme_{lin}$	$itme_{MG}$
4	5,25	1,50	5,25	1,50	16,25	1,12	16,00	1,13
8	4,63	2,50	4,63	2,50	34,13	1,12	33,75	1,12
16	4,31	2,50	4,31	2,50	65,19	1,06	64,69	1,06
32	3,75	2,67	3,72	2,67	117,66	1,03	117,00	1,03
64	3,22	2,67	3,22	2,67	228,94	1,02	244,20	1,02

FONTE: Adaptado de Oliveira *et al.* (2020).

Na FIGURA 28 apresentamos a norma infinito da diferença entre as soluções analíticas e numéricas de p_α versus $N_x = N_t = 4$ até 64 para os esquemas de linearização

estudados (Picard modificado e L-esquema com $L_s = \max|C_w(x,t)|$), tanto para o Teste 1 (T1) como para o Teste 2 (T2). Os resultados obtidos mostram que, independente do esquema de linearização usado, o erro são aproximadamente iguais e diminuem com o refino da malha.

FIGURA 28 – NORMA INFINITO DO ERRO NUMÉRICO *VERSUS* $N_x = N_t$ PARA OS TESTES 1 E 2, COM PICARD MODIFICADO E L-ESQUEMA.



FONTE: Adaptado de Oliveira *et al.* (2020).

6.1.2 Exemplos 2D

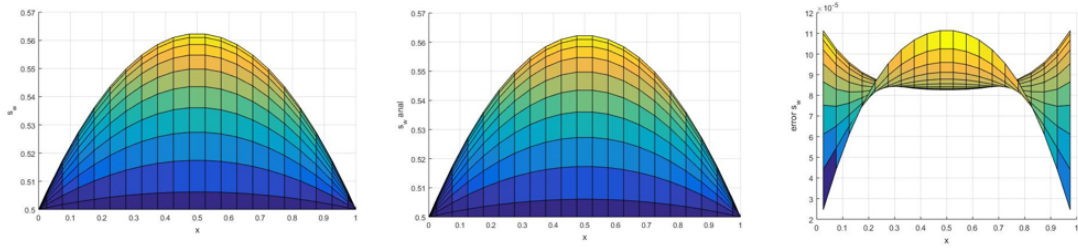
A fim de verificar nosso código em relação ao problema 2D, utilizamos o exemplo com domínio, solução analítica conhecida, condições iniciais e de contorno definidos na seção 4.2 (proposta em Kvashchuk (2015)) e que possui os seguintes dados:

- **Teste 3:** $\lambda_w = \frac{1}{4}$, $\lambda_n = \frac{3}{4}$, $p_c = 1 - S_w^2$, $K = 1$ e $\phi = \rho_\alpha = 1$.

Realizamos neste momento os testes apenas com o método direto, considerando o critério de parada $TOL_{lin} = 1,0e - 09$ para o processo iterativo do método de linearização de Picard Modificado.

Os resultados que obtivemos para a saturação S_w são apresentados na FIGURA 29, sendo possível perceber que a nossa solução numérica é aproximadamente igual a solução analítica, com erros na ordem 10^{-4} , resultados muito próximos aos obtidos em Kvashchuk (2015).

FIGURA 29 – SOLUÇÃO NUMÉRICA, ANALÍTICA E ERRO DE S_w PARA O TEMPO $t_f = 1$ COM $N_x = N_y = N_t = 20$.



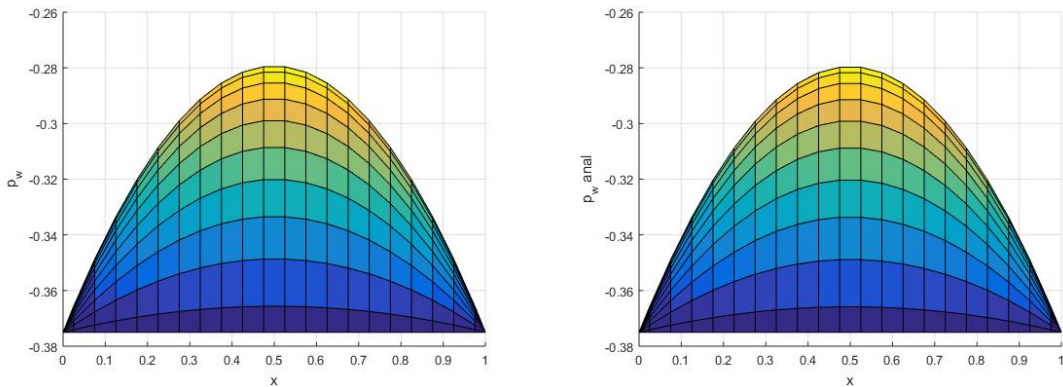
FONTE: A autora (2022).

Nas FIGURAS 30 e 31 apresentamos as soluções numéricas e analíticas das pressões úmida (p_w) e não úmida (p_n), respectivamente. Aqui podemos perceber também que as soluções numéricas estão de acordo com as analíticas.

FIGURA 30 – (a) SOLUÇÃO NUMÉRICA E (b) ANALÍTICA DE p_w OBTIDA NO PASSO DE TEMPO $t_f = 1$.

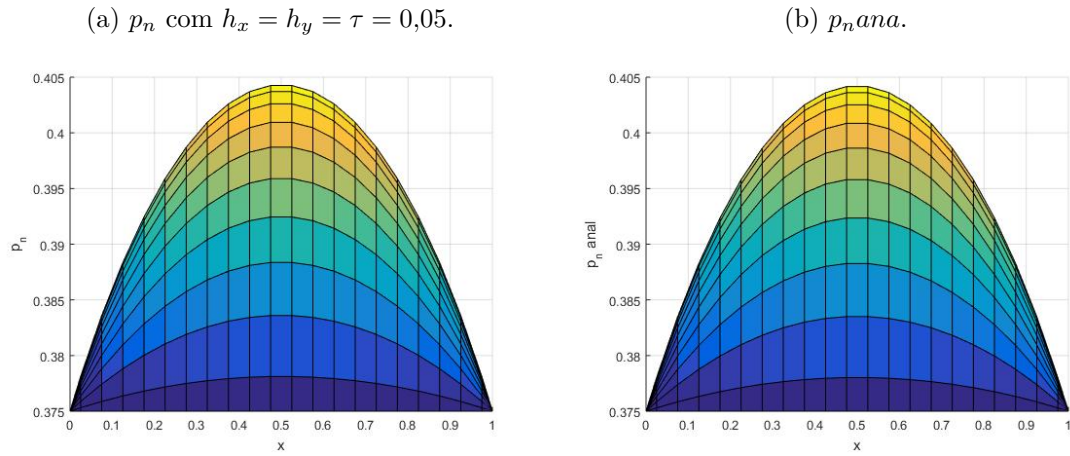
(a) p_w com $h_x = h_y = \tau = 0,05$.

(b) p_w^{ana} .

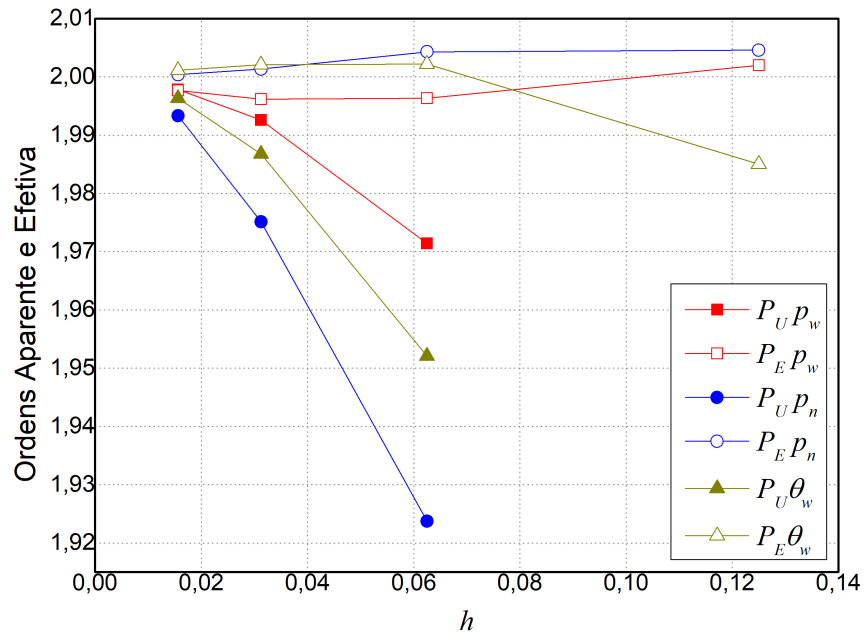


FONTE: A autora (2022).

Na FIGURA 32 apresentamos os valores de p_U e p_E obtidos pela equação (6.3) para as variáveis p_w, p_n e S_w referente aos dados do Teste 3. Note que p_U e p_E tendem a

FIGURA 31 – (a) SOLUÇÃO NUMÉRICA E (b) ANALÍTICA DE p_n NO PASSO DE TEMPO $t_f = 1$.

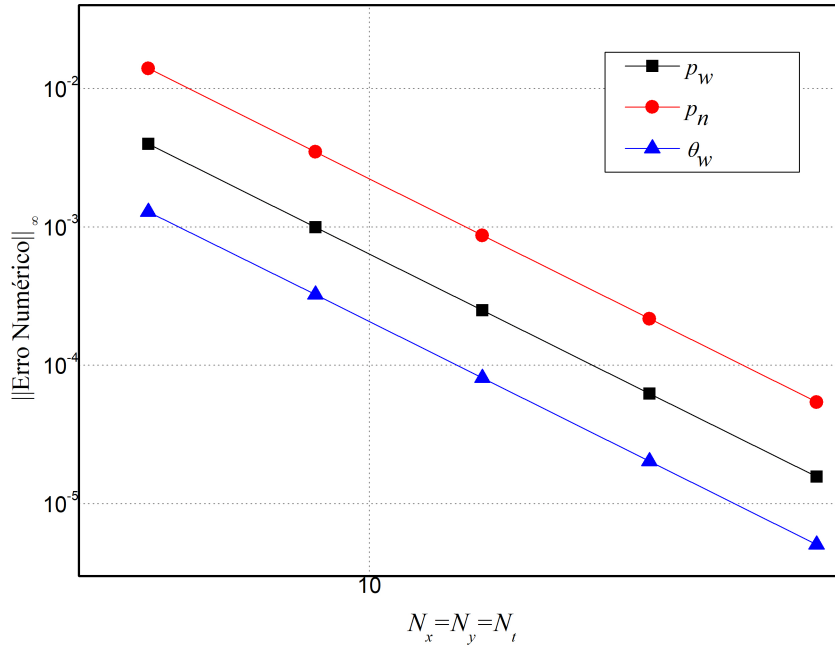
FONTE: A autora (2022).

ordem assintótica, $p_L = 2$ com o refino da malha.FIGURA 32 – ORDENS APARENTE E EFETIVA *VERSUS* h PARA A NORMA INFINITO DO ERRO, COM PICARD MODIFICADO PARA O TESTE 3.

FONTE: A autora (2022).

Na FIGURA 33 apresentamos a norma infinito do erro numérico de p_α versus $N_x = N_y = N_t = 4$ até 64 para o Teste 3, onde é possível perceber que o erro diminui com o refino da malha.

FIGURA 33 – NORMA INFINITO DO ERRO NUMÉRICO VERSUS $N_x = N_y = N_t$ PARA O TESTE 3.



FONTE: Adaptado de Oliveira *et al.* (2020).

Examinamos também a convergência do método de Picard modificado no problema 2D, analisando os erros para diferentes discretizações e comparamos com os resultados apresentados por Kvashchuk (2015), apresentados na TABELA 7 (onde se lê dt em Kvashchuk (2015), leia-se τ no presente trabalho). Aqui apresentamos apenas os resultados com o uso do método *multigrid*, com seu respectivo critério de parada $TOL_{MG} = 1,0e-05$ e o processo iterativo dos métodos de linearização com critério de parada $TOL_{lin} = 1,0e-09$. Devemos reforçar que a pressão (p) que está na TABELA 7 representa $\bar{p} = (p_w + p_n)/2$. Para comparação, os nossos resultados, obtidos com Picard modificado, estão sendo apresentados na TABELA 8.

