

UNIVERSIDADE FEDERAL DO PARANÁ

MARCELO HENRIQUE SABATINI

REDUÇÃO E ESTIMATIVA DO ERRO DE DISCRETIZAÇÃO PARA PROBLEMAS
DE ESCOAMENTO MULTIFÁSICO EM MEIOS POROSOS RÍGIDOS

CURITIBA

2024

MARCELO HENRIQUE SABATINI

REDUÇÃO E ESTIMATIVA DO ERRO DE DISCRETIZAÇÃO PARA PROBLEMAS
DE ESCOAMENTO MULTIFÁSICO EM MEIOS POROSOS RÍGIDOS

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

Orientador:
Prof. Dr. Marcio Augusto Villela Pinto.

Coorientador: Prof. Dr. Marcio André Martins.

CURITIBA
2024

TERMO DE APROVAÇÃO

Os membros da Banca Examinadora designada pelo Colegiado do Programa de Pós-Graduação MÉTODOS NUMÉRICOS EM ENGENHARIA da Universidade Federal do Paraná foram convocados para realizar a arguição da tese de Doutorado de **MARCELO HENRIQUE SABATINI** intitulada: **REDUÇÃO E ESTIMATIVA DO ERRO DE DISCRETIZAÇÃO PARA PROBLEMAS DE ESCOAMENTO MULTIFÁSICO EM MEIOS POROSOS RÍGIDOS**, sob orientação do Prof. Dr. MARCIO AUGUSTO VILLELA PINTO, que após terem inquirido o aluno e realizada a avaliação do trabalho, são de parecer pela sua APROVAÇÃO no rito de defesa.

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

Curitiba, 10 de Julho de 2024.

Assinatura Eletrônica

11/07/2024 15:27:17.0

MARCIO AUGUSTO VILLELA PINTO

Presidente da Banca Examinadora

Assinatura Eletrônica

12/07/2024 08:47:45.0

MATEUS DAS NEVES GOMES

Avaliador Externo (INSTITUTO FEDERAL DO PARANÁ)

Assinatura Eletrônica

11/07/2024 14:49:12.0

LUCIANO KIYOSHI ARAKI

Avaliador Interno (UNIVERSIDADE FEDERAL DO PARANÁ)

Assinatura Eletrônica

11/07/2024 15:04:47.0

GUILHERME BERTOLDO

Avaliador Externo (UNIVERSIDADE TECNOLÓGICA FEDERAL DO PARANÁ)

AGRADECIMENTOS

A conclusão desta tese de doutorado foi alcançada graças ao apoio, orientação e incentivo de diversas pessoas e instituições, às quais expresso meus mais sinceros agradecimentos.

Em primeiro lugar, agradeço aos meus orientadores, Prof. Dr. Marcio Augusto Villela Pinto e Prof. Dr. Marcio André Martins, por sua orientação dedicada, paciência e pelas valiosas contribuições ao longo de todo o processo.

Aos membros da banca examinadora, Prof. Dr. Guilherme Bertoldo, Prof. Dr. Mateus das Neves Gomes e Prof. Dr. Luciano Kiyoshi Araki, pelo tempo dedicado à leitura detalhada deste trabalho e pelas sugestões que contribuíram para o aprimoramento final desta tese.

Gostaria de expressar um agradecimento especial ao amigo e colega Sandro pelo apoio contínuo e contribuições ao longo desta jornada, e estendo meu agradecimento ao amigo e colega Jotair.

À minha família, especialmente aos meus pais, Roseli e Décio.

Por fim, expresso minha gratidão ao Programa de Pós-Graduação em Métodos Numéricos em Engenharia (PPGMNE) da Universidade Federal do Paraná (UFPR) e ao Departamento de Matemática da Universidade Estadual do Centro-Oeste (UNICENTRO), pelo apoio institucional que me permitiu dedicar-me integralmente aos estudos e à pesquisa.

RESUMO

O tema do presente trabalho é a verificação numérica do problema de escoamento bifásico uni e bidimensionais em meio poroso rígido, utilizando a formulação matemática mista pressão-saturação. Neste âmbito, utiliza-se a múltipla extrapolação de Richardson (MER) com o objetivo de reduzir e estimar o erro de discretização. As soluções numéricas foram obtidas mediante o emprego do método dos volumes finitos (MVF) na dimensão espacial, o método de Euler implícito para a dimensão temporal e a linearização pelo método de Picard modificado. Na resolução do sistema linear associado, foi utilizado o método de Gauss-Seidel acoplado juntamente com o método *multigrid* para acelerar a convergência do processo iterativo. As variáveis de interesse analisadas foram as pressões para as fases úmida e não úmida localizadas no ponto central do domínio. Os resultados obtidos apontam que o emprego da MER é promissora para a redução do erro de discretização e aumento da ordem de acurácia das soluções numéricas estudadas. Em relação à estimativa para o erro de discretização, foram analisados alguns estimadores presentes na literatura. Constatou-se que o estimador de Richardson Corrigido apresentou maior nível de acurácia e confiabilidade, representando uma ferramenta robusta para a verificação numérica do problema estudado.

Palavras-chave: Múltipla extrapolação de Richardson, Erro de discretização, Estimador de erro, Escoamento multifásico.

ABSTRACT

The focus of the present work is numerical verification of the one- and two-dimensional two-phase flow problem in rigid porous media using the mixed pressure-saturation mathematical formulation is considered. Within this framework, repeated Richardson extrapolation (RRE) is employed with the aim of reducing and estimating discretization error. The numerical solutions were obtained using the finite volume method (FVM) in the spatial dimension and the implicit Euler method for the temporal dimension. In this resolution, linearization was achieved through the modified Picard method, and for solving the associated linear system, the coupled Gauss-Seidel method with multigrid was utilized to accelerate the convergence of the iterative process. The variables of interest analyzed were the wetting and non-wetting pressures located at the central point of the domain. The results indicate that the use of RRE shows promise in reducing discretization error and increasing the accuracy order of the studied numerical solutions. Regarding the estimation of discretization error, some estimators from the literature were analyzed. It was found that the corrected Richardson estimator exhibited higher levels of accuracy and reliability, representing a robust tool for the numerical verification of the problem under study.

Keywords: Repeated Richardson extrapolation, Discretization error, Error estimator, Multiphase flow.

LISTA DE FIGURAS

Figura 1 – Ilustração de um meio poroso preenchido com um ou dois fluidos.	25
Figura 2 – Materiais Porosos.	26
Figura 3 – Representação da relação entre o vazio e o volume REV.	27
Figura 4 – Ilustração de meios porosos: (a) Heterogêneo e (b) Homogêneo.	28
Figura 5 – Função da pressão capilar de Van Genuchten para diferentes parâmetros n_{vg} , $p_e = 3$ e $S_{\alpha r} = 0$	31
Figura 6 – Função da permeabilidade relativa de Van Genuchten para diferentes parâmetros n_{vg} e $S_{\alpha r} = 0$	32
Figura 7 – Malhas com arranjos colocalizado (esquerda) e desencontrado (direita) para as variáveis p_α e S_α	34
Figura 8 – Disposição de um volume de controle P e seus vizinhos em uma malha uniforme unidimensional (esquerda) e bidimensional (direita).	34
Figura 9 – Condições de contorno com volumes fictícios na fronteira.	36
Figura 10 – Aproximação temporal: formulação explícita.	37
Figura 11 – Aproximação temporal: formulação semi-implícita.	37
Figura 12 – Aproximação temporal: formulação implícita.	37
Figura 13 – Estrutura do ciclo V	40
Figura 14 – Estrutura do ciclo W	40
Figura 15 – Estrutura do ciclo F	40
Figura 16 – Variável com mesma localização nodal em malhas distintas.	45
Figura 17 – Variável situada no ponto médio entre pontos nodais em malhas distintas.	47
Figura 18 – Discretização espacial unidimensional.	55
Figura 19 – Disposição de um volume de controle i e seus vizinhos em uma malha uniforme unidimensional.	56
Figura 20 – Solução analítica e numérica da saturação S_w obtida no primeiro passo de tempo para diversos τ e h	60
Figura 21 – Erro de discretização considerando $\Phi = 0,4$, com e sem o emprego da MER para as variáveis: (a) p_n e (b) p_w	61
Figura 22 – Erro de discretização considerando $\Phi = 0,9$, com e sem o emprego da MER para as variáveis: (a) p_n e (b) p_w	62
Figura 23 – Erro de discretização sem o emprego da MER (E_h), com o emprego da MER (E_m) e sua estimativa (U_{pmc}) versus discretização espacial h , considerando $\Phi = 0,4$, para as variáveis: (a) p_n e (b) p_w	64
Figura 24 – Erro de discretização para o experimento numérico 3, com e sem o emprego da MER para as variáveis: (a) p_n e (b) p_w	67

Figura 25 – Erro de discretização sem o emprego da MER (E_h), com o emprego da MER (E_m) e suas estimativas (U_{Ri} e $U_{p_{mc}}$) <i>versus</i> discretização espacial h , no experimento numérico 3, para as variáveis: (a) p_n e (b) p_w	68
Figura 26 – Erro de discretização para o experimento numérico 4, com e sem o emprego da MER para as variáveis: (a) p_n e (b) p_w	71
Figura 27 – Erro de discretização sem o emprego da MER (E_h), com o emprego da MER (E_m) e suas estimativas (U_{Ri} e $U_{p_{mc}}$) <i>versus</i> discretização espacial h , no experimento numérico 4, para as variáveis: (a) p_n e (b) p_w	72
Figura 28 – Erro de discretização para o experimento numérico 5, com e sem o emprego da MER para as variáveis: (a) p_n e (b) p_w	74
Figura 29 – Erro de discretização sem o emprego da MER (E_h), com o emprego da MER (E_m) e suas estimativas (U_{Ri} e $U_{p_{mc}}$) <i>versus</i> discretização espacial h , no experimento numérico 5, para as variáveis: (a) p_n e (b) p_w	75

LISTA DE TABELAS

Tabela 1 – Valores de porosidades.	27
Tabela 2 – Representação esquemática do emprego da MER.	45
Tabela 3 – Representação esquemática do emprego de U_{p_m}	48
Tabela 4 – Representação esquemática do emprego de U_{ψ}	49
Tabela 5 – Dados de entrada para a verificação do código.	60
Tabela 6 – Dados de entrada para os experimentos numéricos 1 e 2.	61
Tabela 7 – Redução do erro em três malhas distintas, para a variável p_n considerando $\Phi = 0,4$	62
Tabela 8 – Redução do erro em três malhas distintas, para a variável p_w considerando $\Phi = 0,4$	62
Tabela 9 – Ordens efetiva (p_E) e aparente (p_U) para a variável p_n , no experimento numérico 1.	63
Tabela 10 – Efetividade dos estimadores U_{ψ^*} e $U_{p_{mc}}$ para as variáveis p_n e p_w considerando o experimento numérico 1.	63
Tabela 11 – Dados de entrada para o experimento numérico 3.	64
Tabela 12 – Ordens efetiva (p_E) e aparente (p_U) para a variável p_n , no experimento numérico 3.	65
Tabela 13 – Ordens efetiva (p_E) e aparente (p_U) para variável p_w , no experimento numérico 3.	65
Tabela 14 – Erros na $\ \cdot\ _2$ da pressão \bar{p} para diferentes valores dos parâmetros de discretização espacial e temporal, com $t_f = 1$, para o experimento numérico 3.	66
Tabela 15 – Erros na $\ \cdot\ _2$ das pressões p_w e p_n para diferentes valores dos parâmetros de discretização espacial e temporal, com $t_f = 1$, para o experimento numérico 3.	66
Tabela 16 – Redução do erro em duas malhas distintas para as variáveis p_n e p_w , no experimento numérico 3.	67
Tabela 17 – Efetividade dos estimadores U_{Ri} , U_{ψ^*} e $U_{p_{mc}}$ para a variável p_w , no experimento numérico 3.	67
Tabela 18 – Dados de entrada para o experimento numérico 4.	69
Tabela 19 – Ordens efetiva (p_E) e aparente (p_U) para a variável p_n , no experimento numérico 4.	69
Tabela 20 – Ordens efetiva (p_E) e aparente (p_U) para a variável p_w , no experimento numérico 4.	69
Tabela 21 – Erros na $\ \cdot\ _2$ da pressão \bar{p} para diferentes valores dos parâmetros de discretização espacial e temporal, com $t_f = 1$, para o experimento numérico 4.	70

Tabela 22 – Erros na $\ \cdot\ _2$ das pressões p_w e p_n para diferentes valores dos parâmetros de discretização espacial e temporal, com $t_f = 1$, para o experimento numérico 4.	70
Tabela 23 – Redução do erro em duas malhas distintas das variáveis p_n e p_w , para o experimento numérico 4.	71
Tabela 24 – Efetividade dos estimadores U_{Ri} , U_{ψ^*} e $U_{p_{mc}}$ para a variável p_w , no experimento numérico 4.	71
Tabela 25 – Ordens efetiva (p_E) e aparente (p_U) para a variável p_n , no experimento numérico 5.	73
Tabela 26 – Ordens efetiva (p_E) e aparente (p_U) para p_w , no experimento numérico 5.	73
Tabela 27 – Erros na $\ \cdot\ _2$ da pressão \bar{p} para diferentes valores dos parâmetros de discretização espacial e temporal, com $t_f = 1$, para o experimento numérico 5.	73
Tabela 28 – Erros na $\ \cdot\ _2$ das pressões p_w e p_n para diferentes valores dos parâmetros de discretização espacial e temporal, com $t_f = 1$, para o experimento numérico 5.	73
Tabela 29 – Redução do erro em duas malhas distintas para as variáveis p_n e p_w , no experimento numérico 5.	75
Tabela 30 – Efetividade dos estimadores U_{Ri} , U_{ψ^*} e $U_{p_{mc}}$ da variável p_w , no experimento numérico 5.	75

LISTA DE ABREVIATURAS E SIGLAS

CDS	<i>Central Differencing Scheme</i>
CFD	<i>Computational Fluid Dynamics</i>
CS	<i>Correction Scheme</i>
EDP	Equação Diferencial Parcial
ER	Extrapolação de Richardson
FAS	<i>Full Approximation Scheme</i>
MDF	Método das Diferenças Finitas
MEF	Método dos Elementos Finitos
MER	Múltipla Extrapolação de Richardson
MVF	Método dos Volumes Finitos
PVI	Problema de Valor Inicial
REV	<i>Representative Elementary Volume</i>
VC	Volume de Controle

LISTA DE SÍMBOLOS

A	matriz de coeficientes
E	erro numérico
E_{p_α}	erro numérico com p_α a variável correspondente
E_h	erro de discretização
E_I	erro de iteração
E_m	erro de discretização obtido após o emprego de MER com o maior nível de extrapolação possível
E_T	erro de truncamento
E_π	erro de arredondamento
f	vetor do termo fonte
F_α	termo fonte da fase α
g	indicador do nível de malha
G	número total de malhas consideradas
\mathbf{g}	vetor de aceleração gravitacional
h	espaçamento entre os volumes de controle da malha
h_x	tamanho da malha na direção x
h_y	tamanho da malha na direção y
i, j	contadores na direção espacial
I_h^{2h}	operador de restrição
I_{2h}^h	operador de prolongação
K	permeabilidade absoluta
K_α	tensor da permeabilidade da fase α
$k_{r\alpha}$	permeabilidade relativa da fase α
l	número de níveis do <i>multigrid</i>
L	comprimento do domínio de cálculo

