

**Luccas Cassimiro Campos**

Modelagem do escoamento de fluidos em meios  
porosos utilizando a estrutura de dados *Autonomous  
Leaves Graph*

**Belo Horizonte - MG, Brasil  
Dezembro de 2013**

Luccas Cassimiro Campos

Modelagem do escoamento de fluidos em meios  
porosos utilizando a estrutura de dados *Autonomous  
Leaves Graph*

Dissertação apresentada para obtenção do  
Grau de Mestre em Matemática pela  
Universidade Federal de Minas Gerais

Orientador:

Rodney Josué Biezuner

Co-orientadora:

Denise Burgarelli Duczmal

DEPARTAMENTO DE MATEMÁTICA  
INSTITUTO DE CIÊNCIAS EXATAS  
UNIVERSIDADE FEDERAL DE MINAS GERAIS

Belo Horizonte - MG, Brasil  
Dezembro de 2013

Dissertação de Mestrado sob o título “*Modelagem do escoamento de fluidos em meios porosos utilizando a estrutura de dados Autonomous Leaves Graph*”, defendida por Luccas Cassimiro Campos e aprovada em 09/12/2013, em Belo Horizonte, Estado de Minas Gerais, pela banca examinadora constituída pelos professores:

---

Prof. Rodney Josué Biezuner  
Orientador

---

Prof<sup>a</sup>. Denise Burgarelli Duczmal  
Co-orientadora

---

Prof. Ricardo Hiroshi Caldeira Takahashi  
Universidade Federal de Minas Gerais

---

Prof. Eduardo Cardoso de Abreu  
Universidade Estadual de Campinas

# Agradecimentos

Agradeço aos meus pais e à minha família pelo incentivo incondicional aos meus estudos.

Aos meus orientadores, Rodney e Denise, por acreditarem no meu trabalho e me emprestarem sua experiência durante os últimos anos.

Ao CNPq e à CAPES, pela criação do PICME e pela concessão da bolsa durante o período do mestrado.

À Sylvie por levar adiante o projeto do PICME na UFMG e permitir a realização desse trabalho.

Aos professores e funcionários do Departamento de Matemática, por todo o apoio prestado.

Por fim, agradeço à Universidade Federal de Minas Gerais por ter me acolhido como aluno desde o bacharelado.

*“Foi o tempo que perdeste com  
tua rosa que fez tua rosa tão  
importante”*

(Antoine de Saint-Exupéry)

# Resumo

A simulação do escoamento multicomponente de fluidos em meios porosos requer o tratamento de fenômenos localizados, tais como frentes de concentração e gradientes de pressão, assim como a consideração da geometria do meio. O fato de serem localizados nos sugere a utilização de uma malha adaptativa, altamente refinada nas regiões onde é necessária uma melhor resolução, e pouco refinada onde o fluxo de massa é menor. O presente trabalho tem como objetivo a utilização da metodologia conhecida como Autonomous Leaves Graph (ALG) na simulação do escoamento de fluidos em meios porosos. A estrutura ALG tem se mostrado eficiente em problemas que envolvem refinamento adaptativo da malha, permitindo um refinamento local e a coexistência de regiões vizinhas com níveis de refinamento arbitrariamente diferentes. Utilizaremos o método misto-híbrido de elementos finitos para a solução da Equação Diferencial Parcial elíptica dada pela Lei de Darcy, e o método *donor cell upwind scheme* de volumes finitos para avançar no tempo a concentração do *tracer* (marcador) em cada célula. Aplicamos a técnica de refinamento adaptativo à simulação do escoamento monofásico bicomponente em um meio poroso. São discutidos os resultados numéricos obtidos na simulação do escoamento bidimensional.

**Palavras-chave:** Escoamento em meios porosos. Refinamento adaptativo da malha (AMR). *Autonomous Leaves Graphs* (ALG). Método Misto-Híbrido. *Donor cell upwind scheme*.

# Abstract

Multicomponent flow through porous media simulation involves the treatment of localized phenomena, such as concentration fronts, pressure gradients or geometry of the media. This suggests the use of an adaptive mesh, that is highly refined in the regions on which a better resolution is needed and less refined where the mass flow is small. The present work intends to use the methodology known as Autonomous Leaves Graph (ALG) to simulate fluid flow through porous media. The ALG structure have been showing being efficient on problems that involve adaptive mesh refinement, allowing local refining and the coexistence of neighbor regions with arbitrarily different refinement levels. We use a mixed-hybrid finite element method to solve the elliptic Partial Differential Equation given by Darcy's Law, and the *donor cell upwind scheme* finite volume method to update tracer concentrations within each cell. The adaptive refinement technique is applied to monofasic bicomponent flow through a porous medium and numerical results of the bidimensional flow simulation are discussed.

**Keywords:** Flow through porous media. Adaptive mesh refinement (AMR). *Autonomous Leaves Graphs* (ALG). Hybrid mixed method. *Donor cell upwind scheme*.

# Conteúdo

<b>Lista de Figuras</b>	<b>10</b>
<b>Lista de Tabelas</b>	<b>12</b>
<b>Lista de Símbolos</b>	<b>13</b>
<b>Introdução</b>	<b>13</b>
<b>1 Mecânica dos Fluidos</b>	<b>16</b>
1.1 Viscosidade . . . . .	16
1.2 Hipótese do contínuo . . . . .	17
1.3 Meios Porosos . . . . .	17
1.4 Lei de Darcy . . . . .	18
1.5 Equação da Continuidade . . . . .	19
1.6 Fluxo Mássico . . . . .	19
1.7 Conservação do Volume . . . . .	20
<b>2 Métodos Numéricos para a resolução de EDPs</b>	<b>21</b>
2.1 O Método de Galerkin . . . . .	21
2.1.1 Propriedades da aproximação de Galerkin . . . . .	25
2.2 O Método dos Elementos Finitos (FEM) . . . . .	26
2.3 O Método dos Volumes Finitos (FVM) . . . . .	28
2.4 Métodos numéricos para a resolução de Sistemas Lineares . . . . .	28
2.4.1 O Método do Gradiente Conjugado . . . . .	28
2.4.2 O Método do Gradiente Biconjugado Estabilizado . . . . .	32
2.4.3 A fatoração LU incompleta . . . . .	33
<b>3 Discretização da Lei de Darcy</b>	<b>34</b>
3.1 Formulações do problema elíptico . . . . .	35
3.2 A formulação mista . . . . .	36
3.2.1 Existência, unicidade e convergência . . . . .	37
3.3 A formulação mista-híbrida . . . . .	44

3.4	A formulação mista-híbrida e o escoamento em meios porosos . . . . .	47
3.5	Construção do sistema linear . . . . .	48
3.6	Positividade definida do sistema linear . . . . .	49
3.7	Implementação numérica do método híbrido-misto . . . . .	50
<b>4</b>	<b>Discretização das equações convectivo-difusivas</b>	<b>53</b>
4.1	Fluxo convectivo em 1D . . . . .	54
4.2	Fluxo convectivo em 2D . . . . .	56
4.3	Fluxo difusivo . . . . .	59
<b>5</b>	<b>Refinamento Adaptativo da Malha</b>	<b>60</b>
5.1	Malhas Adaptativas . . . . .	60
5.2	A estrutura de dados <i>Autonomous Leaves Graph</i> (ALG) . . . . .	62
5.2.1	A estrutura da malha . . . . .	62
5.3	Refinamento da malha . . . . .	63
5.4	Desrefino da malha . . . . .	65
5.5	Ordenação Total da Malha . . . . .	66
5.6	Refinando e Desrefinando . . . . .	67
<b>6</b>	<b>Implementação e resultados numéricos</b>	<b>70</b>
6.1	Cálculo do campo de pressões e de velocidades . . . . .	70
6.1.1	Exemplo Numérico 1 . . . . .	71
6.1.2	Exemplo Numérico 2 . . . . .	71
6.1.3	Exemplo Numérico 3 . . . . .	74
6.2	Transporte de massa e refinamento adaptativo . . . . .	76
6.2.1	Exemplo Numérico 1 . . . . .	76
6.2.2	Exemplo Numérico 2 . . . . .	78
6.2.3	Exemplo Numérico 3 . . . . .	79
<b>7</b>	<b>Conclusões</b>	<b>81</b>
7.1	Perspectivas . . . . .	81
7.1.1	Permeabilidade Heterogênea . . . . .	81
7.1.2	Poços ( <i>wells</i> ) . . . . .	82
7.1.3	Escoamento Multifásico . . . . .	82
7.1.4	Escoamento Tridimensional . . . . .	83
7.2	Principais Contribuições . . . . .	83

# Lista de Figuras

2.1	Função base. Fonte: GIACCHINI (2012, p. 13) [28]	27
5.1	Malha de 4 células	62
5.2	Definindo os nós de transição	63
5.3	Esquema completo	63
5.4	Esquema não-direcional	64
5.5	Sucessão de refinamentos	64
5.6	Elos de um nó e estrutura básica de refinamento	64
5.7	Refinando a célula noroeste	65
5.8	Mais um nível de refinamento	65
5.9	Sequência de desrefinamento	66
5.10	Exemplo de ordenação pela Curva de Hilbert Modificada	67
6.1	Campo de pressões em diferentes níveis de refinamento	72
6.2	Campo de pressões em diferentes níveis de refinamento	73
6.3	Pressão versus posição $x$	74

6.4	Presença de células impermeáveis . . . . .	75
6.5	Campo de concentrações em diferentes intervalos de tempo . . . . .	77
6.6	Campo de concentrações em diferentes intervalos de tempo . . . . .	78
6.7	Campo de concentrações em diferentes intervalos de tempo . . . . .	80

# Lista de Tabelas

6.1	Tempo gasto para atualizar as concentrações . . . . .	76
6.2	Tempo gasto para atualizar as concentrações . . . . .	79

# Lista de Símbolos

## Principais caracteres romanos

- $p$  pressão em atm =  $1.01325 \times 10^5$  Pa  
 $\mathbf{K}$  tensor permeabilidade, com cada entrada em milidarcy (mD) =  $9.869 \times 10^{-16} \text{m}^2$   
 $\mathbf{v}$  velocidade de Darcy, dada por  $\mathbf{v} = \phi \mathbf{u}$ , em que  $\mathbf{u}$  é a velocidade do fluido  
 $c$  fração volumétrica, em geral, do *tracer*  
 $D$  parte do domínio na qual a pressão é especificada  
 $N$  parte do domínio na qual a velocidade é especificada

## Principais caracteres gregos

- $\rho$  densidade em  $\text{g cm}^{-3}$   
 $\mu$  viscosidade em cP =  $1 \times 10^{-2} \text{g cm}^{-1} \text{s}^{-1}$   
 $\phi$  porosidade do meio (razão entre o volume dos poros e o volume total)  
 $\Omega$  domínio computacional do problema  
 $\Omega_{ij}$  célula da malha, em que  $i$  representa sua posição  $x$  e  $j$  sua posição  $y$

# Introdução

O processo de escoamento em meios porosos é de interesse de uma grande variedade de engenheiros e cientistas, bem como de políticos e economistas que reconhecem a importância dos lençóis freáticos e de uma variedade de processos de extração de petróleo. A lei unidimensional descoberta empiricamente em 1856 por Darcy serviu como ponto de partida para numerosas aplicações práticas e como um desafio constante para os teóricos. Enquanto as condições originais estudadas por Darcy são encontradas em várias situações práticas, suas extensões para casos mais gerais necessitam de uma análise teórica especial, por se tratarem de situações nas quais experimentos são difíceis de se realizar [55].

Além disso, o escoamento multicomponente em meios porosos envolve fenômenos localizados, tais como frentes de concentração, gradientes de pressão e mesmo a geometria do meio. Já as frentes de concentração podem se dispersar por meio de transporte convectivo ou difusão na matriz sólida. Em [52], vemos uma abordagem que utiliza o refinamento adaptativo da malha (AMR) para estudar o escoamento em meios porosos em um meio de permeabilidade (possivelmente) heterogênea, levando em conta os efeitos convectivos e difusivos existentes. Nesse artigo, métodos de alta resolução para as frentes de concentração são utilizados, de forma a tratar os fenômenos localizados, com grande ênfase nas técnicas de álgebra linear utilizadas.

Utilizando ideias de [52], temos como objetivo neste trabalho a utilização da estrutura de dados *Autonomous Leaves Graphs (ALG)* na simulação do escoamento de fluidos em meios porosos. Essa estrutura foi proposta em [11], e pode ser utilizada em problemas que envolvem refinamento adaptativo da malha. Devido à eficiência e à flexibilidade do ALG no tocante ao refinamento e desrefinamento, o resultado esperado é uma melhora significativa no esforço computacional para o cálculo da convecção.

A fim de estabelecer o *background* teórico, lembraremos no Capítulo 1 alguns conceitos fundamentais da mecânica dos fluidos, como a viscosidade de um fluido e a permeabilidade de um meio, e introduziremos as equações que regem o escoamento em meios porosos (Lei

de Darcy e Equação da Continuidade).

O Capítulo 2 é voltado para os conceitos de métodos numéricos, especialmente os Métodos dos Elementos Finitos e dos Volumes Finitos, bem como a parte de álgebra linear esparsa, que serão necessários para as simulações.

Reservamos o Capítulo 3 para a apresentação e discussão das formulações mista e híbrida-mista do sistema elíptico que surge da Lei de Darcy e da Equação da Continuidade, incluindo teoremas de existência, unicidade e aproximação.

A discretização da Equação da Continuidade para o transporte de massa convectivo será vista no Capítulo 4. Lá, apresentamos a forma discreta dos fluxos difusivo e convectivo, levando também em conta a estabilidade do esquema.

O Capítulo 5 apresenta a estrutura de dados *Autonomous Leaves Graph (ALG)*, como proposto em [11]. Descrevemos como se dá o refinamento e o desrefinamento, bem como a ordenação das células da malha.

Os resultados dos testes numéricos são apresentados no Capítulo 6, e a conclusão se dá no Capítulo 7, juntamente com as perspectivas futuras para o trabalho.

# Capítulo 1

## Mecânica dos Fluidos

Um fluido pode ser definido, informalmente, como uma substância que não possui forma definida, e que assume o formato do recipiente que o contém. Do ponto de vista mecânico, um fluido é uma substância que se deforma continuamente sob a ação de uma tensão cisalhante (i.e., o efeito de uma força paralela à superfície). Assim, os fluidos compreendem as fases líquida e gasosa (ou vapor) nas quais a matéria existe. A diferença principal entre um sólido e um fluido é a seguinte: um sólido deforma-se quando uma tensão de cisalhamento lhe é aplicada, mas não continuamente [27]. Relembraremos aqui alguns conceitos e equações fundamentais no estudo do escoamento.

### 1.1 Viscosidade

Um fluido cuja taxa de deformação varia linearmente com as tensões de cisalhamento é chamado *Fluido Newtoniano*. Em termos um pouco mais precisos: tomando coordenadas cartesianas, se  $\tau_{ij}$  representa a componente da tensão cisalhante perpendicular a  $\mathbf{e}_i$  e na direção  $\mathbf{e}_j$ , um fluido newtoniano incompressível satisfaz, para  $i \neq j$  [9]:

$$\tau_{ij} = \mu \left( \frac{\partial v_i}{\partial x_j} + \frac{\partial v_j}{\partial x_i} \right)$$

A constante de proporcionalidade  $\mu$  é chamada de *viscosidade*, e assume-se que varia apenas com a temperatura do fluido.

## 1.2 Hipótese do contínuo

Fisicamente falando, os fluidos são compostos por moléculas em constante movimento. Porém, na maioria das aplicações, em especial na Engenharia, estamos interessados apenas nas propriedades macroscópicas de muitas moléculas. Estamos interessados, portanto, em propriedades *médias*: são essas propriedades que geralmente podemos medir. Tratamos, portanto, um fluido como algo arbitrariamente divisível, algo *contínuo*, e deixamos de lado o comportamento das moléculas individuais.

Essa é a chamada *Hipótese do Contínuo*. É a base da mecânica dos fluidos clássica, e será usada nesse texto, implicitamente, em todas as equações relacionadas ao movimento de fluidos. Porém, devemos estar atentos às condições nas quais a Hipótese é válida. Só podemos assumi-la quando a ordem de grandeza da menor dimensão significativa do problema é superior à trajetória média livre das moléculas (cerca de  $6 \times 10^{-8}$  m nas *condições normais de temperatura e pressão* (CNTP) [27]). Caso contrário, métodos que estudam fluidos a nível molecular devem ser utilizados, área conhecida como *Mecânica Estatística*.

## 1.3 Meios Porosos

Em nossas simulações, assumiremos a existência de um meio poroso e rígido, de tal forma que o escoamento se dê apenas por meio dos poros. Definimos, então, a *porosidade*  $\phi$  como a razão entre o volume total dos poros e o volume total do meio.

Outro conceito importante é a *permeabilidade*  $\mathbf{K}$  do meio poroso. Essa grandeza tensorial corresponde à resistência oferecida pelo meio à passagem do fluido. No caso de escoamento unidirecional em um meio homogêneo, a permeabilidade é uma grandeza escalar e podemos escrever

$$\phi u = -\frac{K}{\mu} \frac{dP}{dx},$$

em que  $u$  é a velocidade do fluido e  $P$  a pressão do fluido. Essa equação é conhecida como *Lei de Darcy*, e nos diz que a *força motriz* do escoamento em meios porosos é o *gradiente de pressão*.

Quando se trata de meios porosos, normalmente se utiliza a chamada *velocidade de Darcy* no lugar da velocidade usual. A relação entre as duas velocidades é dada pela equação:

$$\mathbf{v} = \phi \mathbf{u}, \quad (1.1)$$

onde  $\mathbf{v}$  é a velocidade de Darcy e  $\mathbf{u}$  é a velocidade de fluido. De agora em diante, a menos que dito expressamente o contrário, trabalharemos apenas com a velocidade de Darcy.

## 1.4 Lei de Darcy

No caso mais geral,  $\mathbf{K}$  é uma matriz simétrica positivo-definida, chamada matriz de permeabilidades, e a equação que rege o escoamento pode ser escrita como:

$$\int_{\Omega} \mathbf{K}^{-1} \mathbf{v} \mu dV = - \int_{\partial\Omega} p \mathbf{n} ds. \quad (1.2)$$

É importante ressaltar que essa equação só é válida para o escoamento laminar; para velocidades muito altas do fluido, devem ser usadas as equações de Navier-Stokes. De fato, a Lei de Darcy é derivada das equações de Navier-Stokes sob as hipóteses de escoamento laminar, incompressível, permanente e de uma relação linear entre as forças viscosas e a velocidade do fluido. Os interessados encontrarão a dedução da Lei de Darcy a partir de Navier-Stokes em [55].

Adicionalmente, convém notar que a expressão “a permeabilidade em um determinado ponto” não possui sentido físico:  $\mathbf{K}$  só tem sentido em regiões mensuráveis do domínio que sejam grandes comparadas com o volume dos poros, e possivelmente menores que o domínio total do escoamento (de maneira análoga à Hipótese do Contínuo). Porém, ignorando essas observações, é comum usar o teorema da divergência e escrever a equação (1.2) na forma diferencial:

$$\mathbf{v} = -\frac{\mathbf{K}}{\mu} \nabla p.$$

## 1.5 Equação da Continuidade

Como estamos trabalhando com um modelo do mundo físico, a massa deve ser conservada. Essa conservação dá origem a uma equação conhecida como *Equação da Continuidade*. Podemos escrevê-la como:

$$\frac{d}{dt} \int_{\Omega} \rho c \phi dV + \int_{\partial\Omega} \mathbf{F} \cdot \mathbf{n} ds = \int_{\Omega} \rho c w dV \quad (1.3)$$

Na equação acima,  $\rho$  representa a densidade do componente em questão,  $c$  a sua concentração volumétrica,  $\mathbf{F}$  o fluxo de massa pela fronteira do domínio  $\Omega$ ,  $\mathbf{n}$  o vetor normal exterior unitário e  $w$  o termo de fonte (ou sorvedouro) de massa.

Consideraremos o escoamento incompressível de uma mistura de água e um soluto miscível, que chamaremos *tracer*. Esses componentes serão indicados pelos subíndices  $w$  e  $t$ , respectivamente. Dessa forma, as equações da continuidade para os componentes em uma região  $\Omega$  são:

$$\begin{aligned} \frac{d}{dt} \int_{\Omega} \rho_t c_t \phi dV + \int_{\partial\Omega} \mathbf{F}_t \cdot \mathbf{n} ds &= \int_{\Omega} \rho_t c_t w_t dV \\ \frac{d}{dt} \int_{\Omega} \rho_w c_w \phi dV + \int_{\partial\Omega} \mathbf{F}_w \cdot \mathbf{n} ds &= \int_{\Omega} \rho_w c_w w_w dV \end{aligned} \quad (1.4)$$

Devido à incompressibilidade do escoamento,  $\rho_t$  e  $\rho_w$  são considerados constantes.

## 1.6 Fluxo Mássico

Os fluxos de massa envolvem, principalmente, dois efeitos: o transporte convectivo pelo fluido e a difusão. Porém, em muitas aplicações, a contribuição difusiva é desprezível com relação à convectiva. Desse modo, desprezando-se a difusão, os fluxos de massa  $\mathbf{F}$  podem ser escritos como:

Os fluxos de massa  $\mathbf{F}_t$  envolvem três efeitos: o transporte convectivo pelo fluido, a dispersão devida às conexões aleatórias entre poros e a difusão molecular. Se  $\mathbf{n}$  é o vetor normal unitário a  $\partial\Omega$ , assumiremos que os vetores de fluxos de massa  $\mathbf{F}_t$  e  $\mathbf{F}_w$  satisfazem:

$$\begin{aligned}
\int_{\partial\Omega} \mathbf{F}_t \mathbf{n} ds &= \int_{\partial\Omega} c_t \mathbf{v} \cdot \mathbf{n} - \frac{\mathbf{v} \cdot \mathbf{n}}{\|\mathbf{v}\|} (\alpha_l - \alpha_t) \mathbf{v} \cdot \nabla c_t - \left( \|\mathbf{v}\| \alpha_t + \frac{\phi\delta}{\tau} \right) \mathbf{n} \cdot \nabla c_t ds \\
\int_{\partial\Omega} \mathbf{F}_w \mathbf{n} ds &= \int_{\partial\Omega} c_w \mathbf{v} \cdot \mathbf{n} - \frac{\mathbf{v} \cdot \mathbf{n}}{\|\mathbf{v}\|} (\alpha_l - \alpha_t) \mathbf{v} \cdot \nabla c_w - \left( \|\mathbf{v}\| \alpha_w + \frac{\phi\delta}{\tau} \right) \mathbf{n} \cdot \nabla c_w ds
\end{aligned} \tag{1.5}$$

Aqui,  $\alpha_l$  e  $\alpha_t$  são constantes físicas, a saber: os coeficientes de dispersão longitudinal e transversal, parte do modelo de dispersão Fickiana. A difusão molecular é representada pela difusividade  $\delta$  e tortuosidade  $\tau$ .