Na TABELA 8, mostramos que o erro na norma-2 para as variáveis da saturação e em ambas as pressões ($E_{S_w}^i$, $E_{p_w}^i$ e $E_{p_n}^i$, respectivamente), juntamente com a redução do erro correspondente ($E_{\gamma}^{i-1}/E_{\gamma}^i$, com γ a variável correspondente). Com isso podemos ver

que os resultados obtidos estão de acordo com a estimativa do erro teórico estabelecido pela literatura, com segunda ordem de convergência.

TABELA 7 – ERROS NA NORMA-2 DA PRESSÃO (\bar{p}) E SATURAÇÃO (S_w) ÚMIDA PARA DIFERENTES VALORES DOS PARÂMETROS DE DISCRETIZAÇÃO ESPACIAL E TEMPORAL COM $t_f = 1$ E OS DADOS DO TESTE 3.

i	$h = \tau$	$E_{\bar{p}}^i$	$E_{S_w}^i$	$E_{\bar{p}}^{i-1}/E_{\bar{p}}^i$	$E_{S_w}^{i-1}/E_{S_w}^i$
1	0,1	2,296e-04	0,0012		
2	0,05	4,938e-05	2,634e-04	4,6491	4,4626
3	2,5e-02	1,222e-05	6,599e-05	4,0401	3,9917
4	1,25e-02	3,097e-06	1,676e-05	3,9465	3,9367
5	6,25e-03	7,665e-07	4,159e-06	4,0405	4,0309

FONTE: Adaptada de Kvashchuk (2015).

TABELA 8 – ERROS NA NORMA-2 DAS PRESSÕES (p_w, p_n) E SATURAÇÃO (S_w) PARA DIFERENTES VALORES DOS PARÂMETROS DE DISCRETIZAÇÃO ESPACIAL E TEMPORAL, COM $t_f = 1$, PARA O TESTE 3.

i	$h = \tau$	$E_{p_w}^i$	$E_{p_n}^i$	$E_{S_w}^i$	$E_{p_w}^{i-1}/E_{p_w}^i$	$E_{p_n}^{i-1}/E_{p_n}^i$	$E_{S_w}^{i-1}/E_{S_w}^i$
1	0,1	6,884e-04	3,251e-04	3,441e-04			
2	0,05	1,729e-04	8,152e-05	8,668e-05	3,9809	3,9876	3,9695
3	2,5e-02	4,328e-05	2,040e-05	2,171e-05	3,9950	3,9961	3,9926
4	1,25e-02	1,082e-05	5,102e-06	5,430e-06	3,9988	3,9987	3,9984
5	6,25e-03	2,706e-06	1,276e-06	1,358e-06	3,9997	3,9995	3,9998

FONTE: A autora (2022).

Note que qualitativamente as TABELAS 7 e 8 têm o mesmo padrão. Entretanto, pequenas diferenças quantitativas são justificáveis. Kvashchuk (2015) usa \bar{p} ao invés de p_w e p_n , como usamos neste trabalho. Além disso, para Kvashchuk (2015) as variáveis de interesse são \bar{p} e S_w , enquanto que neste trabalho são p_w e p_n , o que significa que as variáveis de interesse, e obviamente, as variáveis soluções dos sistemas, são variáveis distintas.

Na TABELA 9 mostramos $itme_{lin}$, número médio de iterações na linearização. Para esse exemplo específico, realizamos a comparação dos métodos de Picard modificado e L-esquema com $L_s = \max(|C_w(x,t)|)$. Notamos que Picard modificado necessita de menos iterações que L-esquema para atender o critério de parada, se mostrando mais eficiente.

Se compararmos o número de iterações média necessárias para o exemplo 2D da

TABELA 9 – ITERAÇÕES DOS MÉTODOS DE PICARD MODIFICADO E L-ESQUEMA PARA O TESTE 3.

$N_x = N_y = N_t$	$itme_{lin}$	
	Picard modificado	L-esquema
10	3,00	6,00
20	3,00	6,10
40	3,00	6,00
80	3,00	5,89

FONTE: A autora (2022).

TABELA 9 (Teste 3) com o exemplo 1D da TABELA 6 (Testes 1 e 2), podemos perceber que o comportamento geral é o mesmo: Picard modificado necessita menos iterações que L-esquema.

Como o Picard modificado tem se mostrado mais eficiente que o L-esquema, optamos em utilizar apenas o método de Picard modificado para os próximos testes.

6.2 Testes numéricos realísticos

O foco nesta seção foi a construção de um exemplo de um problema de escoamento multifásico em meios porosos sem solução analítica conhecida, para com isso, mostrar o quão eficiente e robusto é a metodologia proposta nesta tese. Para tanto, apresentamos resultados obtidos para uma sequência de problemas (Testes) 2D com pequenas modificações em cada um deles até evoluir a um problema mais realístico. Para tal análise realizamos alguns testes utilizando *multigrid* (com as componentes algorítmicas já estabelecidas na seção 3.1).

Nesta seção o *multigrid* tem como critérios de parada $TOL_{MG} = 1,0e - 05$, o processo iterativo dos métodos de linearização com critério de parada $TOL_{lin} = 1,0e - 09$ e a porosidade $\phi = 0,9$.

6.2.1 Exemplos 2D

Para análise dos resultados envolvendo o problema 2D utilizamos alguns dados abordados por Kvashchuk (2015), conforme seguem os testes a seguir.

Teste 4

Diferentemente do Teste 3, para o Teste 4, usamos dados baseados na parametrização de Van Genuchten, que é baseada em experimentos práticos. Neste caso, a permeabilidade relativa de cada fase não possuem solução analítica e dependem da saturação do fluido (equação (2.13)),

$$k_{rw}(S_w) = \sqrt{\bar{S}_w}(1 - (1 - \bar{S}_w^{1/m})^m)^2,$$

$$k_{rn}(S_w) = \sqrt{1 - \bar{S}_w}(1 - \bar{S}_w^{1/m})^{2m},$$

onde o parâmetro de Van Genuchten usado aqui será igual à $n = 2$, ou seja, $m = 1/2$ (KVASHCHUK, 2015). Adicionalmente, a pressão capilar é dada pela equação polinomial, $p_c = 1 - S_w^2$.

Note que neste Teste 4 temos uma situação um pouco mais realística, dado que estas permeabilidades geram mobilidades λ_α ($\alpha = w$ e n) dependentes de S_w e não mais valores constantes, como no Teste 3.

Os resultados obtidos por Kvashchuk (2015), para a queda do erro com o refino da malha medido na norma-2, usando a formulação $\bar{p} - S_w$, são apresentados na TABELA 10. Para as nossas simulações os resultados obtidos são apresentados na TABELA 11. Note que há concordância entre os dados destas tabelas.

TABELA 10 – ERROS NA NORMA-2 DA PRESSÃO (\bar{p}) E SATURAÇÃO (S_w) PARA DIFERENTES VALORES DOS PARÂMETROS DE DISCRETIZAÇÃO ESPACIAL E TEMPORAL, COM $t_f = 1$ E OS DADOS DO TESTE 4.

i	$h = \tau$	$E_{\bar{p}}^i$	$E_{S_w}^i$	$E_{\bar{p}}^{i-1}/E_{\bar{p}}^i$	$E_{S_w}^{i-1}/E_{S_w}^i$
1	0,1	9,910e-05	1,574e-04		
2	0,05	2,200e-05	3,893e-05	4,5046	4,0433
3	2,5e-02	5,588e-06	9,991e-06	3,9372	3,8964
4	1,25e-02	1,433e-06	2,548e-06	3,9007	3,9210
5	6,25e-03	3,587e-07	6,3823e-07	3,9940	3,9923

FONTE: Adaptada de Kvashchuk (2015).

TABELA 11 – ERROS NA NORMA-2 DA PRESSÕES (p_w , p_n) E SATURAÇÃO (S_w) PARA DIFERENTES VALORES DOS PARÂMETROS DE DISCRETIZAÇÃO ESPACIAL E TEMPORAL, COM $t_f = 1$ PARA O TESTE 4.

i	$h = \tau$	$E_{p_w}^i$	$E_{p_n}^i$	$E_{S_w}^i$	$E_{p_w}^{i-1}/E_{p_w}^i$	$E_{p_n}^{i-1}/E_{p_n}^i$	$E_{S_w}^{i-1}/E_{S_w}^i$
1	0,1	2,986e-04	3,370e-04	2,880e-04			
2	0,05	8,456e-05	8,516e-05	9,065e-05	3,5312	3,9573	3,1776
3	2,5e-02	2,217e-05	2,135e-05	2,425e-05	3,8149	3,9892	3,7379
4	1,25e-02	5,614e-06	5,341e-06	6,165e-06	3,9481	3,9972	3,9335
5	6,25e-03	1,408e-06	1,335e-06	1,547e-06	3,9868	3,9992	3,9852

FONTE: A autora (2022).

Na TABELA 12 mostramos o número médio de iterações na linearização ($itme_{lin}$) para o uso do método de Picard modificado para o Teste 4. Podemos notar que a medida que a malha se torna mais refinada, o número médio de iterações necessárias diminui, propriedade altamente desejável.

TABELA 12 – ITERAÇÕES DO MÉTODO DE PICARD MODIFICADO PARA O TESTE 4.

$N_x = N_y = N_t$	$itme_{lin}$
10	4,70
20	4,45
40	3,98
80	3,90
160	3,61

FONTE: A autora (2022).

Teste 5

Os dados utilizados no Teste 5 são baseados na parametrização de Van Genuchten tanto para a permeabilidade relativa de cada fase quanto para a pressão capilar. Note que, diferentemente do Teste 4, aqui estamos supondo também que a pressão capilar não possui solução analítica.

As permeabilidades relativas de Van Genuchten são apresentadas na equação (2.13), e lembradas nos dados do Teste 4, e a pressão capilar dada pela equação (2.9),

$$p_c(S_\alpha) = p_e(\bar{S}_\alpha^{-1/m} - 1)^{1/n},$$

com os parâmetros de Van Genuchten igual à $n = pe = 2$.

Apresentamos os resultados apresentados por Kvashchuk (2015) na TABELA 13, para os dados deste Teste.

Calculamos os erros entre a solução analítica e numérica para diferentes valores na discretização no passo de tempo (τ) e no espaço ($h = h_x = h_y$). Na TABELA 14, mostramos o erro na norma-2 para as variáveis da saturação e em ambas as pressões ($E_{S_w}^i$, $E_{p_w}^i$ e $E_{p_n}^i$, respectivamente), juntamente com a redução do erro correspondente ($E_\gamma^{i-1}/E_\gamma^i$, com γ a variável correspondente). Com isso podemos ver que os resultados obtidos estão de acordo com os resultados de Kvashchuk (2015) e de acordo com a estimativa do erro teórico estabelecido pela literatura, com segunda ordem de convergência.

O número de ciclos do *multigrid* no último passo de tempo (it_{MG}), a média de ciclos necessários do *multigrid* ($itme_{MG}$), o número de linearizações no último passo de

TABELA 13 – ERROS NA NORMA-2 DA PRESSÃO (\bar{p}) E SATURAÇÃO (S_w) PARA DIFERENTES VALORES DOS PARÂMETROS DE DISCRETIZAÇÃO ESPACIAL E TEMPORAL, COM $t_f = 1$ E OS DADOS DO TESTE 5.

i	$h = \tau$	$E_{\bar{p}}^i$	$E_{S_w}^i$	$E_{\bar{p}}^{i-1}/E_{\bar{p}}^i$	$E_{S_w}^{i-1}/E_{S_w}^i$
1	0,1	1,258e-04	9,380e-05		
2	0,05	3,719e-05	2,261e-05	3,3823	4,1491
3	2,5e-02	1,085e-05	5,961e-06	3,4280	3,7928
4	1,25e-02	2,796e-06	1,561e-06	3,8796	3,8183

FONTE: Adaptada de Kvashchuk (2015).

