

# Adaptividade de Malhas na Aproximação Lagrangeana de Leis de Conservação

S. MANCUSO<sup>1</sup>, F. PEREIRA<sup>2</sup>, G. de SOUZA<sup>3</sup>, LABTRAN, Departamento de Modelagem Computacional, IPRJ, UERJ, 28630-050 Nova Friburgo, RJ, Brasil.

**Resumo.** Métodos eficientes para a resolução de equações de transporte convectivo constituem uma ferramenta importante na modelagem computacional de problemas de engenharia como, por exemplo, o escoamento de fluidos em meios porosos. Neste trabalho é apresentado um novo método numérico para a resolução de leis de conservação escalares que utiliza técnicas lagrangeanas e adaptividade da malha computacional, que foi chamado de DSTC (“Dynamical Space Time Coarsening”). Este método faz uso da identidade de conservação local que aparece em [1, 3, 4]. Tal metodologia foi aplicada na aproximação numérica das equações de Burgers e Buckley-Leverett, sendo esta última utilizada na modelagem de escoamentos bifásicos em reservatórios de petróleo. A técnica apresentou bom desempenho computacional, precisão na captura de saltos, ausência de oscilações espúrias e convergência numérica sob refinamento da malha computacional.

## 1. Introdução

As leis de conservação aparecem freqüentemente na modelagem matemática de diversos fenômenos físicos. Como exemplo, pode-se citar problemas de transporte convectivo não linear, como a propagação de choques e os escoamentos bifásicos em meios porosos. Estes são especialmente importantes na exploração de petróleo.

Neste trabalho foi desenvolvido um esquema numérico que utiliza uma estratégia lagrangeana localmente conservativa e a evolução da solução numérica para malhas não-uniformes. Além disso, utiliza-se uma combinação de células para permitir passos de tempo maiores e, conseqüentemente, reduzir a suavização numérica presente nas soluções. Através da observação dos resultados de simulações numéricas se nota que as técnicas localmente conservativas são bastante adequadas para o tratamento de leis de conservação hiperbólicas e que o novo esquema proposto apresenta resultados bastante precisos para o problema de propagação de choques.

## 2. Esquema Numérico

A seguir é apresentado o método numérico desenvolvido neste trabalho, que tem sua construção baseada no método presente em [3]. O esquema aqui proposto utiliza

---

<sup>1</sup>smancuso@iprj.uerj.br

<sup>2</sup>pereira@iprj.uerj.br

<sup>3</sup>ev\_grazione@iprj.uerj.br

tubos integrais no espaço-tempo na forma explícita. Para a elaboração do método, considere uma lei de conservação hiperbólica em uma dimensão espacial, como a mostrada abaixo:

$$u_t + f(u)_x = 0, \quad (2.1)$$

ou na sua forma divergente

$$\nabla_{t,x} \cdot \begin{pmatrix} u \\ f(u) \end{pmatrix} = 0 \quad x \in \mathbb{R}, \quad \text{com condição inicial} \quad u(x, 0) = u_0(x). \quad (2.2)$$

## 2.1. Evolução temporal

Para a evolução temporal as variáveis discretizadas calculadas no tempo  $t^n$  são denotadas acrescentando-lhes o índice superior  $n$ . Considera-se para a equação (2.1) uma discretização espacial em malha original uniforme de comprimento  $\Delta x$  para cada célula. Define-se  $h_j^n$  o tamanho da célula  $j$  no tempo  $t^n$ ,  $x_j^n$  representa o centro da  $j$ -ésima célula no mesmo instante onde  $j$  é um inteiro, e  $x_{j-1/2}^n$  e  $x_{j+1/2}^n$ , os seus vértices. Utilizando para a evolução temporal os tubos e curvas integrais expostos na seção 2.2 de [5] e seguindo o raciocínio ali apresentado, define-se  $U_j^n$  como a discretização constante por partes de  $u$  no instante  $t^n$

$$U_j^n(t) = \frac{1}{h_j^n} \int_{x_{j-1/2}^n}^{x_{j+1/2}^n} u(x, t) dx \quad (2.3)$$