## 1.7 Conservação do Volume

Por definição, a soma das concentrações dos componentes é um:

$$c_t + c_w = 1. \tag{1.6}$$

Podemos substituir os fluxos de massa em (1.5) nas equações (1.4), dividir pelas respectivas densidades ( $\rho_t$  e  $\rho_w$ ) e somar sobre os dois componentes para obter:

$$\int_{\partial\Omega} \mathbf{v} \cdot \mathbf{n} ds = \int_{\Omega} w dV \tag{1.7}$$

Uma vez que  $\mathbf{v} \cdot \mathbf{n}$  representa a componente normal do fluxo de fluido, essa equação representa a conservação do volume.

Comumente, fazemos o volume de  $\Omega$  tender a zero e, utilizando o teorema da divergência, obtemos:

$$\nabla \cdot \mathbf{v} = w \tag{1.8}$$

Longe de poços (fontes ou sorvedouros de fluido), essa equação diz que a velocidade de Darcy  $\mathbf{v}$  possui divergente nulo. Em 1D, isso significa que o campo de velocidades é constante entre poços.

## Capítulo 2

# Métodos Numéricos para a resolução de EDPs

Vimos, no Capítulo 1, as equações que descrevem o comportamento de um fluido num meio poroso. Agora precisamos de ferramentas para realizar a simulação numérica. Temos dois problemas aqui envolvidos: o primeiro deles envolve a determinação do campo de velocidades, pela Lei de Darcy (Eq. 1.2) e pela continuidade do volume (Eq. 1.7). Veremos mais adiante (Capítulo 3) que essa é uma EDP elíptica. Uma vez estabelecido o escoamento do fluido, o segundo problema é computar o transporte convectivo do *tracer*, pela Equação da Continuidade (Eq. 1.4). Problemas de convecção são bastante conhecidos por seu caráter hiperbólico.

Dessa forma, precisamos de métodos tanto para equações elípticas quanto para hiperbólicas. Seguindo o procedimento descrito em [52], utilizaremos o método de *Elementos Finitos* (que é baseado no método de *Galerkin*) para o problema elíptico, e *Volumes Finitos* para o problema hiperbólico. Vejamos como funciona cada um desses métodos.

### 2.1 O Método de Galerkin

Dada uma EDP na sua formulação variacional, introduziremos um método para encontrar uma solução aproximada, que posteriormente será utilizado no método dos Elementos Finitos.

Dado um espaço de Hilbert  $V$ , uma forma bilinear  $B(\cdot, \cdot) : V \times V \rightarrow \mathbb{R}$  (procedente da formulação variacional da EDP) e  $l \in V'$  ( $l$  representando o termo independente da EDP e  $V'$  o dual de  $V$ ), queremos encontrar  $u \in V$  tal que:

$$B(u, v) = l(v) \quad \forall v \in V. \quad (2.1)$$

Assumiremos também que a forma  $B(\cdot, \cdot)$  é limitada e coerciva. Ou seja, existem constantes  $k$  e  $\alpha$  tais que

$$|B(u, v)| \leq k \|u\|_V \|v\|_V \quad \forall v \in V \quad (2.2)$$

e

$$B(v, v) \geq \alpha \|v\|_V^2 \quad \forall v \in V. \quad (2.3)$$

A ideia do método de Galerkin é muito simples. A dificuldade de resolver (2.1) vem do fato que  $V$  é um espaço muito grande (em geral, tem dimensão infinita!), impedindo a criação de um procedimento para calcular a solução exata. O método de Galerkin se baseia, então, em uma família enumerável de subespaços de dimensão finita  $\{V_n\}_{n=1}^{\infty} \subset V$ , tais que

$$\overline{\bigcup_{n=1}^{\infty} V_n} = V \quad (2.4)$$

e que satisfazem  $V_n \subset V_{n+1}$  e  $\dim(V_n) = N_n < \infty$  para todo  $n \in \mathbb{N}$ . Cada espaço  $V_n$  é obtido selecionando-se funções linearmente independentes  $\{\phi_i\}_{i=1}^{N_n}$  em  $V$ . Por serem de dimensão finita (portanto, fechados), os  $V_n$  são também espaços de Hilbert.

Temos em mãos, portanto, o seguinte problema: para cada  $n \in \mathbb{N}$ , encontrar  $u_n$  satisfazendo

$$B(u_n, v) = l(v) \quad \forall v \in V_n \quad (2.5)$$

Esse problema normalmente é chamado de *aproximação de Galerkin*. Mostraremos que, sob hipóteses apropriadas, a sequência de soluções obtidas converge para a solução exata do problema (2.1). Começemos com um lema de unicidade:

**Lema 1.** *O problema variacional discreto (2.5) possui solução única  $u_n \in V_n$ , para todo  $n \in \mathbb{N}$ .*

N.

*Demonstração.* A restrição da forma  $B(\cdot, \cdot)$  a  $V_n \times V_n$  é elíptica e coerciva. Da mesma forma, a restrição do funcional  $l$  a  $V_n$  continua sendo linear e limitada, portanto  $l \in V'_n$ . Assim, as hipóteses do teorema de Lax-Milgram são satisfeitas, mostrando que a solução de (2.5) existe e é única.  $\square$

A essência do método de Galerkin se deve ao fato de que a solução  $u_n \in V_n$  pode ser escrita como uma combinação linear finita de elementos da base de  $V_n$ . Portanto, existem escalares  $a_j$  e, para qualquer  $v \in V_n$ , escalares  $b_i$  que satisfazem

$$u_n = \sum_{j=1}^{N_n} a_j \phi_j, \quad v = \sum_{i=1}^{N_n} b_i \phi_i. \quad (2.6)$$

Substituindo (2.6) em (2.5), e usando a linearidade de  $B(\cdot, \cdot)$ , obtemos

$$\sum_{i=1}^{N_n} b_i \left( \sum_{j=1}^{N_n} B(\phi_j, \phi_i) a_j - l(\phi_i) \right) = 0, \quad (2.7)$$

ou, de forma mais clara:

$$\sum_{i=1}^{N_n} b_i \left( \sum_{j=1}^{N_n} K_{ij} a_j - F_i \right) = 0, \quad (2.8)$$

em que

$$K_{ij} := B(\phi_j, \phi_i) \quad \text{e} \quad F_i := l(\phi_i) \quad (2.9)$$

são, respectivamente, uma matriz  $N_n \times N_n$  (chamada de *matriz de rigidez*) e um vetor de dimensão  $N_n$  (chamado de *vetor de carga*). Note que podem-se calcular explicitamente  $K_{ij}$  e  $F_i$ , posto que as funções  $\phi_i$  são conhecidas e tanto  $B$  quanto  $l$  são dados explicitamente.

Uma vez que os coeficientes  $b_i$  são arbitrários, segue que o termo entre parênteses da equação (2.8) deve ser zero, o que reduz a equação a um sistema linear:

$$\mathbf{Ka} = \mathbf{F}. \quad (2.10)$$

Uma vez resolvido esse sistema de equações, pode-se escrever a solução aproximada  $u_n$  pela equação (2.6).

Notemos, por curiosidade, uma propriedade inerente aos  $u_n$ . Caso  $B$  seja uma forma simétrica (e coerciva, por hipótese), podemos definir um produto interno  $(\cdot, \cdot)_B$  como  $(u, v)_B = B(u, v)$ . Esse produto interno induz uma norma  $\|\cdot\|_B$ , chamada de *norma da energia*. Subtraindo as equações (2.1) e (2.5), obtemos

$$B(u - u_n, v) = 0 \quad \forall v \in V_n. \quad (2.11)$$

Assim, no produto interno definido por  $B$ ,  $u - u_n$  é ortogonal a  $V_n$ , o que nos leva a concluir que  $u_n$  é uma espécie de projeção ortogonal de  $u$  em  $V_n$ . De fato, temos o seguinte teorema:

**Teorema 1.**

$$\|u - u_n\|_B = \inf_{v \in V_n} \|u - v\|_B.$$

*Em outras palavras, na norma da energia,  $u_n$  é a melhor aproximação de  $u$  em  $V_n$ .*

*Demonstração.* Temos:

$$\begin{aligned} B(u - v, u - v) &= B(u - u_n + u_n - v, u - u_n + u_n - v) \\ &= B(u - u_n, u - u_n) + 2B(u - u_n, u_n - v) + B(u_n - v, u_n - v) \end{aligned}$$

Como  $B(u - u_n, u_n - v) = 0$ , por (2.11), temos

$$\|u - v\|_B^2 = \|u - u_n\|_B^2 + \|u_n - v\|_B^2.$$

Fixando  $u$  e  $u_n$ , vemos que  $\|u - v\|_B$  assume um mínimo (global) quando  $u_n = v$ , isto é

$$\|u - u_n\|_B = \inf_{v \in V_n} \|u - v\|_B$$

como queríamos demonstrar.

□

Procuraremos, agora, cotas para  $u - u_n$  usando a norma de  $V$ . Isso nos dará respaldo para concluir sobre a convergência da sequência  $\{u_n\}$ .

### 2.1.1 Propriedades da aproximação de Galerkin

Provaremos nesta seção os teoremas que faltam para estabelecer a convergência de  $\{u_n\}$  para a solução exata  $u$ . Começaremos pelo:

**Teorema 2** (Lema de Céa). *Se  $B$  satisfaz (2.2) e (2.3), então*

$$\|u - u_n\|_V \leq \frac{k}{\alpha} \inf_{v \in V_n} \|u - v\|_V$$

*Demonstração.* Usando (2.11), obtemos:

$$\begin{aligned} B(u - u_n, u - u_n) &= B(u - u_n, u - v) + B(u - u_n, u_n - v) \\ &= B(u - u_n, u - v). \end{aligned}$$

Ora, temos

$$B(u - u_n, u - u_n) \geq \alpha \|u - u_n\|_V^2$$

e

$$B(u - u_n, u - u_n) \leq k \|u - u_n\|_V \|u - v\|_V \quad \forall v \in V_n$$

donde

$$\|u - u_n\|_V \leq \frac{k}{\alpha} \|u - v\|_V \quad \forall v \in V_n$$

o que completa a prova. □

Estamos, finalmente, prontos para provar a convergência das soluções  $u_n$ :

**Teorema 3.** *Seja  $V$  um espaço de Hilbert e  $V_1 \subset V_2 \subset V_3 \cdots$  uma família enumerável de espaços de dimensão finita que cumpra*

$$\overline{\bigcup_{n=1}^{\infty} V_n} = V. \quad (2.12)$$

*Adicionalmente, suponhamos que  $B(\cdot, \cdot) : V \times V \rightarrow \mathbb{R}$  seja uma forma bilinear limitada e coerciva e que  $l \in V'$ . Então*

$$\lim_{n \rightarrow \infty} \|u - u_n\|_V = 0 \quad (2.13)$$

*Ou seja, o método de Galerkin para o problema (2.1) é convergente.*

*Demonstração.* Dada uma solução  $u$  de (2.1), por (2.12) é possível encontrar uma sequência tal que  $\{v_n\} \in V_n$  para todo  $n \in \mathbb{N}$  e

$$\lim_{n \rightarrow \infty} \|u - v_n\|_V = 0$$

O resultado segue pelo Lema de Céa. □

## 2.2 O Método dos Elementos Finitos (FEM)

Uma vez compreendida a essência do método de aproximação de Galerkin, precisamos encontrar os espaços  $V_n$  apropriados para que se ponha em prática a simulação. Um

procedimento simples e sistemático para tal é o *Método dos Elementos Finitos*. Este consiste em dividir o domínio  $\Omega$  em uma coleção de polígonos  $\Omega_k$  (chamados de *elementos*). A coleção desses elementos é chamada de *malha*. Definimos, então, a base do espaço  $V_n$  usando funções suaves (em geral, polinômios) em cada  $\Omega_k$ . Esses elementos devem cobrir todo o espaço  $\Omega$ , e a interseção de dois elementos deve ser um vértice, uma aresta ou o conjunto vazio. Além disso, a base de  $V_n$  definida dessa maneira deve pertencer ao espaço  $V$  (pois  $V_n \subset V$ ).

A última afirmativa causa certa dificuldade em aplicar o FEM: em geral, as funções de  $V_n$  devem ser contínuas em  $\Omega$ . Como um vértice pode pertencer a mais de um elemento, se  $\phi \in V_n$  satisfaz  $\phi(x_0) \neq 0$  para algum  $x_0 \in \Omega_i \cap \Omega_j$ , então as restrições de  $\phi$  ao interior de  $\Omega_i$  e de  $\Omega_j$  não podem ser identicamente nulas. Dessa forma, faz sentido definir as funções-base por meio dos seus valores nos vértices, com cada função-base possuindo o valor 1 em um vértice e 0 em todos os outros. Também podem ser usados pontos das arestas, faces ou células [18]. Uma típica função base linear por partes em uma malha triangular é mostrada na Fig. 2.1.

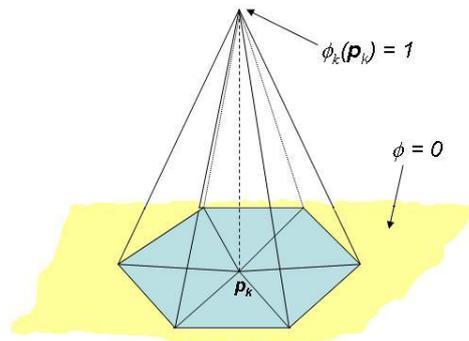


Figura 2.1: Função base.

Fonte: GIACCHINI (2012, p. 13) [28]

A restrição quanto à continuidade das funções-base acaba por introduzir um *acoplamento* entre as células. Retomando o método de Galerkin, precisamos calcular os valores de

$$K_{ij} = B(\phi_j, \phi_i).$$

Em geral, a forma bilinear  $B$  é dada por uma integral envolvendo  $\phi_i, \phi_j$  e suas derivadas. Assim, se  $\phi_i$  e  $\phi_j$  não são identicamente nulas em uma determinada célula, o termo  $K_{ij}$  não será necessariamente igual a zero. De modo a evitar essa dificuldade, gostaríamos de trabalhar em espaços de funções possivelmente descontínuas, que nos permitam zerar o máximo de elementos da matriz  $\mathbf{K}$ . Um dos trunfos da *Formulação Mista-Híbrida* para a solução da Lei de Darcy, que será apresentada no Capítulo 3, será a possibilidade de trabalhar em espaços descontínuos (não sendo, porém, o único método com essa carac-

terística: há também os métodos de Galerkin descontínuos [30]). Métodos de Elementos Finitos que trabalham com funções-base descontínuas são chamados de *não-conformes*.

## 2.3 O Método dos Volumes Finitos (FVM)

O método dos Volumes Finitos é um método de discretização utilizado para a simulação numérica de leis de conservação (sejam elas elípticas, hiperbólicas ou parabólicas). Tem sido usado extensivamente em vários campos da engenharia, como a mecânica dos fluidos, a transferência de calor e massa e a engenharia de petróleo [25]. Alguns aspectos importantes do método dos Volumes Finitos são similares aos dos Elementos Finitos [40]: pode ser usado em geometrias arbitrárias e gera esquemas robustos. Um aspecto adicional é a conservação local dos fluxos numéricos, i.e, o fluxo numérico é conservado de uma célula da discretização para outra. Essa última característica torna o FVM bastante atraente na modelagem de problemas para os quais o fluxo é importante, como na transferência de calor, massa e na mecânica dos fluidos. O FVM é localmente conservativo por ser baseado numa abordagem de *balanços*: um balanço local é escrito em cada célula da discretização, normalmente chamada de *volume de controle*; pelo teorema da divergência, uma formulação integral dos fluxos na fronteira do volume de controle é então obtida. Para uma abordagem completa, veja por exemplo [37], [51], [49], [25] ou [26].

## 2.4 Métodos numéricos para a resolução de Sistemas Lineares

Vimos que, em nossas simulações, precisaremos resolver sistemas lineares. Veremos também que esses sistemas serão de grande porte e esparsos. Para tal, métodos convencionais de resolução de sistemas densos não são efetivos, pois o grande porte do sistema causa uma vasta utilização de memória. Além disso, o extenso número de cálculos feitos implica na necessidade de uma grande capacidade de processamento. Surgem, então, os métodos iterativos, adaptados aos sistemas esparsos e de grande porte.

### 2.4.1 O Método do Gradiente Conjugado

O método do Gradiente Conjugado (CG) é efetivo na resolução de sistemas da forma

$$Ax = b \tag{2.14}$$

nos quais  $A$  é simétrica e positivo-definida. O método surge pela definição da forma bilinear:

$$f(x) = \frac{1}{2}x^t Ax - b^t x$$

cuja derivada é

$$f'(x) = \frac{1}{2}A^t x + \frac{1}{2}Ax - b. \tag{2.15}$$

Se  $A$  for simétrica, sistema (2.15) se torna

$$f'(x) = Ax - b. \tag{2.16}$$

Assim, encontrar as soluções do sistema (2.14) equivale a encontrar os pontos críticos de  $f$ . Agora, se  $x$  é tal que  $Ax = b$ , temos:

$$\begin{aligned} f(x+h) &= \frac{1}{2}(x+h)^t A(x+h) - b^t(x+h) \\ &= \frac{1}{2}x^t Ax - b^t x + h^t Ax + \frac{1}{2}h^t Ah - b^t h && \text{(pois } A \text{ é simétrica)} \\ &= f(x) + h^t b - b^t h + h^t Ah && \text{(pois } Ax = b) \\ &= f(x) + h^t Ah && (h^t = b^t h). \end{aligned}$$

Adicionalmente, se  $A$  for positivo-definida, vale  $f(x+h) \geq f(x) \forall h$ , e o ponto  $x$  é o *mínimo* do funcional  $f$ . Portanto, podemos utilizar uma técnica de *minimização* para encontrar a solução do sistema (2.14).

## O Método da Máxima Descida

Vimos que a solução do sistema (2.14) pode ser visto como um problema de minimização de uma forma bilinear. Para resolvê-lo, começamos com uma estimativa inicial  $x_0$  e criamos uma sequência  $\{x_n\}$  que esperamos que convirja para a solução. Para tal, em cada iteração, escolhemos a direção na qual  $f$  decresce mais rapidamente. Essa direção é a oposta a  $f'(x_n)$ . De acordo com a equação (2.15), a direção desejada é  $-f'(x_n) = b - Ax_n$ . Se denotarmos o *resíduo* na  $n$ ésima iteração por  $r_n = b - Ax_n$ , temos que o vetor buscado para a próxima iteração tem a forma  $x_{n+1} = x_n + \alpha r_n$ .

Falta-nos determinar  $\alpha$ . Isso é feito de forma a minimizar o valor de  $f(x_{n+1}) = f(x_n + \alpha r_n)$ . Um cálculo simples nos mostra que

$$\alpha_n = \frac{r_n^t r_n}{r_n^t A r_n}. \quad (2.17)$$

Para o método da máxima descida, pode-se mostrar (vide [48]) que, se  $x$  é a solução de (2.14), vale:

$$\frac{f(x_n) - f(x)}{f(x_0) - f(x)} \leq \left( \frac{k-1}{k+1} \right)^{2n} \quad (2.18)$$

em que  $k = \|A\| \|A^{-1}\|$  é o número de *condição* da matriz  $A$ .

Vemos que o método da máxima descida é convergente, embora para números de condição altos essa convergência possa ser lenta. Gostaríamos, portanto, de alterar um pouco o método de forma a melhorar a convergência.

Trabalharemos com *direções de busca*  $p_n$ , de forma que  $x_{n+1} = x_n + \alpha_n p_n$ . No método da máxima descida, tínhamos  $p_n = r_n$ . Generalizaremos esse método, construindo os  $p_n$  de tal forma que  $x_{n+1}$  seja o mínimo de  $f$  restrita ao espaço gerado pelas direções de busca já tomadas  $\{p_1, p_2, \dots, p_n\}$ . Assim, caso trabalhemos com aritmética de precisão infinita (ou seja: apenas teoricamente), após no máximo  $n$  iterações, atinge-se o mínimo de  $f$  em todo o espaço.

Esse é o Método do Gradiente Conjugado, proposto originalmente por Hestenes e Stiefel

[33]. São construídas sequências de vetores

$$\begin{aligned}r_{n+1} &= r_n - \alpha_n A p_n \\ p_{n+1} &= r_n + \beta_k p_n\end{aligned}$$

que satisfazem as condições de ortogonalidade e conjugação

$$\begin{aligned}r_i^t r_j &= 0 \\ p_i^t A p_j &= 0 \\ r_i^t p_j &= 0\end{aligned}$$

para todo  $i \neq j$ .

Os escalares  $\alpha_k$  e  $\beta_k$  são dados por

$$\alpha_k = \frac{r_{k-1}^t r_{k-1}}{p_k^t A p_k} \quad (2.19)$$

$$\beta_k = \frac{r_{k-1}^t r_{k-1}}{r_{k-2}^t r_{k-2}}. \quad (2.20)$$

Assim, como proposto por Reid [42], o algoritmo fica na forma

- 1:  $x_0$  estimativa inicial
- 2:  $\epsilon$  tolerância
- 3:  $r_0 = b - Ax_0$
- 4:  $k = 1$
- 5:  $p_1 = r_0$
- 6:  $\alpha_1 = (r_0^t r_0) \setminus (p_1^t A p_1)$
- 7:  $x_1 = x_0 + \alpha_1 r_1$
- 8:  $r_1 = r_0 - \alpha_1 A p_1$
- 9: **while**  $\|r_k\| > \epsilon$  **do**
- 10:      $k = k + 1$
- 11:      $\beta_k = (r_{k-1}^t r_{k-1}) \setminus (r_{k-2}^t r_{k-2})$

```

12:    $p_k = r_{k-1} + \beta_k p_{k-1}$ 
13:    $\alpha_k = (r_{k-1}^t r_{k-1}) \setminus (p_k^t A p_k)$ 
14:    $x_k = x_{k-1} + \alpha_k p_k$ 
15:    $r_k = r_{k-1} - \alpha_k A p_k$ 
16: end while
17:  $x = x_k$ 

```

Notemos que esse método requer apenas uma multiplicação matriz-vetor por iteração. Note também que somente 4 vetores são armazenados:  $x$ ,  $r$ ,  $p$  e  $Ap$ .