L_x	comprimento do domínio bidimensional: direção x
L_y	comprimento do domínio bidimensional: direção y
m	indicador do nível de extrapolação
$\ \cdot\ _2$	norma-2
N_t	número de passos no tempo
N_x	número de volumes de controle na direção x
N_y	Número de volumes de controle na direção y
n_{vg}	parâmetro de Van Genuchten
p	pressão do fluido
p_c	pressão capilar
p_e	pressão de entrada
p_E	ordem efetiva
$(p_E)_{g,m}$	ordem efetiva inerente à solução obtida com o emprego de MER
p_L	ordem assintótica
p_U	ordem aparente
$(p_U)_{g,m}$	ordem aparente inerente à solução obtida com o emprego de MER
p_V	conjunto das ordens verdadeiras
\mathbf{q}	vetor de fluxo volumétrico
r	razão de refino de malha
re	razão de engrossamento no método <i>multigrid</i>
S	saturação
\bar{S}	saturação efetiva
$S_{\alpha r}$	saturação residual da fase α
t_0	tempo inicial
t_f	tempo final
TOL_{lin}	tolerância para o método de linearização

u	vetor das incógnitas
U_{pm}	estimador de Richardson com base em p_v para MER, estimador pm
U_{pmc}	U_{pm} corrigido
U_{Ri}	estimador de Richardson
v	aproximação da variável de interesse u

Letras Gregas

$\nabla \cdot$	operador divergente
∇	operador gradiente
λ_α	mobilidade do fluido na fase α
μ	viscosidade do fluido
ν_1	número de pré-suavizações no <i>multigrid</i>
ν_2	número de pós-suavizações no <i>multigrid</i>
ρ	densidade do fluido
τ	tamanho do passo no tempo
$\bar{\phi}$	solução analítica para a variável de interesse
ϕ	solução numérica para variável de interesse
ϕ_∞	solução analítica estimada
$\Theta(U)$	efetividade da estimativa U
Φ	porosidade do meio
Ω	domínio de cálculo (contínuo)
Ω^h	domínio de cálculo discretizado com espaçamento h (malha uniforme)

índices

n	iteração do passo de tempo
s	iteração do método de linearização
α	fase do fluido
i	posição do volume de controle na direção x
j	posição do volume de controle na direção y
N	volume localizado ao norte do volume de controle central
P	volume de controle central
S	volume localizado ao sul do volume de controle central
W	volume localizado ao oeste do volume de controle central

SUMÁRIO

1	INTRODUÇÃO	17
1.1	Revisão bibliográfica	19
1.1.1	Problemas multifásicos	19
1.1.2	Métodos de linearização	20
1.1.3	Múltipla Extrapolação de Richardson (MER)	21
1.2	Objetivos	24
1.3	Organização do texto	24
2	FUNDAMENTAÇÃO TEÓRICA	25
2.1	Definições básicas de escoamentos multifásicos em meios porosos	25
2.1.1	Equações governantes	28
2.1.2	Pressão capilar e permeabilidade relativa	30
2.2	Métodos de linearização	31
2.3	Método dos volumes finitos	33
2.4	Métodos para a aproximação temporal	36
2.5	Método <i>Multigrid</i>	38
2.6	Erros Numéricos	41
2.7	Múltipla Extrapolação de Richardson	43
2.8	Variáveis de interesse	44
2.8.1	Variável com mesma localização nodal em malhas distintas	45
2.8.2	Variável situada no ponto médio entre pontos nodais cuja localização é pré-estabelecida em malhas distintas	46
2.9	Estimadores para o Erro de Discretização	46
2.9.1	Estimadores de Richardson e Richardson corrigido	47
2.9.2	Estimadores ψ e ψ^*	48
2.9.3	Efetividade de uma estimativa de erro	50
3	MODELO MATEMÁTICO	51
3.1	Modelo matemático unidimensional	51
3.2	Modelo matemático bidimensional	52
4	MODELO NUMÉRICO	53
4.1	Discretização temporal	53
4.2	Linearização	53
4.3	Discretização espacial	55
5	RESULTADOS NUMÉRICOS	59
5.1	Problemas unidimensionais	59

5.2	Problemas bidimensionais	64
5.2.1	Experimento numérico 3	64
5.2.2	Experimento numérico 4	68
5.2.3	Experimento numérico 5	72
6	CONSIDERAÇÕES FINAIS	76
6.1	Escopo do trabalho	76
6.2	Conclusão geral	76
6.3	Principais contribuições	77
6.4	Propostas de trabalhos futuros	77
	REFERÊNCIAS	78
	APÊNDICE A – ARTIGO XLI CILAMCE	84

1 INTRODUÇÃO

O escoamento multifásico em meios porosos é um campo de estudo importante nas Engenharias, especialmente em áreas como a Engenharia de Petróleo, Hidrogeologia, Engenharia Ambiental, Mecânica dos Solos, entre outros. Por exemplo, em campos de petróleo, o escoamento multifásico em meios porosos é crucial para entender a migração e produção de petróleo e gás natural. Isso envolve o estudo do comportamento dos fluidos no subsolo, incluindo a interação entre água, óleo e gás. Em situações de contaminação ambiental, como vazamentos de produtos químicos ou derramamentos de petróleo, o escoamento multifásico em meios porosos é fundamental para prever a propagação da contaminação no solo e na água subterrânea, bem como para desenvolver estratégias de remediação (Yildiz; Kazemi, 2016; Zhang; Parker, 1994). Para estudar estes problemas, são formulados modelos matemáticos que os representem. Tais modelos dependem, geralmente, da saturação, pressão e permeabilidade relativa. Independentemente de como esses modelos são formulados, são gerados sistemas de equações diferenciais parciais (EDPs) acoplados altamente não lineares, que são resolvidos por simulações numéricas. Nesse contexto, a busca por métodos numéricos robustos, eficientes e acurados torna-se um campo relevante da investigação científica.

Neste trabalho, estuda-se um problema genérico envolvendo o escoamento bifásico de fluidos incompressíveis e imiscíveis em meios porosos rígidos, ou seja, a movimentação de dois fluidos distintos (como água e óleo) que não se misturam, através dos poros do meio poroso rígido. O escoamento é governado pela interação entre as forças de pressão, viscosidade e capilaridade, além das propriedades do meio poroso, como permeabilidade e porosidade. Portanto, esse sistema é modelado por duas equações, uma para cada fase, que são acopladas devido à dependência da permeabilidade relativa e da pressão de ambas as fases. Para resolver o sistema, é empregada a formulação mista pressão-saturação, uma técnica amplamente conhecida (Bastian, 1999). No entanto, após a linearização, o sistema é reescrito em um formato menos comum, no qual as pressões são tratadas como as variáveis principais, e em seguida, é utilizado um método para acelerar a convergência.

Para resolver numericamente as equações considera-se o processo de discretização nas dimensões espaciais $\mathbf{x} = (x,y)$ e na dimensão temporal t . Em relação a t é utilizado o método de Euler implícito (Fortuna, 2012; Burden; Faires, 2016). Antes de realizar, a discretização em \mathbf{x} , é feita a linearização do sistema de equações utilizando o método de Picard modificado (Celia; Binning, 1992). Finalmente, com o sistema linearizado realiza-se a discretização de \mathbf{x} utilizando o método dos volumes finitos (MVF) (Maliska, 2004; Golub; Ortega, 1992).

Realizada a discretização espacial, obtém-se uma sequência de sistemas de equações algébricas lineares, geralmente do tipo

$$Au = f, \tag{1.1}$$

onde, A é a matriz dos coeficientes, u é o vetor das incógnitas e f é o vetor do termo fonte. Esse sistema linear pode ser resolvido por diversos métodos (neste trabalho chamados de *solvers*), entre eles, os métodos diretos e os iterativos. Devido às características desse sistema, esparsos e de grande porte, neste trabalho é utilizado o método iterativo de Gauss-Seidel acoplado (Gaspar *et al.*, 2004), *solver* utilizado.

Ao iniciar o processo de resolução do sistema linear, o *solver* tem uma taxa de convergência relativamente alta, fazendo com que o erro associado ao processo iterativo, denominado erro de iteração, diminua rapidamente para os erros de alta frequência, porém, com o passar das iterações, quando restam apenas erros de baixa frequência, essa taxa diminui e tal erro tende a cair muito lentamente, ou, em alguns casos, até mesmo torna-se constante. Neste trabalho, o *solver* que reduz rapidamente os erros de alta frequência restando apenas os erros de baixa frequência, será tratado como suavizador. Para acelerar a convergência de suavizador de forma eficiente é adequada a utilização do método *multigrid* (Trottenberg; Oosterlee; Schüller, 2001; Briggs; Henson; McCormick, 2000; Wesseling, 1992). Tal método foi desenvolvido para superar as dificuldades dos métodos iterativos, visando acelerar a convergência por meio de transferência de dados em malhas distintas, e com isso, reduzir eficientemente todas as componentes do erro de iteração. O método *multigrid* é composto de um conjunto de diferentes malhas, percorridas ao longo do processo iterativo, reduzindo todas as componentes do erro de forma eficiente.

Geralmente, as soluções numéricas podem ser afetadas por erros numéricos, cujas fontes são erros de truncamento (E_T), erros de iteração (E_I) e erros de arredondamento (E_π) (Ferziger; Perić, 2002; Marchi; Germer, 2013). O erro numérico passa a ser denominado como erro de discretização (E_h) quando E_I e E_π são minimizados ou mesmo inexistentes (Roache, 2009). De todas as fontes de erros numéricos, o erro de discretização (E_h) é considerado como a fonte mais significativa (Roy; Obeekampf, 2011). Contudo, as demais fontes necessitam ser consideradas no âmbito da verificação numérica de uma solução. Nesse encaixe, neste trabalho o erro de arredondamento é controlado mediante a utilização de precisão dupla em todos os cálculos. O erro de iteração é reduzido com o emprego do método *multigrid* até que se alcance o erro de máquina (mesma ordem do erro de arredondamento). Então, com a garantia do controle das demais fontes, o estudo sobre a redução do E_h passa a ter uma importância significativa no sentido em que tal fonte é caracterizada na literatura como prioritária. Como formas de reduzi-lo, algumas alternativas são: (a) o refinamento da malha, entretanto resultando em um aumento do custo computacional; (b) o aumento da ordem de acurácia das aproximações, o que leva a um aumento da complexidade do modelo numérico; (c) a utilização de técnicas de extrapolação, como a Extrapolação de Richardson (ER), a qual é considerada um pós-processamento de fácil implementação e baixo custo computacional (Richardson; Gaunt, 1927; Sidi, 2003; Marchi; Germer, 2013).

1.1 Revisão bibliográfica

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

1.1.1 Problemas multifásicos

Simulações numéricas em escoamentos multifásicos são amplamente empregadas para estudar o comportamento de sistemas em que duas ou mais fases de fluidos coexistem. Esses escoamentos podem ser encontrados em uma variedade de aplicações industriais, como na indústria de petróleo e gás, Engenharia Ambiental, entre outros. As equações governantes desses problemas são altamente não lineares representando uma dificuldade significativa na sua resolução, requerendo a aplicação de métodos numéricos robustos e eficientes. Para simplificar essas equações e tornar sua resolução numericamente viável, diversas abordagens são utilizadas. Por exemplo, no caso do escoamento bifásico, água e ar simultaneamente, em um solo insaturado, pode-se supor que a fase do ar permanece constante, ou ainda, igual à pressão atmosférica (Celia; Bouloutas; Zarba, 1990), assim, o sistema é reduzido à fase aquosa apenas. Esta abordagem é chamada de aproximação de Richard (Richard, 1931). Porém, em alguns casos essa abordagem não pode ser aplicada, pois a fase do ar interfere significativamente no movimento da fase de água, de modo que é necessário utilizar o modelo de duas fases.

Considerando duas ou mais fases, o modelo matemático é altamente não linear, o que fez com que alguns trabalhos manipulassem as expressões que interferem nesse fato. O modelo de duas fases proposto por Li e Horne (2006) usou o método de Purcell e a parametrização de Brooks-Corey para descrever o comportamento da permeabilidade relativa em meio poroso úmido consolidado. Segundo Li e Horne (2006), a integração do método de Purcell e da relação de Brooks-Corey em tal modelo aumenta sua capacidade de descrever e prever o comportamento de escoamentos multifásicos em meios porosos.

Cihan, Birkholzer e Bianchi (2012) investigaram o efeito da heterogeneidade geológica na retenção de CO₂ residual e água em reservatórios de arenito. Eles utilizaram a parametrização de Van Genuchten para modelar a pressão capilar e a permeabilidade relativa do meio poroso, permitindo a simulação do fluxo de CO₂ e água no reservatório durante e após a injeção de CO₂.

Esses problemas podem ser modelados por diferentes formulações matemáticas. As propriedades de cada formulação depende das particularidades do problema. Contudo, em algumas formulações são usadas algumas novas variáveis (artificiais) que podem facilitar a resolução do sistema (Bastian, 1999). Formulação mista no formato saturação-pressão da fase (Bastian, 1999; Helmig, 1997), formulação mista no formato saturação-pressão global e formulação no formato pressão-pressão (Ataie-Ashtiani; Raeesi-Ardekani, 2010), são exemplos de formulações possíveis de serem aplicadas em problemas de duas fases,

sendo as duas primeiras as mais comuns na literatura.

1.1.2 Métodos de linearização

Para encontrar a solução numérica de um modelo de escoamento bifásico é necessário escolher uma maneira de resolver o sistema acoplado de equações não lineares. Uma maneira de resolver esse tipo de sistema é utilizar uma técnica de linearização para aproximar tal sistema de equações num sistema de equações lineares e em seguida resolvê-lo usando um método para sistemas lineares (Burden; Faires, 2016; Golub; Ortega, 1992).

O Método de Newton, considerado muito eficiente com convergência quadrática pode ser usado para linearizar o sistema de equações não lineares, porém é custoso computacionalmente devido ao alto custo com o cálculo de derivadas em cada iteração (Burden; Faires, 2016; Golub; Ortega, 1992).

O método L -esquema (Radu *et al.*, 2015) é outro método de linearização comum devido à sua simplicidade, pois substitui a iteração de Newton por uma iteração de ponto fixo. Esse método foi utilizado por Karpinski, Pop e Radu (2017) em um modelo de escoamento bifásico em meio poroso com efeitos de capilaridade dinâmica. O L -esquema, não requer etapa de regularização, pois não utiliza cálculo de derivadas geradas pela linearização como no método de Newton e Picard. Por exemplo, no L -esquema a derivada da saturação é substituída por um valor constante. Esse procedimento de linearização foi apresentado por Pop, Radu e Knaber (2004) para resolver problemas não lineares elípticos, entretanto sua robustez é limitada por uma convergência mais lenta, geralmente convergência linear.

As técnicas de Picard são amplamente utilizadas. O Método de Picard (Golub; Ortega, 1992) é mais eficiente, do ponto de vista computacional, mas não é tão acurado devido à aproximação ser feita por uma parte linear e outra não linear. A linearização pelo método de Picard modificado (Celia; Bouloutas; Zarba, 1990) é baseada na forma mista da equação, permitindo a transição das zonas insaturadas para as saturadas mantendo a conservação da massa. Este método foi criado no intuito de manter um baixo custo computacional (em relação ao método de Newton) e a melhora de acurácia. Tal método foi introduzido por Celia, Bouloutas e Zarba (1990), primeiro para a equação de Richard e depois para o problema de escoamento bifásico em meios porosos (Celia; Binning, 1992).