com  $x_{j-1/2}^n = y(x_j^{n-1}, t^n)$  onde  $\frac{dy}{dt} = \frac{f(U_j^{n-1})}{U_j^{n-1}}$  e  $y(x_j^{n-1}, t^{n-1}) = x_j^{n-1}$ . O valor de  $U_j^{n+1}$  em cada intervalo  $[x_{j-1/2}^{n+1}, x_{j+1/2}^{n+1})$ ,  $j \in \mathbb{Z}$ , da nova malha é dado por

$$\begin{aligned} U_j^{n+1} &= \frac{1}{h_j^{n+1}} \left( \int_{x_j^n}^{x_{j+1/2}^{n+1}} U(x, t^n) dx + \int_{x_{j+1/2}^n}^{x_{j+1}^n} U(x, t^n) dx \right) \\ &= \frac{1}{h_j^{n+1}} \left( \frac{h}{2} U_j^n + \frac{h}{2} U_{j+1}^n \right). \end{aligned} \quad (2.4)$$

Assim determina-se  $U^{n+1}$  e o processo se repete até o fim da simulação.

## 2.2. Aproximação linear por partes

A precisão do método pode ser aumentada pela substituição da função contante por partes  $U(x, t)$  por uma função linear por partes  $L(x, t)$ . Para isto, deve ser obtida uma inclinação  $U_j'(t)$  relacionada à célula de centro  $x_j^n$ . Através de um tipo de MinMod (Módulo Mínimo; ver [2]) obtém-se a derivada numérica espacial

$$\frac{\Delta U_j^n}{h_j^n} = \text{modmin} \{a, b, c\} a/|a|, \quad (2.5)$$

onde

$$a = \frac{U_j^n - U_{j-1}^n}{(h_{j-1}^n + h_j^n)0,5}, b = \frac{U_{j+1}^n - U_{j-1}^n}{(h_{j-1}^n + 2h_j^n + h_{j+1}^n)0,5}, c = \frac{U_{j+1}^n - U_j^n}{(h_j^n + h_{j+1}^n)0,5} \quad (2.6)$$

e  $\min$  é a função mínimo. Usando os valores  $\Delta U_j^n(t)$ , constrói-se então a discretização linear por partes mostrada pela equação (2.7), que preserva a conservação local

$$L_j(x, t^n) = U_j^n + (x - x_j^n) \frac{\Delta U_j^n}{h_j^n}, \quad x_{j-1/2}^n < x \leq x_{j+1/2}^n. \quad (2.7)$$

Neste caso, a equação (2.4) toma a seguinte forma

$$U_j^{n+1} = \frac{1}{h_j^{n+1}} \left( \int_{x_j^n}^{x_{j+1/2}^n} L(x, t^n) dx + \int_{x_{j+1/2}^n}^{x_{j+1}^n} L(x, t^n) dx \right).$$

Nesta implementação segue-se o raciocínio análogo ao utilizado para resolver (2.4). A metodologia foi denominada pelos autores de DSTC-R (“Dynamical Space-Time Coarsening with Reconstruction”). Com uso da reconstrução, as curvas integrais precisam de uma melhor aproximação dos  $x_j^{n+1}$ . A Figura 1 mostra a discretização linear por partes.

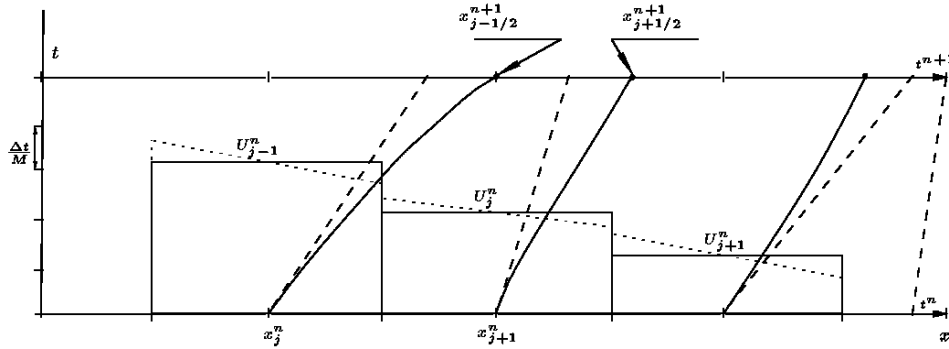


Figura 1: Linhas tracejadas correspondem às tangentes à curva integral no tempo  $t^n$ , para o caso sem correção, enquanto linhas contínuas mostram tubos corrigidos. As linhas pontilhadas apresentam a reconstrução linear  $L_j$ , feita a partir do MINMOD.