Analisemos, agora, a convergência. Caso não haja erros de arredondamento, o método se encerra em exatamente  $n$  iterações, sendo  $n$  a ordem da matriz  $A$ . Porém, em simulações, esse nunca é o caso. Definindo  $\|x\|_A = \sqrt{x^t A x}$ , pode-se mostrar (vide [48]) que

$$\|x_n - x\|_A \leq 2 \left( \frac{\sqrt{k} - 1}{\sqrt{k} + 1} \right)^n \|x_0 - x\|_A. \quad (2.21)$$

Assim, o Gradiente Conjugado é mais eficiente que o da máxima descida. Porém, em qualquer um dos dois métodos, a convergência depende do número de condição da matriz  $A$ .

## 2.4.2 O Método do Gradiente Biconjugado Estabilizado

Uma generalização do Método do Gradiente Conjugado aplicável a matrizes não-simétricas foi proposta em 1992 por H. A. Van der Vorst [54]. É chamado de Gradiente Biconjugado Estabilizado (normalmente abreviado como BiCGSTAB), e pertence à classe de métodos numéricos conhecidos como *Metódos de Krylov*.

Dado um preconditionador  $K = K_1 K_2 \approx A$ , o método do BiCGSTAB é descrito abaixo:

- 1:  $x_0$  estimativa inicial
- 2:  $\epsilon > 0$  tolerância
- 3:  $r_0 = b - Ax_0$
- 4:  $\hat{r}_0 = r_0$
- 5:  $\rho_0 = \alpha_0 = \omega_0 = 1$
- 6:  $p_0 = v_0 = 0$
- 7:  $k = 1$

```

8: while  $\|r_k\| > \epsilon$  do
9:    $k = k + 1$ 
10:   $\rho_k = \hat{r}_0^t r_{k-1}$ 
11:   $\beta_k = (\rho_k / \rho_{k-1})(\alpha_{k-1} / \omega_{k-1})$ 
12:   $p_k = r_{k-1} + \beta_k(p_{k-1} - \omega_{k-1}v_{k-1})$ 
13:  Resolver  $Ky = p_k$ 
14:   $v_k = Ay$ 
15:   $\alpha_k = \rho_k / (\hat{r}_0^t v_k)$ 
16:   $s_k = r_{k-1} - \alpha_k v_k$ 
17:  Resolver  $Kz_k = s_k$ 
18:   $t_k = Az_k$ 
19:   $\omega_k = (K_1^{-1}t_k)^t (K_1^{-1}s_k) / \|K_1^{-1}t_k\|^2$ 
20:   $x_k = x_{k-1} + \alpha_k y_k + \omega_k z_k$ 
21:   $r_k = s_k - \omega_k t_k$ 
22: end while
23:  $x = x_k$ 

```

Como esperado, esse método tem um maior custo computacional que o CG.

### 2.4.3 A fatoração LU incompleta

A fatoração LU incompleta (abreviada como iLU) é uma alternativa dentre os vários possíveis preconditionadores de um sistema. Consiste em realizar uma eliminação gaussiana *aproximada* na matriz, de forma que apenas a diagonal e termos significativos mantenham-se não-nulos. Dessa forma, se a matriz é esparsa, podemos tomar sua fatoração iLU (composta de uma matriz triangular inferior  $L$  e uma triangular superior  $U$ ) composta de matrizes esparsas, mantendo assim a eficiência na resolução de sistemas esparsos e de grande porte.

Para um estudo mais completo sobre a escolha de preconditionadores ou sobre fatorações de matrizes aplicadas à solução de equações, pode-se consultar, por exemplo, [7] e [50].

## Capítulo 3

# Discretização da Lei de Darcy

Este capítulo é dedicado ao estudo do sistema associado à Lei de Darcy e à equação da conservação do volume. Relembrando o capítulo 1, essas equações podem ser descritas, na forma forte, como

$$\begin{cases} \mathbf{v} = -\frac{\mathbf{K}}{\mu}\nabla p \\ \nabla \cdot \mathbf{v} = 0 \\ p = p_D & \text{em } D \\ \mathbf{v} \cdot \mathbf{n} = \mathbf{v}_N \cdot \mathbf{n} & \text{em } N \end{cases} \quad (3.1)$$

Aqui,  $D$  é a parte da fronteira onde é especificada a pressão  $p_D$ , e  $N$  a parte onde é especificada a componente normal da velocidade  $\mathbf{v}_N \cdot \mathbf{n}$ . Essas equações são, na verdade, um caso particular de equações da forma:

$$\begin{cases} \mathbf{T}^{-1}\mathbf{v} + \nabla p = \mathbf{g} \\ \nabla \cdot \mathbf{v} = w \\ p = p_D(x) & \text{em } D \\ \mathbf{v} \cdot \mathbf{n} = \mathbf{v}_N \cdot \mathbf{n} & \text{em } N \end{cases} \quad (3.2)$$

na qual  $\mathbf{T} := \frac{\mathbf{K}}{\mu}$  é simétrica e positivo-definida.

Fisicamente, podemos atribuir o termo  $\mathbf{g}$  à ação da gravidade, por exemplo, e o termo  $w$  a uma fonte ou sorvedouro de fluido. Para um tratamento completo, mostraremos os resultados válidos no caso geral (3.2). Veremos agora, maneiras de tratar esse problema, que culminarão no método *híbrido-misto*, o qual será utilizado nas simulações.

### 3.1 Formulações do problema elíptico

À primeira vista, parece interessante substituir a primeira das equações (3.2) na segunda, obtendo uma equação somente em  $p$ :

$$\begin{cases} \nabla \cdot (\mathbf{T}\nabla p) = w - \nabla \cdot (\mathbf{T}\mathbf{g}) \\ p = p_D \text{ em } D \\ (\mathbf{T}\nabla p) \cdot \mathbf{n} = (\mathbf{v}_N - \mathbf{T}\mathbf{g}) \cdot \mathbf{n} \text{ em } N \end{cases} \quad (3.3)$$

ou simplesmente:

$$\begin{cases} \nabla \cdot (\mathbf{T}\nabla p) = f \\ p = p_D \text{ em } D \\ (\mathbf{T}\nabla p) \cdot \mathbf{n} = \tilde{\mathbf{v}}_N \cdot \mathbf{n} \text{ em } N \end{cases} \quad (3.4)$$

Essa formulação é a famosa forma divergente de um problema elíptico, e é uma variação da conhecida *Equação de Laplace* (que corresponde ao caso  $\mathbf{T} = I$ ). Sabemos que esse problema tem solução única (supondo a regularidade necessária, vide [29], [24]), e que pode ser visto como um problema de minimização de um certo funcional. Porém, estamos interessados no campo de *velocidades*, obtido por meio do gradiente de  $p$ . Computacionalmente, essa abordagem é pouco interessante, pois derivação numérica implica em perda de precisão. Dessa forma, precisamos de uma maneira de obter o campo de velocidades *diretamente*. Surge, então, o *método misto* para a solução do problema.

## 3.2 A formulação mista

Podemos tentar resolver diretamente o sistema (3.2). Porém, o tratamento das equações pode ser mais fácil em espaços de funções que requerem menor regularidade. Faz sentido, então, tentar reduzir a exigência de suavidade das funções e buscar soluções num espaço mais geral. Essa é a essência da formulação *fraca* das EDP's.

Consideraremos, por ora,  $\mathbf{v}_N \cdot \mathbf{n} \equiv 0$ . Multipliquemos a primeira das equações de (3.2) por uma função arbitrária  $\mathbf{u} \in U$  e a segunda por  $q \in Q$  (em que  $U$  e  $Q$  serão definidos posteriormente), e integremos em  $\Omega$ . Então, se  $(\mathbf{u}, p)$  satisfazem (3.2), também satisfazem

$$\begin{cases} \int_{\Omega} \mathbf{u} \cdot \mathbf{T}^{-1} \mathbf{v} + \int_{\Omega} \mathbf{u} \nabla p = \int_{\Omega} \mathbf{u} \cdot \mathbf{g} & \forall \mathbf{u} \in U \\ \int_{\Omega} q \nabla \cdot \mathbf{v} = \int_{\Omega} q w & \forall q \in Q \\ p = p_D & \text{em } D \\ \mathbf{v} \cdot \mathbf{n} = 0 & \text{em } N \end{cases} \quad (3.5)$$

Se tomarmos  $U = H_{0,N}(\text{div}, \Omega) := \{\mathbf{u} \in L^2(\Omega) : \nabla \cdot \mathbf{u} \in L^2(\Omega) \text{ e } \mathbf{u} \cdot \mathbf{n}|_N = 0\}$ , podemos aplicar o teorema da divergência à função  $\mathbf{F} = \mathbf{u} p$  para obter

$$\begin{cases} \int_{\Omega} \mathbf{u} \cdot \mathbf{T}^{-1} \mathbf{v} - \int_{\Omega} (\nabla \cdot \mathbf{u}) p = \int_{\Omega} \mathbf{u} \cdot \mathbf{g} - \int_{\partial\Omega} (\mathbf{u} \cdot \mathbf{n}) p_D & \forall \mathbf{u} \in H_{0,N}(\text{div}, \Omega) \\ \int_{\Omega} q \nabla \cdot \mathbf{v} = \int_{\Omega} q w & \forall q \in L^2(\Omega) \\ p \in L^2(\Omega) \\ \mathbf{v} \in H_{0,N}(\text{div}, \Omega) \end{cases} \quad (3.6)$$

Note que agora podemos buscar uma solução  $(\mathbf{u}, p) \in H_{0,N}(\text{div}, \Omega) \times L^2(\Omega)$ . E mais: se  $p$  for suficientemente suave, pelo teorema de Hahn-Banach, o problema (3.6) é *equivalente* ao problema (3.2) em  $H_{0,N}(\text{div}, \Omega) \times L^2(\Omega)$  com condições de Neumann homogêneas em  $N$ .

A vantagem desse método é obter o campo de velocidades  $\mathbf{v}$  diretamente, resultando numa maior precisão numérica. Resta, portanto, mostrar a existência e unicidade da solução do problema (3.6), obtendo com eles os teoremas de convergência usados para estimar o erro da simulação.

Antes disso, porém, retiremos a homogeneidade da condição de Neumann. Seja  $\tilde{\mathbf{v}}$  qualquer função que satisfaça  $\tilde{\mathbf{v}} \cdot \mathbf{n} = \mathbf{v}_N \cdot \mathbf{n}$ . Isso pode ser feito, por exemplo, tomando uma solução clássica (veja [29] ou [24]) de

$$\begin{cases} \nabla \cdot (\mathbf{T} \nabla \tilde{p}) = 0 \\ \tilde{p} = 0 & \text{em } D \\ (\mathbf{T} \nabla \tilde{p}) \cdot \mathbf{n} = \tilde{\mathbf{v}}_N \cdot \mathbf{n} & \text{em } N \end{cases} \quad (3.7)$$

Tomando a solução  $(\mathbf{v}_0, p)$  do problema

$$\begin{cases} \int_{\Omega} \mathbf{u} \cdot \mathbf{T}^{-1} \mathbf{v} + \int_{\Omega} (\nabla \cdot \mathbf{u}) p = \int_{\Omega} \mathbf{u} \cdot \mathbf{g} - \int_{\Omega} (\mathbf{u} \cdot \mathbf{n}) p_D - \int_{\Omega} \mathbf{u} \cdot \mathbf{T}^{-1} \tilde{\mathbf{v}} & \forall \mathbf{u} \in \mathbf{H}_{0,N}(\text{div}, \Omega) \\ \int_{\Omega} q \nabla \cdot \mathbf{v} = \int_{\Omega} q w - \int_{\Omega} q \nabla \cdot \tilde{\mathbf{v}} & \forall q \in \mathbf{H}_D^0(\Omega) \\ p \in L^2(\Omega) \\ \mathbf{v} \in \mathbf{H}_{0,N}(\text{div}, \Omega) \end{cases} \quad (3.8)$$

e definindo  $\mathbf{v} = \tilde{\mathbf{v}} + \mathbf{v}_0$ , vemos que  $(\mathbf{v}, p)$  é a solução procurada. Isso nos diz que, em  $N$ , condições de contorno não homogêneas significam, simplesmente, uma mudança no lado direito das equações (3.5). Vejamos agora um tratamento mais formal da formulação mista.

### 3.2.1 Existência, unicidade e convergência

Trabalharemos, nesta seção, com um problema mais abstrato. Seja  $V$  um espaço de Hilbert com a norma  $\|\cdot\|_V$ , produto interno  $(\cdot, \cdot)_V$  e dual  $V'$ . Consideraremos uma forma linear limitada em  $V \times V$

$$|a(u, v)| \leq \|a\| \|u\|_V \|v\|_V. \quad (3.9)$$

Essa forma define um operador contínuo  $A : V \rightarrow V'$

$$(Au, v)_{V' \times V} = a(u, v) \quad \forall u, v \in V. \quad (3.10)$$

Seja outro espaço de Hilbert  $Q$  com norma  $\|\cdot\|_Q$ , produto interno  $(\cdot, \cdot)_Q$  e dual  $Q'$ . Seja também uma forma bilinear contínua em  $V \times Q$

$$|b(u, q)| \leq \|b\| \|u\|_V \|q\|_Q. \quad (3.11)$$

Novamente, introduzimos um operador linear  $B : V \rightarrow Q'$  e o operador transposto  $B^t : Q \rightarrow V'$ , definidos por

$$(Bu, q)_{Q' \times Q} = (u, B^t q)_{V \times V'} = b(u, q) \quad \forall u \in V, q \in Q. \quad (3.12)$$

Sejam  $f \in V', g \in Q'$ . Queremos encontrar  $u \in V, p \in Q$  tais que

$$\begin{cases} a(v, u) + b(u, p) = f(u) & \forall u \in V \\ b(v, q) = g(q) & \forall q \in Q \end{cases} \quad (3.13)$$

ou

$$\begin{cases} Av + B^t p = f & \text{em } V' \\ Bv = g & \text{em } Q' \end{cases} \quad (3.14)$$

Por exemplo, para o problema (3.6), temos as seguintes formas bilineares:

$$\begin{aligned} a : \mathbf{H}_{0,N}(\text{div}, \Omega) \times \mathbf{H}_{0,N}(\text{div}, \Omega) &\rightarrow \mathbb{R} \\ (v, u) &\rightarrow \int_{\Omega} \mathbf{T}^{-1} \mathbf{v} \cdot \mathbf{u} \end{aligned} \quad (3.15)$$

$$\begin{aligned} b : \mathbf{H}_{0,N}(\text{div}, \Omega) \times L^2(\Omega) &\rightarrow \mathbb{R} \\ (u, p) &\rightarrow - \int_{\Omega} (\nabla \cdot \mathbf{u}) p \end{aligned} \quad (3.16)$$

Supondo que o operador  $T^{-1} : H_{0,N}(\text{div}, \Omega) \rightarrow H_{0,N}(\text{div}, \Omega)$  seja contínuo, temos

$$|a(u, v)| \leq \|T^{-1}\| \|u\|_{H_{0,N}(\text{div}, \Omega)} \|v\|_{H_{0,N}(\text{div}, \Omega)} \quad (3.17)$$

e

$$|b(u, p)| \leq \|u\|_{H_{0,N}(\text{div}, \Omega)} \|p\|_{L^2(\Omega)}. \quad (3.18)$$

**Lema 2.** *Se  $g \in \text{Im } B$  e a forma bilinear  $a(\cdot, \cdot)$  é coerciva em  $\text{Ker } B$ , i.e., existe  $\alpha_0$  tal que*

$$a(u_0, u_0) \geq \alpha_0 \|u_0\|_V^2 \quad \forall u_0 \in \text{Ker } B, \quad (3.19)$$

então existe um único  $u \in V$  solução de

$$a(u, v_0) = f(v_0) \quad \forall v_0 \in \text{Ker } B \quad (3.20)$$

que satisfaça

$$Bu = g \quad \text{em } V'. \quad (3.21)$$

*Demonstração.* Tomemos  $u_g \in V$  tal que  $Bu_g = g$ . Pela coercividade de  $a$  em  $\text{Ker } B$ , podemos encontrar  $u_0 \in \text{Ker } B$  satisfazendo

$$a(u_0, v_0) = f(v_0) - a(u_g, v_0) \quad \forall v_0 \in \text{Ker } B. \quad (3.22)$$

Escrevendo  $u = u_0 + u_g$ , concluímos a existência. Tomemos, então,  $u_1$  e  $u_2$  soluções de (3.20) e (3.21). Temos

$$a(u_1 - u_2, v_0) \quad \forall v_0 \in \text{Ker } B. \quad (3.23)$$

Como  $u_1 - u_2 \in \text{Ker } B$ , a coercividade de  $a$  em  $\text{Ker } B$  implica  $u_1 = u_2$ .

□

É claro que, se (3.13) tem uma solução  $(u, p)$ , então  $u$  será solução de (3.20) e (3.21). O lema acima implica, então, que o primeiro componente da solução  $(u, p)$  de (3.13) (se

existir) é único. Notemos também que, pela prova do lema:

$$\|u\| \leq \|u_g\| + \frac{1}{\alpha_0} (\|f\|_{V'} + \|a\| \|u_g\|). \quad (3.24)$$

Assim, se encontrarmos uma cota superior para  $\|u_g\|$ , teremos feito o mesmo para  $\|u\|$ . Notemos também que a coercividade de  $a$  pode ocorrer apenas em  $\text{Ker } B$ , sem que ocorra em todo  $V$ .

Temos agora o problema de encontrar  $p$ . Para tal, mais hipóteses têm de ser feitas sobre o operador  $B$ . Mais precisamente, precisaremos que  $\text{Im } B$  seja fechada em  $Q'$ . A razão para tal está no seguinte resultado da análise funcional, cuja prova pode ser vista em [56].

**Lema 3.** *As afirmações abaixo são equivalentes:*

- $\text{Im } B$  é fechada em  $Q'$ .
- $\text{Im } B^t$  é fechada em  $V'$ .
- $(\text{Ker } B)^\perp = \text{Im } B^t$ .
- $(\text{Ker } B^t)^\perp = \text{Im } B$ .
- Existe  $k_0 > 0$  tal que, para todo  $g \in \text{Im } B$ , existe  $v_g \in V$  com  $Bv_g = g$  e  $\|v_g\|_V \leq 1/k_0 \|g\|_{Q'}$ .
- Existe  $k_0 > 0$  tal que, para todo  $f \in \text{Im } B^t$ , existe  $q_f \in Q$  com  $B^t q_f = f$  e  $\|q_f\|_Q \leq 1/k_0 \|f\|_{V'}$ .

Se qualquer uma das condições acima acontecer, dizemos que  $B$  admite um levantamento contínuo de  $V'$  a  $Q$ .

Podemos, finalmente, provar a existência da solução de (3.13).

**Teorema 4.** *Seja  $g \in \text{Im } B$  e seja  $u$  a solução do problema (3.20) e (3.21). Se  $\text{Im } B$  é fechada em  $Q'$ , existe  $p \in Q$  tal que  $(u, p)$  é solução de (3.13). Além disso, as seguintes cotas são válidas:*

$$\|u\|_V \leq \frac{1}{\alpha_0} \|f\|_{V'} + \frac{1}{k_0} \left(1 + \frac{\|a\|}{\alpha_0}\right) \|g\|_{Q'}, \quad (3.25)$$

$$\|p\|_{Q \setminus \text{Ker } B^t} \leq \frac{1}{k_0} \left(1 + \frac{\|a\|}{\alpha_0}\right) \|f\|_{V'} + \frac{\|a\|}{k_0^2} \left(1 + \frac{\|a\|}{\alpha_0}\right) \|g\|_{Q'}. \quad (3.26)$$

*Demonstração.* Para obter (3.25), podemos tomar  $u_g$  satisfazendo (3.20), (3.21) e

$$\|u_g\| \leq \frac{1}{k_0} \|g\|_{Q'},$$

portanto (3.24) nos dá (3.25).

Considere o funcional em  $V'$ :

$$L(v) = f(v) - a(u, v).$$

Temos então que  $L(v_0) = 0 \forall v_0 \in \text{Ker } B$ . Logo, pelo lema (3),  $L \in \text{Im } B^t$ , mostrando que existe  $p \in Q$  que satisfaz

$$L(v) = b(v, p) \quad \forall v \in V,$$

ou seja:

$$a(u, v) + b(v, p) = f(v) \quad \forall v \in V.$$

Por meio de projeções ortogonais, podemos tomar  $p \in (\text{Ker } B^t)^\perp$ . Se  $p_0 \in \text{Ker } B^t$ , o lema (3) ainda nos diz

$$\sup_{\substack{v \in V \\ v \neq 0}} \frac{b(v, p + p_0)}{\|v\|} = \sup_{\substack{v \in V \\ v \neq 0}} \frac{b(v, p)}{\|v\|} = \sup_{\substack{v \in V \\ v \neq 0}} \frac{L(v)}{\|v\|} \geq \inf_{p_0 \in \text{Ker } B^t} k_0 \|p + p_0\|_Q = k_0 \|p\|_{Q / \text{Ker } B^t}.$$

Das desigualdades acima, e do fato que  $b(v, p) = L(v) = f(v) - a(u, v) \quad \forall v \in V$ , obtemos a desigualdade (3.26).  $\square$

Note que não concluímos a unicidade de  $p$ . De fato, pela primeira equação de (3.13), vemos que  $p$  está definida a menos de um elemento de  $\text{Ker } B^t$ . A unicidade estará garantida se, e somente se,  $\text{Ker } B^t = 0$ , ou seja, se  $B$  for *sobrejetiva*.

Resta-nos verificar se as hipóteses do teorema são satisfeitas no caso da Lei de Darcy. Basta verificar que o operador  $B$  é igual a  $-\text{div}$  restrito a  $H_{0,N}(\text{div}, \Omega)$  e que

$$-\text{div} : H_{0,N}(\text{div}, \Omega) \rightarrow L^2(\Omega)$$

é sobrejetivo se  $D \neq \emptyset$ . Para tal, dado  $f \in L^2(\Omega)$ , basta utilizar a existência da solução ([29], [24]) de

$$\begin{cases} -\Delta\phi = f \\ \phi|_D = 0 \\ \frac{\partial\phi}{\partial n}|_N = 0 \end{cases} \quad (3.27)$$

e tomar  $\psi = \nabla\phi$ , obtendo  $\psi \in H_{0,N}(\text{div}, \Omega)$  com  $\text{div}\psi = -f$ . No caso em que  $D = \emptyset$ , a solução estará definida a menos de uma constante arbitrária.