TABELA 14 – ERROS NA NORMA-2 DA PRESSÕES (p_w, p_n) E SATURAÇÃO (S_w) PARA DIFERENTES PASSOS NO TEMPO E TAMANHOS DE MALHAS, COM $t_f = 1$ PARA O TESTE 5.

i	$h = \tau$	$E_{p_w}^i$	$E_{p_n}^i$	$E_{S_w}^i$	$E_{p_w}^{i-1}/E_{p_w}^i$	$E_{p_n}^{i-1}/E_{p_n}^i$	$E_{S_w}^{i-1}/E_{S_w}^i$
1	0,1	1,261e-03	2,755e-03	1,883e-04			
2	0,05	3,276e-04	6,995e-04	4,726e-05	3,8483	3,9389	3,9847
3	2,5e-02	8,274e-05	1,756e-04	1,183e-05	3,9599	3,9843	3,9943
4	1,25e-02	2,073e-05	4,393e-05	2,960e-06	3,9903	3,9960	3,9980
5	6,25e-03	5,186e-06	1,099e-05	7,400e-07	3,9979	3,9990	3,9992

FONTE: A autora (2022).

tempo (it_{lin}) e a média de iterações para o esquema de linearização ($itme_{lin}$) com o método de Picard modificado para este teste estão na TABELA 15.

TABELA 15 – NÚMERO DE ITERAÇÕES DO *MULTIGRID* E DA LINEARIZAÇÃO DE PICARD MODIFICADO PARA DIFERENTES VALORES DOS PARÂMETROS DE DISCRETIZAÇÃO PARA O TESTE 5.

$h = \tau$	it_{MG}	$itme_{MG}$	it_{lin}	$itme_{lin}$
0,1	34	50,22	6	5,7
0,05	20	20,27	6	5,25
2,5e-02	8	9,63	5	4,78
1,25e-02	5	5,82	5	4,51
6,25e-03	4	4,00	5	4,03

FONTE: A autora (2022).

Podemos observar por esta tabela, que o número necessário de linearizações do Picard modificado para a convergência do algoritmo é pequena em todos os casos, dando origem a um algoritmo robusto independente dos valores utilizados como parâmetros de discretização, tanto espacial, como temporal. Além disso, para valores suficientemente

pequenos de h e τ , o número de iterações do *multigrid* é sempre pequeno, propriedade altamente desejável.

Teste 6

A partir deste momento, os próximos testes foram considerados para problemas sem soluções analíticas conhecidas $\bar{p} = (p_w + p_n)/2$ e S_w , no intuito de comprovar a eficiência e robustez do nosso algoritmo. Além disso, consideramos o termo fonte nulo ($F_w = F_n = 0$), permeabilidades relativas e pressão capilar de Van Genuchten e mantemos as mesmas condições iniciais e de contorno de Dirichlet utilizadas no Teste anterior.

A TABELA 16 apresenta número médio de linearizações (Picard modificado) e número médio de ciclos de *multigrid*, com o refino da malha. Nesta tabela notamos o baixo número, tanto para $itme_{lin}$, quanto para $itme_{MG}$.

TABELA 16 – NÚMERO DE ITERAÇÕES MÉDIAS DE LINEARIZAÇÕES E *MULTIGRID* PARA O TESTE 6.

$h = \tau$	$itme_{lin}$	$itme_{MG}$
0,1	1	3
0,05	1	4
2,5e-02	1	4
1,25e-02	1	4
6,25e-03	1	4

FONTE: A autora (2022).

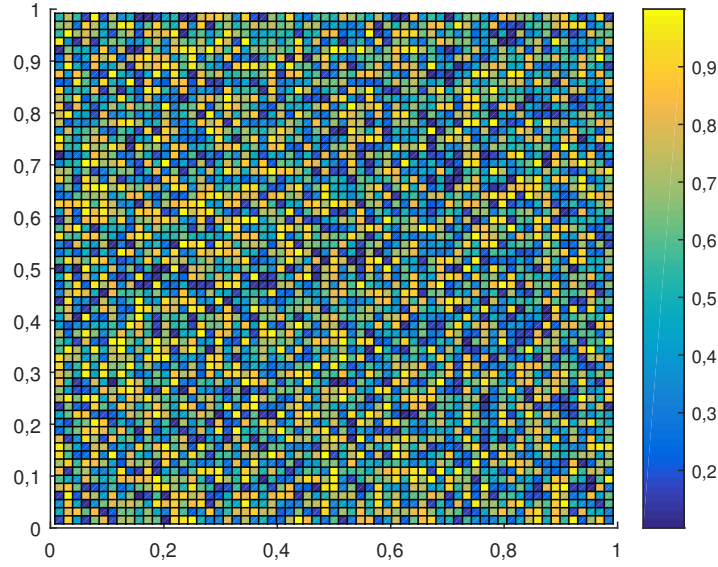
Teste 7

Como no Teste 6, aqui continuamos a considerar $F_w = F_n = 0$, condições de contorno e inicial do Teste 5, pressão capilar de Van Genuchten, porém, vamos admitir um campo de permeabilidade randômica para k_{rw} e k_{rn} em nosso domínio (veja FIGURA 34 para k_{rw}). Neste caso, usamos a função *random* do MATLAB.

Na TABELA 17 encontramos o número médio de linearizações (Picard modificado) e número médio de ciclos de *multigrid* conforme o refino da malha. Podemos perceber que tanto o *multigrid* quanto o Picard modificado convergem rapidamente, pois necessitam de poucas iterações.

Teste 8

Diferentemente do Teste 7, fizemos uma pequena modificação nas condições de contorno no intuito de inserirmos condição de Neumann na fronteira sul e mantermos

FIGURA 34 – CAMPO DE PERMEABILIDADE k_{rw} , PARA $N_x \times N_y = 64 \times 64$.

FONTE: A autora (2022).

TABELA 17 – NÚMERO DE ITERAÇÕES PARA O TESTE 7.

$h = \tau$	$itme_{lin}$	$itme_{MG}$
0,1	1	3
0,05	1	4
2,5e-02	1	4,8
1,25e-02	1	4,81
6,25e-03	1	5

FONTE: A autora (2022).

Dirichlet nas demais. As novas condições adotadas aqui serão dadas a seguir.

As TABELAS 18 e 19 mostram o número médio de linearizações e número médio de ciclos do *multigrid* com diferentes parâmetros de discretização. Na TABELA 18 foram feitas 3 variações no Teste 8: no Teste 8.1 consideramos a condição de contorno de Neumann nula para a variável p_n , ou seja, $\frac{\partial p_n(\vec{x}_S, t)}{\partial y} = 0$ com $\vec{x}_S = (1, y)$; no Teste 8.2 consideramos a condição de Neumann nula para a variável p_w , ou seja, $\frac{\partial p_w(\vec{x}_S, t)}{\partial y} = 0$; já no Teste 8.3, consideramos a condição de Neumann nula para ambas as variáveis, p_n e p_w .

Na TABELA 19 foram feitas outras 3 variações no Teste 8. No Teste 8.4 usamos a condição de contorno de Neumann dada por uma função para p_w e uma constante não nula para p_n . Neste caso, para p_w temos $\frac{\partial p_w(\vec{x}_S, t)}{\partial y}$ conhecida, com p_w dada pelas equações (4.5) e (4.8); e para p_n , a média do valor de $\frac{\partial p_n(\vec{x}_S, t)}{\partial y}$ conhecida, com p_n dada pelas equações (4.5) e (4.8). No Teste 8.5 fizemos o contrário, a constante não nula para p_w e a função

TABELA 18 – NÚMERO MÉDIO DE ITERAÇÕES PARA A CONDIÇÃO DE CONTORNO DE NEUMANN NULA NA FRONTEIRA SUL PARA OS TESTES 8.1, 8.2 E 8.3.

$h = \tau$	Teste 8.1		Teste 8.2		Teste 8.3	
	$itme_{lin}$	$itme_{MG}$	$itme_{lin}$	$itme_{MG}$	$itme_{lin}$	$itme_{MG}$
2,5e-01	4	3	4	3,25	1	3
1,25e-01	4	4	4	4	1	4
6,25e-02	4	5,36	4	5,2	1	4,38
3,13e-02	4	5,79	4	5,51	1	4,97
1,56e-02	4	5,57	4	5,5	1	5

FONTE: A autora (2022).

para p_n , seguindo a mesma ideia anterior. Já no Teste 8.6, usamos a constante não nula para ambas as variáveis.

TABELA 19 – NÚMERO MÉDIO DE ITERAÇÕES PARA CONDIÇÃO DE CONTORNO DE NEUMANN NÃO NULA NA FRONTEIRA SUL PARA OS TESTES 8.4, 8.5 E 8.6.

$h = \tau$	Teste 8.4		Teste 8.5		Teste 8.6	
	$itme_{lin}$	$itme_{MG}$	$itme_{lin}$	$itme_{MG}$	$itme_{lin}$	$itme_{MG}$
2,5e-01	4	3	4	3,25	2,75	3,67
1,25e-01	4	4	4	4	2,5	4
6,25e-02	4	5,36	4	5,2	2,5	5,37
3,13e-02	4	5,79	4	5,52	2,44	5,67
1,56e-02	4	5,57	4	5,5	2,25	5,69

FONTE: A autora (2022).

Podemos perceber que para as variações do Teste 8, o número médio de iterações necessárias tanto para a linearização, quanto para o *multigrid* foram pequenas. O que confirma que o nosso algoritmo funciona bem para esses casos também.

Teste 9

No Teste 9 fizemos uma mudança em relação à malha. Aqui utilizamos uma malha anisotrópica (anisotropia no sentido geométrico), onde o número de volumes da direção x é diferente da direção y , implicando $h_x \neq h_y$. Os outros dados e informações são os mesmos do Teste 8.6: termo fonte nulo, permeabilidades randômicas, condição de contorno de Neumann na fronteira sul e Dirichlet nas demais.

Na TABELA 20 mostramos o número de iterações médias da linearização de Picard

modificado e ciclos *mutligrd* com diferentes refinamentos de malha. Note que os resultados foram satisfatórios com relação à linearização, mostrando a eficiência e robustez do algoritmo para esse caso também. Entretanto, o número médio de ciclos *multigrd* é maior que em casos anteriores e cresce à medida que cresce o tamanho do problema (propriedade indesejada). Voltaremos a discutir esta questão no Teste 11.

TABELA 20 – NÚMERO DE ITERAÇÕES MÉDIAS DO TESTE 9 - ANISOTROPIA GEOMÉTRICA.

$N_x \times N_y$	N_t	$h_x = \tau$	h_y	$itme_{lin}$	$itme_{MG}$
4×32	4	2,5e-01	0,031	4,25	85,67
8×64	8	1,25e-01	0,016	4,13	90,96
16×128	16	6,25e-02	0,008	4,13	95,27
32×256	256	3,13e-2	0,004	4,18	98,38

FONTE: A autora (2022).

Teste 10

No Teste 10, mantemos as mesmas informações e dados do Teste 9, mudamos apenas para um domínio retangular $\Omega = (0,1) \times (0,8)$ com o número de volumes na direção x diferente da direção y , $N_x \neq N_y$, mas com $h_x = h_y$, ou seja, domínio retangular com uma malha isotrópica. Vamos admitir um novo campo de permeabilidade randômica para k_{rw} nesse novo domínio retangular (veja FIGURA 35). Neste caso, usamos novamente a função *random* do MATLAB.

A TABELA 21 mostra o número médio de linearizações do Picard modificado e o número médio de ciclos de *multigrd*, para diferentes malhas e passos no tempo.