Uma comparação de métodos de linearização, em particular entre o L -esquema e o método de Picard modificado, foi realizado por Oliveira *et al.* (2020) para um problema de escoamento bifásico unidimensional em meios porosos rígidos combinado com o método *multigrid* para a aceleração na solução dos sistemas de equações resultantes. Ainda sobre o L -esquema Sabatini *et al.* (2020) (veja no Apêndice A) estabeleceu uma regra e um valor de L que garante a convergência deste método de linearização aplicado ao mesmo problema estudado em Oliveira *et al.* (2020).

Um método de solução para problemas de escoamento bifásico bidimensional em meios porosos rígidos, baseado no método de linearização de Picard modificado combinado com o método *multigrid* foi apresentado por Oliveira *et al.* (2024). Os autores mostraram que o método desempenha eficientemente mesmo para meios aleatórios heterogêneos.

1.1.3 Múltipla Extrapolação de Richardson (MER)

A Extrapolação de Richardson (ER) e a Múltipla Extrapolação de Richardson (MER), uma aplicação recursiva da ER, foram concebidas com o objetivo aumentar a ordem de acurácia de soluções numéricas envolvidas na resolução de equações diferenciais por meio de diversos métodos de discretização, por exemplo, o método dos volumes finitos (MVF) e o método de diferenças finitas (MDF). Dessa forma, nesta seção são apresentados alguns trabalhos relacionados à ER e à MER, em diferentes modelos matemáticos.

Richardson e Gaunt (1927) aplicaram a ER com dois níveis de extrapolação, na equação integral de Volterra e nas derivadas no Teorema de Leibnitz, melhorando a acurácia das soluções numéricas obtidas.

Overholt (1965) aprimorou o método ordinário de Aitken, que tradicionalmente utiliza três valores consecutivos de uma sequência que converge linearmente, para alcançar valores acelerados com erros de qualquer ordem desejada. Ao traçar paralelos com a ER, o autor apresentou uma abordagem direta para melhorar a convergência em processos iterativos.

Em Joyce (1971) é possível identificar semelhanças entre o método de ER e outros métodos de extrapolação existentes. Este trabalho analisou o desenvolvimento dos métodos de extrapolação no contexto da análise numérica.

Christiansen e Petersen (1989) apresentaram uma abordagem para estimar as ordens de extrapolação com base na expansão em série do erro de discretização. Os autores visaram desenvolver um método que permitisse a estimativa precisa das ordens de convergência ao aplicar a MER a métodos numéricos, especialmente no contexto de métodos de elementos finitos e outras aproximações numéricas. Eles exploraram a eliminação eficaz dos termos de erro para melhorar a acurácia dos resultados e validaram sua abordagem por meio de várias aplicações, incluindo a aproximação de integrais e auto-valores.

Lima (1994) aplicou a ER num problema de valor de contorno modelado por equações diferenciais ordinárias lineares de segunda ordem discretizadas com o MDF, melhorando a acurácia dos resultados numéricos.

Ertuk, Corke e Gokçol (2005) aplicaram dois níveis da ER, utilizando três malhas distintas no problema de escoamento permanente bidimensional de fluido incompressível em uma cavidade com tampa móvel e obtiveram sexta ordem de acurácia para a solução numérica.

Rahul e Bhattacharyya (2006) investigaram a ordem de acurácia de aproximações numéricas unilaterais, empregadas quando as condições de contorno envolvem o cálculo de

derivadas. Empregaram a MER com três malhas distintas e dois níveis de extrapolação e atingiram a ordem de acurácia quatro.

Marchi e Germer (2013) avaliaram o desempenho de MER na redução do erro de discretização (E_h) quando associado a dez tipos de esquemas numéricos em CFD: de primeira, segunda e terceira ordens de acurácia para resolver a equação unidimensional de advecção-difusão. As variáveis de interesse avaliadas foram: temperatura no centro do domínio, média do campo de temperatura e taxa de transferência de calor. Os autores mostraram que a MER é extremamente eficaz na redução do erro de discretização para todas as variáveis e esquemas numéricos atingindo uma ordem de acurácia superior a 18.

Marchi *et al.* (2013b) utilizaram a MER para reduzir e estimar o erro de discretização de soluções numéricas para a equação de Laplace bidimensional. Os autores utilizaram o MDF com malhas uniformes, aproximações de segunda ordem e condições de contorno de Dirichlet e constataram que a MER reduziu significativamente o erro de discretização, e que o estimador de erro de Richardson mostrou-se acurado. Também relataram que para se obter um determinado nível de acurácia pré-estabelecido, foi necessário muito menos tempo de processamento e de memória RAM com o uso da MER.

Martins (2013) analisou o desempenho da MER, utilizando as equações de Poisson unidimensional, Burgers bidimensional e Navier–Stokes bidimensional com o MDF e o MVF propondo um conjunto de procedimentos numéricos que reduziram o E_h . Foram empregadas funções de interpolação polinomial em domínios uni e bidimensionais e técnicas de otimização. Em relação às estimativas do E_h , foram analisados os desempenhos de alguns estimadores disponíveis na literatura, e uma nova proposta de estimador para a MER foi apresentada. Nesse trabalho concluiu-se que o erro de discretização é significativamente reduzido e que a ordem de acurácia também é elevada. Esses resultados foram considerados também em Marchi *et al.* (2016).

AbdelMigid *et al.* (2017) analisaram a solução das equações de Navier-Stokes com escoamentos incompressíveis para a faixa de variação do número de Reynolds entre 100 e 5000. Utilizaram computação paralela para obter as soluções numéricas em malhas uniformes e a MER foi usada para a redução dos erros de discretização. Os autores obtiveram uma elevação da ordem de acurácia de 2 para 6.

Da Silva *et al.* (2020) apresentaram um procedimento completo da MER para um tipo mais genérico de malha em escoamentos de fluidos compressíveis. Três testes são realizados para equações de Euler unidimensionais e quase unidimensionais: escoamento de Rayleigh, escoamento isentrópico e escoamento adiabático através de um bocal, todos resolvidos com o MDF. O procedimento proposto aumentou a acurácia obtida em todos os três testes, com o melhor desempenho observado para o escoamento de Rayleigh.

Rodrigues *et al.* (2020) verificaram a eficiência de MER para reduzir E_h quando aplicada ao problema de poroelasticidade unidimensional. As variáveis de interesse analisadas foram o deslocamento e a pressão no centro do domínio e, o valor médio

da pressão e do deslocamento. Verificou-se que o emprego de MER resultou em uma redução significativa da magnitude de E_h , assim como numa elevação da sua ordem de acurácia.

Da Silva *et al.* (2022) empregaram a MER para melhorar a acurácia das soluções numéricas de variáveis locais e globais obtidas usando o método de hidrodinâmica de partículas suavizadas (SPH) para problemas de condução de calor unidimensionais em regime permanente e transiente, com condições de contorno de Dirichlet. Os autores constataram que a MER é robusta na determinação até a ordem de acurácia 16 para o domínio espacial.

Rodrigues *et al.* (2022) realizaram um estudo para avaliar a eficiência de MER, considerando variáveis com valores extremos, correspondentes ao problema de poroelasticidade unidimensional. Os autores verificaram que a aplicação direta de MER em variáveis com valores extremos não foi eficiente e utilizaram uma metodologia que envolve interpolação polinomial seguida de um método de otimização previamente ao emprego de MER. Os resultados obtidos indicam que a metodologia utilizada neste estudo é promissora em termos de redução do erro de discretização e aumento da acurácia das soluções numéricas, além de possibilitar a obtenção de estimativas para o erro de discretização confiáveis e acuradas.

Foltran, Marchi e Moura (2023) analisaram a eficiência de MER em problemas de meios participantes e não participantes de transferência de calor por radiação, alcançando bons resultados. As estimativas de erro mostraram-se acuradas e confiáveis para verificação de código e solução. Nesse trabalho também foram apresentadas equações que quantificam o erro de discretização espacial dentro do domínio quando o Método das Ordenadas Discretas é usado para simular problemas de meios participantes e quando regras básicas de integração numérica são usadas para resolver problemas de meios não participantes.

Kwiatkowski Junior (2023) empregou a MER para reduzir e estimar o erro de discretização na simulação do processo de aeração da massa de grãos utilizando o modelo proposto por Thorpe (Thorpe, 2001). O autor comparou o MVF com o método de diferenças finitas (MDF) usando cinco esquemas de aproximações numéricas: de primeira e segunda ordem. O autor mostrou que a MER reduziu significativamente o erro de discretização. Em relação às estimativas do E_h , foram analisados os desempenhos de alguns estimadores disponíveis na literatura, concluindo que o estimador de Richardson é o mais adequado para o modelo estudado.

Leduc (2024) realizou um estudo para analisar as oscilações na convergência do preço das opções, utilizando métodos de árvore. Segundo o autor, o uso da MER é dificultada por essas oscilações. Tais oscilações geralmente surgem devido às flutuações nas posições dos nós em torno das descontinuidades na função de pagamento ou em suas derivadas, em que elas impedem o uso eficaz de métodos de rede quando é necessária alta eficiência. Foi proposto o desenvolvimento de uma árvore trinomial que ajusta precisamente

as posições dos nós para se alinharem com as descontinuidades ao longo da vida útil da opção e em vários passos de tempo. Esse alinhamento permite o uso da MER para alcançar convergência de alta ordem, especialmente próximo das barreiras.

Nesta seção, são apresentados diversos estudos que demonstram a eficiência da Múltipla Extrapolação de Richardson (MER) para a redução do E_h em diferentes modelos matemáticos. Contudo, até o momento, não foram encontrados estudos que explorem o uso da MER em modelos aplicados a problemas de escoamentos multifásicos. Diante disso, esta tese se propõe a preencher essa lacuna na literatura ao analisar o emprego da MER para reduzir e estimar o erro E_h neste tipo de problema, com o objetivo de aumentar o nível de acurácia e confiabilidade de suas soluções numéricas.

1.2 Objetivos

O objetivo geral deste trabalho é analisar o comportamento do E_h em problemas de escoamentos bifásicos, bem como o emprego da MER para reduzir e estimar o E_h . Dessa forma, admite-se como objetivos específicos:

- resolver problemas de escoamentos bifásicos;
- avaliar a eficiência da MER na redução do E_h ;
- encontrar estimativas acuradas para o E_h , ao empregar-se a MER.

1.3 Organização do texto

Este texto está dividido em mais 5 capítulos, como segue. No capítulo 2, é apresentada a fundamentação teórica deste trabalho, que envolve conceitos básicos em problemas multifásicos em meios porosos, o método de discretização espacial e temporal, métodos de linearização, o método *multigrid*, conceitos e definições sobre erros numéricos, ordens efetiva e aparente, Extrapolação de Richardson e os aspectos referentes à obtenção de estimativa para o erro de discretização. No capítulo 3, é apresentado o modelo matemático. No capítulo 4, é apresentado o modelo numérico. No capítulo 5, são apresentados os resultados obtidos com a aplicação de MER e, finalmente, no capítulo 6 são apresentadas as considerações finais, as principais contribuições e sugestões para trabalhos futuros.

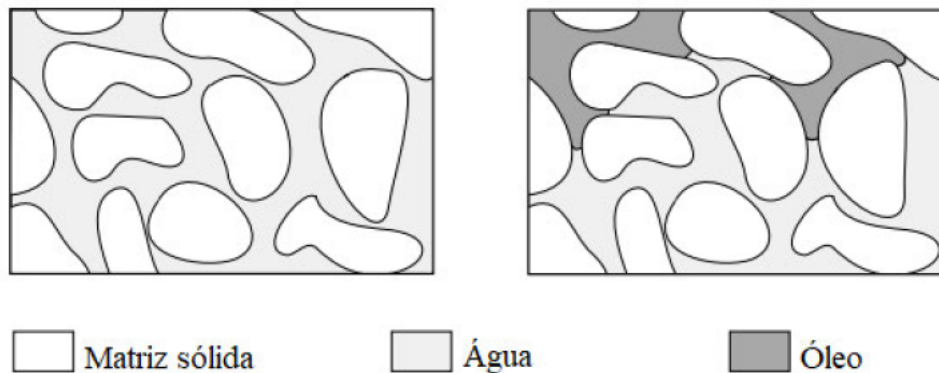
2 FUNDAMENTAÇÃO TEÓRICA

Neste capítulo é apresentado o embasamento necessário para o desenvolvimento deste trabalho, isto é, conceitos básicos sobre escoamentos multifásicos em meios porosos, o método dos volumes finitos, o método de Euler implícito, método de linearização, conceitos sobre os erros numéricos, extrapolação e múltipla extrapolação de Richardson e os estimadores de erros.

2.1 Definições básicas de escoamentos multifásicos em meios porosos

Nesta seção serão introduzidas as propriedades essenciais dos problemas multifásicos em meios porosos. O meio poroso é um corpo constituído por uma parte sólida (por vezes chamado de matriz sólida) e por vazios que podem estar preenchidos por um ou mais fluidos. No caso de escoamentos multifásicos, os espaços vazios são preenchidos por dois ou mais fluidos, que neste trabalho, são admitidos imiscíveis entre si, ou seja, fluidos que não se misturam (por exemplo, água e óleo). A Figura 1, mostra um meio poroso completamente preenchido apenas por água (sistema monofásico, à esquerda) ou preenchido com água e óleo (sistema bifásico, à direita).

Figura 1 – Ilustração de um meio poroso preenchido com um ou dois fluidos.



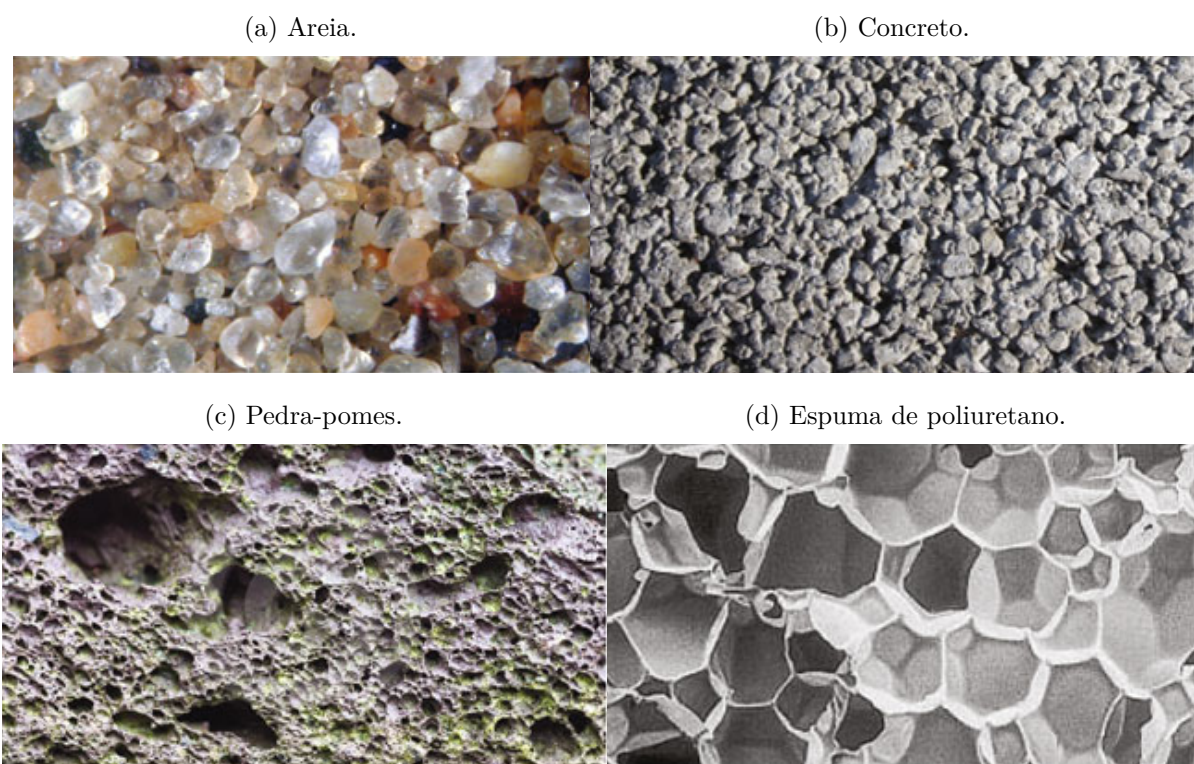
Fonte: Adaptado de Bastian (1999).