Vejamos como utilizar o Método dos Elementos Finitos para construir uma aproximação para o problema. Trabalharemos num domínio quadrado  $\Omega$ , dividido em quadrados abertos disjuntos  $\Omega_{ij}$  tais que

$$\bigcup_{i,j} \overline{\Omega_{ij}} = \Omega. \quad (3.28)$$

Denotemos, num elemento  $\Omega_{ij}$  da partição,

$$P_0(\Omega_{ij}) : \text{o espaço de funções constantes em } \Omega_{ij}$$

e

$$RT_0(\Omega_{ij}) : \{(ax + b, cy + d) : a, b, c, d \in P_0\}.$$

Denotemos por  $h$  o supremo dos diâmetros (i.e, dos diâmetros dos círculos circunscritos) desses quadrados e

$$V_h := \left\{ v_h \in H_{0,N}(\text{div}, \Omega) : v_h|_{\Omega_{ij}} \in RT_0(\Omega_{ij}) \quad \forall i, j \right\},$$

$$Q_h := \{p_h \in L^2(\text{div}, \Omega) : p_h|_{\Omega_{ij}} \in P_0(\Omega_{ij}) \quad \forall i, j\}.$$

Note que  $\text{div } V_h = Q_h$ . Procuramos então  $(v_h, p_h)$  satisfazendo

$$\begin{cases} a(u, v_h) + b(u, p_h) = f(u) & \forall u \in V_h \\ b(v_h, q) = g(q) & \forall q \in Q_h \end{cases} \quad (3.29)$$

ou mesmo

$$\begin{cases} A_h u + B_h^t p = f & \text{em } V_h' \\ B_h u = g & \text{em } Q_h'. \end{cases} \quad (3.30)$$

Aqui, o operador  $B_h$  é a restrição de  $B$  a  $V_h$ . Como  $B = -\text{div}$ , pela igualdade  $\text{div } V_h = Q_h$  vemos que  $B_h$  é sobrejetiva e  $\text{Ker } B_h \subset \text{Ker } B$ . Além disso, como  $a(\cdot, \cdot)$  é coerciva em  $\text{Ker } B$ , também o será em  $\text{Ker } B_h$ . Assim, o problema discreto 3.29 tem solução única.

Pode ser visto, também, em [10]:

**Teorema 5.** *Sejam  $(v, p)$  solução de (3.13) e  $(v_h, p_h)$  solução de (3.29). Então, existe  $K$  independente de  $h$  tal que as seguintes estimativas são válidas:*

$$\|v - v_h\|_{H_{0,N}(\text{div}, \Omega)} + \|p - p_h\|_{L^2(\Omega)} \leq Kh \quad (3.31)$$

Isso significa que temos uma aproximação de *primeira ordem* ao utilizar o método misto.

Vimos que o método misto é uma alternativa interessante por permitir a computação direta do campo de velocidades. Porém, pode-se mostrar ([10]) que a formulação mista envolve a determinação de um *ponto de sela*. Computacionalmente, problemas de ponto de sela são mais difíceis que problemas de minimização. Além disso, o espaço  $V_h$  é composto de funções contínuas, o que gera um certo acoplamento no sistema associado, de forma que a matriz de rigidez tenha menos zeros. Procuramos (se possível) um método que nos leve a um problema de minimização, preferencialmente que envolva funções descontínuas. Esse método é o chamado *método misto-híbrido*, tema da próxima seção.

### 3.3 A formulação mista-híbrida

A ideia desta seção é trabalhar em um espaço menos restritivo que  $H_{0,N}(div, \Omega)$ . Começamos definindo

$$X(\Omega) = \{\mathbf{v} : \mathbf{v} \in \oplus_{i,j} H(div, \Omega_{ij})\}.$$

É claro que  $H_{0,N}(div, \Omega) \subset X(\Omega)$ . Para trabalhar nesse espaço, precisamos saber sob quais condições uma função em  $X(\Omega)$  pertence a  $H_{0,N}(div, \Omega)$ .

Seja  $E$  o conjunto das arestas dos  $\Omega_{ij}$  e  $\Lambda_{0,D}$  as funções em  $L^2(E)$  que se anulam em  $D$  (a parte da fronteira com condições de Dirichlet). Definimos a seguinte forma bilinear:

$$\begin{aligned} c : X(\Omega) \times \Lambda_{0,D} &\rightarrow \mathbb{R} \\ (\mathbf{v}, \mu) &\rightarrow \sum_{i,j} \int_{\partial\Omega_{ij}} \mu \mathbf{v} \cdot \mathbf{n} \, ds \end{aligned} \quad (3.32)$$

Como usual, denotaremos por  $C : X(\Omega) \rightarrow \Lambda'_{0,D}$  o operador linear definido por  $c(\cdot, \cdot)$ . É imediato ver que

$$C\mathbf{u} = \sum_{i,j} \mathbf{v}|_{\Omega_{ij}} \cdot \mathbf{n}_{\partial\Omega_{ij}}$$

Esse operador é sobrejetivo. De fato, dado  $\mu \in \Lambda_{0,D}$  podemos resolver em cada  $\Omega_{ij}$ :

$$\begin{cases} -\Delta\psi_{ij} = 0 \\ \psi_{ij} = 0 & \text{em } \partial\Omega_{ij} \cap D \\ \frac{\partial\psi_{ij}}{\partial n} = \mu|_{\Omega_{ij}} & \text{em } \partial\Omega_{ij} \cap N \end{cases}$$

e escrever  $\mathbf{v}$  como uma soma (direta) dos  $\psi_{ij}$ .

Em [10], temos as seguintes caracterizações:

**Lema 4.** *Seja  $\mathbf{v} \in X(\Omega)$ . Então*

$$(c(\mathbf{v}, \mu) = 0 \quad \forall \mu \in \Lambda_{0,D}) \Leftrightarrow (\mathbf{v} \in H_{0,N}(\text{div}, \Omega)). \quad (3.33)$$

**Lema 5.** *Se  $\mu \in \Lambda_{0,D}$  e*

$$c(\mathbf{v}, \mu) = 0 \quad \forall \mathbf{v} \in X(\Omega) \quad (3.34)$$

*então  $\mu \equiv 0$ .*

Podemos ver, então, a condição “ $\mathbf{v} \in H_{0,N}(\text{div}, \Omega)$ ” como uma restrição em  $X(\Omega)$  dada por  $c(\mathbf{v}, \mu) = 0 \quad \forall \mu \in \Lambda_{0,D}$ .

Vejamos como uma nova formulação do problema pode ser apresentada. Escreveremos, em  $X_{0,N}(\Omega)$ ,  $\mathbf{v}|_{\Omega_{ij}} = \mathbf{v}_{ij}$  e, em  $L^2(\Omega)$ ,  $p|_{\Omega_{ij}} = p_{ij}$ . Seja  $(\mathbf{v}, p)$  solução de (3.13) e considere o mapa

$$\phi : \mathbf{u} \rightarrow f(u) - a(\mathbf{v}, \mathbf{u}) - \sum_{ij} b(\mathbf{u}_{ij}, p_{ij}). \quad (3.35)$$

É claro que  $\phi(\mathbf{u}) = 0$  para todo  $\mathbf{u} \in H_{0,N}(\text{div}, \Omega) = \text{Ker } C$ . Pelo lema (3), isso implica na existência de um  $\lambda_0$  tal que

$$c(\mathbf{u}, \lambda_0) = \phi(\mathbf{u}) \quad \forall \mathbf{u} \in X(\Omega). \quad (3.36)$$

Ou seja, temos

$$a(\mathbf{v}, \mathbf{u}) + \sum_{ij} b(\mathbf{u}_{ij}, p_{ij}) + c(\mathbf{u}, \lambda_0) = f(u). \quad (3.37)$$

Para ver que  $\lambda_0$  é único, basta usar o lema (5).

Podemos resumir os resultados obtidos no seguinte teorema:

**Teorema 6.** *[Formulação mista-híbrida] Sejam  $(\mathbf{v}, p)$  solução de (3.13) e  $\lambda_0$  definido por (3.36). Então o terno ordenado  $(\mathbf{v}, p, \lambda_0)$  é a única solução do seguinte problema:*

encontrar  $(\mathbf{v}, p, \lambda_0) \in X(\Omega) \times L^2(\Omega) \times \Lambda_{0,D}$  tais que

$$\begin{cases} a(\mathbf{v}, \mathbf{u}) + \sum_{i,j} b(\mathbf{u}_{ij}, p_{ij}) + c(\mathbf{u}, \lambda_0) = f(u) & \forall \mathbf{u} \in H(\Omega) \\ \sum_{i,j} b(\mathbf{v}_{ij}, q_{ij}) = g(q) & \forall q \in L^2(\Omega) \\ c(\mathbf{v}, \mu) = 0 & \forall \mu \in \Lambda_{0,D}. \end{cases} \quad (3.38)$$

Denotaremos por  $V_h = \{\mathbf{v} \in X(\Omega) : \mathbf{v}|_{\Omega_{ij}} \in RT_0(\Omega_{ij}) \forall i, j\}$ ,  $P_h = \{p \in L^2(\Omega) : p|_{\Omega_{ij}} \in P_0(\Omega) \forall i, j\}$  e  $\Lambda_h = \{\lambda \in \Lambda_{0,N}; \lambda \text{ é constante em cada aresta de } E\}$ . Esses espaços são normados (e de Hilbert):  $V_h$  e  $P_h$  herdam a norma natural de  $X(\Omega)$  e  $L^2(\Omega)$ . Além disso:

$$\|\mu\|_{\Lambda_h}^2 = \sum_{e \in E} |e| \|\mu|_e\|_{L^2(E)}^2.$$

Podemos, então, estender nosso resultado para o problema discreto:

**Teorema 7.** *[Formulação mista-híbrida discreta] Existe um único terno  $(\mathbf{v}_h, p_h, \lambda_h) \in V_h \times P_h \times \Lambda_h$  solução de*

$$\begin{cases} a(\mathbf{v}, \mathbf{u}) + \sum_{ij} b(\mathbf{u}_{ij}, p_{ij}) + c(\mathbf{u}, \lambda) = f(u) & \forall \mathbf{u} \in V_h \\ \sum_{ij} b(\mathbf{v}_{ij}, q_{ij}) = g(q) & \forall q \in P_h \\ c(\mathbf{v}, \mu) = 0 & \forall \mu \in \Lambda_h. \end{cases} \quad (3.39)$$

Finalmente, em [10], encontramos o seguinte teorema para a convergência do Método dos Elementos Finitos:

**Teorema 8.** *[Convergência dos multiplicadores de Lagrange] Seja  $(\mathbf{v}, p, \lambda)$  solução de (3.38),  $(\mathbf{v}_h, p_h, \lambda_h)$  solução de (3.39) e  $\Pi$  a projeção de  $L^2(\Omega)$  em  $\Lambda_h$ . Então existe uma constante  $K$  independente de  $h$  tal que*

$$\|\Pi p - \lambda_h\|_{\Lambda_h} \leq Kh^2 \quad (3.40)$$

Assim, vemos que  $\lambda_h$  converge para a projeção de  $p$  nas arestas das células. E mais:  $\lambda_h$  é uma aproximação de segunda ordem de  $p$ , enquanto  $\|p - p_h\|_{P_h}$  é somente  $O(h)$  (vide Equação (3.31)). Assim, os multiplicadores de Lagrange serão identificados com as pressões nas arestas.

As próximas seções são devotadas a estabelecer a implementação numérica da formulação

mista-híbrida no escoamento de fluidos em meios porosos.

### 3.4 A formulação mista-híbrida e o escoamento em meios porosos

Utilizaremos a abordagem descrita em [52] para a solução da equação de Darcy. Seja o domínio do problema uma coleção de retângulos  $\Omega = \cup_{i,j} \Omega_{ij}$  e seja  $E$  o conjunto dos lados desses retângulos interiores a  $\partial\Omega$ . De acordo com a seção anterior, a formulação *mista-híbrida* consiste em encontrar  $v \in \oplus_{\Omega_{ij}} H(\text{div}, \Omega_{ij})$ ,  $p \in L^2(\Omega)$  e  $\lambda \in \Lambda_{0,D}$  (funções em  $L^2(E)$  que se anulam em  $D$ ) tais que:

$$\int_{\Omega} \mathbf{u} \cdot T^{-1} \mathbf{v} - \sum_{i,j} \left[ \int_{\Omega_{ij}} (\nabla \cdot \mathbf{u}) p - \int_{\partial\Omega_{ij}} (\mathbf{u} \cdot \mathbf{n}) \lambda \right] = \int_{\Omega} (\mathbf{u} \mathbf{g}) - \int_{\partial\Omega} (\mathbf{u} \cdot \mathbf{n}) p \quad \forall u \in \oplus_{\Omega_{ij}} H(\text{div}, \Omega_{ij}) \quad (3.41)$$

$$\sum_{i,j} \int_{\Omega_{ij}} q \nabla \cdot \mathbf{v} = \int_{\Omega} q w \quad \forall q \in L^2(\Omega) \quad (3.42)$$

$$\sum_{i,j} \int_{\partial\Omega_{ij}} \mu \mathbf{v} \cdot \mathbf{n} = 0 \quad \forall \mu \in \Lambda_{0,N} \quad (3.43)$$

Os multiplicadores de Lagrange  $\lambda$  serão associados às pressões nos lados das células. De fato, para soluções fortes, o teorema da divergência nos diz que o somatório na equação (3.41) deve ser igual a  $\int_{\Omega} \mathbf{u} \nabla p$ , implicando em  $p|_E = \lambda$ . Essa hipótese vai ao encontro do teorema de convergência (8), e assim passaremos a identificar os multiplicadores de Lagrange com as pressões nas arestas das células.

Para encontrar uma solução aproximada, trabalharemos em subespaços  $V_h \subset \oplus_{\Omega_{ij}} H(\text{div}, \Omega_{ij})$ ,  $P_h \subset L^2(\Omega)$  e  $\Lambda_h \subset L^2(E)$ . Assim, procuramos  $v_h \in V_h$ ,  $p_h \in P_h$  e  $\lambda_h \in \Lambda_h$  tais que

$$\int_{\Omega} \mathbf{u} \cdot T^{-1} \mathbf{v} - \sum_{i,j} \left[ \int_{\Omega_{ij}} (\nabla \cdot \mathbf{u}) p - \int_{\partial\Omega_{ij}} (\mathbf{u} \cdot \mathbf{n}) \lambda \right] = \int_{\Omega} (\mathbf{u} \cdot \mathbf{g}) - \int_{\partial\Omega} (\mathbf{n} \cdot \mathbf{u}) p \quad \forall u \in V_h \quad (3.44)$$

$$\sum_{i,j} \int_{\Omega_{ij}} q \nabla \cdot \mathbf{v} = \int_{\Omega} q w \quad \forall q \in P_h \quad (3.45)$$

$$\sum_{i,j} \int_{\partial\Omega_{ij}} \mu \mathbf{v} \cdot \mathbf{n} = 0 \quad \forall \mu \in \Lambda_h. \quad (3.46)$$

Retomando a seção anterior, escolhemos  $V_h = \{ \mathbf{v} \in \oplus_{i,j} H(\text{div}, \Omega_{ij}) : \mathbf{v}|_{\Omega_{ij}} \in RT_0(\Omega_{ij}) \forall i, j \}$ ,  $P_h = \{ p \in L^2(\Omega) : p|_{\Omega_{ij}} \in P_0(\Omega) \forall i, j \}$  e  $\Lambda_h = \{ \lambda \in \Lambda_{0,N} ; \lambda \text{ é constante em cada aresta de } E \}$ .

Veremos agora o formato do sistema linear associado às equações do método *misto-híbrido*

### 3.5 Construção do sistema linear

Seja  $\{u_i\}$  uma base para o espaço  $V_h$ ,  $\{q_i\}$  uma base para  $P_h$  e  $\{\mu_i\}$  uma base para  $\Lambda_h$ . Definimos  $a_{ij} = \int_{\Omega} \mathbf{u}_i \cdot \mathbf{T}^{-1} \mathbf{u}_j$ ,  $b_{ij} = \int_{\Omega} \nabla \cdot \mathbf{u}_i q_j$ ,  $c_{ij} = \int_E \lambda_i (\mathbf{u}_i \cdot \mathbf{n}) + \int_{\partial\Omega} p (\mathbf{u}_i \cdot \mathbf{n})$ ,  $g_i = \int_{\Omega} \mathbf{u}_i \cdot \mathbf{g}$  e  $w_i = \int_{\Omega} q_i w$ . Definamos, então, as matrizes  $\mathbf{A} = (a_{ij})$ ,  $\mathbf{B} = (b_{ij})$ ,  $\mathbf{C} = (c_{ij})$ ,  $\mathbf{g} = (g_i)$  e  $\mathbf{w} = (w_i)$ . As equações (3.44)-(3.46) se tornam, então:

$$\mathbf{A}\mathbf{v} + \mathbf{B}\mathbf{p} + \mathbf{C}\lambda = \mathbf{g} \quad (3.47)$$

$$\mathbf{B}^t \mathbf{v} = \mathbf{w} \quad (3.48)$$

$$\mathbf{C}^t \mathbf{v} = 0 \quad (3.49)$$

Notemos que são permitidas funções descontínuas nos espaços  $V_h$  e  $P_h$ . A vantagem disso é o desacoplamento das funções em cada célula.

Mostraremos agora que o sistema de equações para os multiplicadores de lagrange é

positivo-definido.

### 3.6 Positividade definida do sistema linear

Examinando as equações (3.47) - (3.49), vemos que o sistema linear associado é da seguinte forma:

$$\begin{bmatrix} A & B & C \\ B^t & 0 & 0 \\ C^t & 0 & 0 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \mathbf{v} \\ \mathbf{p} \\ \lambda \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} \mathbf{g} \\ \mathbf{w} \\ 0 \end{bmatrix} \quad (3.50)$$

Sabemos que a matriz  $A$  é diagonal em blocos e positivo-definida. Sendo assim, resolvendo a primeira linha de blocos da equação (3.50) para  $\mathbf{v}$ , obtemos:

$$\mathbf{v} = A^{-1}(\mathbf{g} - B\mathbf{p} - C\lambda)$$

Substituindo nas outras linhas, obtemos o seguinte sistema em  $\mathbf{p}$  e  $\lambda$ :

$$\begin{bmatrix} -B^t A^{-1} B & -B^t A^{-1} C \\ -C^t A^{-1} B & -C^t A^{-1} C \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \mathbf{p} \\ \lambda \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} \mathbf{w} - B^t A^{-1} \mathbf{g} \\ -C^t A^{-1} \mathbf{g} \end{bmatrix}.$$

Isolamos  $\mathbf{p}$  na primeira linha:

$$\mathbf{p} = (B^t A^{-1} B)^{-1} [-B^t A^{-1} C \lambda + B^t A^{-1} \mathbf{g} - \mathbf{w}]$$

Substituímos  $\mathbf{p}$  na segunda linha, obtendo um sistema na forma  $H\lambda = R$ , no qual:

$$H = C^t A^{-1} C - C^t A^{-1} B (B^t A^{-1} B)^{-1} B^t A^{-1} C.$$

Ou seja:

$$H = C^t A^{-1} \left[ I - B(B^t A^{-1} B)^{-1} B^t A^{-1} \right] C.$$

A quantidade entre colchetes é uma projeção ortogonal (pois é simétrica e idempotente), o que nos mostra que  $H$  é não-negativa. Invocando a unicidade da solução do sistema de equações do método híbrido misto (Teorema 6), concluímos que o sistema é positivo-definido.

### 3.7 Implementação numérica do método híbrido-misto

No caso em que temos as pressões especificadas em toda a fronteira (ou seja,  $N = \emptyset$ ), obtemos uma grande simplificação do problema. Vejamos mais a fundo o formato do sistema nesse caso. Para fixar as ideias, consideremos a célula  $[0, \Delta x] \times [0, \Delta y]$ . Podemos tomar uma base de  $V_h$  na qual cada elemento é nulo exceto em uma célula  $\Omega_{ij}$ . Em  $[0, \Delta x] \times [0, \Delta y]$  há quatro elementos que não são identicamente nulos. São eles:

$$\begin{aligned} \mathbf{u}_L(t, s) &= \left( 1 - \frac{t}{\Delta x}, 0 \right) \\ \mathbf{u}_R(t, s) &= \left( \frac{t}{\Delta x}, 0 \right) \\ \mathbf{u}_U(t, s) &= \left( 0, 1 - \frac{s}{\Delta y} \right) \\ \mathbf{u}_D(t, s) &= \left( 0, \frac{s}{\Delta y} \right) \end{aligned}$$

Dessa forma, podemos escrever, nessa célula, a velocidade na forma  $\mathbf{v} = v_L \mathbf{u}_L + v_R \mathbf{u}_R + v_U \mathbf{u}_U + v_D \mathbf{u}_D$ , em que  $v_L, v_R, v_U$  e  $v_D$  indicam, respectivamente, a velocidade na aresta esquerda, direita, superior e inferior da célula. Analogamente, denotaremos os multiplicadores de lagrange por  $p_L, p_R, p_U$  e  $p_D$ .

Tomaremos como base de  $P_h$  os elementos que valem 1 em apenas uma célula, e 0 nas demais células. A base de  $\Lambda_h$  é obtida de forma análoga. Definimos o tensor *transmissibilidade*  $\mathbf{T} = \mathbf{K}/\mu$  e a matriz auxiliar  $\mathbf{S}$ :

$$\mathbf{S} = \begin{bmatrix} \Delta x & 0 \\ 0 & \Delta y \end{bmatrix} \times \begin{bmatrix} T_{11} & T_{12} \\ T_{21} & T_{22} \end{bmatrix}^{-1} \begin{bmatrix} \Delta x & 0 \\ 0 & \Delta y \end{bmatrix} \frac{1}{\Delta x \Delta y}$$

Nessas condições, as equações (3.47) e (3.48) têm o seguinte formato:

$$\begin{bmatrix} \frac{1}{3}S_{11} & \frac{1}{6}S_{11} & \frac{1}{4}S_{12} & \frac{1}{4}S_{12} & 1 \\ \frac{1}{6}S_{11} & \frac{1}{3}S_{11} & \frac{1}{4}S_{12} & \frac{1}{4}S_{12} & -1 \\ \frac{1}{4}S_{21} & \frac{1}{4}S_{21} & \frac{1}{3}S_{22} & \frac{1}{6}S_{22} & 1 \\ \frac{1}{4}S_{21} & \frac{1}{4}S_{21} & \frac{1}{6}S_{22} & \frac{1}{3}S_{22} & 1 \\ 1 & -1 & 1 & -1 & 0 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} v_L \Delta y \\ v_R \Delta y \\ v_U \Delta x \\ v_D \Delta x \\ p \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} p_L \\ -p_R \\ p_U \\ -p_D \\ 0 \end{bmatrix}$$

Simularemos o caso em que  $\mathbf{K}$  é uma matriz diagonal. Nessa situação, temos um sistema ainda mais simples, pois  $\mathbf{S}$  é diagonal:

$$\begin{bmatrix} \frac{1}{3}S_{11} & \frac{1}{6}S_{11} & 0 & 0 & 1 \\ \frac{1}{6}S_{11} & \frac{1}{3}S_{11} & 0 & 0 & -1 \\ 0 & 0 & \frac{1}{3}S_{22} & \frac{1}{6}S_{22} & 1 \\ 0 & 0 & \frac{1}{6}S_{22} & \frac{1}{3}S_{22} & 1 \\ 1 & -1 & 1 & -1 & 0 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} v_L \Delta y \\ v_R \Delta y \\ v_U \Delta x \\ v_D \Delta x \\ p \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} p_L \\ -p_R \\ p_U \\ -p_D \\ 0 \end{bmatrix} \quad (3.51)$$

O sistema (3.51) pode ser invertido, de forma a obter:

$$\begin{bmatrix} v_L \Delta y \\ v_R \Delta y \\ v_U \Delta x \\ v_D \Delta x \\ p \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} M_1 & M_2 & M_4 & M_7 & m_1 \\ M_2 & M_3 & M_5 & M_8 & m_2 \\ M_4 & M_5 & M_6 & M_9 & m_3 \\ M_7 & M_8 & M_9 & M_{10} & m_4 \\ m_1 & m_2 & m_3 & m_4 & -\mu \end{bmatrix} \begin{bmatrix} p_L \\ -p_R \\ p_U \\ -p_D \\ 0 \end{bmatrix} \quad (3.52)$$

Agora, (3.49) nos dá:

$$\begin{aligned} (v_L)_{i+1,j} &= (v_R)_{i,j} \\ (v_U)_{i,j+1} &= (v_D)_{i,j} \end{aligned} \quad (3.53)$$

em que os índices  $i, j$  indicam, respectivamente, a posição horizontal e vertical da célula. As equações (3.53) nos dizem que o fluxo volumétrico é contínuo entre células, i.e., todo o fluido que vem de uma célula é transportado para a célula vizinha.