Neste caso, as curvas são construídas por  $M$  passos: no primeiro, constrói-se a curva da forma convencional com um avanço de tempo  $\Delta t/M$  usando  $U_j^n$  indo de  $x_j^n$  até  $x_{j,1}^n$ . Para calcular  $x_{j,i+1}^n$  calcula-se  $U_{j,i}^n$  em  $(x_{j,i}^n, t^n + i\Delta t/M)$  por expansão em série de Taylor no tempo, sobre  $L_j(x_{j,i}^n, t^n)$ , obtendo-se  $x_{j,i+1}^n = x_{j,i}^n + \frac{f(U_{j,i}^n)}{U_{j,i}^n} \frac{\Delta t}{M}$ . Isto é feito enquanto  $i < M$  (até completar o  $\Delta t$  total permitido). Uma vez determinados os valores de  $U$  no instante  $t + \Delta t$ , repete-se o procedimento partindo, agora, dos centros das células da nova malha não-uniforme para determinar os  $x_j^{n+2}$ . A Figura 1 também mostra a correção dos tubos.

### 2.3. Restrição no passo de tempo

A evolução temporal utiliza um incremento  $\Delta t$  que não permita que a solução dos problemas de Riemann oriundos dos vértices das células atinjam os centros das mesmas. O passo de tempo  $\Delta t$  deve satisfazer uma condição do tipo CFL e assume valores dinamicamente durante a simulação (faz-se uso do menor tamanho de célula da malha,  $h_{min}$ ). Tem-se a restrição

$$\max \left\{ f'_{sup} - \left( \frac{f(U)}{U} \right)_{sup}, \left( \frac{f(U)}{U} \right)_{inf} - f'_{inf} \right\} \frac{\Delta t^n}{h_{min}} \leq \frac{1}{2}, \quad (2.8)$$

onde  $\max$  é a função máximo e

$$f'_{sup} = \sup \{ f'(U) | U \in \mathbb{D}_{f'} \} \text{ e } f'_{inf} = \inf \{ f'(U) | U \in \mathbb{D}_{f'} \},$$

$$\left( \frac{f(U)}{U} \right)_{sup} = \sup \left\{ \left( \frac{f(U)}{U} \right) | U \in \mathbb{D}_f \right\} \text{ e } \left( \frac{f(U)}{U} \right)_{inf} = \inf \left\{ \left( \frac{f(U)}{U} \right) | U \in \mathbb{D}_f \right\}.$$

## 3. Combinação de Células

Dependendo da função de fluxo  $f$  que aparece na equação (2.1), o passo de tempo pode tender a uma queda acentuada no decorrer da simulação. Por isso, se combinam dinamicamente células de tamanho inferior a um valor crítico para formar células maiores usando uma técnica denominada DSTC (“Dynamical Space Time Coarsening”). A idéia é construir os tubos partindo apenas de centros de células pré-selecionadas a fim de evitar o surgimento de células que causem refinamento excessivo da malha. O cálculo do escalar  $U$  médio continua sendo feito usando a quantidade contida entre as paredes dos tubos. O tamanho crítico é uma fração do tamanho de célula na malha original e foi denominada fator crítico, simbolizado por  $fc$ .

Quando uma determinada célula alcança um tamanho crítico faz-se uma combinação entre esta e uma de suas vizinhas, formando uma célula maior com um novo valor de  $U$  médio determinado pela soma das quantidades  $h_j U_j$  de cada uma. A combinação ocorre entre a célula que ficou muito reduzida e a sua vizinha com valor de  $U$  mais próximo: se em um passo de tempo, por exemplo, se a célula  $j+1$  apresenta um tamanho inferior ao valor crítico com  $U$  mais próximo ao da célula  $j$  do que ao da célula  $j+2$ , combinam-se as células  $j+1$  e  $j$ , criando uma nova célula  $j$ . Por outro lado, se ocorrer a combinação das células  $j+1$  com  $j+2$  forma-se uma nova célula  $j+1$ . Tal processo é repetido até que todas as células tenham tamanho maior do que o crítico. A seguir calcula-se o centro dessas novas células e determina-se em que células da malha antes da pré-seleção encontram-se esses pontos médios. A evolução temporal é idêntica à que foi apresentada anteriormente e será realizada sobre a malha anterior à pré-seleção, mas não serão construídos os tubos que partiriam daquelas células que foram combinadas na pré-seleção, mas que não contém os pontos médios das células resultantes da combinação, como é apresentado na Figura 2.