O material poroso assume muitas formas e meios. Por exemplo, materiais porosos como espumas de polímero, lã de vidro e lã de rocha são utilizados como isolantes térmicos e acústicos em edifícios e aplicações industriais. Sua estrutura porosa ajuda a reduzir a transferência de calor e som, tornando-os ideais para melhorar o conforto térmico e acústico em construções (Silva; Gaspar; Pereira, 2014). Estruturas porosas também são utilizadas em aplicações biomédicas, como engenharia de tecidos e implantes (Woodruff; Hutmacher, 2010). Outro exemplo de material poroso muito utilizado na Engenharia Civil é o concreto, devido às suas propriedades específicas. O concreto é caracterizado por conter uma quantidade significativa de vazios ou poros em sua estrutura, o que confere uma série

de vantagens em várias aplicações, por exemplo pavimentação permeável e estabilização de solos (Zhu; Lura; Weiss, 2014). Outros exemplos de meios porosos são: terra, areia, espuma de borracha, arenito, pulmões, rochas vulcânicas, etc.

A Figura 2a apresenta a areia que é um material com alta porosidade e é um componente essencial na produção de concreto e argamassa. A porosidade da areia ajuda a fornecer uma estrutura estável para esses materiais quando misturados com cimento e água. A Figura 2b apresenta um concreto com alta porosidade. Este tipo de concreto é utilizado para pavimentos onde se deseja permear e armanezar água para reduzir o escoamento superficial em caso de tempestade. A Figura 2c mostra um púmice (pedra-pomes), uma rocha vulcânica. Ela contém grandes poros de tamanhos de milímetros ou até mesmo centímetros. Os poros são formados por bolhas de gás provenientes da exsudação de voláteis durante o resfriamento da lava. A Figura 2d mostra a espuma de poliuretano que é utilizada na fabricação de implantes biomédicos.

Figura 2 – Materiais Porosos.

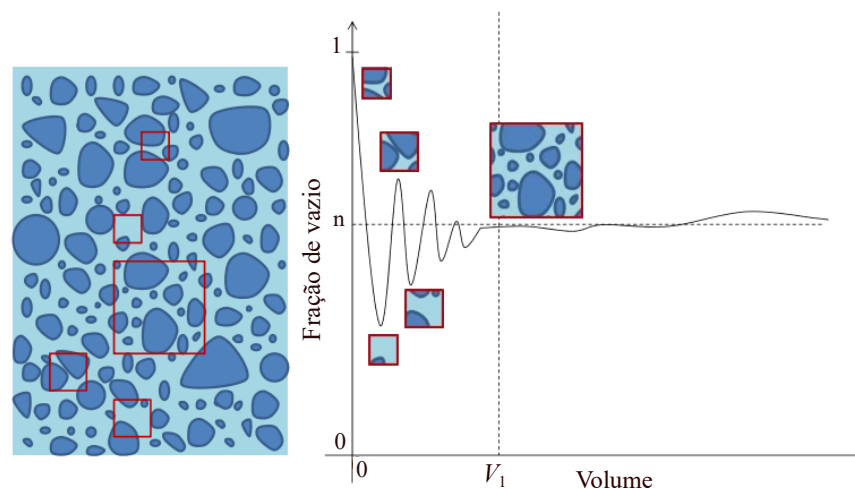


Fonte: Adaptado de Cheng (2016).

Frequentemente o meio poroso tem uma geometria complexa, por isso não pode ser descrito por um ponto, pois cada ponto pode conter apenas sólido ou apenas fluido. Por isso, neste trabalho é utilizada uma abordagem comum que em vez de considerar um único ponto, é considerado o volume elementar representativo (*Representative Elementary Volume*, REV). O REV é o menor volume possível que pode conter uma quantidade representativa de vazio e sólido de forma que seja possível definir as propriedades médias

(macro) com eles. A Figura 3 apresentada por Kvashchuk e Radu (2017) exibe uma maneira para escolher o tamanho do REV mais adequado. Nota-se pela Figura 3 que podem ocorrer oscilações aleatórias em relação à parte vazia se o REV for muito pequeno, assim sendo, a região escolhida pode ter muitos espaços vazios ou poros, não representando o meio em análise. Portanto, é necessário aumentar o tamanho do REV para obter um equilíbrio (V_1 na Figura 3). O volume de vazios no REV dividido pelo seu volume total é chamado de porosidade. Essa quantidade é adimensional e está entre 0 e 1.

Figura 3 – Representação da relação entre o vazio e o volume REV.



Fonte: Adaptado de Kvashchuk e Radu (2017).

A Tabela 1 mostra os valores aproximados esperados das porosidades em vários materiais porosos.

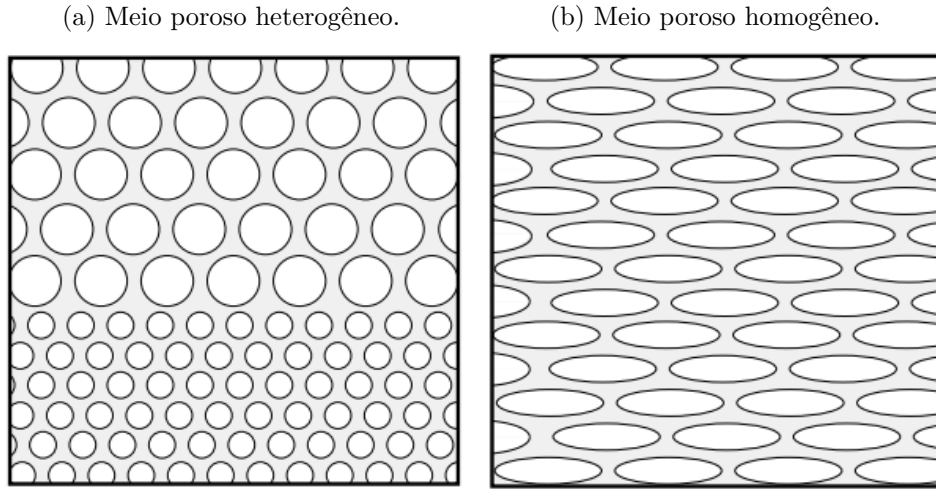
Tabela 1 – Valores de porosidades.

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

Fonte: Adaptado de Kaviany (2012) e Yu *et al.* (2015).

De acordo com Bastian (1999), um meio poroso é homogêneo se a quantidade (média) macroscópica de um parâmetro for o mesmo valor em todo o domínio. Caso contrário, é chamado de heterogêneo. Na Figura 4a é possível observar que o meio tem poros diferentes com grãos grandes e pequenos, logo, é heterogêneo em relação à porosidade. Entretanto, na Figura 4b os poros são todos iguais, logo, um meio homogêneo.

Figura 4 – Ilustração de meios porosos: (a) Heterogêneo e (b) Homogêneo.



Fonte: Bastian (1999).

2.1.1 Equações governantes

Considerando que o espaço vazio do meio poroso é preenchido por duas fases de fluidos imiscíveis e incompressíveis¹, então a conservação de massa dos fluidos pode ser expressa por (Celia; Binning, 1992)

$$\frac{\partial(\rho_\alpha \theta_\alpha)}{\partial t} + \nabla \cdot (\rho_\alpha \mathbf{q}_\alpha) = F_\alpha, \quad \text{em } \Omega \times [0, t_f], \quad (2.1)$$

em que $\Omega \subset \mathbb{R}^d$, com $d = 1, 2$, $[0, t_f]$ é um intervalo de tempo dado com t_f sendo o tempo final e $\alpha = w, n$ são as fases do fluido úmida e não úmida², respectivamente.

A equação (2.1) mostra que a taxa de variação da massa do fluido em um volume de controle arbitrário $V \subseteq \Omega$ é igual ao escoamento líquido sobre a superfície ∂V e a contribuição das fontes dentro de V (Bastian, 1999).

As variáveis na equação (2.1) tem os seguintes significados:

- $\rho_\alpha(x, t)$ é a densidade do fluido da fase α dado em $[kg/m^3]$. Neste trabalho a densidade é um valor constante pois são considerados fluidos incompressíveis;
- $\theta_\alpha = \Phi(x)S_\alpha$ é uma variável adimensional composta pela porosidade $\Phi(x)$ e saturação $S_\alpha(x, t)$ e é usada apenas para simplificação;
- $\Phi(x)$ é a porosidade do meio poroso. Em meios heterogêneos é uma função de posição. Em geral, a porosidade pode depender da pressão do fluido ou do tempo (por exemplo, inchaço da argila), mas esses efeitos não são considerados neste trabalho;

¹Fluidos incompressíveis têm sua densidade constante.

²Em um escoamento bifásico, sempre temos uma fase úmida e uma fase não úmida. O fluido que é preferencialmente atraído pela superfície sólida é chamado de fluido úmido. O ângulo de contato desse fluido com a superfície sólida é menor que 90° . O outro fluido é referido como fluido não úmido (Bastian, 1999; Kvashchuk, 2015).

- $S_\alpha(x,t)$ é a saturação da fase α do fluido. É uma quantidade adimensional definida como uma fração do espaço de poro ocupado pelo fluido α em REV. Portanto, $S_\alpha(x,t)$ possui um valor entre 0 e 1;
- $\nabla \cdot$ é o operador divergente,
- \mathbf{q}_α é o vetor de fluxo volumétrico do fluido da fase α (descrito pela equação (2.2)) dado em $[m^3/s]$;
- $F_\alpha(x,t)$ é o termo fonte da fase α com unidade $[kg/m^3s]$.

O fluxo volumétrico é dado pela lei de Darcy generalizada para o caso multifásico (Bastian, 1999), que é escrita como

$$\mathbf{q}_\alpha = -\frac{K_\alpha}{\mu_\alpha}(\nabla p_\alpha - \rho_\alpha \mathbf{g}), \quad (2.2)$$

onde as variáveis na equação (2.2) tem os seguintes significados:

- K_α é o tensor simétrico da permeabilidade absoluta em $[m^2]$, dado por

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

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

- $\mu_\alpha(x,t)$ é a viscosidade dinâmica do fluido da fase α em $[Pa \cdot s]$. Neste trabalho considera-se que a viscosidade é constante;
- ∇ é o operador gradiente;
- $p_\alpha(x,t)$ é a pressão do fluido da fase α em $[Pa] = [N/m^2]$. Neste trabalho, esta é a função incógnita a ser determinada pelo modelo matemático;
- \mathbf{g} é o vetor da aceleração gravitacional em $[m/s^2]$.

Quando se trata de escoamentos bífasicos é necessário lidar com um sistema onde parte dos poros já estão ocupados com um fluido, o que obstrui o escoamento do outro fluido. Isso implica em menor permeabilidade para ambos os fluidos. Por isso, a necessidade da permeabilidade relativa que é diferente para cada fase α , obedecendo à restrição $0 \leq k_{r\alpha}(S_\alpha) \leq 1$ (Bastian, 1999).

Inserindo $K_\alpha = k_{r\alpha}(S_\alpha)K$ na equação (2.2) obtém-se

$$\mathbf{q}_\alpha = -\frac{k_{r\alpha}}{\mu_\alpha}K(\nabla p_\alpha - \rho_\alpha \mathbf{g}). \quad (2.3)$$

Considerando um fluido incompressível e desconsiderando os efeitos da gravidade,^{1,2} inserindo a equação (2.3) na equação (2.1) e definindo a quantidade $\lambda_\alpha = \frac{k_{r\alpha}}{\mu_\alpha}$ como sendo a mobilidade (Bastian, 1999), obtém-se a equação da conservação de massa dos fluidos de forma simplificada

$$\frac{\partial(\theta_\alpha)}{\partial t} - \lambda_\alpha \nabla \cdot (K \nabla p_\alpha) = \frac{F_\alpha}{\rho_\alpha}. \quad (2.4)$$

Além dessas equações, existem as seguintes relações auxiliares: $S_w + S_n = 1$ e $p_c = p_n - p_w$. Essas relações implicam que a soma da saturação das fases deve ser igual a 1 e que a pressão de capilaridade p_c é definida como a diferença entre as pressões p_n e p_w . Também é possível verificar que, da relação $S_w + S_n = 1$, segue que $\theta_w + \theta_n = \bar{\Phi}$ (Bastian, 1999; Helmig, 1997).

2.1.2 Pressão capilar e permeabilidade relativa

Os modelos mais comuns para a pressão capilar e a permeabilidade relativa são baseados em experimentos laboratoriais. Dessa forma, existem na literatura alguns modelos a respeito desses parâmetros, como por exemplo o modelo de Van Genuchten, que é utilizado neste trabalho. Em tal modelo, a pressão capilar é escrita dependendo da saturação efetiva, ou seja,

$$p_c(S_\alpha) = p_e (\bar{S}_\alpha^{-1/m} - 1)^{1/n_{vg}}, \quad (2.5)$$

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

$$\bar{S}_w = \frac{S_w - S_{wr}}{1 - (S_{wr} + S_{nr})}, \quad (2.6)$$

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

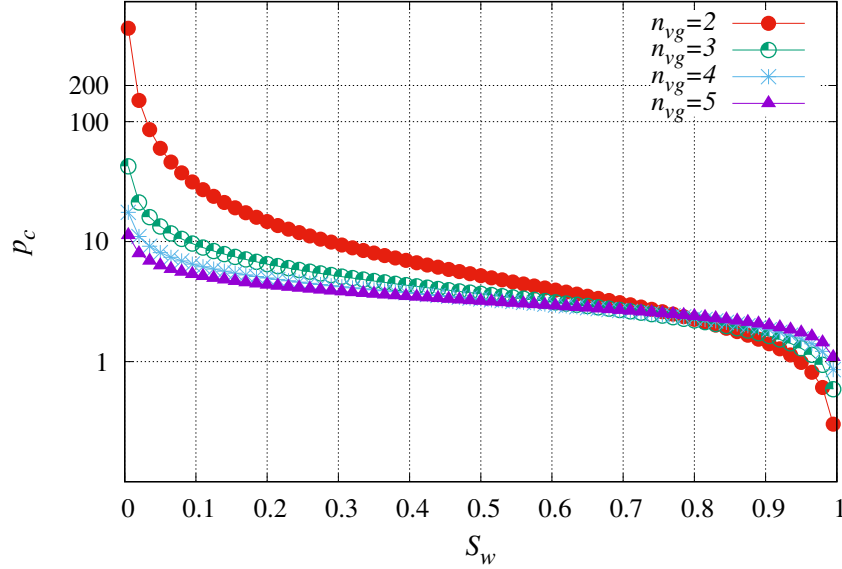
As funções de permeabilidade relativa, dadas por Van Genuchten, para o sistemas de duas fases (úmida e não úmida) são dadas por

$$k_{rw}(S_w) = \sqrt{\bar{S}_w (1 - (1 - (\bar{S}_w)^{1/m})^m)^2}, \quad (2.7)$$

¹Em escoamentos onde as fases fluídicas, como água (fase úmida) e óleo (fase não úmida), apresentam densidades similares ou quando a diferença de densidade não desempenha um papel crucial no comportamento do escoamento, a gravidade pode ser ignorada. Neste caso, a gravidade não gera uma diferença significativa no movimento das fases (Helmig, 1997).