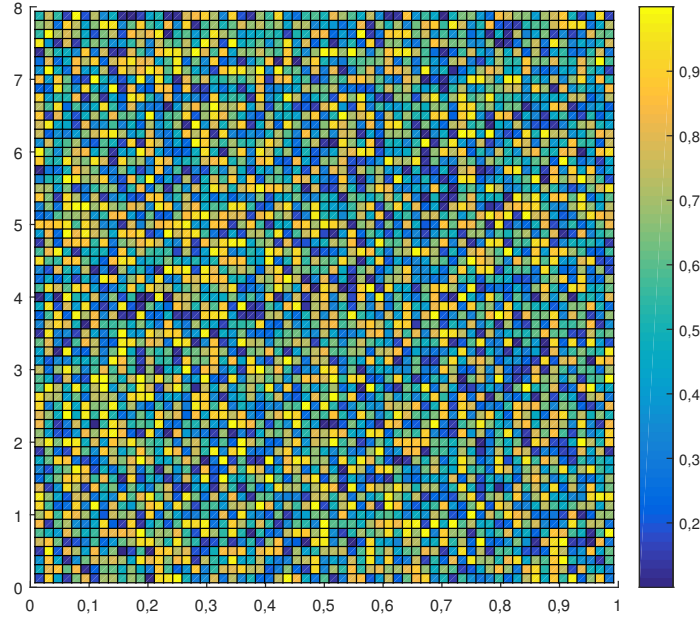
TABELA 21 – NÚMERO MÉDIO DE LINEARIZAÇÕES E CICLOS DE *MULTIGRID* PARA O TESTE 10 - MALHA ISOTRÓPICA E DOMÍNIO RETANGULAR.

$N_x \times N_y$	N_t	$h = \tau$	$itme_{lin}$	$itme_{MG}$
4×32	4	2,5e-01	4	4,95
8×64	8	1,25e-01	4	4,59
16×128	16	6,3e-02	4	5,30
32×256	256	3,13e-02	4	5,45

FONTE: A autora (2022).

Teste 11

FIGURA 35 – CAMPO DE PERMEABILIDADE k_{rw} , PARA $N_x \times N_y = 64 \times 64$ PARA DOMÍNIO RETANGULAR.



FONTE: A autora (2022).

Todos os dados do Teste 10 foram mantidos, exceto o número de volumes na direção x igual ao da direção y , $N_x = N_y$, com $h_x \neq h_y$, ou seja, domínio retangular com anisotropia geométrica.

A TABELA 22 mostra o número médio de linearizações do Picard modificado e o número médio de ciclos de *multigrid*, para diferentes malhas e passos no tempo para este teste.

Podemos perceber que a metodologia também funcionou neste caso de anisotropia, como pode ser visto pelos resultados satisfatórios com relação à linearidade. Porém, foram necessários um número grande de ciclos do *multigrid* para este caso (veja também no Teste 9). Note também que o número médio de ciclos cresce à medida que cresce o tamanho do problema (propriedade indesejada). Entretanto, isso gera um possível tema para trabalhos futuros, por exemplo, a utilização de um *solver* linha na direção da anisotropia, pois este tipo de *solver* tem um bom comportamento neste tipo de problema.

Teste 12

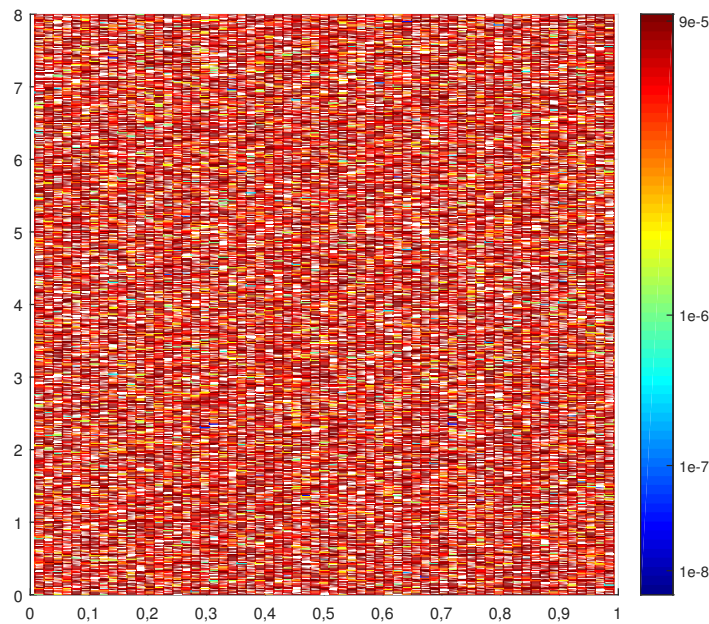
Diferentemente ao caso isotrópico tratado no Teste 10, no Teste 12 temos o objetivo de abordar um problema ainda mais realístico. Para isso, aqui utilizamos todos os dados do Teste 10, mas mudando as condições de contorno: Neumann na fronteira sul ($\frac{\partial p_w(\vec{x}_S, t)}{\partial y} = -1$ e $\frac{\partial p_n(\vec{x}_S, t)}{\partial y} = 0$) e Dirichlet no restante.

TABELA 22 – NÚMERO DE ITERAÇÕES MÉDIAS DE LINEARIZAÇÃO E *MULTIGRID* PARA ANISOTRÓPICA GEOMÉTRICA E DOMÍNIO RETANGULAR.

$N_x = N_y = N_t$	$h_x = \tau$	h_y	$itme_{lin}$	$itme_{MG}$
4	2,5e-01	2,000	3	5,33
8	1,25e-01	1,000	3,88	15,72
16	6,25e-02	0,500	4	36,98
32	3,13e-02	0,250	4	58,73
64	1,56e-02	0,250	4	73,43

FONTE: A autora (2022).

Além disso, vamos admitir um novo campo de permeabilidades randômicas nesse domínio retangular para um intervalo real de variação dessa permeabilidade (veja FIGURA 36 para k_{rw}). Segundo Knappett e Craig (2019), essa variação de permeabilidade abrange solos desde cascalho, areia limpa, até areia muito fina, argila não fissurada, entre outros.

FIGURA 36 – CAMPO DE PERMEABILIDADE k_{rw} , PARA $N_x \times N_y = 64 \times 512$.

FONTE: A autora (2022).

Apresentamos na TABELA 23, o número médio de linearizações de Picard modificado e ciclos *multigrid* para diferentes tamanhos de malhas. Além disso, exibimos na última coluna dessa tabela, a média aritmética do fator de convergência assintótica do *multigrid* ($\rho_{\mathbf{M}}$), calculado da seguinte forma (TROTTEMBERG; OOSTERLEE; SCHÜLLER, 2001),

$$\rho_{\mathbf{M}} = \frac{1}{it_{lin}} \sum_{j=1}^{it_{lin}} \rho_m^j, \quad \text{onde } \rho_m^j = \sqrt[it_{MG}]{\frac{\|R^{it_{MG}}\|_{\infty}}{\|R^0\|_{\infty}}}. \quad (6.4)$$

Como podemos observar, o método proposto necessita de algumas poucas linearizações para atingir o critério de parada estipulado, bem como um pequeno número de iterações de *multigrid* em cada etapa de linearização. Observe que os resultados apresentados também são robustos com relação aos parâmetros de discretização. Esses resultados mostram a robustez e eficiência da solução do método proposto.

TABELA 23 – NÚMERO DE ITERAÇÕES PARA O *MULTIGRID* E PICARD MODIFICADO, JUNTAMENTE COM O FATOR DE CONVERGÊNCIA ASSINTÓTICO, PARA DIFERENTES PARÂMETROS DE DISCRETIZAÇÃO.

$N_x \times N_y$	N_t	$h = \tau$	it_{MG}	$itme_{MG}$	it_{lin}	$itme_{lin}$	$\rho_{\mathbf{M}}$
4×32	4	2,5e-01	4	3,13	4	4	0,0235
8×64	8	1,25e-01	5	3,84	4	4	0,0468
16×128	16	6,25e-02	5	3,53	4	4	0,0267
32×256	32	3,13e-02	6	3,8	4	4	0,0483
64×512	64	1,56e-02	5	4,33	4	4	0,0631

FONTE: A autora (2022).

Portanto, podemos notar que em todos os testes aqui realizados (desde o Teste 1 até o Teste 12), a metodologia proposta para os problemas de escoamentos multifásicos em meios porosos rígidos, se mostrou eficiente e robusta, com melhor performance em problemas isotrópicos.

7 CONSIDERAÇÕES FINAIS

7.1 Conclusões gerais

Neste trabalho analisamos o problema de escoamento bifásico em meios porosos rígidos, para os casos uni e bidimensionais. Utilizamos alguns exemplos numéricos da literatura para poder comparar dois métodos de linearização, Picard modificado e L-esquema, juntamente com o *multigrid*. Inicialmente realizamos alguns testes a fim de verificar nosso código, comparamos as soluções numéricas com soluções analíticas e posteriormente analisamos, no caso 1D, o *speedup* do *multigrid* em relação ao *singlegrid*, com bons resultados. Com isso, pudemos então gerar alguns resultados e perceber que o uso dos métodos de linearização com o método *multigrid*, geraram bons resultados, pois o número de iterações necessários tanto para a linearização quanto para o *multigrid*, foram baixas. O erro numérico teve um bom comportamento, pois a medida que refinamos a malha, o erro foi diminuindo e na ordem em que isto deveria ocorrer. Portanto, podemos concluir que a combinação que propomos, foi eficiente e robusta: formulação mista pressão-saturação, discretização temporal com Euler implícito, discretização espacial com MVF usando arranjo colocalizado, Picard modificado (com melhor desempenho) ou L-esquema nas linearizações, Gauss-Seidel acoplado como *solver* e *multigrid* com componentes algorítmicas padrão.

7.2 Principais contribuições

1. Aplicação da formulação mista pressão-saturação para um problema bifásico em meio poroso rígido, utilizando as pressões como variáveis principais, na construção do sistema de equações diferenciais;
2. Análise dos métodos de linearizações, Picard modificado e L-esquema, mostrando a eficiência e robustez de ambos devido ao pouco número de iterações necessárias para a convergência nos diversos testes propostos;
3. Ao utilizar tais linearizações, geramos um sistema linear de equações elípticas, em que o *multigrid* tem comprovada eficiência, e verificadas pela boa convergência do método em nossos testes.

7.3 Propostas de trabalhos futuros

1. Fazer uma análise sobre os parâmetros ótimos de Van Genuchten e Brooks-Corey;
2. Comparar e analisar as aproximações numéricas das permeabilidades relativas e pressão capilar dadas por Van Genuchten e por Brooks-Corey;

3. Aplicar um *solver* linha para resolver o problema de escoamento bifásico anisotrópico;
4. Desenvolver métodos de resolução eficientes e robustos, baseados no uso do método *multigrid*, para o problema de escoamento multifásico em meios porosos deformáveis com o objetivo de fazer simulações em sistema de grande porte relacionadas com aplicações práticas.

REFERÊNCIAS

- ADIBIFARD, M. *et al.* Iterative ensemble kalman filter and genetic algorithm for automatic reconstruction of relative permeability curves in the subsurface multi-phase flow. *Journal of Petroleum Science and Engineering*, Elsevier, v. 192, p. 107264, 2020. Citado na página 23.
- ATAIE-ASHTIANI, B.; RAEESI-ARDEKANI, D. Comparison of numerical formulations for two-phase flow in porous media. *Geotechnical and Geological Engineering*, Springer, v. 28, n. 4, p. 373–389, 2010. Citado na página 23.
- BAKHVALOV, N. S. On the convergence of relaxation method with natural constraints on the elliptic operator. *USSR Computational Mathematics and Mathematical Physics*, Elsevier, v. 1, n. 5, p. 101–135, 1966. Citado na página 26.
- BASTIAN, P. *Numerical computation of multiphase flows in porous media*. Tese (Doutorado) — Habilitationsschrift, 1999. Citado 8 vezes nas páginas 23, 28, 30, 31, 32, 33, 34 e 35.
- BASTIAN, P.; HELMIG, R. Efficient fully-coupled solution techniques for two-phase flow in porous media: Parallel multigrid solution and large scale computations. *Advances in Water Resources*, Elsevier, v. 23, n. 3, p. 199–216, 1999. Citado 3 vezes nas páginas 23, 27 e 33.
- BRAKHAGEN, F.; FOGWELL, T. Multigrid for the fully implicit formulation of the equations for multiphase flow in porous media. *Multigrid Methods: special topics and applications, II*, p. 31–42, 1990. Citado na página 27.
- BRANDT, A. Multi-level adaptive solutions to boundary-value problems. *Mathematics of Computation*, v. 31, p. 333–390, 1977. Citado 2 vezes nas páginas 26 e 48.
- BRIGGS, W. L.; HENSON, V. E.; MCCORMICK, S. F. *A multigrid tutorial*. [S.l.]: SIAM, 2000. Citado 5 vezes nas páginas 21, 26, 46, 47 e 48.
- BUI, Q. M.; ELMAN, H. C.; MOULTON, J. D. Algebraic multigrid preconditioners for multiphase flow in porous media. *SIAM Journal on Scientific Computing*, SIAM, v. 39, n. 5, p. S662–S680, 2017. Citado na página 25.
- BUI, Q. M.; WANG, L.; OSEI-KUFFUOR, D. Algebraic multigrid preconditioners for two-phase flow in porous media with phase transitions. *Advances in water resources*, Elsevier, v. 114, p. 19–28, 2018. Citado na página 25.
- BURDEN, R. L.; FAIRES, J. D.; BURDEN, A. M. *Numerical analysis*. [S.l.]: Cengage learning, 2015. Citado 8 vezes nas páginas 20, 24, 37, 38, 39, 40, 45 e 63.
- BÜSING, H. Efficient solution techniques for two-phase flow in heterogeneous porous media using exact jacobians. *Computational Geosciences*, Springer, v. 25, n. 1, p. 163–177, 2021. Citado na página 25.
- CAO, H. *et al.* Parallel scalable unstructured cpr-type linear solver for reservoir simulation. In: ONEPETRO. *SPE Annual Technical Conference and Exhibition*. [S.l.], 2005. Citado na página 25.