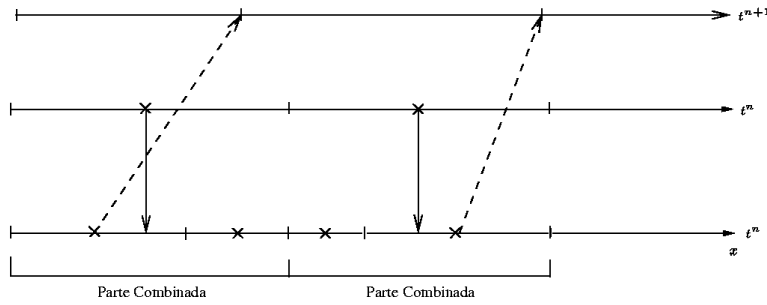


Figura 2: Combinação de células: linhas contínuas mostram em que ponto está o centro de uma célula combinada em relação as células que a formaram e linhas tracejadas mostram de onde vão partir os tubos.

## 4. Simulações Numéricas

Nos experimentos numéricos utilizou-se uma condição de injeção lateral na fronteira esquerda da malha computacional correspondente ao fluxo associado a condição inicial à esquerda do problema de Riemann (ver detalhes em [3]). O fator crítico  $fc$  utilizado foi de 0,2 e o valor  $M$  de passos para construção dos tubos integrais foi igual a 10, em todas as simulações.

Na equação de Burgers a função  $f$  da equação (2.1) é

$$f(u) = \left(\frac{u^2}{2}\right) \quad \text{com condição inicial} \quad \begin{cases} u(x,0) = 1, & \text{se } x \leq 0 \\ u(x,0) = 0, & \text{se } x > 0 \end{cases} \quad (4.1)$$

Nos testes para esta equação o comprimento da região física foi de 12800 cm e o tempo de simulação de 15000 s. As Figuras 3 e 4 apresentam um estudo de refinamento de malha e a comparação da solução numérica em 256 células com a solução analítica para o DSTC-R, respectivamente.

As simulações numéricas conseguiram representar o salto com velocidade de propagação correta, como pode ser visto na comparação com a solução analítica. Além disso, a estratégia DSTC-R produziu resultados com baixa difusão numérica e pôde-se observar que em uma malha de 128 células atingiu-se um bom nível de convergência numérica.

Para a Eq. de Buckley-Leverett, a função de fluxo  $f$  é

$$f(s) = \lambda_w(s)v \quad \text{com} \quad \begin{cases} \lambda_w(s) = \frac{k_{rw}(s)}{\mu_w \lambda(s)} \\ \lambda(s) = \frac{k_{ro}(s)}{\mu_o} + \frac{k_{rw}(s)}{\mu_w} \\ k_{ro}(s) = (1 - (1 - s_{r_o})^{-1}s)^2 \\ k_{rw}(s) = (1 - s_{r_w})^{-2}(s - s_{r_w})^2 \end{cases},$$

onde w=água e o=óleo. Para a fase  $\alpha$  ( $\alpha = w, o$ ) tem-se:  $\lambda_\alpha(s)$ , mobilidade;  $k_{r_\alpha}(s)$ , permeabilidade relativa;  $s_{r_\alpha}$ , saturação residual e  $\mu_\alpha$ , a viscosidade. Os demais termos são:  $\lambda(s)$ , mobilidade total do sistema e  $v$ , a velocidade do fluido (velocidade