²Quando o escoamento ocorre em um meio poroso horizontal ou com inclinação mínima, a força gravitacional atua perpendicularmente à direção do fluxo. Isso significa que a gravidade não afeta o movimento do fluido nas direções horizontais e o gradiente de pressão é o principal responsável pelo escoamento.

Figura 5 – Função da pressão capilar de Van Genuchten para diferentes parâmetros n_{vg} , $p_e = 3$ e $S_{\alpha r} = 0$.



Fonte: O autor (2024).

e

$$k_{rn}(S_w) = \sqrt{1 - \bar{S}_w} (1 - \bar{S}_w^{1/m})^{2m}, \quad (2.8)$$

em que m é o mesmo parâmetro definido na equação (2.5). A Figura 6 mostra a permeabilidade relativa calculada pela função de Van Genuchten para diferentes valores de n_{vg} e $S_{\alpha r} = 0$.

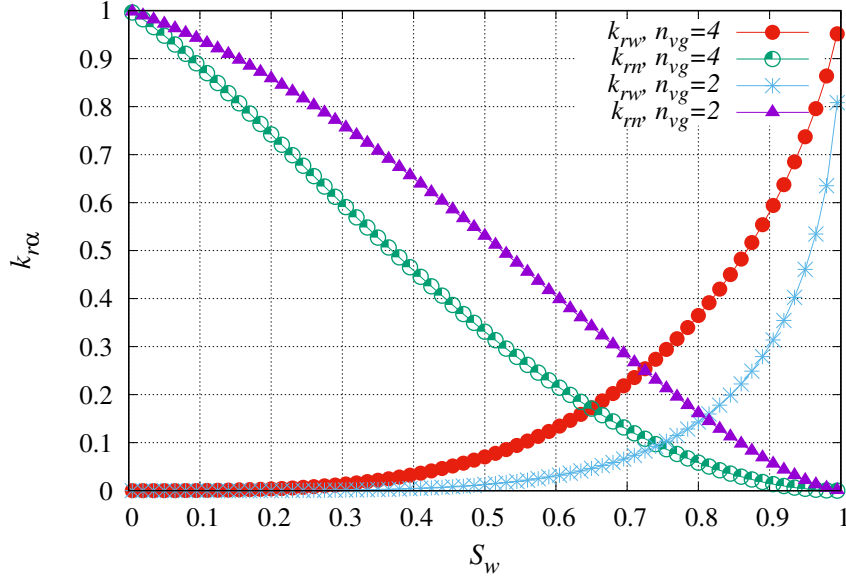
Vale ressaltar que existem na literatura outras parametrizações para as variáveis mostradas nesta seção, entre elas, a parametrização de Brooks-Corey (Bastian, 1999). Neste trabalho foi escolhida a parametrização de Van Genuchten por razões apresentadas em Slompo, Pinto e Oliveira (2023) e Oliveira *et al.* (2024).

2.2 Métodos de linearização

Quando se está resolvendo um modelo matemático correspondente a um problema de Engenharia, é frequente a necessidade de se obter a solução de um sistema de equações não lineares. Observa-se que em geral é difícil se obter a solução deste tipo de sistema. Portanto, pode-se aplicar um método de linearização. Neste trabalho, é utilizado o método de linearização de Picard modificado. Nesta seção, são apresentados apenas os conceitos básicos da linearização de Picard e mais detalhes sobre Picard modificado serão dados na seção 4.2.

Para entender como ocorre este processo de linearização, baseia-se em Golub e Ortega (1992).

Figura 6 – Função da permeabilidade relativa de Van Genuchten para diferentes parâmetros n_{vg} e $S_{or} = 0$.



Fonte: O autor (2024).

Considera-se um sistema não linear com n equações e n incógnitas que pode ser escrito na forma

$$\begin{cases} f_1(x_1, x_2, \dots, x_n) = 0 \\ f_2(x_1, x_2, \dots, x_n) = 0 \\ \vdots \\ f_n(x_1, x_2, \dots, x_n) = 0 \end{cases}, \quad (2.9)$$

ou na forma vetorial

$$F(X) = \mathbf{0}, \quad (2.10)$$

onde $X = (x_1, x_2, \dots, x_n)^T$ é o vetor de incógnitas, $F(X) = (f_1(X), f_2(X), \dots, f_n(X))^T$ e $\mathbf{0}$ é o vetor nulo de \mathbb{R}^n . Aqui, é considerado que o sistema da equação (2.10) tenha pelo menos uma solução.

Em muitas situações o sistema dado pela equação (2.10) pode ser representado na forma

$$F(X) = AX + H(X) = 0, \quad (2.11)$$

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

$$AX^{s+1} = -H(X^s), \quad (2.12)$$

em que $s = 0, 1, 2, \dots$ indicam os passos de iteração. O processo iterativo da equação (2.12) é conhecido como iteração de Picard.

No método de linearização de Picard modificado (Celia; Bouloutas; Zarba, 1990; Celia; Binning, 1992; Oliveira *et al.*, 2024), em vez de todas as variáveis serem usadas como estimativas conhecidas, apenas uma delas segue essa abordagem, enquanto a outra variável é aproximada pela série de Taylor de segunda ordem.

2.3 Método dos volumes finitos

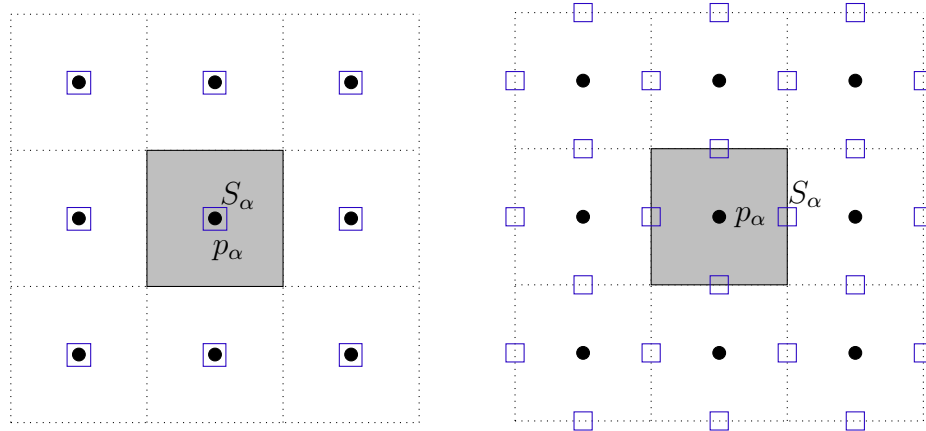
Para se obter a solução numérica de um sistema de equações diferenciais parciais (EDPs), primeiramente é necessário discretizar o domínio de cálculo e com isso, gerar uma malha de pontos ou volumes, onde os termos da equação são aproximados, resultando em um sistema de equações algébricas envolvendo as funções incógnitas. Os métodos numéricos mais utilizados na discretização das equações diferenciais são o método das diferenças finitas (MDF) (Golub; Ortega, 1992; Ferziger; Perić, 2002; Saad, 2003; Pletcher; Tannehill; Anderson, 2013), dos volumes finitos (MVF) (Golub; Ortega, 1992; Maliska, 2004) e dos elementos finitos (MEF) (Hughes, 2000; Thompson, 2005). Neste trabalho é utilizado o MVF. Uma das vantagens desse método é que ele pode ser aplicado em qualquer tipo de malha, em geometrias complexas e diferentes sistemas coordenados (Ferziger; Perić, 2002).

No MVF o domínio de cálculo é dividido em um número finito de subdomínios conhecido como volumes de controle (VC), os quais envolvem um único ponto nodal da malha, onde os valores da variável de interesse são calculados (Patankar, 2018). Em seguida, cada EDP é integrada sobre cada VC. Para as variáveis nas faces são utilizadas funções de interpolação em termos de valores nodais (Patankar, 2018). Segundo Patankar (2018), no caso de sistemas de equações diferenciais, onde há mais de uma variável de interesse, todas as variáveis podem ser posicionadas no centro do volume (arranjo colocalizado, veja a Figura 7 - esquerda), ou posicionar algumas variáveis no centro do volume e outras em suas faces (arranjo desencontrado, veja a Figura 7 - direita). Neste trabalho, é utilizado o primeiro caso, por simplicidade na implementação das condições de contorno e devido ao uso do método *multigrid*, que é mais viável com o uso deste tipo de arranjo (Oliveira *et al.*, 2024).

A organização dos VCs em uma malha unidimensional e bidimensional uniforme é apresentada na Figura 8, em que as letras maiúsculas P , N , S , W e E representam o centro do volume e seus vizinhos norte, sul, oeste e leste, respectivamente, e as letras minúsculas n , s , w e e representam as faces norte, sul, oeste e leste do VC, respectivamente. Note que na Figura 8, além da notação por pontos cardeais, há também a notação (i,j) . Nesta figura, h , h_x e h_y representam os tamanhos dos VCs nas direções indicadas.

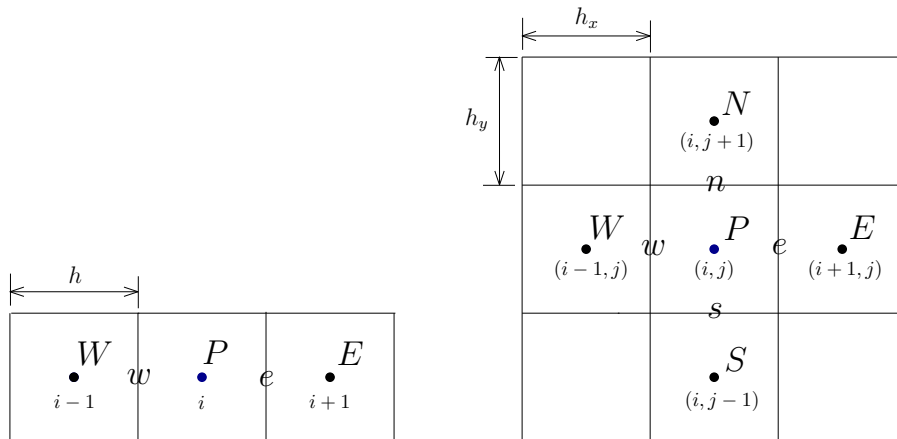
Como ilustração da aplicação da técnica de volumes finitos, é considerado um caso simples unidimensional que não está diretamente relacionado ao modelo matemático estudado, mas com grande apelo didático.

Figura 7 – Malhas com arranjos colocalizado (esquerda) e desencontrado (direita) para as variáveis p_α e S_α .



Fonte: O autor (2024).

Figura 8 – Disposição de um volume de controle P e seus vizinhos em uma malha uniforme unidimensional (esquerda) e bidimensional (direita).



Fonte: O autor (2024).

Seja a equação

$$\frac{d}{dx} \left(\frac{du}{dx} \right) = 0, \tag{2.13}$$

em que $u = u(x)$. Ao integrar a equação (2.13) sobre cada VC, temos

$$\iiint_{VC} \frac{d}{dx} \left(\frac{du}{dx} \right) dV = 0, \tag{2.14}$$

sendo dV o elemento de volume de controle P . Com a aplicação do teorema da divergência de Gauss (Kreyszig, 2011) à equação (2.13), obtém-se

$$\iint_A \frac{du}{dx} \cdot \mathbf{n} dA = 0, \tag{2.15}$$

sendo dA o elemento de área da superfície do volume de controle P e \mathbf{n} o vetor unitário normal à superfície do elemento dA .

Em seguida, integra-se a equação (2.15) em relação ao volume de controle P , conforme a Figura 8 (esquerda), obtendo

$$\iint_A \frac{du}{dx} \cdot \mathbf{n} dA \approx \left[\left(\frac{du}{dx} \right)_e - \left(\frac{du}{dx} \right)_w \right] A = 0, \quad (2.16)$$

portanto,

$$\iint_A \frac{du}{dx} \cdot \mathbf{n} dA \approx \left(\frac{du}{dx} \right)_e - \left(\frac{du}{dx} \right)_w = 0. \quad (2.17)$$

Para aproximar as derivadas da função u nas faces w e e do volume de controle P , é utilizado o esquema CDS (Maliska, 2004). Assim

$$\left(\frac{du}{dx} \right)_e = \frac{u|_E - u|_P}{h}, \quad (2.18)$$

$$\left(\frac{du}{dx} \right)_w = \frac{u|_P - u|_W}{h}. \quad (2.19)$$

Finalmente a equação (2.17) pode ser reescrita como

$$\frac{u|_E - u|_P}{h} - \frac{u|_P - u|_W}{h} = 0. \quad (2.20)$$

Ao rearranjar os termos dessa equação, obtém-se um sistema linear do tipo

$$a_P u_P = a_W u_W + a_E u_E + b_P, \quad (2.21)$$

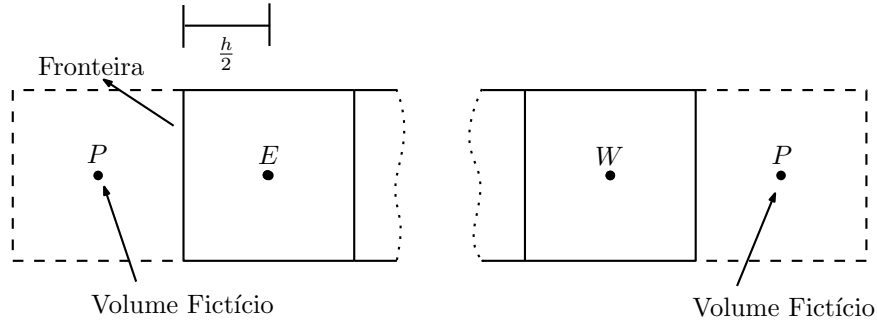
em que

$$\begin{aligned} a_P &= \frac{2}{h}, \\ a_W &= a_E = \frac{1}{h}, \\ b_P &= 0. \end{aligned}$$

A equação (2.21) representa a equação discretizada para um VC interno genérico. Para obter o sistema de equações algébricas completo, é necessário também obter as equações algébricas para os volumes de controle que estão nas fronteiras, podendo ser usada a condição de contorno de Dirichlet, Neumann ou Robin (Patankar, 2018). Algumas formas de aplicação das condições de contorno são: volumes fictícios, balanço para os volumes da fronteira ou meio-volume (Maliska, 2004). Neste trabalho é utilizada a técnica de volumes fictícios que tem a vantagem de ser de fácil aplicação, manter as mesmas equações/formulações para todos os volumes internos e os volumes permanecerem inteiros (Oliveira *et al.*, 2020).

Para ilustrar essa técnica considera-se a Figura 9. Adicionamos volumes auxiliares ao redor do domínio, de modo que as condições de contorno originais do problema continuem

Figura 9 – Condições de contorno com volumes fictícios na fronteira.