- CELIA, M. A.; BINNING, P. A mass conservative numerical solution for two-phase flow in porous media with application to unsaturated flow. *Water Resources Research*, Wiley Online Library, v. 28, n. 10, p. 2819–2828, 1992. Citado 4 vezes nas páginas 20, 24, 26 e 54.
- CELIA, M. A.; BOULOUTAS, E. T.; ZARBA, R. L. A general mass-conservative numerical solution for the unsaturated flow equation. *Water resources research*, Wiley Online Library, v. 26, n. 7, p. 1483–1496, 1990. Citado 3 vezes nas páginas 23, 24 e 25.
- CHAVENT, G.; JAFFRÉ, J. *Mathematical models and finite elements for reservoir simulation: single phase, multiphase and multicomponent flows through porous media*. [S.l.]: Elsevier, 1986. Citado na página 23.
- CHEN, H. *et al.* Fully mass-conservative impes schemes for incompressible two-phase flow in porous media. *Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering*, Elsevier, v. 350, p. 641–663, 2019. Citado na página 23.
- CHEN, Z.; HUAN, G.; MA, Y. *Computational methods for multiphase flows in porous media*. [S.l.]: SIAM, 2006. Citado 2 vezes nas páginas 23 e 28.
- CHENG, A. H.-D. *Poroelasticity*. [S.l.]: Springer, 2016. v. 27. Citado na página 29.
- CRAIG, C. D. *Multigrid Methods in Science and Engineering*. Watson Research Center and Yale University, IEE: IBM T.F., 1996. Citado na página 26.
- CUSINI, M. *et al.* Constrained pressure residual multiscale (cpr-ms) method for fully implicit simulation of multiphase flow in porous media. *Journal of Computational Physics*, Elsevier, v. 299, p. 472–486, 2015. Citado na página 25.
- DANA, S.; JAMMOUL, M.; WHEELER, M. F. Performance studies of the fixed stress split algorithm for immiscible two-phase flow coupled with linear poromechanics. *Computational Geosciences*, Springer, v. 26, n. 1, p. 13–27, 2022. Citado na página 23.
- DENDY JR, J. Two multigrid methods for three-dimensional problems with discontinuous and anisotropic coefficients. *SIAM journal on scientific and statistical computing*, SIAM, v. 8, n. 5, p. 673–685, 1987. Citado na página 27.
- FEDORENKO, R. P. The speed of convergence of one iterative process. *USSR Computational Mathematics and Mathematical Physics*, Elsevier, v. 4, n. 3, p. 227–235, 1964. Citado na página 26.
- FERZIGER, J. H.; PERIĆ, M.; STREET, R. L. *Computational methods for fluid dynamics*. [S.l.]: Springer, 2002. v. 3. Citado 3 vezes nas páginas 20, 21 e 26.
- FRANCO, S. R. *Métodos multigrid espaço-tempo para resolver as equações do calor e da poroelasticidade*. Tese (Doutorado) — Universidade Federal do Paraná, 2017. Citado na página 50.
- FRANCO, S. R. *et al.* A multigrid waveform relaxation method for solving the poroelasticity equations. *Computational and Applied Mathematics*, Springer, v. 37, n. 4, p. 4805–4820, 2018. Citado na página 26.

- FREPOLI, C.; MAHAFFY, J. H.; OHKAWA, K. Notes on the implementation of a fully-implicit numerical scheme for a two-phase three-field flow model. *Nuclear Engineering and Design*, v. 225, p. 191–217, 2003. Citado na página 24.
- GANIS, B. *et al.* A multiscale mortar method and two-stage preconditioner for multiphase flow using a global jacobian approach. In: ONEPETRO. *SPE Large Scale Computing and Big Data Challenges in Reservoir Simulation Conference and Exhibition*. [S.l.], 2014. Citado na página 24.
- GASPAR, F. J. *et al.* A systematic comparison of coupled and distributive smoothing in multigrid for the poroelasticity system. *Numerical linear algebra with applications*, Wiley Online Library, v. 11, n. 2-3, p. 93–113, 2004. Citado na página 21.
- GASPAR, F. J.; RODRIGO, C. On the fixed-stress split scheme as smoother in multigrid methods for coupling flow and geomechanics. *Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering*, Elsevier, v. 326, p. 526–540, 2017. Citado na página 26.
- GOLUB, G. H.; ORTEGA, J. M. *Scientific computing and differential equations: an introduction to numerical methods*. [S.l.]: Elsevier, 2014. Citado 3 vezes nas páginas 24, 40 e 45.
- GONÇALVES, S. F. T. *Estudo de parâmetros do método multigrid geométrico para equações 2D em CFD e volumes finitos*. Tese (Doutorado) — UFPR, Curitiba, PR, 2013. Citado na página 44.
- GRIES, S. *et al.* Preconditioning for efficiently applying algebraic multigrid in fully implicit reservoir simulations. *SPE Journal*, OnePetro, v. 19, n. 04, p. 726–736, 2014. Citado na página 25.
- HELMIG, R. *et al.* *Multiphase flow and transport processes in the subsurface: a contribution to the modeling of hydrosystems*. [S.l.]: Springer-Verlag, 1997. Citado na página 23.
- HORTMANN, M.; PERIĆ, M.; SCHEURER, G. Finite volume multigrid prediction of laminar natural convection: Bench-march solutions. *International Journal for Numerical Methods in Fluids*, Wiley Online Library, v. 11, n. 2, p. 189–207, 1990. Citado na página 26.
- HUGHES, T. J. R. *The Finite Element Method - Linear Static and Dynamics Finite Element Analysis*. Boca Raton (USA): CRC Press, 2000. Citado na página 20.
- ILLIANO, D. *Iterative schemes for solving coupled, non-linear flow and transport in porous media*. Dissertação (Mestrado) — Universitetet i Bergen (UiB), 2016. Citado 5 vezes nas páginas 51, 52, 60, 61 e 67.
- ILLIANO, D.; POP, I. S.; RADU, F. A. Iterative schemes for surfactant transport in porous media. *Computational Geosciences*, Springer, p. 1–18, 2020. Citado 5 vezes nas páginas 20, 24, 55, 64 e 67.
- KARKI, K. C.; SATHYAMURTHY, P. S.; PATANKAR, S. V. Performance of a multigrid method with an improved discretization scheme for three-dimensional fluid flow calculations. *Numerical Heat Transfer*, Taylor & Francis, v. 29, n. 3, p. 275–288, 1996. Citado na página 26.

- KARPINSKI, S.; POP, I. S.; RADU, F. A. Analysis of a linearization scheme for an interior penalty discontinuous galerkin method for two-phase flow in porous media with dynamic capillarity effects. *International Journal for Numerical Methods in Engineering*, Wiley Online Library, v. 112, n. 6, p. 553–577, 2017. Citado 3 vezes nas páginas 20, 24 e 55.
- KAVIANY, M. *Principles of heat transfer in porous media*. [S.l.]: Springer Science & Business Media, 2012. Citado na página 31.
- KELKAR, K. M. Iterative method for the numerical prediction of heat transfer in problems involving large differences in thermal conductivities. *Numerical Heat Transfer, Part B Fundamentals*, Taylor & Francis, v. 18, n. 1, p. 113–128, 1990. Citado na página 26.
- KNABNER, P.; ANGERMANN, L. Numerical methods for elliptic and parabolic partial differential equations. Springer, 2003. Citado na página 24.
- KNAPPETT, J.; CRAIG, R. F. *Craig's soil mechanics*. [S.l.]: CRC press, 2019. Citado na página 84.
- KOU, J.; SUN, S. On iterative impes formulation for two phase flow with capillarity in heterogeneous porous media. *International Journal of Numerical Analysis and Modeling. Series B*, v. 1, n. 1, p. 20–40, 2010. Citado na página 23.
- KREYSZIG, E. *Advanced engineering mathematics, 10th Eddition edn*. [S.l.]: Wiley (Reprint), 2009. Citado na página 56.
- KUEPER, B. H.; FRIND, E. O. Two-phase flow in heterogeneous porous media: 1. model development. *Water resources research*, Wiley Online Library, v. 27, n. 6, p. 1049–1057, 1991. Citado na página 24.
- KUMAR, P. *et al.* A parametric acceleration of multilevel monte carlo convergence for nonlinear variably saturated flow. *Computational Geosciences*, Springer, v. 24, n. 1, p. 311–331, 2020. Citado na página 27.
- KVASHCHUK, A. *A robust implicit scheme for two-phase flow in porous media*. Dissertação (Mestrado) — The University of Bergen, 2015. Citado 11 vezes nas páginas 30, 33, 52, 70, 71, 73, 74, 75, 76, 77 e 78.
- KVASHCHUK, A.; RADU, F. A. A fully-implicit, iterative scheme for the simulation of two-phase flow in porous media. In: SPRINGER. *European Conference on Numerical Mathematics and Advanced Applications*. [S.l.], 2017. p. 625–633. Citado 2 vezes nas páginas 23 e 30.
- LACROIX, S. *et al.* Iterative solution methods for modeling multiphase flow in porous media fully implicitly. *SIAM Journal on Scientific Computing*, SIAM, v. 25, n. 3, p. 905–926, 2003. Citado na página 24.
- LACROIX, S.; VASSILEVSKI, Y. V.; WHEELER, M. F. Decoupling preconditioners in the implicit parallel accurate reservoir simulator (ipars). *Numerical Linear Algebra with Applications*, Wiley Online Library, v. 8, n. 8, p. 537–549, 2001. Citado na página 25.
- LI, K.; HORNE, R. N. Comparison of methods to calculate relative permeability from capillary pressure in consolidated water-wet porous media. *Water resources research*, Wiley Online Library, v. 42, n. 6, 2006. Citado na página 23.