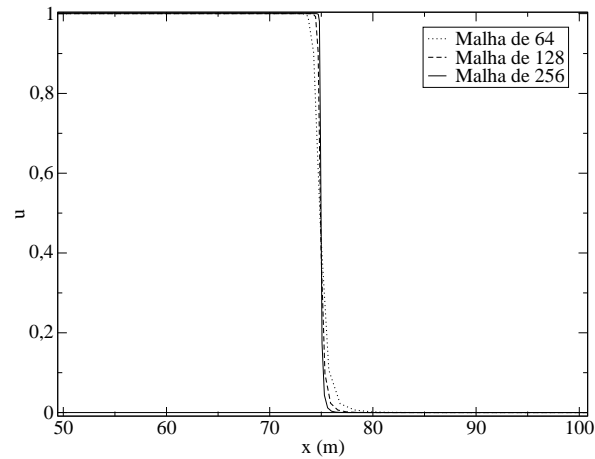


Figura 3: Eq. de Burgers: refinamento de malha (DSTC-R).

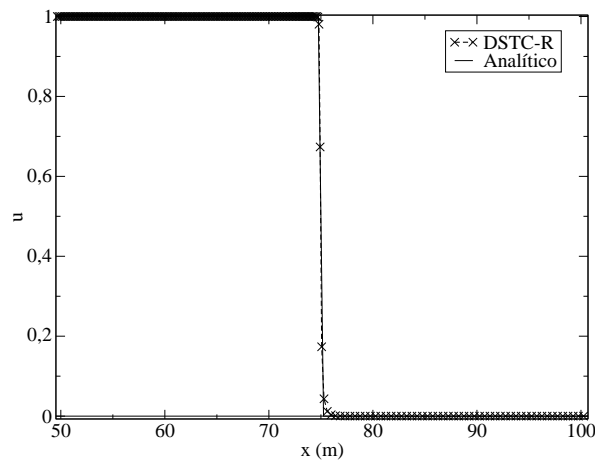


Figura 4: Eq. de Burgers: DSTC-R e solução analítica (malha de 256).

de Darcy). Os seguintes valores numéricos foram utilizados nas simulações:  $v = 8,11235e^{-5}$ ;  $s_{r_o} = 0,15$ ;  $s_{r_w} = 0,20$ ;  $\mu_o = 10,0$ ;  $\mu_w = 0,5$ . Nos testes feitos para a Eq. de Buckley-Leverett o comprimento da região física foi de 12800 cm e o tempo total de simulação 300 dias. A condição de contorno em  $x = 0$  é  $f(s) = \lambda_w(0,85)v$ . O escalar  $s$  representa a saturação de água (quantidade de água por cada quantidade de espaço poroso) em uma determinada região em um certo instante do escoamento. A condição inicial é uma saturação de 0,85 para  $x \leq 0$  e uma saturação de 0,21 para  $x > 0$ . As grandezas físicas estão expressas em CGS.

As Figuras 5 e 6 apresentam refinamento de malha e a comparação da solução numérica em 128 células com o método NT [6] para o DSTC-R, respectivamente.

Para os testes usando a Eq. de Buckley-Leverett também ocorreu convergência

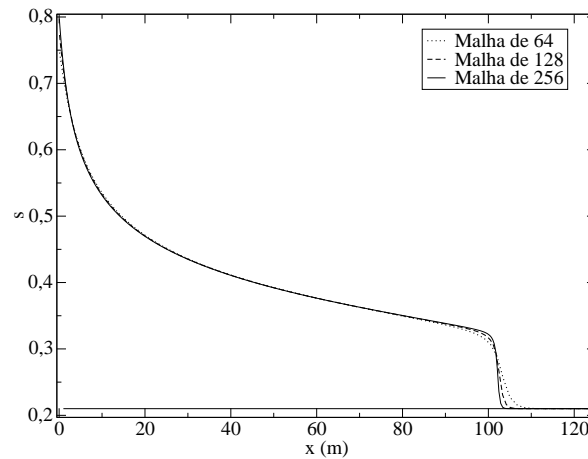


Figura 5: Eq. de Buckley-Leverett: refinamento de malha (DSTC-R).