FONTE: O autor (2024).

sendo satisfeitas. Como exemplo, para a condição de contorno de Dirichlet, utilizada neste trabalho, a propriedade na fronteira à esquerda u_c é conhecida e pode ser escrita como

$$u_c = \frac{u_P + u_E}{2}. \quad (2.22)$$

Ao reescrever a equação (2.22), obtém-se

$$u_P = -u_E + 2u_c. \quad (2.23)$$

Ao comparar a equação (2.23) com a equação (2.21), obtém-se os coeficientes e o termo fonte do volume fictício

$$a_P = 1,$$

$$a_E = -1,$$

$$a_W = 0,$$

$$b_P = 2u_c.$$

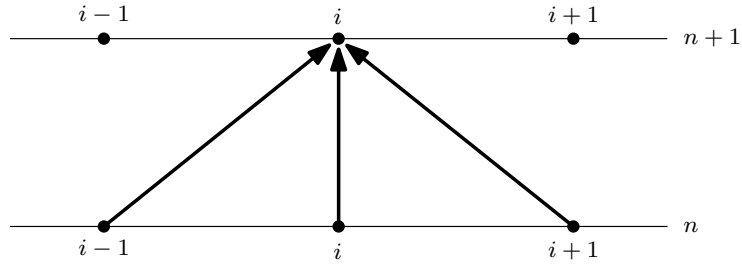
Neste trabalho, a ideia apresentada nessa seção será facilmente estendida para o caso bidimensional e para o caso onde temos sistemas de EDPs.

2.4 Métodos para a aproximação temporal

Para as aproximações das derivadas temporais, na literatura são encontradas as seguintes formulações numéricas: explícita, implícita e totalmente implícita (Maliska, 2004; Tannehill; Anderson; Pletcher, 1997). Uma formulação é dita explícita a um passo de tempo quando todas as incógnitas vizinhas ao ponto i são avaliadas nos passos de tempo anteriores (n) e, portanto, já são conhecidas (veja a Figura 10); semi-implícita a um passo de tempo ocorre quando as incógnitas vizinhas ao ponto i são avaliadas nos passos de tempo atual ($n + 1$) e anterior (n) (veja a Figura 11); e implícita a um passo de tempo quando todas as incógnitas vizinhas ao ponto i são avaliadas no passo de tempo atual ($n + 1$) e, portanto, não são conhecidas em sua totalidade (depende da ordenação de atualização das incógnitas) (veja a Figura 12).

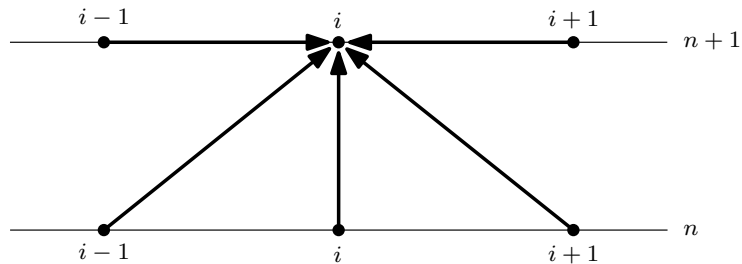
Os métodos explícitos são métodos de primeira ordem e condicionalmente estáveis; os semi-implícitos são métodos de segunda ordem e incondicionalmente estáveis e, os métodos implícitos são de primeira ordem e incondicionalmente estáveis (Burden; Faires, 2016).

Figura 10 – Aproximação temporal: formulação explícita.



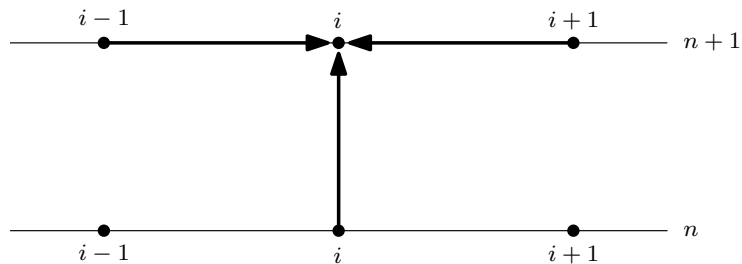
FONTE: Maliska (2004).

Figura 11 – Aproximação temporal: formulação semi-implícita.



FONTE: Maliska (2004).

Figura 12 – Aproximação temporal: formulação implícita.



FONTE: Maliska (2004).

Para ilustrar as formulações citadas acima, considera-se o problema de valor inicial (PVI) em uma malha unidimensional, dado por

$$\begin{cases} \frac{du_i(t)}{dt} = f_i(t, u_i(t)) \\ u_i(t_0) = u_i^0 \end{cases}, \quad (2.24)$$

em que $u_i(t)$ e $f_i(t, u_i(t))$ são funções a serem resolvidas para todo nível de tempo t nos pontos i da malha. O índice i denota as coordenadas dos pontos na malha, com i variando

de 1 a N , indicando as posições na direção x . A equação diferencial é expressa pela derivada temporal $\frac{du_i(t)}{dt}$ igual a uma função $f_i(t, u_i(t))$, que depende do tempo t e da solução $u_i(t)$ no ponto i da malha. As condições iniciais são dadas por $u_i(t_0) = u_i^0$, onde t_0 é o tempo inicial e u_i^0 é o valor inicial da solução u_i no ponto i da malha.

Observa-se que a derivada temporal é ordinária, pois apesar de depender dos valores espaciais em cada ponto i da malha, considera-se x_i conhecido durante o cálculo da variável temporal. Por isso, nesse contexto, $u(x_i, t)$ pode ser denotado somente por $u(t)$ para indicar que u é uma função da variável temporal t .

Dessa forma, o método de Euler é empregado para obter uma aproximação para a solução $u(t)$ da equação (2.24) de forma discreta em diversos valores no intervalo $[t_0, t_f]$, chamados pontos de malha temporal. Estipula-se que os pontos desta malha têm distribuição uniforme no intervalo $[t_0, t_f]$. Para isso, é selecionado um número positivo inteiro N_t e os pontos de malha (em t) são dados por

$$t_{n+1} = t_0 + (n + 1)\tau, \quad n = 0, 1, \dots, N_t - 1, \quad (2.25)$$

onde o tamanho do passo de tempo é dado por $\tau = \frac{t_f - t_0}{N_t}$.

Seja $u(t) \in C^2[t_0, t_f]$ a única solução da equação (2.24), de modo que sua expansão em série de Taylor para cada $n = 0, 1, \dots, N_t - 1$ seja dada por

$$u(t_{n+1}) = u(t_n) + \tau \frac{d}{dt} u(t_n) + \frac{\tau^2}{2} \frac{d^2}{dt^2} u(\xi_n), \quad (2.26)$$

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

Ao considerar v uma aproximação para u , o método de Euler constroi $v^n \approx u(t_n)$ para cada $n = 0, 1, \dots, N_t - 1$ ao desconsiderar os termos $\frac{\tau^2}{2} \frac{d^2}{dt^2} u(\xi_k)$ de segunda ordem de aproximação em τ . Dessa forma, o método de Euler é dado por

$$v^{n+1} = v^n + \tau f(v^{n+1}, t_{n+1}), \quad n = 0, 1, \dots, N_t - 1. \quad (2.27)$$

Esse método é chamado de método de Euler implícito, pois para obter o valor de v^{n+1} são utilizados os valores correspondentes ao passo de tempo n e $n + 1$. Tal método possui primeira ordem de aproximação temporal e é incondicionalmente estável, ou seja, a sua convergência não depende da relação entre o tamanho do passo de tempo e o tamanho da discretização espacial (Burden; Faires, 2016; Ferziger; Perić, 2002; Fortuna, 2012; Franco, 2017). Neste trabalho, é utilizado este método.

2.5 Método *Multigrid*

O método *multigrid* constitui uma técnica numérica alternativa para resolver iterativamente sistemas de equações do tipo $Au = f$, obtidos ao se discretizar uma equação diferencial. O método foi proposto originalmente por Fedorenko (1964), mostrando que a

velocidade de convergência com o uso de tal técnica é melhor que a dos métodos iterativos puros (sem o uso de *multigrid*), neste caso, chamados de *singlegrid*.

O método tem como princípio básico utilizar um conjunto de malhas e alternar suavizações em cada nível de malha e as aproximações destas soluções em uma malha mais grossa (com uma certa razão de engrossamento re) através de operadores que transferem informações da malha fina para a malha imediatamente mais grossa (operador de restrição), e em seguida, transferir informação da malha grossa para a malha imediatamente mais fina (operador de prolongação), desta forma reduzindo todo espectro de erros (erros de alta e baixa frequência) (Briggs; Henson; McCormick, 2000; Trottenberg; Oosterlee; Schüller, 2001; Wesseling, 1992).

Dependendo do tipo de informação a ser transportada entre as malhas, tem-se o esquema de correção (*Correction Scheme*, CS) ou o esquema de aproximação completa (*Full Approximation Scheme*, FAS). Briggs, Henson e McCormick (2000) recomendam o esquema CS para problemas lineares e FAS para problemas não lineares.

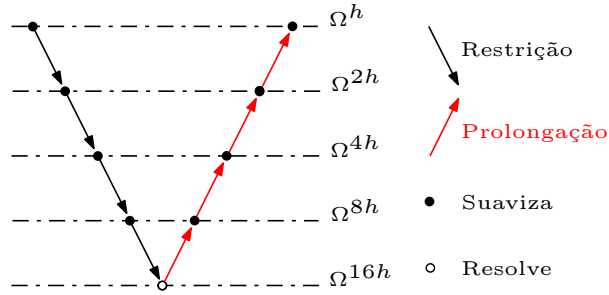
Como os sistemas não lineares serão linearizados neste trabalho, o esquema CS deverá ser usado. O esquema CS para o caso de duas malhas e com $re = 2$ é apresentado a seguir:

- Suavize $Au = f$ na malha mais fina Ω^h ν_1 vezes para obter uma aproximação v^h .
- Calcule o resíduo $r^h = f^h - A^h v^h$.
 - * Obter $r^{2h} = I_h^{2h} r^h$ na malha grossa Ω^{2h} .
 - * Resolva a equação residual $A^{2h} e^{2h} = r^{2h}$ em Ω^{2h} com estimativa inicial $e^{2h} = 0$ para obter uma aproximação para o erro e^{2h} .
 - * Obter $e^h = I_{2h}^h e^{2h}$ na malha mais fina Ω^h .
- Corrija a aproximação obtida em Ω^h : $v^h \leftarrow v^h + e^h$.
- Suavize $Au = f$ na malha Ω^h ν_2 vezes com estimativa inicial v^h .

Neste caso, ν_1 e ν_2 são chamados, respectivamente, de número de pré e pós-suavização, e I_h^{2h} e I_{2h}^h são os operadores de restrição e prolongação. O procedimento apresenta o esquema CS para o caso de duas malhas, porém, pode ser estendido para o número de malhas desejadas. A sequência com que as diversas malhas são visitadas caracteriza um ciclo *multigrid* que pode ser do tipo V , W , F , entre outros. As Figuras 13, 14 e 15 ilustram, respectivamente, os ciclos V , W e F para cinco níveis de malha.

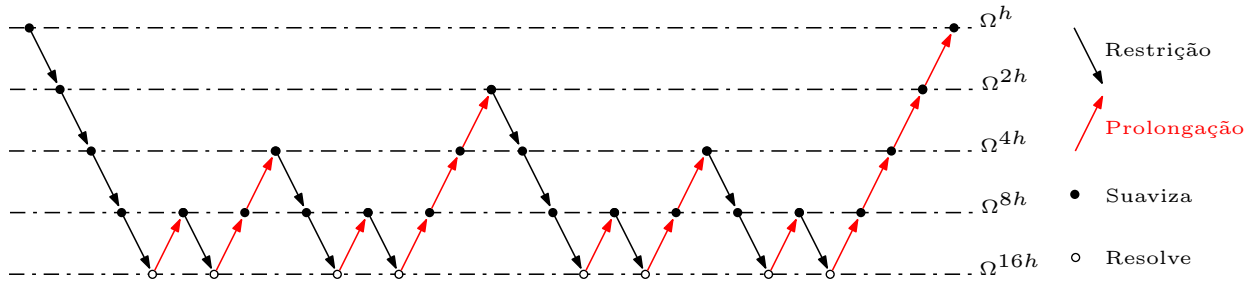
Uma generalização dos ciclos V , W e F é apresentado em Wesseling (1992), Briggs, Henson e McCormick (2000) e Trottenberg, Oosterlee e Schüller (2001), compreendidos como parte de uma família de ciclos denominada μ -ciclo. O algoritmo 1 (Franco, 2017)

Figura 13 – Estrutura do ciclo V .



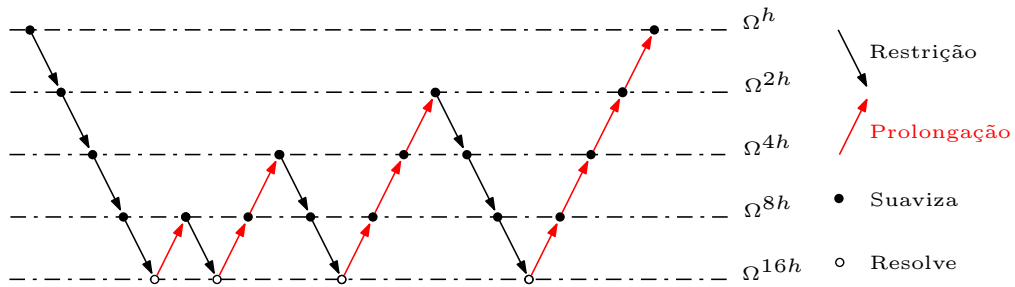
FONTE: O autor (2024).

Figura 14 – Estrutura do ciclo W .



FONTE: O autor (2024).

Figura 15 – Estrutura do ciclo F .



FONTE: O autor (2024).

apresenta um esquema para o μ -ciclo. Se $\mu = 1$ tal algoritmo realiza um ciclo V e se $\mu = 2$ realiza um ciclo W .

Neste trabalho será utilizado o ciclo $W(\nu_1, \nu_2)$ por ser mais robusto (Trottenberg; Oosterlee; Schüller, 2001; Franco, 2017; Oliveira, 2022). Consulte Briggs, Henson e McCormick (2000), Trottenberg, Oosterlee e Schüller (2001), Wesseling (1992) para uma visão abrangente sobre os diversos operadores de restrição e prolongação que podem ser utilizados no método *multigrid*. Neste trabalho, para a restrição foi empregada a média aritmética dos valores das propriedades dos volumes da malha fina e adotou-se a interpolação constante por partes para a prolongação.

Algoritmo 1: MG- μ -ciclo(l)

if $l = L_{max}$ é o nível de malha mais grossa **then**
 Resolva o sistema $A^l v^{(l)} = f^{(l)}$ na malha grossa $\Omega^{2^{l-1}h}$.
else
 Suavize ν_1 vezes $A^l v^{(l)} = f^{(l)}$ na malha $\Omega^{2^{l-1}h}$.
 Calcule e restrinja o resíduo: $f^{(l+1)} = I_{2^{l-1}h}^{2^l h}(f^{(l)} - A_l v^{(l)})$.
for $ciclo = 1 : \mu$ **do**
 Resolva no próximo nível: **MG- μ -ciclo**($l + 1$).
end for
 Corrija usando interpolação: $v^{(l)} \leftarrow v^{(l)} + I_{2^l h}^{2^{l-1} h} v^{(l+1)}$.
 Suavize ν_2 vezes $A^l v^{(l)} = f^{(l)}$ na malha $\Omega^{2^{l-1}h}$.
end if

2.6 Erros Numéricos

Nesta seção são tratados conceitos e definições sobre erros numéricos e suas fontes, e as ordens efetivas e aparente do erro de discretização.