- LIU, H.; WANG, K.; CHEN, Z. A family of constrained pressure residual preconditioners for parallel reservoir simulations. *Numerical Linear Algebra with Applications*, v. 23, p. 120 – 146, 2016. Citado na página 25.
- LU, B.; WHEELER, M. F. Iterative coupling reservoir simulation on high performance computers. *Petroleum Science*, v. 6, p. 43–50, 2009. Citado na página 23.
- LUO, P. *et al.* On an uzawa smoother in multigrid for poroelasticity equations. *Numerical Linear Algebra with Applications*, Wiley Online Library, v. 24, n. 1, p. e2074, 2017. Citado na página 26.
- MALISKA, C. R. *Transferência de calor e mecânica dos fluidos computacional*. 2.ed.. ed. Rio de Janeiro: Livros Técnicos e Científicos, 2004. Citado 4 vezes nas páginas 20, 37, 43 e 44.
- MARCHI, C. H. *Verificação de soluções numéricas unidimensionais em dinâmica dos fluidos*. Tese (Doutorado) — UFSC, Florianópolis, SC, 2001. Citado na página 61.
- MOLENAAR, J. *Multigrid methods for fully implicit oil reservoir simulation*. [S.l.]: Citeseer, 1995. Citado na página 27.
- NARDEAN, S.; FERRONATO, M.; ABUSHAIKHA, A. S. A block preconditioner for two-phase flow in porous media by mixed hybrid finite elements. *Computational and Mathematical Methods*, Wiley Online Library, v. 3, n. 6, p. e1207, 2021. Citado na página 25.
- NARDEAN, S.; FERRONATO, M.; ABUSHAIKHA, A. S. A novel block non-symmetric preconditioner for mixed-hybrid finite-element-based darcy flow simulations. *Journal of Computational Physics*, Elsevier, v. 442, p. 110513, 2021. Citado na página 25.
- NORDBOTTEN, J. M.; CELIA, M. A. *Geological storage of CO₂: modeling approaches for large-scale simulation*. [S.l.]: John Wiley & Sons, 2011. Citado 2 vezes nas páginas 28 e 32.
- OLIVEIRA, M. L. *et al.* On the robustness of the xy-zebra-gauss-seidel smoother on an anisotropic diffusion problem. *Computer Modeling in Engineering & Sciences*, Tech Science Press, v. 117, n. 2, p. 251–270, 2018. Citado na página 26.
- OLIVEIRA, M. L. *et al.* L-scheme and modified picard with multigrid method for a 1d two-phase problem in rigid porous media with analytical solution. In: *XLI Iberian Latin-American Congress on Computational methods in Engineering CILAMCE*. [S.l.: s.n.], 2020. Citado 5 vezes nas páginas 25, 64, 69, 70 e 73.
- OOSTERLEE, C. W.; SCHULLER, A.; TROTTENBERG, U. *Multigrid*. [S.l.]: Academic, 2001. Citado na página 26.
- PATANKAR, S. *Numerical heat transfer and fluid flow*. [S.l.]: Taylor & Francis, 2018. Citado 4 vezes nas páginas 21, 41, 42 e 44.
- PEACEMAN, D. W. *Fundamentals of numerical reservoir simulation*. [S.l.]: Elsevier, 2000. Citado na página 23.

- POP, I. S.; RADU, F.; KNABNER, P. Mixed finite elements for the richards' equation: linearization procedure. *Journal of computational and applied mathematics*, Elsevier, v. 168, n. 1-2, p. 365–373, 2004. Citado 3 vezes nas páginas 20, 24 e 55.
- RADU, F. A. *et al.* A robust, mass conservative scheme for two-phase flow in porous media including hölder continuous nonlinearities. *IMA Journal of Numerical Analysis*, Oxford University Press, v. 38, n. 2, p. 884–920, 2018. Citado na página 67.
- RADU, F. A. *et al.* A robust linearization scheme for finite volume based discretizations for simulation of two-phase flow in porous media. *Journal of Computational and Applied Mathematics*, Elsevier, v. 289, p. 134–141, 2015. Citado na página 24.
- RICHARD, L. A. Capillary conduction of liquids through porous mediums. *Physics*, v. 1, n. 5, p. 318–333, 1931. Citado na página 23.
- RUTZ, G. V.; PINTO, M. A. V.; GONÇALVES, S. F. T. On the robustness of the multigrid method combining ilu and partial weight applied in an orthotropic diffusion problem. *Revista Internacional de Métodos Numéricos para Cálculo y Diseño en Ingeniería*, v. 35, n. 1, 2019. Citado na página 26.
- SABATINI, M. H. *et al.* Solving one-dimensional two-phase flow problems in rigid porous media using l-scheme. In: *XLI Iberian Latin-American Congress on Computational methods in Engineering CILAMCE*. [S.l.: s.n.], 2020. Citado na página 67.
- SATHYAMURTHY, P. S.; PATANKAR, S. V. Block-correction-based multigrid method for fluid flow problems. *Numerical Heat Transfer, Part B Fundamentals*, Taylor & Francis, v. 25, n. 4, p. 375–394, 1994. Citado na página 26.
- SCHEICHL, R.; MASSON, R.; WENDEBOURG, J. Decoupling and block preconditioning for sedimentary basin simulations. *Computational Geosciences*, Springer, v. 7, p. 295–318, 2003. Citado na página 25.
- SCOTT, T. Multi-grid methods for oil reservoir simulation in two and three dimensions. *Journal of Computational Physics*, Elsevier, v. 59, n. 2, p. 290–307, 1985. Citado na página 27.
- SINGH, G.; PENICHEVA, G.; WHEELER, M. F. An approximate jacobian nonlinear solver for multiphase flow and transport. *Journal of Computational Physics*, Elsevier, v. 375, p. 337–351, 2018. Citado na página 25.
- STÜBEN, K. *et al.* Algebraic multigrid methods (amg) for the efficient solution of fully implicit formulations in reservoir simulation. In: ONEPETRO. *SPE Reservoir Simulation Symposium*. [S.l.], 2007. Citado na página 25.
- TANNEHILL, J. C.; ANDERSON, D. A.; PLETCHER, R. H. *Computational Fluid Mechanics and Heat Transfer*. Philadelphia: Florence: Taylor e Francis, 1997. Citado na página 26.
- TROTTEMBERG, U.; OOSTERLEE, C. W.; SCHÜLLER, A. Multigrid academic press. *New York*, 2001. Citado 9 vezes nas páginas 21, 26, 45, 46, 47, 48, 61, 64 e 84.
- VERSTEEG, H. K.; MALALASEKERA, W. *An introduction to Computational Fluid Dynamics The Finite Volume Method*. London: Pearson Longman, 2007. Citado 2 vezes nas páginas 20 e 62.

- WALLIS, J. R. Incomplete gaussian elimination as a preconditioning for generalized conjugate gradient acceleration. In: ONEPETRO. *SPE Reservoir Simulation Symposium*. [S.l.], 1983. Citado na página 25.
- WALLIS, J. R.; KENDALL, R. P.; LITTLE, T. Constrained residual acceleration of conjugate residual methods. In: ONEPETRO. *SPE Reservoir Simulation Symposium*. [S.l.], 1985. Citado na página 25.
- WANG, L. *et al.* Multigrid reduction for coupled flow problems with application to reservoir simulation. In: ONEPETRO. *SPE Reservoir Simulation Conference*. [S.l.], 2017. Citado na página 25.
- WESSELING, P. multigrid method. *Reports of the Department of Mathematics and Informatics no.*, v. 82, p. 05, 2004. Citado 2 vezes nas páginas 21 e 26.
- WIENANDS, R. *et al.* An efficient multigrid solver based on distributive smoothing for poroelasticity equations. *Computing*, Springer, v. 73, n. 2, p. 99–119, 2004. Citado na página 26.
- YANG, H. *et al.* A scalable fully implicit framework for reservoir simulation on parallel computers. *Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering*, Elsevier, v. 330, p. 334–350, 2018. Citado na página 25.
- YU, C. *et al.* *Data collection handbook to support modeling the impacts of radioactive material in soil*. [S.l.], 1993. Citado na página 31.
- ZHOU, Y.; JIANG, Y.; TCHELEPI, H. A scalable multistage linear solver for reservoir models with multisegment wells. *Computational Geosciences*, Springer, v. 17, n. 2, p. 197–216, 2013. Citado na página 25.

APÊNDICE A – ARTIGO DO CILAMCE

L-scheme and modified Picard with multigrid method for a 1D two-phase problem in rigid porous media with analytical solution

M. L. Oliveira¹, M. A. V. Pinto², C. Rodrigo³, F. J. Gaspar³, S. R. Franco⁴

¹Graduate Program in Numerical Methods in Engineering, Federal University of Paraná
Curitiba - PR, Brazil

michely-lais@hotmail.com

²Department of Mechanical Engineering, Federal University of Paraná
Curitiba - PR, Brazil

marcio_villela@ufpr.br

³Department of Applied Mathematics, University of Zaragoza
Zaragoza, Spain

fjgaspar@unizar.es, carmenr@unizar.es

⁴Department of Mathematics, State University of Centro-Oeste
Iratí - PR, Brazil

romero@unicentro.br

Abstract. Applications of two-phase problems in porous media are common in Geomechanics, Hydrogeology, Engineering and Biomedicine. There are different formulations when working on two-phase problems, in this work we have chosen to use the pressure-pressure formulation. The equations system generated is a strongly non-linear system of coupled partial differential equations. Thus, the modified Picard and L-scheme to perform its linearization, the Finite Volume Method for the discretization of the equation in space and implicit Euler scheme for the discretization of the equation in time were used. The systems of linear equations generated were solved by the lexicographic Gauss-Seidel solver in a coupled way. In this work, we proposed to use multigrid method with the Correction Scheme and W-cycle, in order to accelerate the convergence of this solver. Based on the tests performed using an example with a known analytical solution, it was possible to notice the convergence to the solution with a few iterations and little computational time.

Keywords: Two-phase flow, Linearization methods, Coupled problem, Finite Volume Method, Implicit Euler.

1 Introduction

Problems with the two-phase flow in porous media are found in Engineering, Geomechanics, Hydrogeology and Biomedicine applications. For the study of these problems, different mathematical models are generated to represent them, depending on the pressure, saturation and relative permeability, being subsequently solved by numerical simulations. Independent of how these models are formulated, coupled differential equations and highly non-linear systems are generated. Therefore, the challenge is to find robust and efficient methods for the numerical solution.

Many articles are found in the literature involving two-phase flow in porous media, using different methods and approaches to variables. A numerical algorithm, based in modified Picard linearization is proposed by Celia and Binning [1] for simulation of these problems, considering unsaturated soils and pressure-pressure formulation. Kvashchuk and Radu [2] presented a new implicit scheme based in IMPES (Implicit Pressure Explicit Saturation), that obtained a superior performance in relation to the standard IMPES.

Considering the two-phase flow in porous media with dynamic capillarity effects, Karpinski et al. [3] proposed a linearization scheme, called L-scheme, that does not require regularization step, besides not using derivative calculations like the Picard and Newton method. Proved that the scheme is robust and linearly convergent. That procedure linearization was also presented by Pop et al. [4] to solve non-linear elliptical problems.

Illiano et al. [5] applied three techniques, Newton, modified Picard and L-scheme methods, for linearization of the surfactant transport in porous media. They concluded that monolithic Newton is the only method with

quadratic convergence, modified Picard and Newton generated ill-conditioned matrices and that solvers based on L-scheme were the most robust because produce well-conditioned linear systems.

Because this problem is strongly non-linear, some works consisted of manipulating the expressions that interfere in this fact. Li and Horne [6] compared some methods, for example, Purcell and Brooks-Corey methods, to calculate the relative permeability of the capillary pressure in a consolidated wetting porous media. Being that, permeability can be satisfactory if a suitable model is chosen for the problem under study.

Most of the literature found has the main focus on the analysis of different linearization methods. But, thinking about the solver convergence, Franco et al. [7] used a new approach with the use of space-time multigrid method for solving poroelasticity equations, obtaining excellent results.

Therefore, in this work, we study a problem involving the flow of two incompressible and immiscible fluids in rigid porous media. Using pressure-pressure formulation modeling, where the variables of interest are the pressures of each both phases, thus, relative permeability and saturation were calculated by numerical expressions that depend on the pressures. Discretizations in time and space were carried out by the Implicit Euler and Finite Volumes Methods (FVM) (Ferziger et al. [8]), respectively. As we have a non-linear system, so we have chosen to apply and compare two methods of linearization, modified Picard (Celia and Binning [1]) and L-scheme (Karpinski et al. [3], Pop et al. [4]), and later to solve the linear system, used iterative method, coupled Gauss-Seidel (Gaspar et al. [9]). To accelerate the convergence of solver, we proposed to use multigrid method (MG) (Briggs et al. [10]).

