

Adaptividade de Malhas na Aproximação Lagrangeana de Leis de Conservação

S. MANCUSO¹, F. PEREIRA², G. de SOUZA³, 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

¹smancuso@iprj.uerj.br

²pereira@iprj.uerj.br

³ev_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 Δx 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.

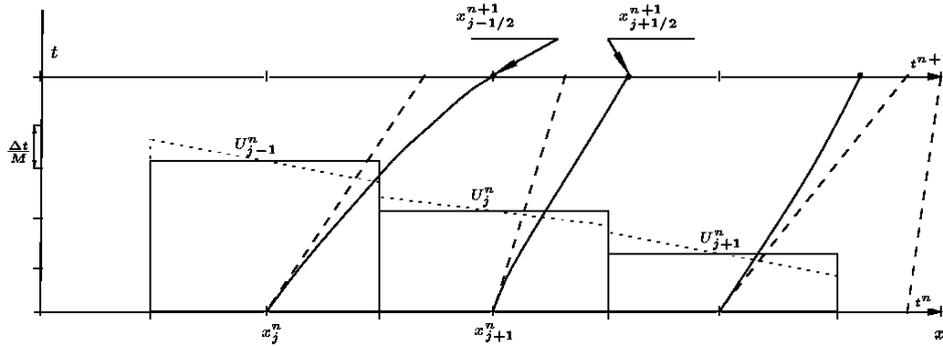


Figura 1: Linhas tracejadas correspondem às tangentes à curva integral no tempo t^n , para o caso sem correção, enquanto linhas contínuas mostram tubos corrigidos. As linhas pontilhadas apresentam a reconstrução linear L_j , feita a partir do MINMOD.

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 Δt 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^{n+2} . A Figura 1 também mostra a correção dos tubos.

2.3. Restrição no passo de tempo

A evolução temporal utiliza um incremento Δt que não permita que a solução dos problemas de Riemann oriundos dos vértices das células atinjam os centros das mesmas. O passo de tempo Δt 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.

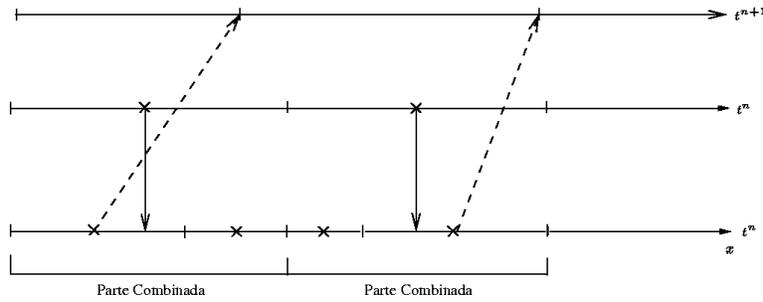


Figura 2: Combinação de células: linhas contínuas mostram em que ponto está o centro de uma célula combinada em relação as células que a formaram e linhas tracejadas mostram de onde vão partir os tubos.

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

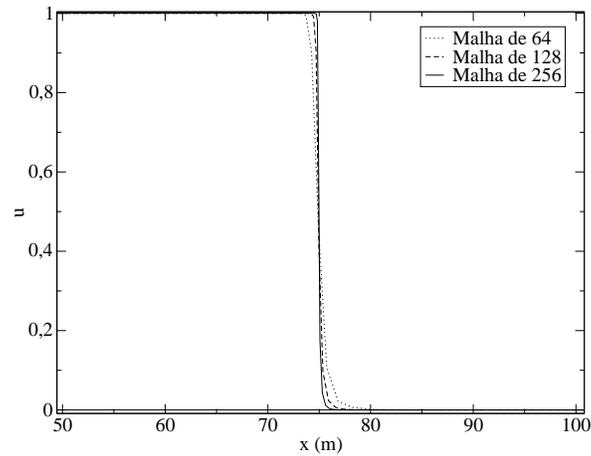


Figura 3: Eq. de Burgers: refinamento de malha (DSTC-R).

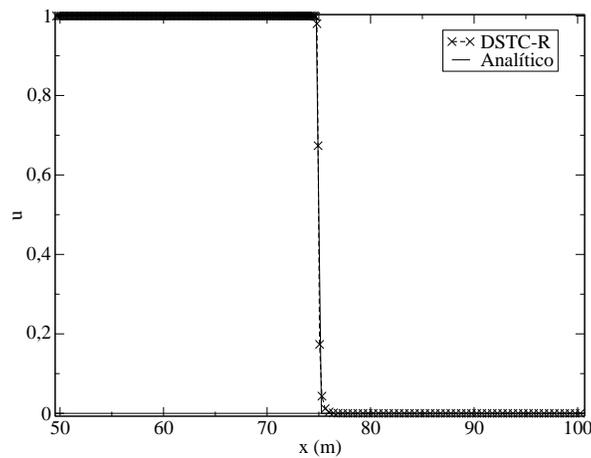


Figura 4: Eq. de Burgers: DSTC-R e solução analítica (malha de 256).

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

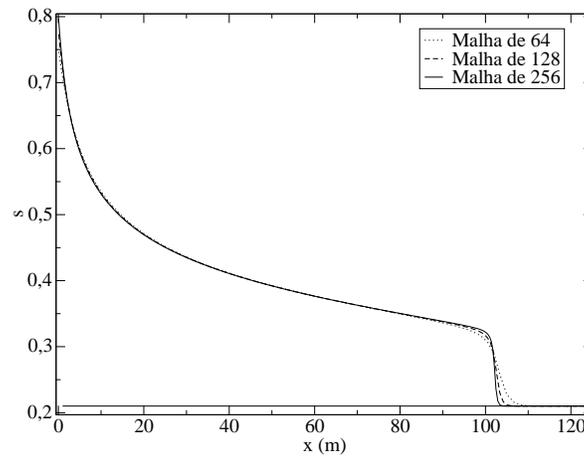


Figura 5: Eq. de Buckley-Leverett: refinamento de malha (DSTC-R).

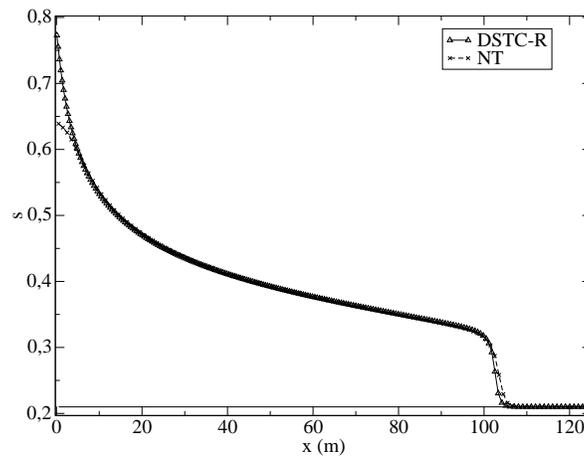


Figura 6: Eq. de Buckley-Leverett: NT e DSTC-R (malha de 128).

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.