Para uma determinada variável de interesse, o erro numérico (E) é definido como a diferença entre a solução analítica exata ($\bar{\phi}$) e sua solução numérica (ϕ) (Ferziger; Perić, 2002), ou seja,

$$E(\phi) = \bar{\phi} - \phi. \quad (2.28)$$

O erro numérico pode ser causado por diversas fontes, que são apresentadas em Ferziger e Perić (2002) e Marchi (2001) como: erros de truncamento (E_T), erros de iteração (E_I) e erros de arredondamento (E_π). Cada fonte de erro tem um significado específico, conforme segue:

- O erro de truncamento ocorre ao se aproximar um modelo matemático contínuo (conjunto infinito), em um modelo discreto (conjunto finito), ou seja, é o resultado obtido ao se truncar um processo infinito (Roache, 1998);
- Considerando a solução numérica (ϕ) para determinada variável de interesse, o erro de iteração E_I é dado pela diferença entre a solução exata do sistema de equações algébricas e a solução numérica na iteração n , ao se considerar o emprego de um método iterativo de resolução (Ferziger; Perić, 2002). Em geral, os efeitos decorrentes do E_I tendem a diminuir conforme o número de iterações n aumenta, isto é, à medida que $n \rightarrow \infty$, tem-se que $E_I \rightarrow 0$;
- Os erros de arredondamento (E_π) são causados pela representação numérica finita das variáveis nos cálculos, que está ligado à precisão dos números.

O erro numérico passa a ser denominado como erro de discretização (E_h) (foco neste trabalho) (Roache, 2009) quando E_I e E_π são minimizados ou mesmo inexistentes.

Então E_h pode ser representado a partir da série de Taylor por

$$E_h(\phi) = E_h = c_0 h^{p_0} + c_1 h^{p_1} + c_2 h^{p_2} + \dots = \sum_{V=0}^{\infty} c_V h^{p_V}, \quad (2.29)$$

em que os coeficientes c_0, c_1, c_2, \dots são números reais e podem ser funções da variável dependente e de suas derivadas, mas independem de h . Os expoentes p_0, p_1, p_2, \dots são as ordens verdadeiras de $E_h(\phi)$ e seu conjunto é representado por $p_V = \{p_0, p_1, p_2, \dots\}$.

Os elementos de p_V são números inteiros positivos seguindo geralmente a relação $1 \leq p_0 < p_1 < \dots$, os quais representam uma progressão aritmética de razão $q = p_1 - p_0$. O primeiro termo p_0 é denominado de ordem assintótica (ou de acurácia) de $E_h(\phi)$ (ou da solução numérica ϕ) e será denotado por p_L . Quando $h \rightarrow 0$, o E_h é dominado pela primeira parcela da equação (2.29), ou seja,

$$E_h = c_0 h^{p_L}.$$

Ao se considerar o gráfico bilogarítmico de E_h versus h , tem-se que sua inclinação em relação ao eixo das abscissas, tende ao valor de p_L . Logo, quanto maior o valor de p_L da solução, maior será a redução de E_h com o refino da malha.

O E_h pode ser estimado *a priori* ou *a posteriori* ao cálculo da solução numérica. As estimativas *a priori* consistem, basicamente, em estimar a ordem de acurácia p_L (SZABÓ; Babuska, 1991). Obtendo p_L , é possível avaliar o efeito da redução de h sobre E_h . Por exemplo, considerando os erros de discretização E_{h_1} e E_{h_2} obtidos e duas malhas distintas Ω^{h_1} e Ω^{h_2} , grossa e fina, respectivamente, tem-se

$$\frac{E_{h_1}}{E_{h_2}} = \frac{c h_1^{p_L}}{c h_2^{p_L}} = \left(\frac{h_1}{h_2}\right)^{p_L} = r^{p_L}, \quad (2.30)$$

onde $r = \frac{h_1}{h_2}$ representa a razão de refino de malha. Dessa forma, o fator de redução de E_h , com o refinamento de malha é dado por r^{p_L} .

Por outro lado, a análise de p_L *a posteriori* da solução numérica é baseada no cálculo das ordens efetiva p_E , quando a solução analítica é conhecida, ou aparente p_U , nos casos em que não se conhecem a solução analítica. Suas expressões são dadas por

$$p_E = \frac{\log\left(\frac{E_{h_1}}{E_{h_2}}\right)}{\log(r)}, \quad (2.31)$$

e

$$p_U = \frac{\log\left(\frac{\phi_2 - \phi_1}{\phi_3 - \phi_2}\right)}{\log(r)}, \quad (2.32)$$

em que ϕ_1, ϕ_2 e ϕ_3 correspondem, respectivamente, às soluções numéricas obtidas nas malhas Ω^{h_1} (grossa), Ω^{h_2} (fina) e Ω^{h_3} (superfina), com $r = h_1/h_2 = h_2/h_3$ (razão de refino constante) (Martins, 2013).

2.7 Múltipla Extrapolação de Richardson

Extrapolação é um processo matemático que envolve estimar valores além dos pontos de dados disponíveis em um conjunto de dados. De acordo com Sidi (2003), um bom método de extrapolação leva em consideração não apenas a precisão dos dados disponíveis, mas também o comportamento assintótico de uma sequência convergente. Dentre esses métodos, a Extrapolação de Richardson (ER) é um dos mais conhecidos (Martins, 2013). De acordo com Burden e Faires (2016), esta metodologia pode ser utilizada sempre que é possível usar uma técnica de aproximação que apresenta um termo indicativo de erro de modo previsível, ou seja, que depende de um parâmetro real, o que acontece com h , e que possui uma representação por meio de uma série analítica. A ER teve inicialmente o objetivo de combinar aproximações a fim de gerar resultados com maior ordem de acurácia considerando-se, exclusivamente, $p_0 = 2$, $p_1 = 4$ e $r = 2$ (razão de refino). Tal procedimento ficou conhecido como Extrapolação de Richardson padrão e posteriormente, passou-se a considerar valores gerais para p_0 , p_1 e r , ficando então conhecida por Múltipla Extrapolação de Richardson (Oberkampf; Roy, 2010).

A ER é considerada um pós-processamento e que deve ser empregado *a posteriori* das soluções $\phi(h)$ obtidas em diferentes malhas Ω^h , levando em consideração a razão de refino $r = h_g/h_{g+1}$, em que os subíndices $g + 1$ e g representam a malha fina e grossa, respectivamente. A equação da ER na forma original, dada em Richardson e Gaunt (1927), é

$$\phi_\infty = \frac{h_g^2 \phi_{g+1} - h_{g+1}^2 \phi_g}{h_g^2 - h_{g+1}^2} + E(\phi_\infty), \quad (2.33)$$

onde ϕ_∞ é a solução analítica estimada, ϕ_{g+1} e ϕ_g são as soluções numéricas nas malhas fina e grossa, respectivamente. Ao generalizar a ER para qualquer ordem assintótica p_L e r , tem-se

$$\phi_\infty = \phi_{g+1} + \frac{\phi_{g+1} - \phi_g}{r^{p_L} - 1}, \quad (2.34)$$

e será efetiva, se as soluções numéricas ϕ_g possuem apenas erros de discretização.

A Múltipla Extrapolação de Richardson (MER) consiste da aplicação recursiva da ER com o objetivo de se elevar progressivamente a ordem de acurácia do erro de discretização (E_h). A recursividade é estabelecida a partir da equação (2.34), aplicada em um conjunto de malhas estabelecidas por um processo de refinamento, isto é, considera-se

$$\phi_0(h_g) = \phi(h_g), \quad g = 1, 2, \dots, \quad (2.35)$$

$$\phi_1(h_{g+1}) = \phi_0(h_{g+1}) + \frac{\phi_0(h_{g+1}) - \phi_0(h_g)}{r^{p_L} - 1}, \quad g = 1, 2, \dots \quad (2.36)$$

A partir disso, considerando m os níveis de extrapolação e g indicando a malha Ω^h , com m e g sendo números naturais não nulos, a equação (2.36) passa a ser representada

por (Marchi *et al.*, 2013b)

$$\phi_{g,m} = \phi_{g,m-1} + \frac{\phi_{g,m-1} - \phi_{g-1,m-1}}{r^{p_{m-1}} - 1}, \quad (2.37)$$

com $m = 1, 2, \dots$ e $g = m + 1, m + 2, \dots$.

Do ponto de vista teórico, a equação (2.37) pode ser repetida infinitamente. Entretanto, para aplicações práticas considera-se um valor limite para g , isto é, $g = G$, em que G é um número inteiro positivo que corresponde ao número de malhas adotadas. Presume-se que o emprego desse processo recursivo proporcione uma elevação progressiva da ordem de acurácia do E_h (Marchi *et al.*, 2016).

Uma análise da ordem de acurácia resultante pode ser realizada *a posteriori*, considerando os valores de p_E se a solução analítica $\bar{\phi}$ é conhecida, ou os valores de p_U se $\bar{\phi}$ não é conhecida. Uma generalização de p_E e p_U , para MER, pode ser encontrada em Marchi *et al.* (2016) como:

$$(p_E)_{g,m} = \frac{\log\left(\frac{E_{h_{g-1,m}}}{E_{h_{g,m}}}\right)}{\log(r)}, \quad (2.38)$$

e

$$(p_U)_{g,m} = \frac{\log\left(\frac{\phi_{g-1,m} - \phi_{g-2,m}}{\phi_{g,m} - \phi_{g-1,m}}\right)}{\log(r)}, \quad (2.39)$$

em que $g = 2, \dots, G$ e $m = 1, \dots, g - 1$ para a equação (2.38); e $g = 3, \dots, G$ e $m = 1, \dots, \text{Int}((g - 3)/2)$ para a equação (2.39), onde $\text{Int}(\beta)$ corresponde à parte inteira do número real β . Nesta perspectiva, quando não se conhece a solução analítica, nem mesmo as ordens verdadeiras, o cálculo da MER, equação (2.37), pode ser realizado levando-se em consideração os valores de $(p_U)_{g,m-1}$ no lugar de p_{m-1} .

Uma representação esquemática do emprego da MER é apresenta na Tabela 2. Quando $m = 0$, tem-se a solução numérica ϕ sem qualquer extrapolação. Para $m = 1$ tem-se um nível de extrapolação, para $m = 2$ tem-se dois níveis de extrapolações e assim sucessivamente até o valor máximo permitido para m na malha Ω^{h_g} , ou seja, $m = G - 1$. Teoricamente, $\phi_{G,G-1}$ apresenta a solução numérica como o maior nível de acurácia dentre todos os $\phi_{g,m}$.

Ao se analisar a Tabela 2 verifica-se que para cada valor obtido de $\phi_{m,g}$, necessita-se da solução numérica em pelo menos duas malhas distintas (g e $g - 1$) considerando-se p_E . Isto posto, quando se utiliza p_U ($\bar{\phi}$ não é conhecido), faz-se necessário pelo menos três malhas distintas (g , $g - 1$ e $g - 2$), conforme a equação (2.39).

2.8 Variáveis de interesse

De acordo com Martins (2013), o emprego da MER requer a obtenção de soluções numéricas para determinada variável de interesse, em uma coleção de malhas distintas, em

Tabela 2 – Representação esquemática do emprego da MER.

$m = 0$	$m = 1$	$m = 2$	\dots	$m = G - 2$	$m = G - 1$
$\phi_{1,0} = \phi_1$					
$\phi_{2,0} = \phi_2$	\rightarrow $\boxed{\phi_{2,1}}$				
$\phi_{3,0} = \phi_3$	$\phi_{3,1}$	\rightarrow $\boxed{\phi_{3,2}}$			
\vdots	\vdots	\vdots	\dots		
$\phi_{G-1,0} = \phi_{G-1}$	$\phi_{G-1,1}$	$\phi_{G-1,2}$	\dots	$\boxed{\phi_{G-1,G-2}}$	
$\phi_{G,0} = \phi_G$	$\phi_{G,1}$	$\phi_{G,2}$	\dots	$\phi_{G,G-2}$	\rightarrow $\boxed{\phi_{G,G-1}}$

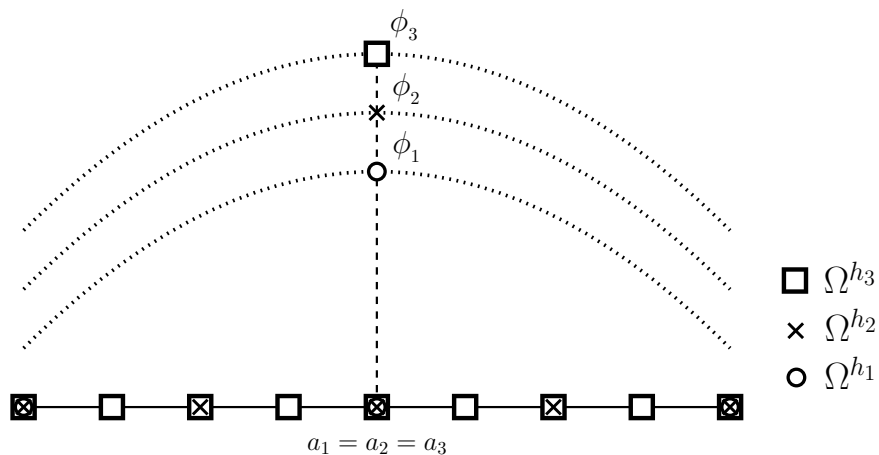
Fonte: Adaptado de Martins (2013).

que as variáveis podem apresentar diferentes comportamentos. Neste sentido, nas seções 2.8.1 e 2.8.2 são apresentadas: (i) variáveis com mesma localização nodal, em todas as malhas, com o refinamento de Ω^h e (ii) variáveis situadas no ponto médio entre pontos nodais cuja localização é pré-estabelecida, que é o tipo de variável que será tratada neste trabalho.

2.8.1 Variável com mesma localização nodal em malhas distintas

Tratam-se de variáveis cuja a localização de sua coordenada é mantida em todas as malhas consideradas e coincidem com um ponto nodal. A Figura 16 ilustra este tipo de variável de interesse. Nesta figura temos ϕ_1 com coordenada a_1 , ϕ_2 com coordenada a_2 e ϕ_3 com coordenada a_3 , correspondendo, respectivamente, às soluções numéricas obtidas nas malhas Ω^{h_1} (grossa), Ω^{h_2} (fina) e Ω^{h_3} (superfina), com razão de refinamento $r = h_1/h_2 = h_2/h_3$ constante.

Figura 16 – Variável com mesma localização nodal em malhas distintas.



Fonte: Marchi *et al.* (2016).

O emprego da MER para variáveis com mesma localização nodal ocorre de forma direta, isto é, utiliza-se apenas a equação (2.37), de acordo com o algoritmo 2, apresentado a seguir.