Combinando (3.52), (3.53) e (3.53), podemos eliminar as velocidades do sistema linear, resultando num sistema que envolve apenas as pressões nas arestas das células. Além disso, como vimos na seção anterior, esse sistema é positivo-definido, permitindo a utilização do método do gradiente conjugado para sua resolução. O método será ainda mais eficiente por se acoplar a matriz de rigidez à malha, pois aquela é esparsa e requer alguns cuidados no armazenamento de forma a garantir a otimização dos recursos computacionais.

Uma vez obtidas as pressões, podemos usar as equações (3.52) para obter as velocidades em cada célula, e proceder para o cálculo do transporte de massa convectivo, que será visto na próxima seção.

No caso em que as condições de fronteira determinam a pressão (condição do tipo de Dirichlet) em uma parte, e da velocidade (que pode ser vista como condição do tipo de Neumann, pois  $\mathbf{v}$  é proporcional ao gradiente de  $p$ ) na outra parte da fronteira, o sistema não envolve apenas as pressões, e o método acima não é mais utilizável. Também não podemos garantir que o sistema seja simétrico ou positivo-definido. Dessa forma, um método diferente para a resolução do problema deve ser utilizado. Como a matriz de rigidez ainda é esparsa, escolhemos aqui o método do Gradiente Biconjugado Estabilizado. As experiências feitas indicaram a necessidade de um condicionamento do sistema e, para tal, utilizamos a decomposição LU incompleta. Assim, em qualquer tipo de condição de fronteira, já sabemos como obter as velocidades, e assim resta-nos apenas resolver as equações convectivas.

## Capítulo 4

# Discretização das equações convectivo-difusivas

Após integrar a Eq.(1.4) no tempo, podemos escrever a conservação da massa do *tracer* em uma célula  $\Omega$  da malha por

$$\int_{\Omega} c(\mathbf{x}, t^{n+1}) \phi dV = \int_{\Omega} c(\mathbf{x}, t^n) \phi dV + \int_{\partial\Omega} \int_{t^n}^{t^{n+1}} \mathbf{F} \cdot \mathbf{n} dt ds. \quad (4.1)$$

Definimos

$$* A_{\Omega} = \int_{\Omega} \phi dV \quad (4.2)$$

e

$$c_{\Omega}^n = \left[ \int_{\Omega} c(x, t^n) dV \right] \frac{1}{A_{\Omega}}. \quad (4.3)$$

Nas faces  $S$  da célula, temos as integrais no tempo para o fluxo volumétrico

$$V_S^{n+\frac{1}{2}} = \int_S \int_{t^n}^{t^{n+1}} \mathbf{v} \cdot \mathbf{n} dt ds. \quad (4.4)$$

A equação da diferença conservativa para o *tracer*, Eq.(4.1) toma a forma

$$c_{\Omega}^{n+1} = c_{\Omega}^n + \frac{1}{A_{\Omega}} \sum_{S \subset \partial\Omega} f_S^{n+\frac{1}{2}} \quad (4.5)$$

em que  $f_S^{n+\frac{1}{2}}$  é a integral no tempo do fluxo do *tracer* na face  $S$  da célula. Vejamos como se dá o cálculo desse fluxo.

Dividiremos o fluxo em uma parcela hiperbólica (correspondente à contribuição convectiva) e em uma parcela difusiva:

$$f_S^{n+\frac{1}{2}} = f_S^{H,n+\frac{1}{2}} + f_S^{D,n+\frac{1}{2}} \quad (4.6)$$

A parcela convectiva é definida por:

$$f_S^{H,n+\frac{1}{2}} = c_S^{n+\frac{1}{2}} V_S^{n+\frac{1}{2}} = \int_S \int_{t^n}^{t^{n+1}} \mathbf{c} \mathbf{v} \cdot \mathbf{n} dt ds. \quad (4.7)$$

Aqui, a concentração do *tracer* na face  $S$  da célula,  $c_S^{n+\frac{1}{2}}$ , é calculada de diferentes maneiras, dependendo do número de dimensões espaciais. Já o fluxo difusivo será calculado por diferenças finitas explícitas. Trataremos do fluxo convectivo na seção seguinte. A parcela difusiva será tratada numa seção posterior.

## 4.1 Fluxo convectivo em 1D

Por razões ilustrativas, exibimos o cálculo dos fluxos convectivos em 1D. Esse cálculo será feito utilizando uma variação do conhecido *MUSCL Scheme*, que consiste em uma reconstrução linear por partes da concentração do *tracer*, seguido do uso das retas características para obter as concentrações nas faces da célula. A reconstrução é detalhada a seguir.

Definimos

$$\text{muscl}(a, b) = \begin{cases} \text{sign}(a) \min \{2|a|, 2|b|, |a+b|/2\} & \text{se } ab \geq 0 \\ 0 & \text{se } ab < 0 \end{cases} \quad (4.8)$$

e

$$\Delta c_i^n = \text{muscl}(c_i^n - c_{i-1}^n, c_{i+1}^n - c_i^n). \quad (4.9)$$

A reconstrução tem a forma

$$c_i^n(x) = c_i^n + \Delta c_i^n \frac{x - x_i}{\Delta x_i}, \quad x \in (x_{i+\frac{1}{2}}, x_{i-\frac{1}{2}}) \quad (4.10)$$

em que  $\Delta x_i = x_{i+\frac{1}{2}} - x_{i-\frac{1}{2}}$  e  $x_i = \frac{x_{i+\frac{1}{2}} + x_{i-\frac{1}{2}}}{2}$ .

Se aproximarmos

$$V_{i+\frac{1}{2},j}^{n+\frac{1}{2}} \approx (v_R)_i \Delta t^{n+\frac{1}{2}} \quad (4.11)$$

(com  $v_R$  definido no Capítulo 3, no caso bidimensional, sendo a restrição para o caso unidimensional imediata), computamos as concentrações nas faces da célula:

$$c_{i+\frac{1}{2}}^{n+\frac{1}{2}} = \begin{cases} c_i^n + \frac{1}{2} \left( 1 - \frac{V_{i+\frac{1}{2}}^{n+\frac{1}{2}}}{\phi \Delta x_i} \right) \Delta c_i^n & \text{se } V_{i+\frac{1}{2}}^{n+\frac{1}{2}} \geq 0 \\ c_{i+1}^n - \frac{1}{2} \left( 1 + \frac{V_{i+\frac{1}{2}}^{n+\frac{1}{2}}}{\phi \Delta x_{i+1}} \right) \Delta c_{i+1}^n & \text{se } V_{i+\frac{1}{2}}^{n+\frac{1}{2}} < 0. \end{cases} \quad (4.12)$$

Note que essa equação necessariamente difere do "MUSCL Scheme" padrão, no qual  $V_{i+\frac{1}{2}}^{n+\frac{1}{2}}$  é substituído pela velocidade característica vezes o intervalo de tempo.

Completamos os cálculos para o fluxo puramente convectivo usando:

$$f_{i+\frac{1}{2}}^{H,n+\frac{1}{2}} = c_{i+\frac{1}{2}}^{n+\frac{1}{2}} V_{i+\frac{1}{2}}^{n+\frac{1}{2}}. \quad (4.13)$$

É possível determinar as circunstâncias nas quais esse método será estável e convergente. Lembramos que, na ausência de poços em 1D, a velocidade é independente de  $x$  (já que  $\text{div } v = w = 0$ ), e assim  $V_{i+\frac{1}{2}}^{n+\frac{1}{2}} = v^n \Delta t^{n+\frac{1}{2}}$ . Utilizando o Lema de Harten [32], vemos que esse método será TVD (Total Variation Diminishing) se:

$$\forall i \Delta t^{n+\frac{1}{2}} \leq \Delta t_i^H \equiv \frac{\phi \Delta x_i}{|v^n|}. \quad (4.14)$$

Fisicamente, isso significa que o fluxo de fluido (i.e.,  $v\Delta t$ ) se restrinja a, no máximo, o volume de vazio da célula (i.e.,  $\phi\Delta x_i$ ). É fato conhecido que os métodos TVD são estáveis e convergentes [32].

## 4.2 Fluxo convectivo em 2D

Em 2D, usaremos uma versão do *donor cell upwind scheme* ([53]). Nesse método, a massa do *tracer* na célula após um intervalo de tempo é igual ao valor no tempo anterior mais ou menos correções nas regiões trapezoidais associadas às arestas das células.

Como no caso unidimensional, utilizamos uma reconstrução linear por partes. Em cada célula, calculamos os incrementos:

$$\Delta c_{1,ij}^n = \text{muscl}(c_{ij}^n - c_{i-1,j}^n, c_{i+1,j}^n - c_{ij}^n)$$

e

$$\Delta c_{2,ij}^n = \text{muscl}(c_{ij}^n - c_{i,j-1}^n, c_{i,j+1}^n - c_{ij}^n)$$

além do volume dos poros na célula:

$$A_{ij} = \phi \Delta x_{1i} \Delta x_{2j}. \quad (4.15)$$

Definindo a aproximação

$$V_{i+\frac{1}{2},j}^{n+\frac{1}{2}} \approx (v_R)_{i,j} \Delta x_{2j} \Delta t^{n+\frac{1}{2}} \quad (4.16)$$

e equações análogas para  $V_{i,j+\frac{1}{2}}^{n+\frac{1}{2}}$  (lembrando que  $v_L$ ,  $v_R$ ,  $v_U$  e  $v_D$  foram definidos no Capítulo 3), computamos as concentrações nas arestas:

$$c_{i+\frac{1}{2},j}^n = \begin{cases} c_{ij}^n + \frac{1}{2} \left( 1 - \frac{V_{i+\frac{1}{2},j}^{n+\frac{1}{2}}}{A_{ij}} \right) \Delta c_{1,ij}^n & \text{se } V_{i+\frac{1}{2},j}^{n+\frac{1}{2}} \geq 0 \\ c_{i+1,j}^n - \frac{1}{2} \left( 1 + \frac{V_{i+\frac{1}{2},j}^{n+\frac{1}{2}}}{A_{i+1,j}} \right) \Delta c_{1,i+1,j}^n & \text{se } V_{i+\frac{1}{2},j}^{n+\frac{1}{2}} < 0 \end{cases} \quad (4.17)$$

( $c_{i,j+\frac{1}{2}}^n$  é similar) e proceder para calcular o fluxo numérico

$$f_{i+\frac{1}{2},j}^n = V_{i+\frac{1}{2},j}^{n+\frac{1}{2}} c_{i+\frac{1}{2},j}^n \quad (4.18)$$

(com  $f_{i+\frac{1}{2},j}^n$  similar). Agora, *corrigimos* os  $c_{i+\frac{1}{2},j}^n$  e afins:

$$c_{i+\frac{1}{2},j}^{n+\frac{1}{2}} = \begin{cases} c_{i+\frac{1}{2},j}^n - \frac{f_{i,j+\frac{1}{2}}^n - f_{i,j-\frac{1}{2}}^n}{2A_{ij}}, & \text{se } V_{i+\frac{1}{2},j}^{n+\frac{1}{2}} \geq 0, \\ c_{i+\frac{1}{2},j}^n - \frac{f_{i+1,j+\frac{1}{2}}^n - f_{i+1,j-\frac{1}{2}}^n}{2A_{i+1,j}}, & \text{se } V_{i+\frac{1}{2},j}^{n+\frac{1}{2}} < 0, \end{cases} \quad (4.19)$$

com uma equação análoga para  $c_{i,j+\frac{1}{2}}^{n+\frac{1}{2}}$ . Calculamos os fluxos corrigidos

$$f_{i+\frac{1}{2},j}^{n+\frac{1}{2}} = V_{i+\frac{1}{2},j}^{n+\frac{1}{2}} c_{i+\frac{1}{2},j}^{n+\frac{1}{2}}, \quad (4.20)$$

computando  $f_{i,j+\frac{1}{2}}^{n+\frac{1}{2}}$  de maneira análoga. Finalmente, aplicamos a diferença conservativa

$$c_{ij}^{n+1} = c_{ij}^n - \frac{1}{A_{ij}} \left[ f_{i+\frac{1}{2},j}^{n+\frac{1}{2}} - f_{i-\frac{1}{2},j}^{n+\frac{1}{2}} + f_{i,j+\frac{1}{2}}^{n+\frac{1}{2}} - f_{i,j-\frac{1}{2}}^{n+\frac{1}{2}} \right]. \quad (4.21)$$

As equações (4.15) - (4.21) constituem o esquema  $2D$  para o cálculo das concentrações em cada instante de tempo. De acordo com [52], o esquema será estável e de segunda ordem caso

$$\max \left\{ \frac{V_{i+\frac{1}{2},j}^{n+\frac{1}{2}+} - V_{i-\frac{1}{2},j}^{n+\frac{1}{2}-}}{A_{ij}}, \frac{V_{i,j+\frac{1}{2}}^{n+\frac{1}{2}+} - V_{i,j-\frac{1}{2}}^{n+\frac{1}{2}-}}{A_{ij}} \right\} \leq 1 \quad (4.22)$$

em que  $V^+$  e  $V^-$  são as partes positiva e negativa de  $V$ :

$$V^+ = \max \{V, 0\} \text{ e } V^- = \min \{V, 0\}. \quad (4.23)$$

No caso de uma malha uniforme, podemos equivalentemente definir os incrementos temporais direcionais

$$\frac{1}{\Delta t_{1,ij}} = \frac{\mathbf{v}_{i+\frac{1}{2},j}^{n+\frac{1}{2}+} - \mathbf{v}_{i+\frac{1}{2},j}^{n+\frac{1}{2}-}}{\phi_{ij} \Delta x_{ij}} \quad (4.24)$$

e

$$\frac{1}{\Delta t_{2,ij}} = \frac{\mathbf{v}_{i,j+\frac{1}{2}}^{n+\frac{1}{2}+} - \mathbf{v}_{i,j+\frac{1}{2}}^{n+\frac{1}{2}-}}{\phi_{ij} \Delta x_{ij}} \quad (4.25)$$

restringindo o incremento de tempo  $\Delta t^{n+\frac{1}{2}}$  de forma que

$$\Delta t^{n+\frac{1}{2}} \max \left\{ \frac{1}{\Delta t_{1,ij}}, \frac{1}{\Delta t_{2,ij}} \right\} \leq 1. \quad (4.26)$$

Note que não exigimos que o método bidimensional seja TVD, pois é fato conhecido que os esquemas TVD são, no máximo, de primeira ordem [31].

### 4.3 Fluxo difusivo

Espera-se que a difusão desempenhe um papel pequeno no fluxo mássico, sendo uma pequena correção do fluxo convectivo. Dessa forma, utilizaremos integração explícita no tempo. Um tratamento mais acurado exigiria um método implícito, mas os custos computacionais extras seriam grandes comparados ao efeito esperado da difusão.

No escoamento unidimensional, aproximamos o fluxo difusivo por:

$$\int_{\partial\Omega} \int_{t^n}^{t^{n+1}} \left[ \left( \alpha_l |v| + \frac{\phi\delta}{\tau} \right) \frac{\partial c}{\partial x} \right]_{x_{i+\frac{1}{2}}} \approx f_{i+\frac{1}{2}}^{D,n+\frac{1}{2}} \quad (4.27)$$

$$\equiv \left( \alpha_l \left| V_{i+\frac{1}{2}}^{n+\frac{1}{2}} \right| + \frac{\phi\delta\Delta t^{n+\frac{1}{2}}}{\tau} \right) \frac{\Delta c_{i+\frac{1}{2}}^n}{\Delta x_{i+\frac{1}{2}}}. \quad (4.28)$$

Aqui usamos a notação  $\Delta c_{i+\frac{1}{2}}^n \equiv c_{i+1}^n - c_i^n$  e  $\Delta x_{i+\frac{1}{2}} \equiv \frac{1}{2}(\Delta x_i + \Delta x_{i+1})$ .

Há uma restrição quanto aos incrementos temporais na utilização do fluxo difusivo juntamente com o convectivo. Seguindo [52], caso a desigualdade

$$\alpha_l \ll \frac{2\Delta x_{i+\frac{1}{2}}\Delta x_{i-\frac{1}{2}}}{\Delta x_{i+\frac{1}{2}} + \Delta x_{i-\frac{1}{2}}} \quad (4.29)$$

seja verdadeira, o tratamento da difusão não implicará em uma restrição adicional significativa no incremento temporal. Nas nossas simulações, verificamos que uma redução de 5% é suficiente para garantir a estabilidade do método.

O tratamento da difusão em múltiplas dimensões é análogo. Obtemos as velocidades de Darcy pela solução do sistema linear, como visto no capítulo anterior. A partir delas, e com as concentrações de cada célula, obtemos as derivadas necessárias para o cálculo do fluxo difusivo, de forma a atualizar as concentrações de cada célula.

# Capítulo 5

## Refinamento Adaptativo da Malha

### 5.1 Malhas Adaptativas

A solução numérica de EDPs pode muitas vezes exigir uma malha não-uniforme, que se adapte ao problema, sendo mais refinada onde a solução ou as suas derivadas variem mais rapidamente e menos refinada onde essa variação ocorra menos abruptamente. Em sistemas dependentes do tempo, essa necessidade é mais expressiva, uma vez que a natureza dinâmica desses problemas pode produzir regiões de rápida variação na solução.

Há essencialmente dois métodos de se modificar malhas. A primeira é movê-las juntamente com as frentes de onda (vide [4, 14, 15, 38]). O segundo método não movimentava a malha no tempo, mas refina as regiões de grande variação da solução. Nessa situação, a cada instante de tempo, a malha deve ser atualizada de forma a refletir a dinâmica do problema (veja [3, 5, 8, 19, 39, 41, 43, 44, 45]). Alguns autores, inclusive, preferem combinar os dois métodos, como pode ser visto em [2].

Uma malha é formada por células que cobrem todo o domínio estudado, cada uma delas associada a um nó da estrutura de dados. Dada uma malha inicial, que é representada como a raiz de uma árvore, *nós-filho* com graus crescentes de refinamento podem ser criados. Cada nó pode agora ser um *nó-pai* para os refinamentos seguintes. Esse procedimento pode ser executado em regiões que atendam a um certo critério de refinamento de acordo com o problema em questão. Dessa forma, diferentes graus de refinamento podem ser encontrados em regiões adjacentes do domínio estudado [12].

De acordo com [47], esse procedimento é conhecido como *quadtree*, uma classe de estruturas de dados hierárquica cuja propriedade em comum a todas é serem baseadas no princípio da decomposição recursiva do espaço. Em [36], uma nova estrutura de dados, chamada de *fully threaded tree* (FFT), é apresentada e aplicada a simulação do escoamento de fluidos. FFT representa um avanço comparado às abordagens baseadas em árvores mencionadas. Cada nó (seja ele uma *folha* ou não) possui fácil acesso a seus filhos, vizinhos e pais, por meio de ponteiros especiais. Mais ainda, no FFT, o acesso a células vizinhas é mais rápido, pois não é necessário percorrer toda a árvore para tal.

Implementações do tipo *quadtrees* permitem que regiões adjacentes do domínio possuam diferentes níveis de refinamento. Como consequência, para alcançar células vizinhas, o algoritmo realiza uma busca na árvore. FFT consegue evitar esses custos permitindo a diferença de apenas um nível de refinamento entre células vizinhas. No entanto, essa restrição impõe um efeito de médio alcance na malha: se uma célula necessita de mais refinamento, seus vizinhos terão de ser refinados também. Há, então, uma perda de localidade no refinamento, impondo um custo computacional adicional.

Nesse trabalho, será utilizada a estrutura de dados *Autonomous Leaves Graph (ALG)*, descrita em [12]. Trata-se de uma estrutura simples, embora flexível, que nos proporciona um refinamento local da malha, a um baixo custo computacional. Nele, em vez da estrutura *quadtree* convencional, é criado um grafo no qual os nós *filho* (os quais serão chamados *folhas*) tornam-se autônomos quando os respectivos nós *pai* são deletados. Além disso, essa estrutura permite a coexistência de vizinhos com graus de refinamento (arbitrariamente) diferentes – por meio dos chamados *nós de transição* – bem como a comunicação rápida entre esses vizinhos ([12]).

O ordenamento das células é feito por meio de uma *space-filling curve*. A vantagem desse tipo de curva é a utilização de um método simples e sistemático para visitar todas as células da malha. Além disso, *space-filling curves* possuem um alto grau de localidade (vide [46, 47]). Nesse trabalho, será utilizada a chamada *Curva de Hilbert Modificada*, uma versão da curva de Hilbert tradicional, mas adaptada a malhas de diferentes níveis de refinamento. Essa curva foi proposta em [13] e descrita em detalhes em [15]. Apresentaremos agora o funcionamento do ALG.

## 5.2 A estrutura de dados *Autonomous Leaves Graph* (ALG)

A explicação e as ilustrações dessa seção até o fim do capítulo foram retirados de [12]. A estrutura de grafo utilizada no ALG é constituída por dois tipos de nós: os *cell nodes*, que correspondem às células da malha, e os *transition nodes*, que são usados para conectar *cell nodes* de diferentes níveis de refinamento.