The rest of the paper is organized as follows. In Section 2, the one-dimensional porous media equations are introduced together with their linearization and discretization techniques in time and space. Solver and multigrid method for the equation of porous media is detailed in Section 3. The code verification and results are demonstrated in Section 4. Finally, conclusions are drawn in Section 5.

2 Mathematical Model and Discretization

In this section, we present the mathematical model and its discretization, for the two-phase flow in a rigid porous medium.

2.1 Government equations

The fluids considered were immiscible and incompressible with the flow in a rigid porous medium. For each α phase of the fluid, the mass equation can be written as:

$$\frac{\partial (\rho_\alpha \theta_\alpha)}{\partial t} + \nabla \cdot (\rho_\alpha \vec{q}_\alpha) = F_\alpha, \quad \text{in } \Omega \times [0, T]. \quad (1)$$

where $\alpha = w, n$ represents the fluid phases (w wetting, n non-wetting), $\theta_\alpha = \phi S_\alpha$, ϕ is the porosity, S_α is the saturation, ρ_α is the density, \vec{q}_α is the volumetric flux vector and F_α is the source term of phase α . The domain is $\Omega \subset \mathbb{R}^+$ and T is the final time. The volumetric flow is given by the generalized Darcy's Law for the multiphase case

$$\vec{q}_\alpha = -\lambda_\alpha \mathbf{K} (\nabla p_\alpha - \rho_\alpha \vec{g}), \quad (2)$$

where λ_α is the mobility, $\lambda_\alpha = k_{r\alpha}/\mu_\alpha$, $k_{r\alpha} = k_{r\alpha}(S_\alpha)$ is the relative permeability, μ_α is the viscosity, \mathbf{K} is the intrinsic permeability tensor (see Bastian [11]), p_α is the pressure, \vec{g} is the gravitational acceleration vector.

Substitution of eq.(2) into eq.(1), and consider incompressible case and null gravitational acceleration vector, the equation can be simplified:

$$\frac{\partial \theta_\alpha}{\partial t} - \lambda_\alpha \nabla \cdot (\mathbf{K} \nabla p_\alpha) = \frac{F_\alpha}{\rho_\alpha}. \quad (3)$$

In addition to these differential equations, we have the auxiliary relations (Bastian and Helmig [12]): capillary pressure $p_c = p_n - p_w$ and saturation $S_w + S_n = 1$, so, $\theta_w + \theta_n = \phi$.

2.2 Discretization

We begin with a implicit Euler time discretization, use the modified Picard linearization (Celia and Binning [1]) to linearize the equations and consider pressure-pressure formulation (Ataie-Ashtiani and Raeesi-Ardekani

[13]). It lets superscripts n and m denote time level and iteration number, respectively. The distance between points of temporal approximation is $\tau = \frac{T}{N_t}$, where, T is final time and N_t is points number in temporal discretization. Then discretizing the eq. 3 for wetting and non-wetting phases, we get eqs. (4, 5), respectively,

$$C_w^{n+1,m} \frac{\delta p_n^{n+1,m+1} - \delta p_w^{n+1,m+1}}{\tau} - \frac{\partial}{\partial x} [K_w^{n+1,m} \frac{\partial}{\partial x} (\delta p_w^{n+1,m+1})] = \frac{\partial}{\partial x} [K_w^{n+1,m} \frac{\partial}{\partial x} (p_w^{n+1,m})] + F_w^{n+1} - \frac{\theta_w^{n+1,m} - \theta_w^n}{\tau}, \quad (4)$$

$$-C_w^{n+1,m} \frac{\delta p_n^{n+1,m+1} - \delta p_w^{n+1,m+1}}{\tau} - \frac{\partial}{\partial x} [K_n^{n+1,m} \frac{\partial}{\partial x} (\delta p_n^{n+1,m+1})] = \frac{\partial}{\partial x} [K_n^{n+1,m} \frac{\partial}{\partial x} (p_n^{n+1,m})] + F_n^{n+1} - \frac{\theta_n^{n+1,m} - \theta_n^n}{\tau}, \quad (5)$$

where $K_\alpha^{n+1,m} = \mathbf{K}\lambda_\alpha$, $\delta p_\alpha^{n+1,m+1} = p_\alpha^{n+1,m+1} - p_\alpha^{n+1,m}$ and $C_w = \frac{\partial \theta_w}{\partial p_c} = -\frac{\partial \theta_n}{\partial p_c}$. But, for L-scheme using L_s , large enough, in place of C_w , that is $L_s \geq |C_w|$ (Illiano et al. [5]).

Subsequently, space discretization was done using the FVM. For that, our domain will be a segment of length L and considering uniform mesh, $D_h = \{(x_i); x_i = (i - 1/2)h, i = 1, \dots, N_x\}$, with N_x volume number in space and $h = \frac{L}{N_x}$ distance between volumes of the space approximation, given in Fig. 1.

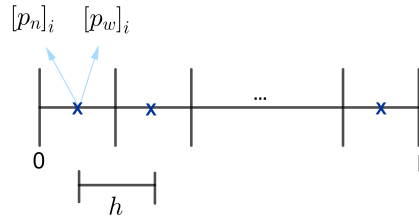


Figure 1. Space discretization

Thus, the system that we should result in each time step is described in eq. (6).

$$\begin{bmatrix} A_w & B \\ B & A_n \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \delta p_w \\ \delta p_n \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} f_w \\ f_n \end{bmatrix}, \quad (6)$$

being that,

$$A_\alpha = \begin{bmatrix} bc & 0 & & & \\ [a_\alpha]_{i-1} & [a_\alpha]_i & [a_\alpha]_{i+1} & 0 & \\ 0 & [a_\alpha]_{i-1} & [a_\alpha]_i & [a_\alpha]_{i+1} & 0 \\ & \ddots & \ddots & \ddots & \ddots \\ & & 0 & [a_\alpha]_{i-1} & [a_\alpha]_i & [a_\alpha]_{i+1} \\ & & & 0 & bc \end{bmatrix}, B = \begin{bmatrix} bc & 0 & & & \\ 0 & c_i & 0 & & \\ & 0 & c_i & 0 & \\ & & \ddots & \ddots & \ddots \\ & & & 0 & c_i & 0 \\ & & & & 0 & bc \end{bmatrix},$$

where, bc are boundary conditions and:

$$\begin{aligned} [a_\alpha]_i &= -[C_w^{n+1,m}]_i + \frac{\tau}{h^2} \left([K_\alpha^{n+1,m}]_{i+\frac{1}{2}} + [K_\alpha^{n+1,m}]_{i-\frac{1}{2}} \right), \\ [a_\alpha]_{i+1} &= -\frac{\tau}{h^2} [K_\alpha^{n+1,m}]_{i+\frac{1}{2}}, \\ [a_\alpha]_{i-1} &= -\frac{\tau}{h^2} [K_\alpha^{n+1,m}]_{i-\frac{1}{2}}, \\ c_i &= [C_w^{n+1,m}]_i \\ [f_\alpha]_i &= \frac{\tau}{h^2} [K_\alpha^{n+1,m}]_{i+\frac{1}{2}} [p_\alpha^{n+1,m}]_{i+1} - \frac{\tau}{h^2} \left([K_\alpha^{n+1,m}]_{i+\frac{1}{2}} + [K_\alpha^{n+1,m}]_{i-\frac{1}{2}} \right) [p_\alpha^{n+1,m}]_i + \\ &\quad \frac{\tau}{h^2} [K_\alpha^{n+1,m}]_{i-\frac{1}{2}} [p_\alpha^{n+1,m}]_{i-1} + \tau F_\alpha - [\theta_\alpha^{n+1,m}]_i + [\theta_\alpha^n]_i, \end{aligned}$$

where $[K_\alpha^{n+1,m}]_{i-\frac{1}{2}}$ and $[K_\alpha^{n+1,m}]_{i+\frac{1}{2}}$ denote the interblock conductivities of each phase, calculated by arithmetic mean.

3 Solver and Multigrid Method

To solve the system of linear equations that appear in each linearization step, there are direct and iterative methods. Direct methods are not efficient in cases where matrices are large and sparse (Burden et al. [14]). In this article, we use the coupled Gauss-Seidel method.

However, these methods present high-frequency error smoothing properties (oscillatory components), while low-frequency errors are virtually unchanged. Therefore, in the first iterations, the error is reduced quickly and later very slowly, with a predominance of smooth modes (Briggs et al. [10], Trottenberg et al. [15], Oliveira et al. [16]). So the MG technique is based on solving the problem in several grids, because after the smoothing the oscillatory modes in a refined grid, these modes are transferred for a coarse-grid, where they become more oscillatory and the convergence of the iterative method is efficient. That procedure can be repeated up to coarsest or desired grid. For the transfer process between grids, restriction and prolongation operators are required with their respective pre- (ν_1) and post-smoothing (ν_2) numbers.

There are several ways to go through the various involved grids, which we call a cycle. In this work, we solve the eq. 6 with the MG method, using the W-cycle and null initial estimative. The ratio between the size of the volumes of the fine grid (Ω^h) and the immediately coarse-grid Ω^H is defined as the grid coarsening ratio (r). In this work, we use $r = 2$ (standard coarsening) (Wesseling [17]). For the stop criterion we use $\|R^m\|_\infty / \|R^0\|_\infty \leq TOL_{MG}$, where R^m is the residual in the iteration m , R^0 is the residual in the initial guess and TOL_{MG} is the tolerance for the W-cycle.

4 Results

In this work we use the analytical solution of the problem proposed by Illiano [18] (section 5.1, p.37). In that work, Illiano [18] considers the pressure-saturation formulation of the \bar{p} - S_w , where $\bar{p} = \frac{p_w + p_n}{2}$. In this case, we have the analytical solution $f(x, t) = \bar{p}(x, t) = S_w(x, t) = xt(1 - x)$, whose spatial x temporal domain is $D = [0, L] \times [0, T]$, $L = T = 1$, with initial and boundary conditions $f(x, 0) = f(0, t) = f(1, t) = 0$. As we have opted for pressure-pressure formulation of the form p_w - p_n , we have to make some adaptations to use p_w and p_n instead of \bar{p} . For this, using the capillary pressure equation ($p_c = p_n - p_w$) and \bar{p} , we have obtained that $p_w = \bar{p} - \frac{p_c}{2}$ and $p_n = \bar{p} + \frac{p_c}{2}$, where $p_c(S_w) = 1 - \frac{1}{2}S_w^2$. Additionally, we use $\theta_\alpha = \phi S_\alpha$, thus $\theta_w = \phi\sqrt{2 - 2p_c}$ and $\theta_n = \phi - \theta_w$. As a consequence, we have: $C_w = \frac{\partial \theta_w}{\partial p_c} = -\frac{\phi}{\sqrt{2 - 2p_c}}$, for $p_c \neq 1$.

Using these expresions we have found the source terms:

$$F_w = -\frac{1}{2}\rho_w[2\phi(x-1)x + K\lambda_w t(-4 + t - 6tx + 6tx^2)], \quad (7)$$

$$F_n = \frac{1}{2}\rho_n[2\phi(x-1)x + K\lambda_n t(4 + t - 6tx + 6tx^2)]. \quad (8)$$

According to Illiano [18] data were used to obtain easy calculations, which are presented in test 1 of Table 1. Table 1 we also find data from test 2.

Table 1. Properties

	λ_w	λ_n	K	ϕ	ρ_w	ρ_n
Test 1 (Illiano [18])	1	2	1	1	1	1
Test 2	1	2	1	0.9	1	1

We implemented the algorithms in the Scilab 6.1.0 language on a computer with an Intel Core i7 2.6 GHz processor, 8 GB of RAM, and Windows 10 operating system, with 64 bits.

4.1 Code Verification

In order to verify our code, we reproduce the figure 5.1 of Illiano et al. [5], which presents the numerical and analytical solution obtained for the saturation for the test 1 data of Table 1 for several steps in time. These generated graphs are presented in Fig. 2, where is possible to see that all of our solutions (different grids size and in different time steps) coincide with the Illiano's analytical solutions (Illiano [18]).