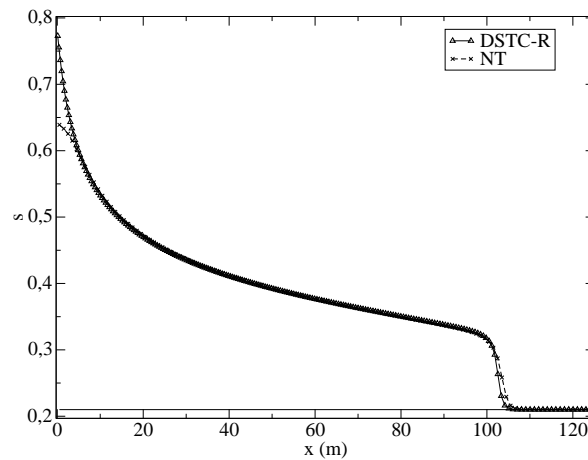


Figura 6: Eq. de Buckley-Leverett: NT e DSTC-R (malha de 128).

numérica sob refinamento da malha computacional. A comparação com o método *NT* mostra que o choque apresenta velocidade de propagação correta e que o método DSTC-R foi menos difusivo. Além disso, o comportamento na injeção usando o DSTC-R está mais próximo da situação física a ser simulada.

## 5. Conclusões

Neste trabalho foi desenvolvido um método numérico preciso para a solução de leis de conservação escalares em uma dimensão espacial. O método utiliza uma adaptividade da malha computacional para evitar o surgimento de células muito

reduzidas, que poderiam provocar restrições severas no passo de tempo. A metodologia, denominada DSTC-R resolveu descontinuidades de forma precisa, apresentou baixa difusão numérica, e convergiu, nos experimentos realizados, para a solução fisicamente correta, tanto no caso da Eq. de Burgers (comparação com a solução analítica) como para a Eq. de Buckley-Leverett (comparação com os resultados de [6]). A extensão desta estratégia para problemas bidimensionais está sendo considerada pelos autores.

### Agradecimentos

F. Pereira recebeu apoio financeiro dos projetos: CNPq-Edital 05/2004, CT-Petro/Edital 01/2003, CT-Petro/Edital 016/2005, Edital Institutos do Milênio 01/2005 e Edital 20/2004-Acordo de Cooperação Internacional CNPq/NSF; G. de Souza agradece ao CNPq (Bolsa de Iniciação Científica) e S. Mancuso agradece à CAPES (Bolsa de Doutorado) pelo apoio.

**Abstract.** Efficient methods for convective transport equations are important tools in the computational modeling of engineering problems such as fluid flows in porous media. In this work we present a new numerical method for scalar conservation laws. It uses a lagrangian strategy for the time evolution and grid adaptation. This scheme uses the local conservation identity that appears in [1, 3, 4]. The method was applied in the numerical approximation of the Burgers and Buckley-Leverett equations (the last one is used in two-phase flow modeling in oil reservoir). The scheme shows good computational performance, precision in the capture of the shock and absence of spurious oscillations.

### Referências

- [1] J. Douglas Jr., F. Pereira, L.M. Yeh, A locally conservative Eulerian-Lagrangian numerical method and its application to nonlinear transport in porous media, *Computational Geosciences*, **4** (2000), 1-40.
- [2] R.J. Le Veque, ‘Finite Volume Methods for Hyperbolic Problems’, Cambridge Texts in applied Mathematics, Cambridge University Press, UK 2002.
- [3] S. Mancuso, “Aproximação numérica de leis de conservação por esquemas euleriano-lagrangeanos localmente conservativos.” Dissertação de Mestrado, Instituto Politécnico do Rio de Janeiro - UERJ, 2004.
- [4] S. Mancuso, F. Pereira, Esquemas euleriano-lagrangeanos localmente conservativos para leis de conservação hiperbólicas, in “CD-Rom - Iberian Latin American Congress on Computational Methods of Engineering”, (2004).
- [5] S. Mancuso, F. Pereira, G. de Souza, Um novo método euleriano-lagrangeano para aproximação de leis de conservação, em “Seleta do XXIX CNMAC” (C.F. Bracciali, M.C.C. Cunha, V.L.R. Lopes, H.M. Yang, eds.), TEMA - Tend. Mat. Apl. Comput., Vol. 8, No. 2, pp.277-286, SBMAC, 2007.
- [6] N. Nessyahu, E. Tadmor, “Non-oscillatory central differencing scheme for hyperbolic conservation laws”, *J. Comput. Physics*, **87** (1990), 408-463.