No caso bidimensional, cada *cell node* possui quatro ponteiros, chamados norte, sul, leste e oeste, orientados respectivamente na direção do eixo  $y$  positivo,  $y$  negativo,  $x$  positivo e  $x$  negativo. Esses ponteiros podem apontar tanto para *cell nodes* quanto para *transition nodes*. Cada *transition node* possui apenas três ponteiros, para conectar *cell* ou *transition nodes*.

Os *cell nodes* possuem variáveis adicionais correspondentes às coordenadas espaciais dos seus centros e as propriedades físicas pertinentes. Ambos os nós possuem informação sobre o seu tipo (*cell* ou *transition node*) e sobre o seu nível de refinamento. Por convenção, representaremos os *cell nodes* por pontos negros, e os *transition nodes* por pontos brancos.

### 5.2.1 A estrutura da malha

Para descrever a malha, mostraremos o caso do quadrado unitário (embora a generalização possa ser feita para malhas com polígonos arbitrários, em duas ou mais dimensões espaciais). Começamos com uma malha constituída por quatro células, cada uma delas identificadas pelo seu centro:  $(0.25, 0.25)$ ,  $(0.75, 0.25)$ ,  $(0.25, 0.75)$  e  $(0.75, 0.75)$ . Cada um dos quatro *cell nodes* possuem elos orientados nas quatro direções: norte, sul, leste e oeste. Como resultado, temos o diagrama representado na Figura 5.1.

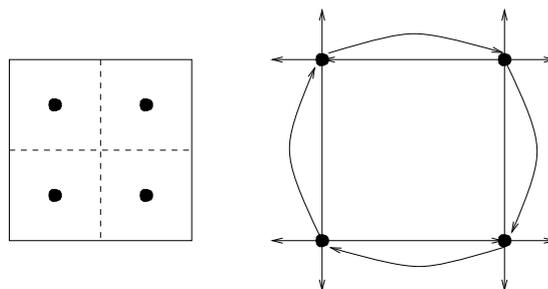


Figura 5.1: Malha de 4 células

Os elos restantes, que não apontam para um dos quatro nós no quadrado são então

conectados aos quatro *transition nodes* mostrados na Figura 5.2.

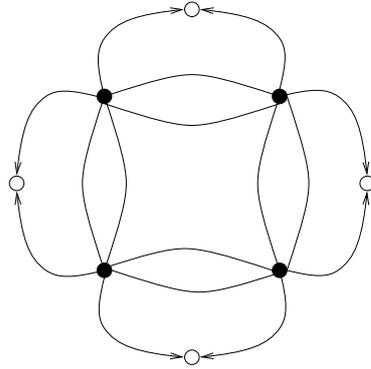


Figura 5.2: Definindo os nós de transição

Finalmente, como mostrado na Figura 5.3, esses *transition nodes* são “aterrados” (ou seja, apontam para um ponteiro nulo).

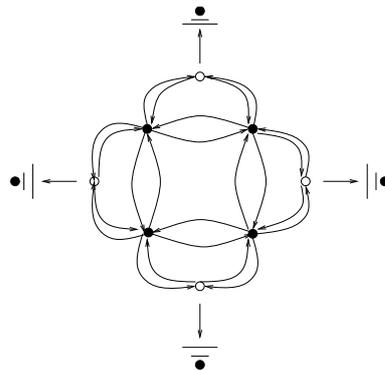


Figura 5.3: Esquema completo

De forma a simplificar a representação gráfica, cada par de setas conectando dois nós será substituídos por uma única linha, como mostrado na Figura 5.4.

Quatro células com o mesmo nível de refinamento e originadas do mesmo verticé  $v$  são chamadas de *cache* (*bunch*), com pai  $v$ . O nó pai é deletado, mas cada célula é munida de um identificador de forma a determinar que as quatro células pertencem ao mesmo cache.

### 5.3 Refinamento da malha

Para mostrar como se realiza o refinamento da malha, suponha que a célula centrada em  $(0.25, 0.75)$  seja escolhida para ser refinada. Nesse caso, a configuração mostrada em na Figura 5.5(a) será criada:

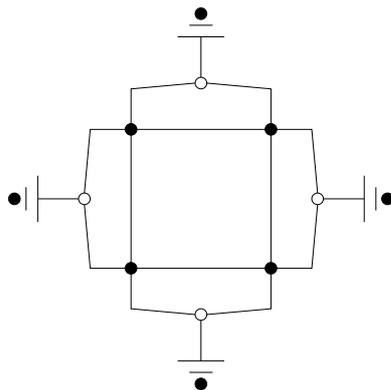


Figura 5.4: Esquema não-direcional

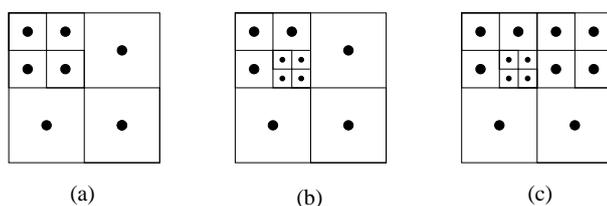


Figura 5.5: Sucessão de refinamentos

Esse refinamento é implementado substituindo a estrutura básica representando os elos do nó em questão (parte esquerda da Fig 5.6) pela estrutura desenvolvida para o quadrado unitário (parte direita da Fig 5.7). Cada nó  $(a, b)$  no centro da célula de lado  $c$  a ser refinada é substituído pelos nós  $(a - c/4, b - c/4)$ ,  $(a - c/4, b + c/4)$ ,  $(a + c/4, b + c/4)$  e  $(a + c/4, b - c/4)$ . Os quatro elos partindo dos *transition nodes* são então conectados aos vizinhos do nó que está sendo substituído. O grafo resultante é exibido na figura 5.7; o número próximo a cada nó indica o seu nível de refinamento.

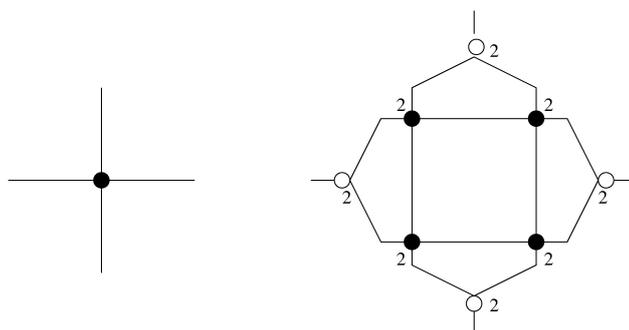


Figura 5.6: Elos de um nó e estrutura básica de refinamento

Consideremos agora um nível a mais de refinamento, como mostrado na Figura 5.5(b). A aplicação do mesmo princípio para o refinamento resulta no grafo da Figura 5.8:

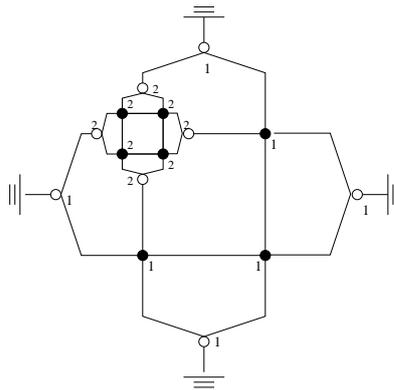


Figura 5.7: Refinando a célula noroeste

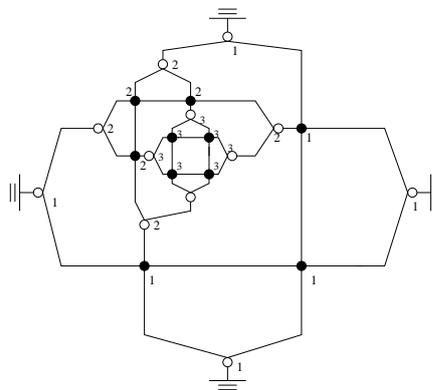


Figura 5.8: Mais um nível de refinamento

## 5.4 Desrefino da malha

Antes de entrar em detalhes sobre o processo de desrefino, devemos ter em mente que, para manter a estrutura básica de blocos do grafo, é necessário que todas as quatro células que serão desrefinadas pertençam ao mesmo *bunch*, permitindo a recuperação da configuração anterior. Essa condição garante que configurações antigas da malha possam ser recuperadas executando-se mudanças locais mutuamente independentes, mesmo após um número arbitrariamente grande de refinamentos e desrefinamentos. O procedimento de desrefino pode ser esquematizado da seguinte forma:

1. Transformação do cacho a ser desrefinado em um único nó
2. Alimentação desse nó com as variáveis pertinentes (coordenadas espaciais, nível e parâmetros físicos relativos ao problema)
3. Conexão do novo nó com seus vizinhos
4. Simplificação da malha, eliminando nós desnecessários

A conexão do novo nó com seus vizinhos é feita com a criação de quatro *transition nodes*, com o mesmo nível de refinamento do *bunch* original. Ilustremos a seqüência de desrefinamento com as figuras abaixo:

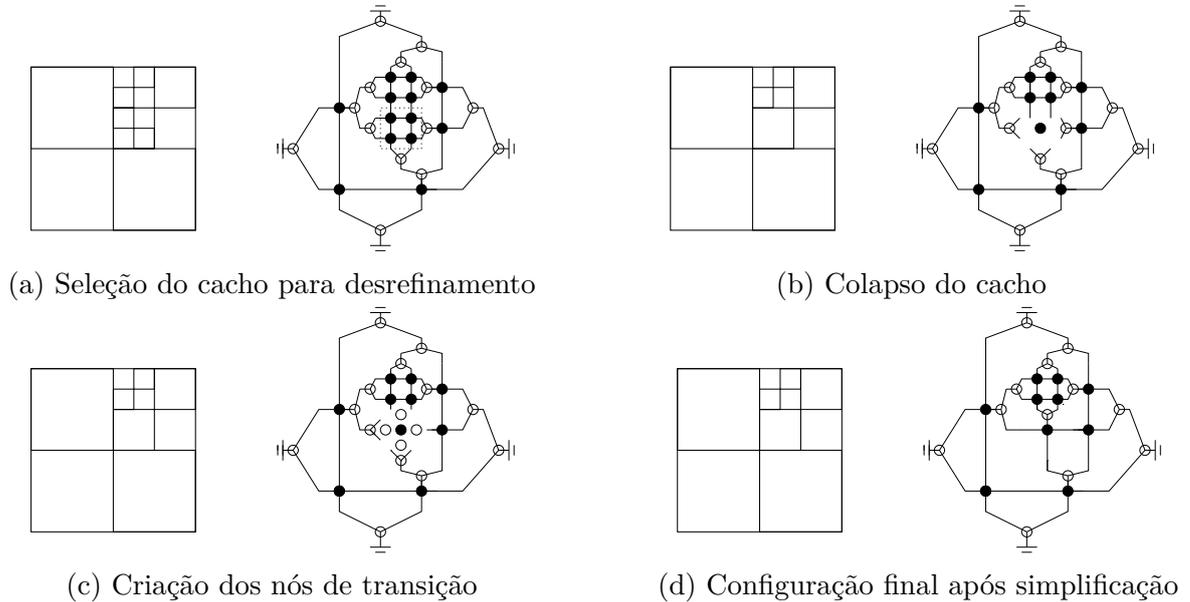


Figura 5.9: Seqüência de desrefinamento

Adotando as estratégias acima, a configuração mostrada na Figura 5.9a torna-se aquela mostrada na Figura 5.9d. Note as três simplificações que ocorreram nesse exemplo.

## 5.5 Ordenação Total da Malha

A ordenação das células da malha é feita utilizando uma *Curva de Hilbert Modificada* (MHC). Trata-se de um algoritmo baseado na curva de Hilbert original, mas adaptado à divisão do domínio em uma malha não-uniforme. Essa ordenação é implementada por meio de uma lista, e a cada vez que um refinamento é executado, as novas células são inseridas nessa lista. O procedimento detalhado para a construção da MHC pode ser encontrado em [12]. Podemos ver um exemplo da MHC na Figura 5.10 abaixo.

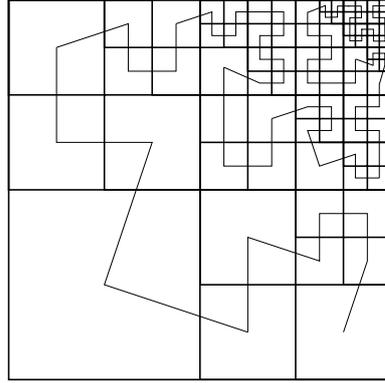


Figura 5.10: Exemplo de ordenação pela Curva de Hilbert Modificada

## 5.6 Refinando e Desrefinando

Descreveremos aqui como se dá o refinamento e o desrefinamento da malha em termos das propriedades físicas armazenadas nas células.

Temos, no problema, um campo de velocidades estático, em regime estacionário. Esse campo causa o transporte convectivo do *tracer* de célula para célula. Utilizamos como critério de refinamento a norma (da soma) do gradiente de concentração; caso o seu valor fosse superior a um limite predeterminado, a célula seria refinada.

Resta-nos saber como calcular os valores de pressão e velocidade nas células refinadas. Nossa primeira abordagem foi realizar um cálculo local, resolvendo a Equação de Darcy com condições de contorno iguais às propriedades da célula a ser refinada. Esse procedimento mostrou-se ineficaz, pois a solução obtida se afastava muito daquela obtida com a malha uniforme (como nosso problema não tem solução analítica, a alternativa é a comparação com os resultados da aplicação do mesmo método a uma malha uniforme).

Dessa forma, apelamos para um método diferente. No início da simulação, resolve-se a Equação de Darcy no maior nível de refinamento permitido. Armazenamos esse resultado à parte na memória (numa malha *auxiliar*), e buscamos informação ali sempre que necessário. Ao refinar uma célula da malha, percorremos essa malha auxiliar (que contém a melhor informação física disponível), e calculamos as médias necessárias para definir as propriedades das células refinadas. Denotaremos por  $I$  e  $J$  a posição espacial de uma célula da malha do problema e por  $i$  e  $j$  a posição de uma célula na malha auxiliar. Quando a aresta da malha auxiliar  $S_{i+\frac{1}{2},j}$  está contida na aresta  $S_{I+\frac{1}{2},J}$ , calculamos as médias da seguinte maneira:

$$V_{I+\frac{1}{2},J} = \sum_{S_{i+\frac{1}{2},j} \subset S_{I+\frac{1}{2},J}} V_{i+\frac{1}{2},j} \quad (5.1)$$

$$p_{I+\frac{1}{2},J} = \frac{1}{\Delta y_{IJ}} \sum_{S_{i+\frac{1}{2},j} \subset S_{I+\frac{1}{2},J}} p_{i+\frac{1}{2},j} \Delta y_{ij} \quad (5.2)$$

e se a célula  $\Omega_{ij}$  está contida em  $\Omega_{IJ}$ :

$$p_{IJ} = \frac{1}{\Delta x_{IJ} \Delta y_{IJ}} \sum_{\Omega_{ij} \subset \Omega_{IJ}} p_{ij} \Delta x_{ij} \Delta y_{ij}. \quad (5.3)$$

Essas equações garantem a *conservação* da massa do fluido. A Eq. (5.1) diz que o fluxo volumétrico na aresta de uma célula menos refinada é a soma dos fluxos volumétricos nas arestas das células mais refinadas. Equações (5.2) e (5.3) nos dizem que as pressões, tanto nas faces quanto nos centros das células, são médias das pressões nas respectivas células mais refinadas. Quanto à concentração do *tracer*, as células refinadas recebem o mesmo valor da célula menos refinada original, pois não há como se determinar qual a proporção de *tracer* que deve ir para cada nova célula.

O procedimento de resolver a Equação de Darcy inicialmente para toda a malha no nível de refinamento máximo requer um certo esforço computacional. Porém, lembramos que o sistema linear será resolvido apenas uma vez: os cálculos para a atualização da concentração do *tracer* nas células usam um método *explícito*. Assim, esse custo computacional inicial é compensado por não termos que resolver um novo sistema para determinar o campo de velocidades a cada iteração na malha não-uniforme.

O desrefinamento é inteiramente análogo: caso um grupo de células com o mesmo nível de refinamento e pertencentes ao mesmo cacho tenham um gradiente de concentração menor que um valor limite, efetuamos o desrefinamento, como visto na seção 5.2. Nesse caso, para esse grupo de células, calculamos as médias pelas equações (5.1) - (5.3). Além disso, calculamos a concentração média do *tracer*:

$$c_{IJ} = \frac{1}{\Delta x_{IJ} \Delta y_{IJ}} \sum_{\Omega_{ij} \subset \Omega_{IJ}} c_{ij} \Delta x_{ij} \Delta y_{ij}. \quad (5.4)$$

Esses valores médios serão as propriedades físicas da célula desrefinada. Note que a

Equação (5.4) conserva a massa em cada célula, como era de se esperar.

Podemos resumir, então, o procedimento adotado na simulação no pseudocódigo:

- 1: Definir o nível máximo de refinamento
- 2: Definir as condições de contorno
- 3: Montar a matriz de rigidez da malha
- 4: **if** Pressão especificada em toda a fronteira **then**
- 5:     Resolução do sistema pelo CG
- 6: **else**
- 7:     Fatoração LU incompleta
- 8:     Resolução do sistema pelo BiCGSTAB
- 9: **end if**
- 10: Definir condição inicial das concentrações
- 11: **while** Massa total for positiva **do**
- 12:     Refinar\Desrefinar a malha
- 13:     Calcular  $\Delta t$  para esta iteração
- 14:     Atualizar as concentrações nas células
- 15: **end while**

# Capítulo 6

## Implementação e resultados numéricos

Mostraremos nesta seção os resultados numéricos obtidos com a abordagem computacional descrita nos capítulos anteriores. O simulador foi programado na linguagem *C++*, com gráficos produzidos via OpenGL e compilado com o Dev Cpp 4.9.9.3, e todos os testes foram executados num Intel(R) Core(TM) i5 2.50 GHz equipado com Windows 7 Home Premium (C).

Vimos nos capítulos anteriores que o programa pode ser dividido, grosso modo, em duas partes: na primeira, o cálculo dos campos de pressão e de velocidades é feito, por meio da resolução de um sistema linear. Na segunda parte, com os campos de velocidades em mãos, realiza-se o cálculo da transferência de massa entre as células da malha. Vejamos primeiro os resultados obtidos na resolução do sistema linear.

### 6.1 Cálculo do campo de pressões e de velocidades

Como vimos no Capítulo 3, foram utilizadas duas abordagens diferentes: uma para o caso de pressões especificadas no contorno, e outra para a condição de contorno mista, na qual  $p$  era especificada em uma parte do contorno e  $v$  na outra. Essas abordagens nos levam a sistemas diferentes, e veremos agora alguns exemplos do resultado obtido em cada um desses casos.

### 6.1.1 Exemplo Numérico 1

Para ilustrar a aplicação do método ao caso de pressões especificadas, utilizamos uma pressão igual a 2 atm nas fronteiras norte e oeste, e igual a 1 atm nas fronteiras sul e leste de um domínio quadrado, de lado 1m. Foi utilizado um campo de permeabilidades uniforme e isotrópico igual a 1000 milidarcy, e uma porosidade igual a 0,27. O fluido simulado foi a água, com viscosidade igual a 1cP.

Para a solução do sistema, aplicamos o Gradiente Conjugado (CG) ao sistema linear obtido. Por envolver apenas multiplicações matriz-vetor, uma forma bastante eficiente de se aplicar o CG é utilizar a própria malha para o armazenamento da matriz e para realizar as operações necessárias. Dessa forma, nenhum pacote extra de álgebra linear precisa ser utilizado, otimizando o uso de memória e de processamento.

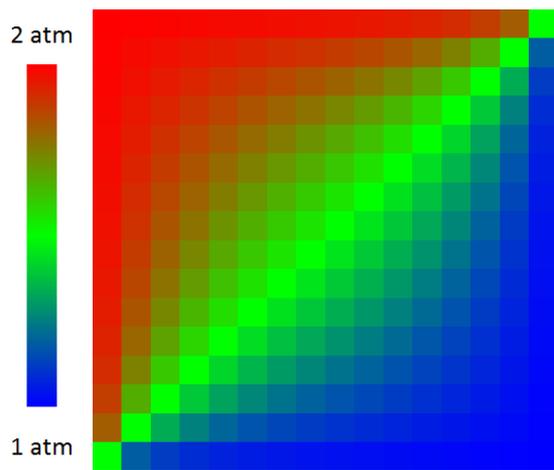
Exibimos na Figura 6.1 o campo de pressões obtido em diferentes níveis de refinamento.

### 6.1.2 Exemplo Numérico 2

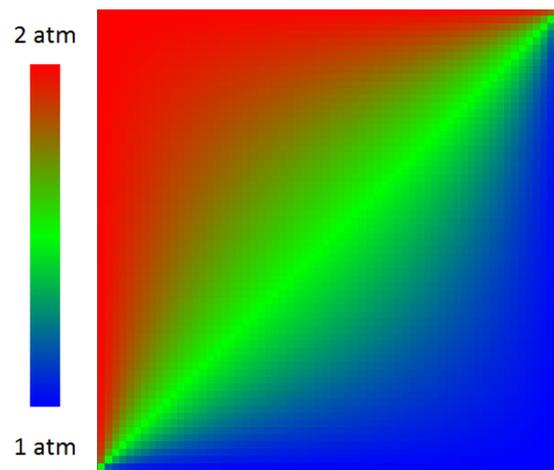
Gostaríamos de verificar a exatidão do método empregado. No caso geral, não existe solução analítica para a Lei de Darcy. Porém, condições de contorno bem-escolhidas nos levam a um resultado conhecido. Sendo assim, realizamos a simulação com condição de contorno mista:  $v = 0$  (*no-flow*) nas fronteiras norte e sul,  $p = 2$  atm na fronteira oeste e  $p = 1$  atm na fronteira leste.

Os testes iniciais indicaram a necessidade de um condicionamento: o *solver* não convergia utilizando simplesmente o BiCGSTAB aplicado a esse sistema. Buscamos, então, alternativas que fossem satisfatórias em termos de eficiência e praticidade. Há várias bibliotecas para C++ especializadas em álgebra linear, como por exemplo *LAPACK*, *Amadillo* e *Eigen*. Existem também aplicações como o SciLab e MATLAB(R) que possuem módulos para a resolução de sistemas.