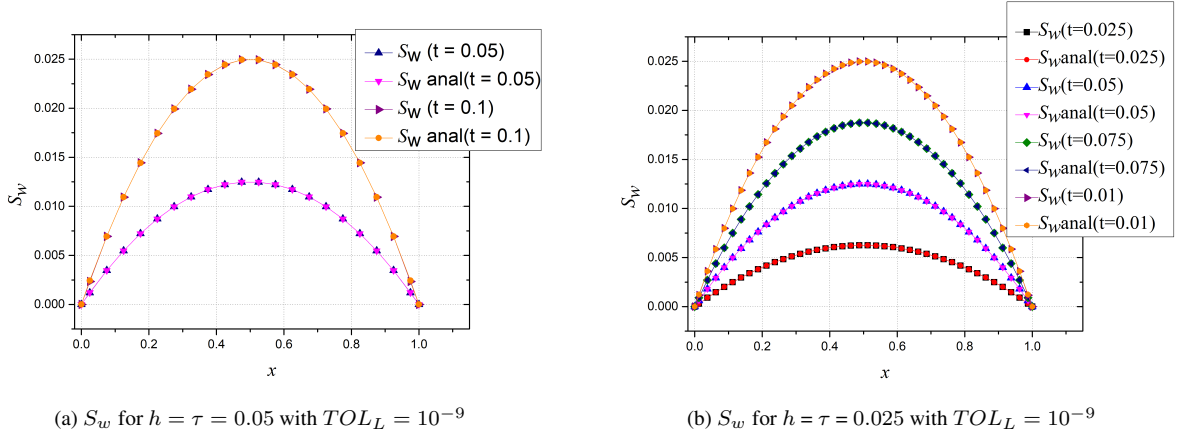


Figure 2. Analytical and numerical saturation obtained in first step time with different meshes: (a) $N_x = N_t = 20$ and (b) $N_x = N_t = 40$

In order to analyze the MG implementation we made a comparison with Singlegrid (SG) (single grid method). For the SG and MG, we used the coupled Gauss-Seidel solver. Besides, for MG we used the following transfer operators between grids: restriction by full weighting and prolongation by linear interpolation (Trottenberg et al. [15], Rutz et al. [19]). In this work, we have used the maximum number of levels and data from the Table 2, being that, ν_1 and ν_2 is the pre- and post-smoothing number, respectively, ν_0 the number of smoothing in the coarsest grid, TOL_{MG} , the tolerance for the W-cycle and TOL_L tolerance for the linearization.

Table 2. Implementation data

ν_1	ν_2	ν_0	TOL_{MG}	TOL_L
5	5	5	$10E-5$	$10E-8$

In Table 3 we presented the required total CPU time (t_{CPU}) (which takes into account all the time steps and their respective necessary linearizations) for each method and the speedup ($S = \frac{t_{CPU-SG}}{t_{CPU-MG}}$, that is, S represents how many times the MG is faster than the SG). Here, we opted only for spatial refining, which is already sufficient to verify the desirable properties of MG concerning SG. Note that $S > 1$ in all cases, that is, MG is always faster than SG. Even more, as we refine the grid, S gets bigger and MG gets more efficient.

Table 3. CPU time for MG and SG

N_t	N_x	$t_{CPU} - SG$	$t_{CPU} - MG$	S
16	16	24.860	3.630	6.848
16	32	175.394	10.013	17.516
16	64	1310.780	27.618	47.460
16	128	9892.466	62.690	157.799

We performed a geometrical adjustment of the type $t_{CPU} = c(N_x)^p$ to analyze the performace of MG, where c is a constant relative to the method and p represents the order of the algorithm. Considering the first time step and the first linearization in different loops, $N_x = 4, 8, 16, 32, 64, 128, 256, 512$ and 1024 , we obtained $c = 0.0127$ and $p = 1.1103 \approx 1$, according to the literature (Trottenberg et al. [15]).

4.2 Results in a specific porous medium

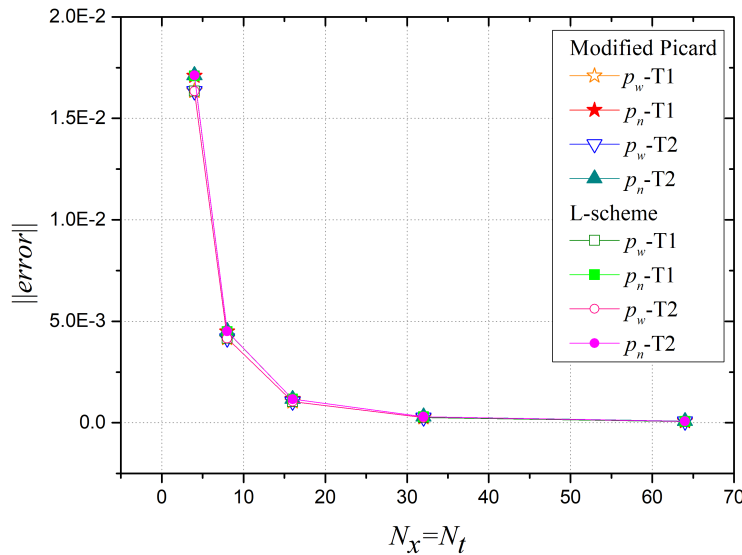
In order to obtain the following results, we performed several simulations, comparing the linearization methods, modified Picard and L-scheme, with $L_s(t) = \max(|C_w|)$. The data used were those in the Table 1, others data in the Table 2 and maximum number of linearization iterations, $itmax_L = 500$.

Table 4 shows $itme_L$, arithmetic mean linearization iterations and $itme_{MG}$, arithmetic mean of MG cycles. Thus, we can see that the number of iterations in MG is always a small number, concerning linearization methods. We also realized that for this specific problem, modified Picard needs fewer iterations than the L-scheme, becoming the most efficient.

Table 4. Modified Picard and L-scheme with Multigrid

$N_x = N_t$	Modified Picard				L-scheme			
	Test 1		Test 2		Test 1		Test 2	
	$itme_L$	it_{MG}	$itme_L$	it_{MG}	$itme_L$	it_{MG}	$itme_L$	it_{MG}
4	5.25	1.50	5.25	1.50	16.25	1.12	16.00	1.13
8	4.63	2.50	4.63	2.50	34.13	1.12	33.75	1.12
16	4.31	2.50	4.31	2.50	65.19	1.06	64.69	1.06
32	3.75	2.67	3.72	2.67	117.66	1.03	117.00	1.03
64	3.22	2.67	3.22	2.67	228.94	1.02	244.20	1.02

Figure 3 presents the infinity norm of the difference between the analytical and numerical solution of p_α versus $N_x = N_t = 4$ up to 64 for linearization schemes studied, the results obtained show that, regardless of the linearization scheme used, the errors were essentially the same and decrease with the grid refinement.


 Figure 3. Infinity norm of the numerical error vs. $N_x = N_t$ for Tests 1 and 2, with modified Picard and L-scheme

5 Conclusions

In this work, we have analyzed two linearization methods, together with MG, for a two-phase flow problem in a rigid porous media. Initially, we carried out some tests to verify our code, compared the numerical with analytical solutions, then analyzed the speedup of MG in relation to SG, where we obtained good results. With that, we were able to generate some results and to realize the use of the linearization methods, modified Picard and L-scheme, with the MG method, generated good results, because the numbers of iterations necessary for both linearization and MG, were low numbers. The numerical error performed well because as we refined the grid, the error decreased. Therefore, we can conclude that the combination we have used in this article is efficient. Now, among the two linearization methods studied, the modified Picard with MG method was the only which presented the best performance to the problem studied.

Acknowledgements. This study was financed in part by the Coordenação de Aperfeiçoamento de Pessoal de Nível Superior - Brasil (CAPES) - Finance Code 001. The authors also would acknowledge the infrastructure provided by

the Graduate Program in Numerical Methods in Engineering (PPGMNE) of Federal University of Paraná (UFPR) and the University Institute of Mathematics and Applications (IUMA), University of Zaragoza (UNIZAR), Spain.

Authorship statement. The authors hereby confirm that they are the sole liable persons responsible for the authorship of this work, and that all material that has been herein included as part of the present paper is either the property (and authorship) of the authors.

References

- [1] Celia, M. A. & Binning, P., 1992. A mass conservative numerical solution for two-phase flow in porous media with application to unsaturated flow. *Water Resources Research*, vol. 28, n. 10, pp. 2819–2828.
- [2] Kvashchuk, A. & Radu, F. A., 2017. A fully-implicit, iterative scheme for the simulation of two-phase flow in porous media. In *European Conference on Numerical Mathematics and Advanced Applications*, pp. 625–633. Springer.
- [3] Karpinski, S., Pop, I. S., & Radu, F. A., 2017. Analysis of a linearization scheme for an interior penalty discontinuous galerkin method for two-phase flow in porous media with dynamic capillarity effects. *International Journal for Numerical Methods in Engineering*, vol. 112, n. 6, pp. 553–577.
- [4] Pop, I. S., Radu, F., & Knabner, P., 2004. Mixed finite elements for the richards' equation: linearization procedure. *Journal of computational and applied mathematics*, vol. 168, n. 1-2, pp. 365–373.
- [5] Illiano, D., Pop, I. S., & Radu, F. A., 2020. Iterative schemes for surfactant transport in porous media. *Computational Geosciences*, pp. 1–18.
- [6] Li, K. & Horne, R. N., 2006. Comparison of methods to calculate relative permeability from capillary pressure in consolidated water-wet porous media. *Water resources research*, vol. 42, n. 6.
- [7] Franco, S. R., Rodrigo, C., Gaspar, F. J., & Pinto, M. A. V., 2018. A multigrid waveform relaxation method for solving the poroelasticity equations. *Computational and Applied Mathematics*, vol. 37, n. 4, pp. 4805–4820.
- [8] Ferziger, J. H., Perić, M., & Street, R. L., 2002. *Computational methods for fluid dynamics*, volume 3. Springer.
- [9] Gaspar, F. J., Lisbona, F. J., Oosterlee, C. W., & Wienands, R., 2004. A systematic comparison of coupled and distributive smoothing in multigrid for the poroelasticity system. *Numerical linear algebra with applications*, vol. 11, n. 2-3, pp. 93–113.
- [10] Briggs, W. L., Henson, V. E., & McCormick, S. F., 2000. *A multigrid tutorial*. SIAM.
- [11] Bastian, P., 1999. *Numerical computation of multiphase flows in porous media*. PhD thesis, Habilitationsschrift.
- [12] Bastian, P. & Helmig, R., 1999. Efficient fully-coupled solution techniques for two-phase flow in porous media: Parallel multigrid solution and large scale computations. *Advances in Water Resources*, vol. 23, n. 3, pp. 199–216.
- [13] Ataie-Ashtiani, B. & Raeesi-Ardekani, D., 2010. Comparison of numerical formulations for two-phase flow in porous media. *Geotechnical and Geological Engineering*, vol. 28, n. 4, pp. 373–389.
- [14] Burden, R., Faires, J., & Burden, A., 2010. *Numerical analysis: Cengage Learning*. Brooks/Cole.
- [15] Trottenberg, U., Oosterlee, C. W., & Schüller, A., 2001. *Multigrid academic press*. New York.
- [16] Oliveira, M. L., Pinto, M. A. V., Gonçalves, S. F. T., & Rutz, G. V., 2018. On the robustness of the xy-zebra-gauss-seidel smoother on an anisotropic diffusion problem. *Computer Modeling in Engineering & Sciences*, vol. 117, n. 2, pp. 251–270.
- [17] Wesseling, P., 2004. An introduction to multigrid methods. *rt edwards. Inc.*, vol. 2, pp. 2.
- [18] Illiano, D., 2016. Iterative schemes for solving coupled, non-linear flow and transport in porous media. Master's thesis, Universitetet i Bergen (UiB).
- [19] Rutz, G. V., Pinto, M. A. V., & Gonçalves, S. F. T., 2019. On the robustness of the multigrid method combining ilu and partial weight applied in an orthotropic diffusion problem. *Revista Internacional de Métodos Numéricos para Cálculo y Diseño en Ingeniería*, vol. 35, n. 1.