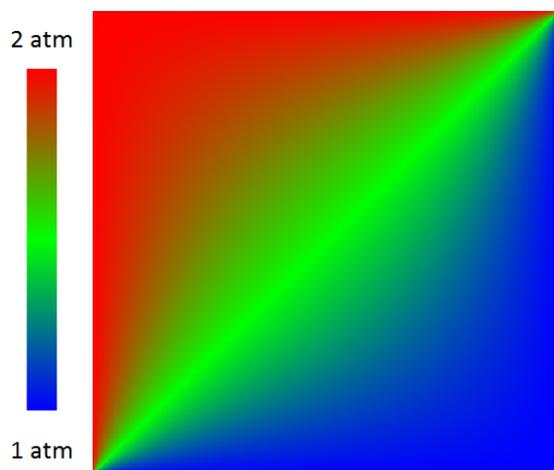
O programa que demonstrou melhor eficiência na resolução do sistema, além de oferecer as ferramentas necessárias para seu uso, foi o MATLAB(R). Sendo assim, utilizamos uma aplicação desenvolvida em MATLAB(R) e compilada (via MATLAB(R) *Compiler*) num arquivo executável *standalone*, que pode ser executado mesmo em máquinas que não possuem MATLAB(R) instalado. Esse arquivo executável lê a matriz de rigidez e o vetor de cargas, realiza a fatoração LU incompleta (iLU) e resolve o sistema utilizando



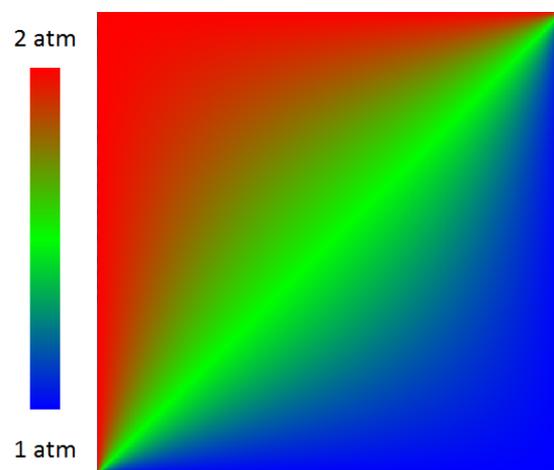
(a) Nível 4



(b) Nível 6



(c) Nível 7



(d) Nível 8

Figura 6.1: Campo de pressões em diferentes níveis de refinamento

o BiCGSTAB. Os arquivos gerados pelo MATLAB(R) *Compiler* gozam de livre uso e distribuição, não implicando em problemas de licença na utilização do simulador.

Utilizando esse programa “misto”, podemos resolver o sistema desse exemplo (e todos os que utilizam uma condição de fronteira mista). Mostramos na Figura 6.2 abaixo o campo de pressões obtido em vários níveis de refinamento.

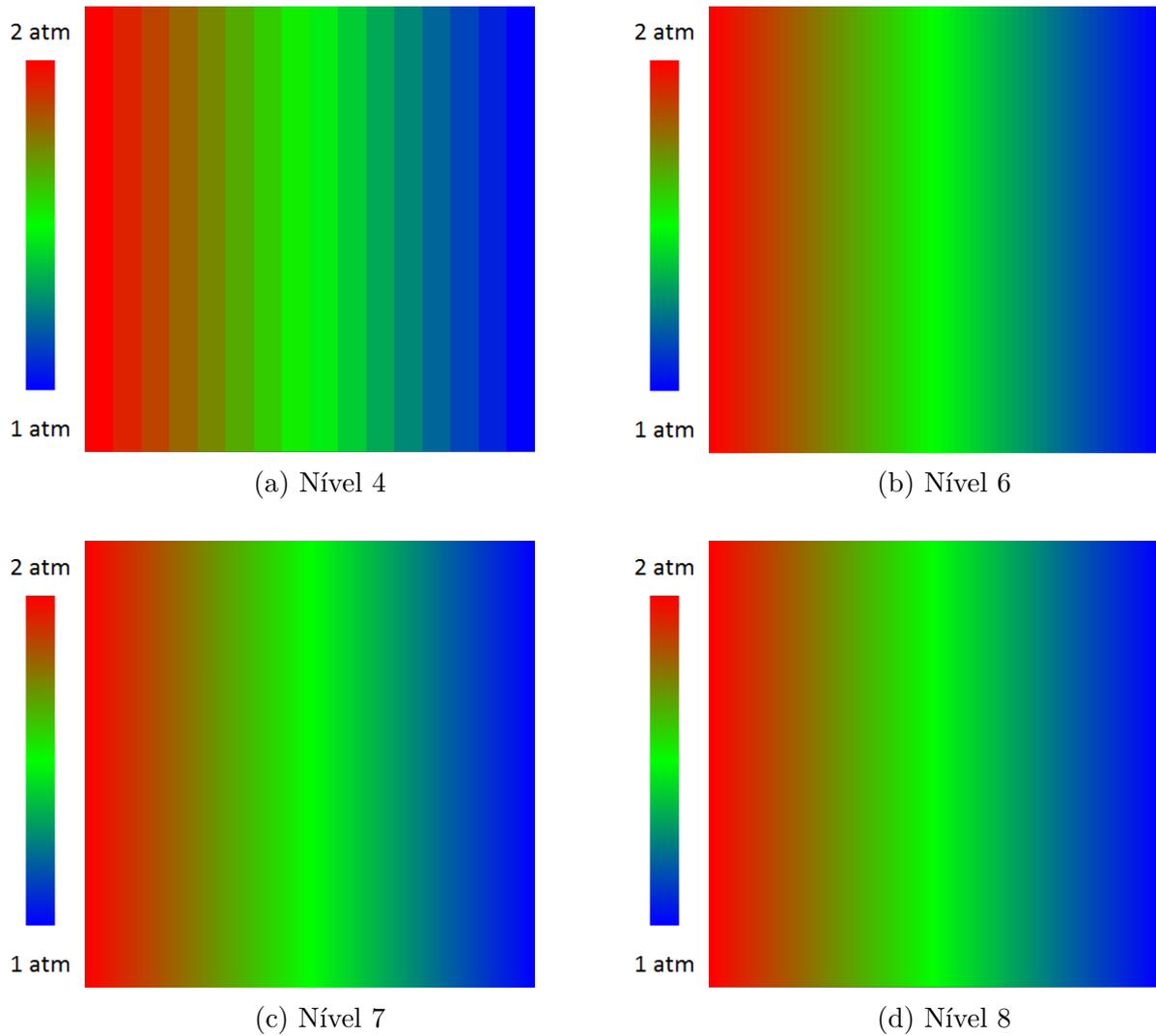


Figura 6.2: Campo de pressões em diferentes níveis de refinamento

Para essas condições de contorno, é fácil ver que a solução analítica é:

$$\begin{aligned}
p(x, y) &= 2 - x \text{ atm} \\
v(x, y) &= \left( \frac{K}{\mu}, 0 \right) \\
&= (1000, 0) \frac{\text{mD-atm}}{\text{cP-m}} \\
&\approx (8.64, 0) \text{ m/dia.}
\end{aligned}$$

Dessa forma, podemos comparar a solução obtida na simulação com a solução analítica. Realizamos a simulação em diversos níveis de refinamento, obtendo valores exatos para as velocidades, pressões nas arestas e pressões no centro das células. O gráfico  $p$  versus  $x$  (Figura 6.3) no nível 4 de refinamento (256 células) ilustra esse resultado.

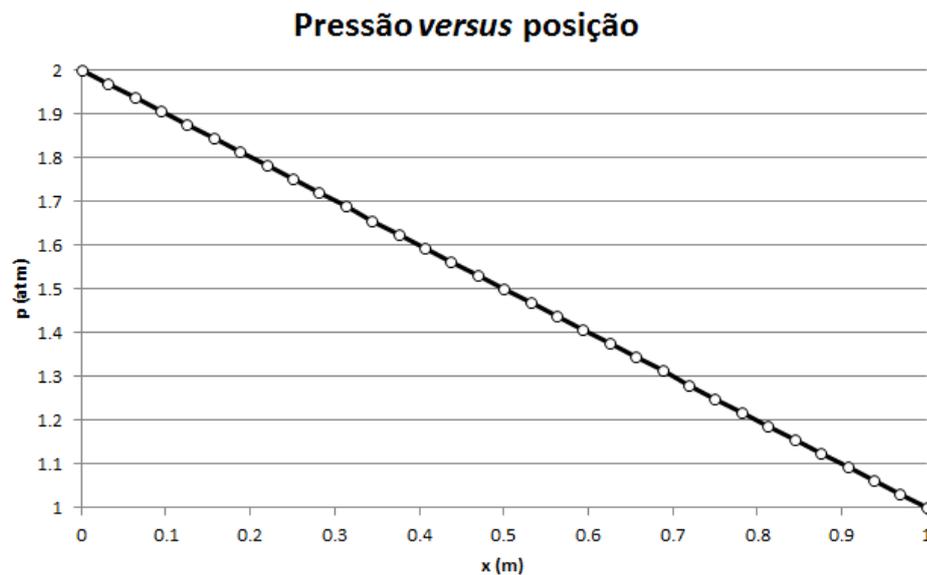


Figura 6.3: Pressão versus posição  $x$

Na figura acima, a linha reta indica a solução analítica, enquanto os círculos denotam a solução numérica.

### 6.1.3 Exemplo Numérico 3

Simulamos também o caso em que a permeabilidade não é igual para todas as células. Isso pode acontecer, por exemplo, quando há rochas diferentes compondo o meio poroso. Nesse caso, ao se desrefinar um cacho que possui células de diferentes permeabilidades, é necessário calcular uma determinada *média* das permeabilidades dessa células. Há várias

maneiras de se definir a permeabilidade média, sendo notórias as técnicas de renormalização ([16, 17, 21, 22, 23]), as médias volumétricas ([34, 35, 55]) e a homogeneização ([1, 6, 20]). Porém, por estar fora do escopo dessa dissertação, simplesmente tomamos o cuidado de não desrefinar cachos de células que possuem permeabilidades diferentes.

Nesse exemplo, colocamos a permeabilidade igual a zero em um certo conjunto das células. Se isso acontece, a velocidade na célula deve ser nula. Nesse caso, certo cuidado deve ser tomado para evitar a divisão por zero na resolução do sistema. Simulamos um domínio quadrado, em cujo centro há um disco de células impermeáveis. Abaixo (Figura 6.4) podemos ver o campo de pressões nos centros das células obtido numa malha de 16384 células.

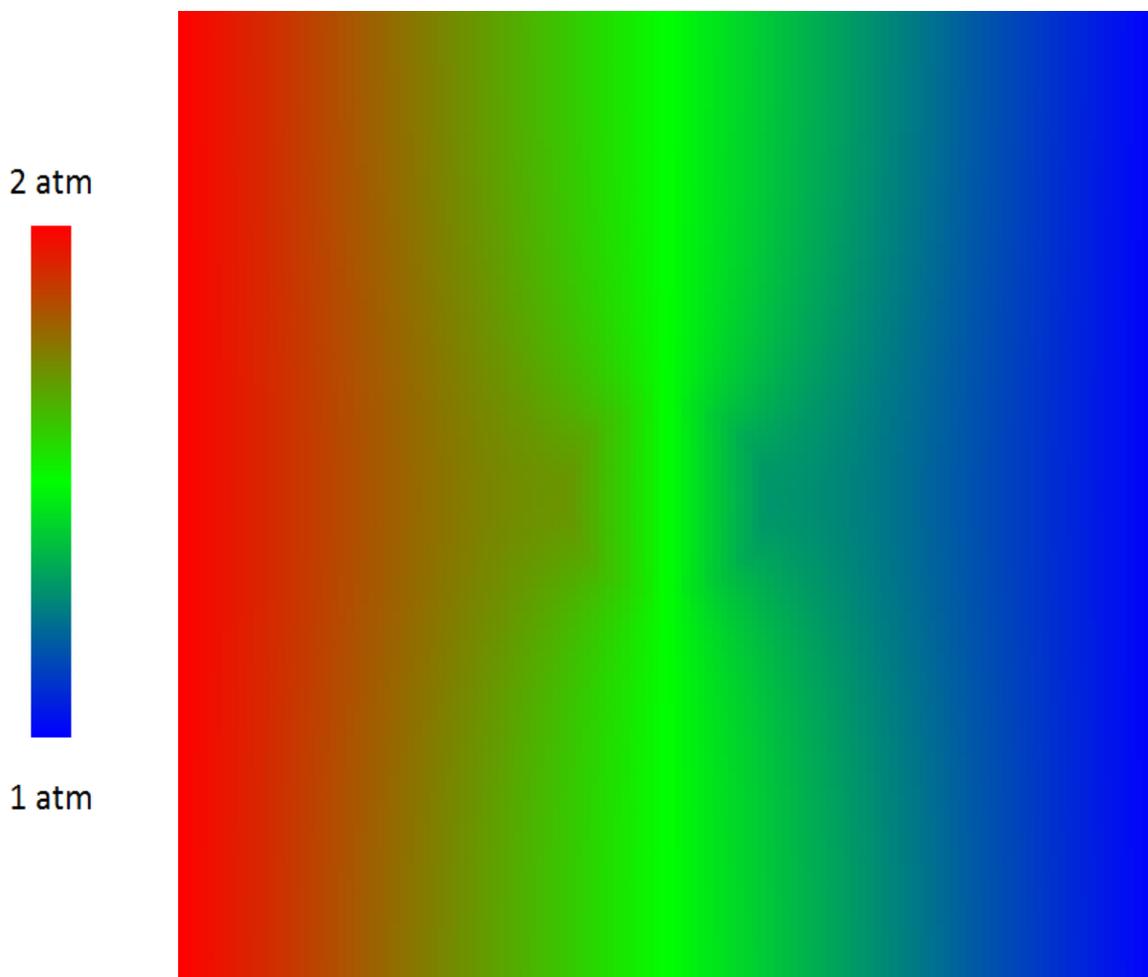


Figura 6.4: Presença de células impermeáveis

Podemos notar uma região circular central no qual a pressão varia de forma diferenciada: o gradiente de pressão é maior nas regiões de maior permeabilidade, resultando num maior fluxo de fluido. Já esperávamos esse resultado, pela própria definição de permeabilidade. Esse comportamento será mais claramente observado na seção seguinte, onde serão mostrados mais detalhes do escoamento.

## 6.2 Transporte de massa e refinamento adaptativo

Exibiremos aqui os resultados obtidos no cálculo da transferência de massa entre as células, evoluindo a concentração do *tracer* com relação ao tempo. Retomaremos, para tal, os exemplos da seção anterior.

### 6.2.1 Exemplo Numérico 1

Utilizaremos nesse exemplo uma concentração inicial igual a 0.8 em um círculo de raio 0.3 centrado na origem. A evolução da concentração do *tracer* ao longo do tempo pode ser vista na Figura 6.5 a seguir.

Podemos notar regiões de maior refinamento onde há maior fluxo de massa, e regiões pouco refinadas onde esse fluxo é baixo. Essa propriedade das malhas adaptativas nos permite reduzir custos computacionais, desde que as regiões de interesse ocupem uma porção relativamente pequena do domínio a cada instante de tempo. A comparação entre os tempos necessários para atualizar as concentrações em malha uniforme e malha adaptativa pode ser vista na tabela abaixo (Tabela 6.1).

Nível	Número de Células	Malha Uniforme(s)	ALG(s)
2	16	6.3E-2	5.84E-2
3	64	0.26	0.22
4	256	1.45	0.31
5	1024	10.28	1.94
6	4096	193.99	12.79
7	16384	2937.59	109.79

Tabela 6.1: Tempo gasto para atualizar as concentrações

Vemos uma clara vantagem na utilização de uma malha adaptativa: no nível 7, por exemplo, o tempo gasto em malha adaptativa para atualizar as concentrações foi menos de 4% do tempo gasto em malha uniforme, com uma diferença de 2827.8s. Essa diferença tende a aumentar com o aumento do número de células, pois enquanto a malha uniforme sempre trabalha no nível mais refinado, a malha adaptativa rapidamente desrefina as células nas quais o fluxo de massa é baixo, realizando menos cálculos desnecessários e reduzindo o custo computacional.

Podemos notar também a coexistência de regiões vizinhas com níveis distintos de refinamento. Essa é uma das características do *ALG* que o coloca em vantagem com relação a outras estruturas de dados, como *quadtrees* e *FTT*.

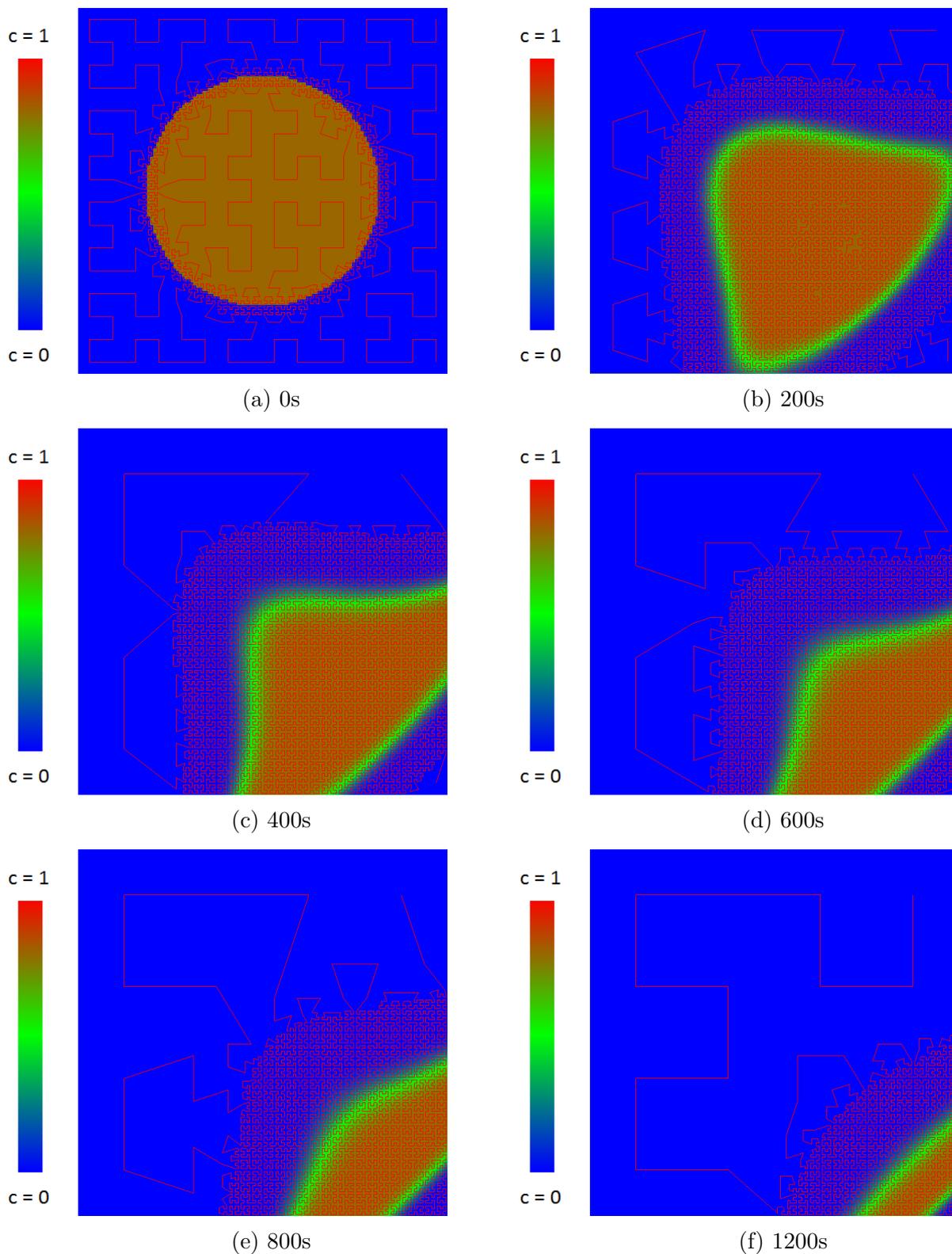


Figura 6.5: Campo de concentrações em diferentes intervalos de tempo

## 6.2.2 Exemplo Numérico 2

Utilizaremos o mesmo campo de concentrações do exemplo anterior. Como vimos na seção anterior, esse problema é análogo a um escoamento unidimensional. Essa característica pode ser vista na Figura 6.6 abaixo.

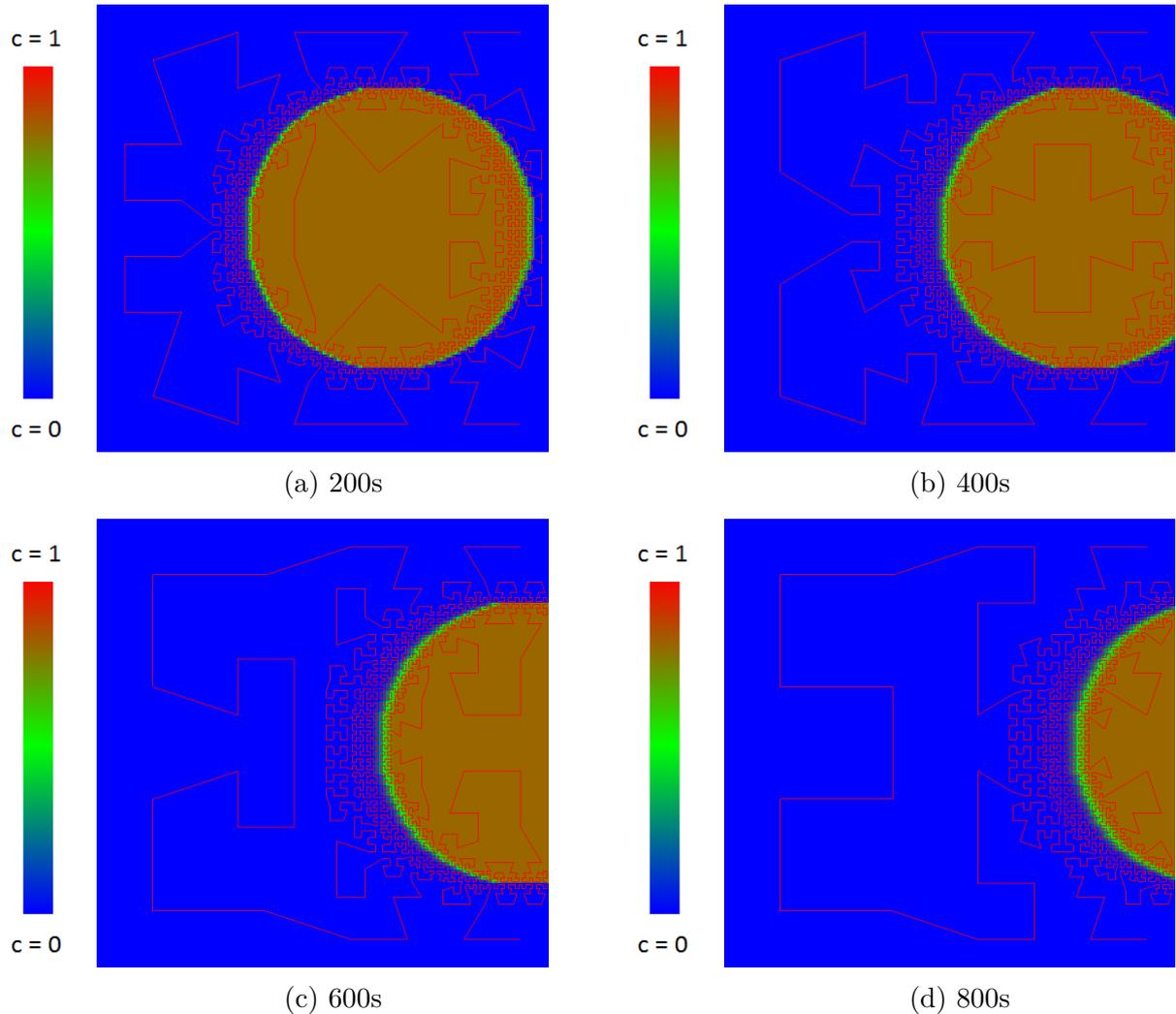


Figura 6.6: Campo de concentrações em diferentes intervalos de tempo

Podemos também ver a vantagem da malha adaptativa sobre a malha uniforme comparando os tempos gastos na atualização das concentrações, na tabela a seguir (Tabela 6.2).

Aqui também notamos a vantagem da utilização da malha adaptativa. No nível 8, por exemplo, o tempo gasto em malha adaptativa para atualizar as concentrações foi pouco mais do que 50% do tempo gasto em malha uniforme, com uma diferença de 24,59s.

Nível	Número de Células	Malha Uniforme(s)	ALG(s)
2	16	1.11E-2	4.37E-3
3	64	7.36E-3	4.00E-3
4	256	2.82E-2	2.73E-2
5	1024	0.14	0.11
6	4096	1.04	0.62
7	16384	9.11	4.88
8	65536	49.93	25.34

Tabela 6.2: Tempo gasto para atualizar as concentrações

### 6.2.3 Exemplo Numérico 3

Nesse exemplo podemos ver o efeito de células com permeabilidade nula. Utilizamos uma concentração inicial de 0.8 em uma faixa vertical na parte oeste do domínio. Abaixo (Figura 6.7) exibimos o campo de concentrações em diferentes intervalos de tempo.

Agora podemos ver claramente que não há transferência de massa para as células de permeabilidade nula. Em vez disso, o campo de concentrações sofre um desvio ao redor dessas células. Convém notar que essa condição ocorre naturalmente: a solução do sistema linear nessas células produz um fluxo nulo na região. Assim, apesar de ser um obstáculo ao escoamento do fluido, não tratamos essas células como contorno, mas sim como uma célula qualquer interna à malha.

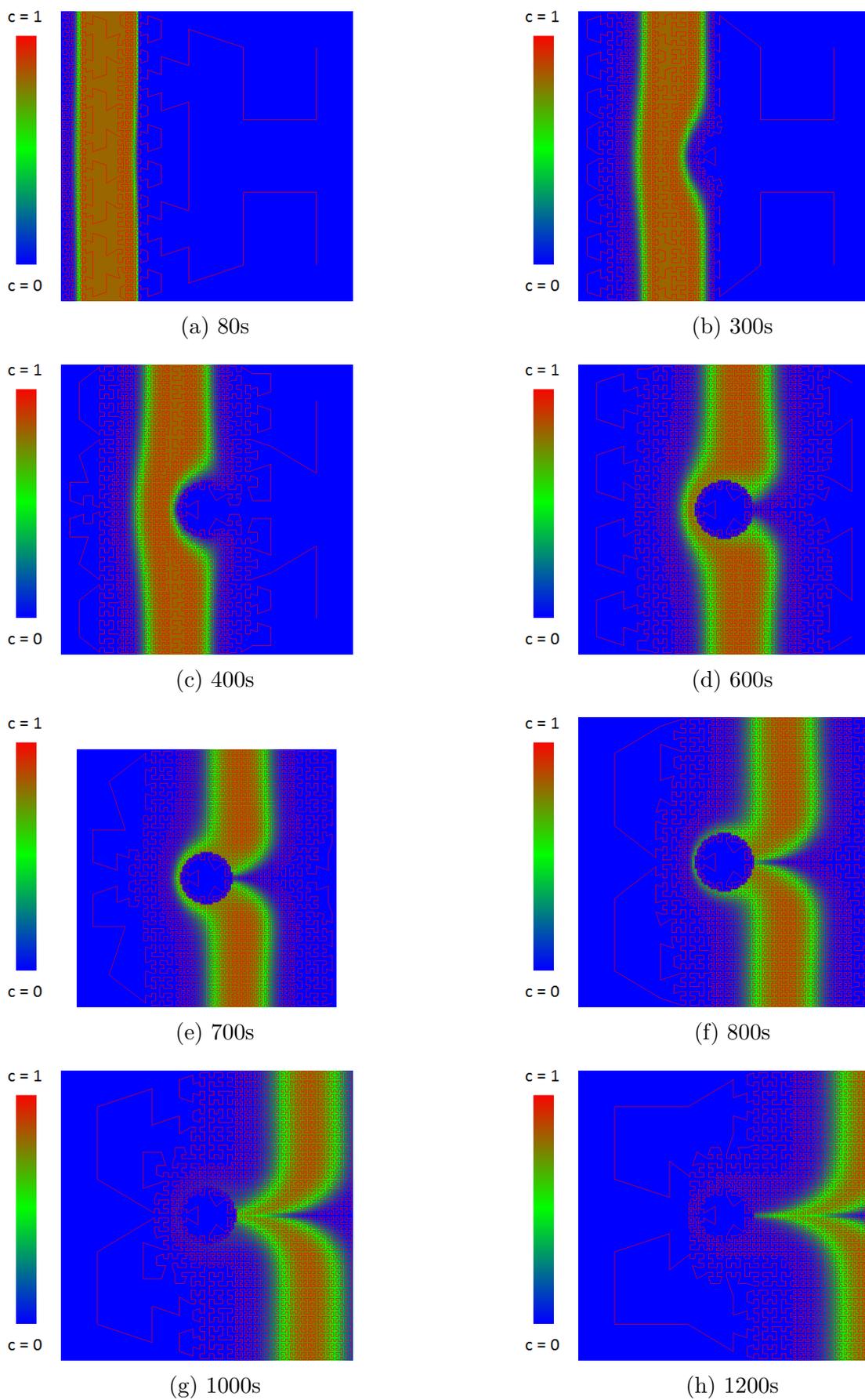


Figura 6.7: Campo de concentrações em diferentes intervalos de tempo

# Capítulo 7

## Conclusões

### 7.1 Perspectivas

#### 7.1.1 Permeabilidade Heterogênea

Nesse trabalho, utilizamos (salvo no último exemplo) uma permeabilidade constante. Normalmente, porém, o tensor de permeabilidade é uma função das coordenadas espaciais. Uma abordagem comum é modelar a permeabilidade como uma variável aleatória na escala mais fina permitida no problema. Apesar de ser aleatória, há uma correlação espacial (que leva em conta as permeabilidades das células vizinhas) como também estão correlacionadas a permeabilidades e a porosidades da células.

Ao se trabalhar com uma permeabilidade heterogênea, surge a dificuldade de definir a média das permeabilidades no desrefino das células. Como citado no Exemplo 3 da seção 6.1.3, existem diversos métodos de se definir a permeabilidade média. Porém, de forma geral, todos envolvem uma média harmônica das permeabilidades de cada célula. Em 1D, ou no caso de fluxo unidirecional, a média é de fato a média harmônica, ponderada pelo tamanho da célula. Em situações mais gerais, porém, cálculos mais complexos devem ser feitos para encontrar a média. Esses cálculos podem envolver, inclusive, a solução de outra equação diferencial, como ocorre na *homogeneização*.

### 7.1.2 Poços (*wells*)

Em simulações voltadas para a indústria de petróleo, é comum a presença de termos fonte, chamados de poços (*wells*, no original em inglês). Derivam das perfurações feitas no meio poroso, de forma a caracterizar o terreno (poços exploratórios) e eventualmente produzir petróleo (utilizando poços injetores ou produtores).

Os poços devem ser levados em conta tanto na resolução da Lei de Darcy (por terem uma pressão de trabalho) quanto na Equação da Continuidade (pois efetivamente alteram o balanço de massa do sistema). Além disso, por terem um caráter semelhante a uma condição de contorno (já que temos massa injetada ou removida diretamente em uma determinada região), necessitam de uma atenção especial quanto a refinamentos, já que a comunicação na vizinhança de poços é mais rápida que no restante do domínio.

A variedade de poços existentes, bem como o tratamento especial que requerem, adiciona um grau extra de complexidade ao problema. Agrega, em contrapartida, uma vasta gama de aplicações ao simulador, especializadas principalmente na indústria de petróleo.

### 7.1.3 Escoamento Multifásico

Algumas aplicações requerem a simulação de vários fluidos imiscíveis num mesmo meio poroso. Novamente, a indústria de petróleo nos dá uma aplicação imediata: não raro há a presença de água e óleo (eventualmente, gás) quando se trata de extração de petróleo.

Alguns poços de petróleo não produzem naturalmente, devido à pressão na rocha ser menor que a pressão externa. Nesse caso, é necessária uma *injeção*, em geral de  $CO_2$ , para que o poço comece a produzir. O gás carbônico penetra, então, na rocha, expulsando o óleo lá contido. Há também poços que produzem gás (principalmente metano), juntamente com o óleo. Esses tipos de poços geram a necessidade de entender melhor o escoamento com várias fases em um meio poroso.

Para a simulação, uma versão multifásica da Lei de Darcy deve ser utilizada, mas também devem-se levar em conta outros fatores importantes, como as tensões superficiais, as interações que ocorrem entre cada fase e o meio, e mesmo a morfologia e saturação da matriz.

### 7.1.4 Escoamento Tridimensional

Foram realizadas nesse trabalho simulações bidimensionais. Porém, em algumas aplicações, fazem-se necessárias (naturalmente) as simulações em 3D. A formulação teórica da Lei de Darcy (inclusive em sua forma híbrida-mista) apresentada no Capítulo 3 pode ser aplicada em qualquer número de dimensões. No entanto, uma modificação no tratamento da convecção deve ser feita, utilizando-se (por exemplo) uma generalização do *donor cell upwind scheme* para o caso tridimensional [52].

## 7.2 Principais Contribuições

Desenvolveu-se um simulador do escoamento em meios porosos unifásico bidimensional. Este se caracteriza pela solução numérica da Lei de Darcy, que por sua vez é usada para a simulação do transporte de massa de um *tracer* miscível. No contexto de aplicabilidade, a simulação do escoamento em meios porosos permite a compreensão da dinâmica de filtros, de água subterrânea e até mesmo da extração de petróleo em reservatórios.

Para a solução da Lei de Darcy, foi utilizada a formulação mista-híbrida em elementos finitos, gerando um sistema linear esparsos que é resolvido por métodos iterativos. Para a convecção, utilizou-se o *donor cell upwind scheme*, um método explícito em volumes finitos para a atualização do campo de concentração do *tracer* no tempo.

Com relação à malha, utilizou-se a estrutura de dados ALG, uma estrutura adaptativa que possui uma série de vantagens. Em especial, permite refinamentos locais e a coexistência de regiões próximas com níveis de refinamento arbitrariamente diferentes, sem perder a eficiência computacional.

As células da malha foram ordenadas com uma Curva de Hilbert Modificada (MHC), que generaliza a Curva de Hilbert clássica, e que pode ser aplicada no caso de refinamentos não-uniformes. Obteve-se um bom desempenho computacional ao se acoplar a matriz de rigidez à malha; desempenho esse possibilitado pela eficiência da ordenação pela MHC. No caso em que a condição de fronteira é mista, recorreu-se ao emprego de um aplicação gerada via MATLAB(R) e dotada de livre uso e distribuição.

Dessa forma, esse trabalho cria mais uma alternativa para a simulação do escoamento em meios porosos, possibilitando futuramente sua adaptação para utilização em problemas específicos, em especial na Matemática Aplicada e na Engenharia.

# Bibliografia

- [1] B. Amaziane, A. Bourgeat, and J. Koebbe. Numerical simulation and homogenization of two-phase flow in heterogeneous porous media. *Transp Por Media*, 6:519–47, 1991.
- [2] D.C. Arney and J.E. Flaherty. An adaptive mesh-moving and local refinement method for time-dependent partial differential equations. *ACM Trans. Math. Software*, 16:48–71, 1990.
- [3] I. Babuska, J.P.S.R. Gago, D.W. Kelly, and C. Zienkiewicz. A posteriori error analysis and adaptive processes in the finite element method: part ii—adaptive mesh refinement. *Internat. J. Numer. Methods Eng.*, 19:1621–1656, 1982.
- [4] M.J. Baines and A.J. Wathen. Moving finite element modelling of compressible flow. *Appl. Numer. Math.*, 2:495–514, 1986.
- [5] J. Bell, M. Berger, J. Saltzman, and M. Welcome. Three-dimensional adaptive mesh refinement for hyperbolic conservation laws. *SIAM J. Sci. Comput.*, 15(1):127–138, 1994.
- [6] A. Bensoussan, J. L. Lions, and G. Papanicolaou. *Asymptotic analysis for periodic structures*. Elsevier, 1978.
- [7] Michele Benzi. Preconditioning techniques for large linear systems: A survey. *Journal of Computational Physics*, 182:418–477, 2002.
- [8] M. Berger and J. Olinger. Adaptive methods for hyperbolic partial differential equations. *J. Comput. Phys.*, 53:484–512, 1984.
- [9] R. Byron Bird, Edwin N. Lightfoot, and Warren E. Stewart. *Transport Phenomena, Revised Second Edition*. Wiley, 2006.
- [10] Franco Brezzi and Michel Fortin. *Mixed and Hybrid Finite Element Methods*. Springer-Verlag, 1991.

- [11] D. Burgarelli. Modelagem computacional e simulação numérica adaptativa de equações diferenciais parciais evolutivas aplicadas a um problema termoacústico. Master's thesis, Tese de doutorado, PUC-Rio, Rio de Janeiro, 1998.
- [12] D. Burgarelli, M. Kischinhevsky, and R. J. Biezuner. A new adaptive mesh refinement strategy for numerically solving evolutionary pde's. *J. Comput. Appl. Math.*, 196:115 – 131, 2006.
- [13] D. Burgarelli, M. Kischinhevsky, P.J. Paes Leme, and O.T. Silveira. Refinamento de malha adaptativa em paralelo. *Colloquia em Computação Científica de Alto Desempenho, Rio de Janeiro, RJ*, 1995.
- [14] N. Carlson and K. Miller. Design and application of a gradient-weighted moving finite element code, part i, in 1-d. *SIAM J. Sci. Comput.*, 19(3):728–765, 1994.
- [15] N. Carlson and K. Miller. Design and application of a gradient-weighted moving finite element code, part ii, in 1-d. *SIAM J. Sci. Comput.*, 19(3):766–798, 1994.
- [16] G. Christakos, C. T. Miller, and D. Oliver. *Cleopatra's Nose and the Diagrammatic Approach to Flow Modelling in Random Porous Media*. In: *Geostatistics for the Next Century*. Kluwer Academic, 1994.
- [17] M. A. Christie. *A renormalization based upscaling technique for WAG flood in heterogeneous reservoirs*. In: *Symposium on Reservoir Simulation*. SPE, 1995.
- [18] M. Crouzeix and P.A. Raviart. Conforming and non-conforming finite elements for solving the stationary stokes equations. *R.A.I.R.O. Anal.*, 7:33 – 76, 1973.
- [19] P. De Oliveira. On the characterization of finite differences “optimal” meshes. *J. Comput. Appl. Math.*, 36:137–148, 1991.
- [20] L. J. Durlofsky. Numerical calculation of equivalent grid block permeability tensors for heterogeneous porous media. *Water Resourc Res*, 27:699–708, 1991.
- [21] M. G. Edwards and M. A. Christie. *Dynamically adaptive Godunov schemes with renormalization for reservoir simulation*. In: *Twelfth SPE Reservoir Simulation Symposium, New Orleans, Louisiana*. SPE, 1993.
- [22] M. G. Edwards and C. F. Rogers. *Multigrid and renormalization for reservoir simulation*. In: *Hemker D, Wesseling P, editors. Multi-Grid Methods IV, The Netherlands*. Birkhäuser Basel, 1993.
- [23] M. G. Edwards and C. F. Rogers. *A flux continuous scheme for the full tensor pressure equation*. In: *Christie MA, Da Silva FV, Farmer CL, Guillon O, Heinmann*

- ZE, editors.* 4th European Conference on the Mathematics of Oil Recovery, Norway, 1994.
- [24] Lawrence C. Evans. *Partial Differential Equations, Second Edition*. American Mathematical Society, 2010.
- [25] R. Eymard, T. Gallouët, and R. Herbin. Finite volume methods. *In: P.G. Ciarlet and J.L. Lions, editors, Techniques of Scientific Computing, Part III, Handbook of Numerical Analysis*, VII:713–1020, 2000.
- [26] R. Eymard, T. Gallouët, and R. Herbin. Finite volume methods. schemes and analysis. <[http://www.math.uni.wroc.pl/~olech/courses/skrypt\\_Roberta\\_wroclaw.pdf](http://www.math.uni.wroc.pl/~olech/courses/skrypt_Roberta_wroclaw.pdf)>, 2008. University Course Notes [Online; acessado em 29/09/2013].
- [27] Fox and McDonald. *Introduction to Fluid Mechanics, Fifth Edition*. Wiley, 1999.
- [28] B. L. Giacchini. Uma breve introdução ao método dos elementos finitos. <[http://www.mat.ufmg.br/~rodney/notas\\_de\\_aula/elementos\\_finitos.pdf](http://www.mat.ufmg.br/~rodney/notas_de_aula/elementos_finitos.pdf)>, 2012. Acessado em 31/10/2013.
- [29] David Gilbarg and Neil S. Trudinger. *Elliptic Partial Differential Equations of Second Order*. Springer, 2001.
- [30] V. Girault, S. Sun, M. F. Wheeler, and I Yotov. Coupling discontinuous galerkin and mixed finite element discretizations using mortar finite elements. *SIAM J. on Num. Anal*, 46:949–979, 2008.
- [31] J Goodman and RJ LeVeque. On the accuracy of stable schemes for 2d scalar conservation laws. *Math. Comp.*, 45:15–21, 1985.
- [32] A. Harten. High resolution schemes for hyperbolic conservation laws. *J. Comput. Phys.*, 49:357–393, 1983.
- [33] M.R. Hestenes and E. Stiefel. Methods of conjugate gradients for solving linear systems. *J. Res. Nat. Bur. Stand.*, 49:409–436, 1952.
- [34] P. Indelman and G. Dagan. Upscaling of permeability of anisotropic formations 1. the general framework. *Water Resourc Res*, 29:917–23, 1993.
- [35] P. Indelman and G. Dagan. Upscaling of permeability of anisotropic formations 2. the general framework. *Water Resourc Res*, 29:925–33, 1993.
- [36] A.M Khokhlov. Fully threaded tree algorithms for adaptive refinement fluid dynamics simulations. *J. Comput. Phys.*, 143:519–543, 1998.

- [37] Randall J. LeVeque. *Numerical Methods for Conservation Laws*. Birkhauser, 1992.
- [38] K. Miller and R. Miller. Moving finite elements, part i. *SIAM J. Numer. Anal.*, 18:1019–1032, 1981.
- [39] W.F. Mitchell. Adaptive refinement for arbitrary finite-element spaces with hierarchical bases. *J. Comput. Appl. Math.*, 36:65–78, 1991.
- [40] J. T. Oden. Finite elements: An introduction. In: *P.G. Ciarlet and J.L. Lions, editors, Techniques of Scientific Computing, Part III, Handbook of Numerical Analysis*, II:3–15, 1991.
- [41] J. Oliger and X. Zhu. Stability and error estimation for component adaptive grid methods. *Appl. Numer. Math.*, 20:407–426, 1996.
- [42] J.K. Reid. On the method of conjugate gradients for the solution of large sparse systems of linear equations. In: *Large sparse sets of linear equations, J. K. Reid, ed., Academic Press*, pages 231–254, 1971.
- [43] W.C. Rheinboldt. On a theory of mesh-refinement processes. *SIAM J. Numer. Anal.*, 17(6):766–778, 1980.
- [44] M.C. Rivara. Mesh refinement processes based on the generalized bisection of simplices. *SIAM J. Numer. Anal.*, 21(3):604–612, 1984.
- [45] M.C. Rivara. Local modification of meshes for adaptive and/or multigrid finite-element methods. *J. Comput. Appl. Math.*, 36:79–89, 1991.
- [46] H. Sagan. *Space-Filling Curves*. Springer, Berlin, 1994.
- [47] H. Samet. *The Design and Analysis of Spatial Data Structures*. Addison-Wesley, Reading, MA, 1990.
- [48] Jonathan Richard Shewchuk. An introduction to the conjugate gradient method without the agonizing pain. *School of Computer Science, Carnegie Mellon University, Pittsburg*, 1994.
- [49] John C. Tannehill, Dale A. Anderson, and Richard H. Pletcher. *Computational Fluid Mechanics and Heat Transfer, 2nd Ed.* Taylor and Francis, 1997.
- [50] Hélia Valério Thibes. Um estudo da fatoração incompleta lu e cholesky como pré-condicionadores nos métodos iterativos. Master’s thesis, Dissertação(Mestrado em Matemática Aplicada) - Instituto de Matemática, Universidade Federal do Rio Grande do Sul, 2002.

- [51] E. F. Toro. *Riemann Solvers and Numerical Methods for Fluid Dynamics*. Springer-Verlag, 1999.
- [52] John A. Trangenstein. Multi-scale iterative techniques and adaptive mesh refinement for flow in porous media. *Advances in Water Resources*, 25:1175 – 1213, 2002.
- [53] John A. Trangenstein. *Numerical Solution of Hyperbolic Partial Differential Equations*. Cambridge University Press, 2009.
- [54] H. A. Van der Vorst. Bi-cgstab: A fast and smoothly converging variant of bi-cg for the solution of nonsymmetric linear systems. *SIAM J. Sci. and Stat. Comput.*, 13:631–644, 1992.
- [55] S. Whitaker. Flow in porous media i: A theoretical derivation of darcy’s law. *Transport in Porous Media*, 1:3–25, 1986.
- [56] Kosaku Yoshida. *Functional Analysis*. Springer, 1995.