Algoritmo 2: Aplicação da MER em variáveis de mesma localização nodal

Calcule ϕ , em G malhas distintas: $\phi_1, \phi_2, \dots, \phi_G$.

for $i = 1 : G$ **do**

$$\phi_{i,0} = \phi_i.$$

end for

for $m = 1 : G - 1$ **do**

for $g = m + 1 : G$ **do**

$$\phi_{g,m} = \phi_{g,m-1} + \frac{\phi_{g,m-1} - \phi_{g-1,m-1}}{r^{p_{m-1}} - 1}.$$

end for

end for

2.8.2 Variável situada no ponto médio entre pontos nodais cuja localização é pré-estabelecida em malhas distintas

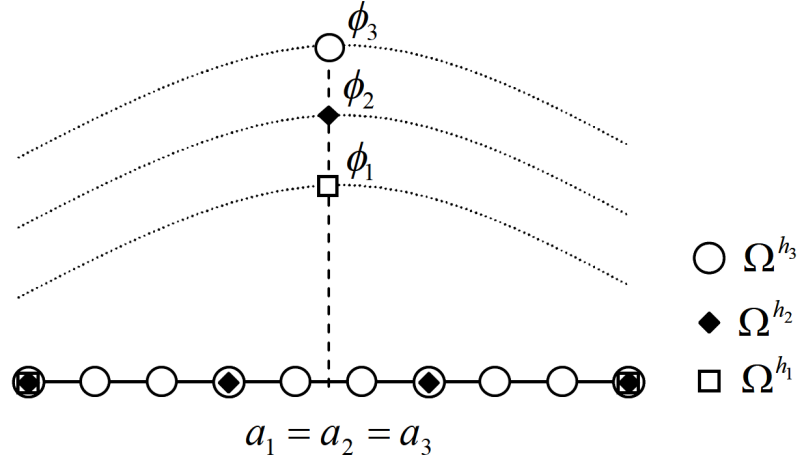
Consideram-se variáveis cuja localização de sua coordenada situa-se no ponto médio entre pontos nodais de Ω^h , ou seja, suas coordenadas coincidem com a média aritmética das coordenadas dos pontos nodais vizinhos. A Figura 17 ilustra este tipo de variável de interesse.

Como no caso da Figura 16 temos ϕ_i com coordenada a_i , $i = 1, 2$ e 3 , correspondendo, respectivamente às soluções numéricas obtidas nas malhas Ω^{h_i} e com a mesma razão de refino r . Nesse caso a MER não pode ser aplicada diretamente como no caso anterior, pois a localização da variável de interesse não é coincidente com as coordenadas nodais, fazendo-se necessário o emprego de um método que possibilite o seu cálculo previamente à aplicação da MER. A metodologia mais adequada para essa finalidade, a partir dos valores nodais obtidos, é a interpolação linear (Martins, 2013). Portanto, o resultado da interpolação linear pode ser atribuído à localização da variável de interesse (ponto médio entre coordenadas nodais) tornando possível obter ϕ em malhas distintas e a partir desses valores obtidos, aplica-se a MER como no caso anterior.

2.9 Estimadores para o Erro de Discretização

Nesta seção são tratados aspectos referentes à obtenção de estimativa para o E_h , considerando-se o emprego da MER. Nesse sentido, são abordados os estimadores de Richardson, Richardson corrigido, ψ e ψ^* .

Figura 17 – Variável situada no ponto médio entre pontos nodais em malhas distintas.



Fonte: Marchi *et al.* (2016).

2.9.1 Estimadores de Richardson e Richardson corrigido

A estimativa para o E_h com o estimador de Richardson, deduzida a partir da equação (2.34), é denotada por U_{Ri} e dada por:

$$U_{Ri}(\phi_g) = \frac{\phi_g - \phi_{g-1}}{r^{pL} - 1}, \quad (2.40)$$

em que ϕ_g e ϕ_{g-1} representam as soluções nas malhas Ω^{h_g} (fina) e $\Omega^{h_{g-1}}$ (grossa) sem o emprego de extrapolação. A estimativa U_{Ri} fornece, além da magnitude do E_h , o seu sinal, e pode ser empregada em diversos níveis de malhas, isto é, para Ω^{h_g} com $g = 2, \dots, G$ (Marchi, 2001).

Para soluções obtidas com o emprego da MER, Marchi *et al.* (2013a) propõem uma extensão do estimador de Richardson, dada por:

$$U_{p_m}(\phi_{g,m}) = \frac{\phi_{g,m} - \phi_{g-1,m}}{r^{p_m} - 1}, \quad (2.41)$$

em que g representa o nível de malha e m o nível de extrapolação, sendo válida para $m = [0, G - 2]$ e $g = [m + 2, G]$.

A utilização da simbologia U_{p_m} , refere-se à aplicação do estimador de Richardson com base em $p_V = \{p_m, m = 0, 1, 2, \dots\}$, sobre as soluções obtidas com o emprego da MER, sendo então, denominado estimador U_{p_m} (Martins, 2013; Marchi *et al.*, 2016).

Na Tabela 3, é apresentado um esquema para estimar E_m usando o estimador U_{p_m} , para um nível m de extrapolação qualquer, em que p_m representa a ordem correspondente. Quando é aplicado um fator de correção r^{p_m} , obtém-se o estimador de Richardson corrigido (Martins, 2013), representado por

$$U_{p_{mc}}(\phi_{g,m}) = r^{p_m} U_{p_m}(\phi_{g+1,m}), \quad (2.42)$$

em que $m = g - 1$.

Tabela 3 – Representação esquemática do emprego de U_{pm} .

Malha	Nível de extrapolação m
$\Omega^{h_{g-1}}$	$\phi_{g-1,m}$
Ω^{h_g}	$\phi_{g,m} \rightarrow U_{pm}(\phi_{g,m}) = \frac{\phi_{g,m} - \phi_{g-1,m}}{r^{pm} - 1}$

Fonte: Adaptado de Martins (2013).

2.9.2 Estimadores ψ e ψ^*

De acordo com Marchi e Silva (2002), uma outra abordagem para a ER é considerada ao utilizar a série de Richardson, denotada R_∞ e representada por

$$R_\infty = \frac{1}{\psi} + \frac{1}{\psi^2} + \frac{1}{\psi^3} + \frac{1}{\psi^4} + \dots, \quad (2.43)$$

em que $\psi \in \mathbb{R}$ é denominada razão de convergência da série.

Se $|\psi| > 1$, a série geométrica representada pela equação (2.43), é dada por

$$R_\infty = \frac{1}{\psi - 1}. \quad (2.44)$$

Ao admitir r e $P \in \mathbb{R}_+^*$, pode-se definir $|\psi| = r^P$, de modo que

$$R_\infty = \begin{cases} \frac{1}{r^P - 1}, & \text{se } \psi > 1 \\ -\frac{1}{r^P + 1}, & \text{se } \psi < -1 \end{cases}, \quad (2.45)$$

e considerando $P = p_L$, pode-se reescrever a equação (2.40) como

$$\phi_\infty = \phi_g + R_\infty(\phi_g - \phi_{g-1}), \quad (2.46)$$

em que ϕ_g e ϕ_{g-1} correspondem as soluções obtidas nas malhas Ω^{h_g} (fina) e $\Omega^{h_{g-1}}$ (grossa), respectivamente.

Dessa forma, admite-se a existência de um estimador $U_\psi(\phi_g) = \phi_\infty - \phi_g$, baseado no valor de ψ correspondente à malha Ω^{h_g} , dado por

$$U_\psi(\phi_g) = \frac{\phi_g - \phi_{g-1}}{\psi - 1}. \quad (2.47)$$

Ao se considerar as soluções numéricas ϕ_M conforme a Tabela 2, a equação (2.47) referente ao estimador ψ pode ser empregada considerando a razão de convergência de ϕ_M para se estimar E_m da seguinte forma

$$U_\psi(\phi_{g,m}) = \frac{\phi_{g,m} - \phi_{g-1,m-1}}{\psi - 1}, \quad (2.48)$$

onde $\psi = (\psi_M)_g$ é dada por

$$\psi = (\psi_M)_g = \frac{\phi_{g-1,m-1} - \phi_{g-2,m-2}}{\phi_{g,m} - \phi_{g-1,m-1}}, \quad (2.49)$$

para $g = 3, \dots, G$. A Tabela 4 apresenta o esquema para utilizar esse estimador para E_m , quando $m = g - 1$ malhas.

Tabela 4 – Representação esquemática do emprego de U_ψ .

Malha	Nível de extrapolação			
	$m - 2$	$m - 1$	m	
$\Omega^{h_{g-2}}$	$\phi_{g-2,m-2}$			
$\Omega^{h_{g-1}}$	$\phi_{g-1,m-2}$	$\phi_{g-1,m-1}$		
Ω^{h_g}	$\phi_{g,m-2}$	$\phi_{g,m-1}$	$\phi_{g,m}$	$\Rightarrow U_\psi(\phi_{g,m}) = \frac{\phi_{g,m} - \phi_{g-1,m-1}}{\psi - 1}$

FONTE: Adaptada de Martins (2013).

O emprego de U_ψ somente será efetivo se $|\psi| > 1$, que garante a convergência de ϕ_M e, conseqüentemente, ocorrendo a redução da magnitude de E_m .

Na equações (2.48) e (2.49), $\psi = (\psi_M)_g$ é a ordem aparente de E_m na malha Ω^{h_g} . Devido seu cálculo envolver três malhas distintas, é natural admitir que o seu valor corresponda a uma inclinação média para o gráfico da estimativa de E_m nessas três malhas.

A equação (2.50) calcula a correção para o estimador ψ em que a razão de convergência de ϕ_M ($m = g - 1$) é atribuída à malha intermediária do trio $\Omega^{h_{g-1}}$, Ω^{h_g} e $\Omega^{h_{g+1}}$, ou seja

$$\psi^* = \begin{cases} \frac{\phi_{g,m} - \phi_{g-1,m-1}}{\phi_{g+1,m+1} - \phi_{g,m}}, & g = 2, 3, \dots, G - 1 \\ \frac{(\phi_{g-1,m-1} - \phi_{g-2,m-2})^2}{(\phi_{g,m} - \phi_{g-1,m-1})(\phi_{g-2,m-2} - \phi_{g-3,m-3})}, & g = G \end{cases}. \quad (2.50)$$

onde ψ^* representa a correção para o estimador ψ , para $g = 2, 3, \dots, G - 1$, obtido para valores de ϕ em $\Omega^{h_{g-1}}$, Ω^{h_g} e $\Omega^{h_{g+1}}$ e o resultado atribuído a Ω^{h_g} . Para $g = G$, a malha $\Omega^{h_{g+1}}$ não está disponível para o calculo de ψ^* , com isso, busca-se estabelecer uma relação entre os valores obtidos para ψ e ψ^* , considerando a obtenção de ψ^* através da razão entre o quadrado de ψ para $g = G$ e o seu valor para $g = G - 1$, nas equações (2.48) e (2.49) (Martins, 2013).

Dessa forma, o cálculo da estimativa do erro numérico associado a ϕ_M , após a determinação de ψ^* , por analogia a U_ψ (equações (2.48) e (2.49)), é dado por

$$U_{\psi^*}(\phi_{g,m}) = \frac{\phi_{g,m} - \phi_{g-1,m-1}}{\psi^* - 1}. \quad (2.51)$$

2.9.3 Efetividade de uma estimativa de erro

A qualidade de uma estimativa (U) para o erro numérico (E) pode ser avaliada de modo geral mediante o cálculo de sua efetividade ($\Theta(U)$), definida em Zhu e Zienkiewicz (1990) pela razão entre U e E , ou seja,

$$\Theta(U) = \frac{U}{E}. \quad (2.52)$$

Para o caso ideal, a efetividade $\Theta(U) = 1$ ocorre quando $U = E$. Uma estimativa U será dita confiável quando $\Theta(U) \geq 1 \Rightarrow U \geq E$; e acurada quando $\Theta(U) \approx 1 \Rightarrow U \approx E$ (Marchi, 2001).

3 MODELO MATEMÁTICO

Neste capítulo é apresentado o modelo matemático, juntamente com suas condições iniciais e de contorno, presente neste trabalho.

O problema de escoamento bifásico em meios porosos rígidos, representado pela equação (2.4), pode ser reescrito para $\alpha = w$ e n , ou seja, para a fase úmida (w) e não úmida (n). Dessa forma, obtém-se o seguinte sistema de equações

$$\begin{cases} \frac{\partial \theta_w}{\partial t} - \lambda_w \nabla \cdot (K \nabla p_w) = \frac{F_w}{\rho_w} \\ \frac{\partial \theta_n}{\partial t} - \lambda_n \nabla \cdot (K \nabla p_n) = \frac{F_n}{\rho_n} \end{cases}, \quad (3.1)$$

cujo domínio físico será dado por $\Omega \subset \mathbb{R}^d$, com $d \in \{1, 2\}$, sendo $x \in \Omega = [0, L]$ se $d = 1$ ou $\mathbf{x} = (x, y) \in \Omega = [0, L_x] \times [0, L_y]$ se $d = 2$. O intervalo de tempo considerado é $t \in [0, t_f]$, onde t_f é o tempo final.

As equações governantes são sujeitas às condições de contorno do tipo Dirichlet, ou seja,

$$\begin{aligned} p_\alpha(x_{cc}, t) &= p_{\alpha cc} \\ \theta_\alpha(x_{cc}, t) &= \theta_{\alpha cc} \end{aligned}, \quad x_{cc} \in \partial\Omega, \quad 0 \leq t \leq t_f, \quad (3.2)$$

onde x_{cc} denota os pontos sobre a fronteira do domínio Ω , ou seja, $x_{cc} \in \partial\Omega$. Para completar a formulação matemática, condições iniciais devem ser dadas por

$$\begin{aligned} p_\alpha(x, 0) &= p_{\alpha ci} \\ \theta_\alpha(x, 0) &= \theta_{\alpha ci} \end{aligned}, \quad (3.3)$$

onde ci refere-se às condições iniciais de p_α e θ_α .

Para realizar os experimentos apresentados no próximo capítulo, serão exibidos os modelos matemáticos unidimensional e bidimensional.

3.1 Modelo matemático unidimensional

Neste trabalho, é utilizado o problema proposto por Illiano (2016). Nesse problema, Illiano considera a formulação mista pressão-saturação (\bar{p}, S_w) , onde $\bar{p} = \frac{p_w + p_n}{2}$ e propõe a solução analítica

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

definida no domínio $\Omega = [0, 1]$ no intervalo de tempo $[0, 1]$, com condição inicial e de contornos dadas por $f(x, 0) = f(0, t) = f(1, t) = 0$.

Com o objetivo de se obter um sistema elíptico (onde é sabido que o método *multigrid* funciona bem), foram realizadas algumas modificações no sistema gerado pela formulação mista pressão-saturação a fim de reescrevê-lo em função das variáveis da

pressão, p_w e p_n (detalhes desta modificação serão dados na próxima seção). Portanto, foi necessário fazer alguns ajustes para usar p_w e p_n ao invés de \bar{p} . Usando as definições da pressão capilar $p_c = p_w - p_n$ e \bar{p} obtém-se

$$p_w = \bar{p} - \frac{1}{2}p_c \text{ e } p_n = \bar{p} + \frac{1}{2}p_c, \quad (3.4)$$

em que $p_c(S_w) = 1 - \frac{1}{2}S_w^2$. Como $\theta_\alpha = \Phi S_\alpha$, segue que $\theta_w = \Phi\sqrt{2 - 2p_c}$ e $\theta_n = \Phi - \theta_w$.

Usando essas expressões, encontram-se os termos fontes

$$F_w = -\frac{1}{2}\rho_w[2\Phi(x-1)x + K\lambda_w t(6tx^2 - 6tx + t - 4)], \quad (3.5)$$

$$F_n = \frac{1}{2}\rho_n[2\Phi(x-1)x + K\lambda_n t(6tx^2 - 6tx + t - 4)]. \quad (3.6)$$

3.2 Modelo matemático bidimensional

Para o caso bidimensional, é utilizado o problema proposto por Kvashchuk (2015). Nesse trabalho, Kvashchuk considera a formulação mista pressão-saturação, (\bar{p}, S_w) , onde $\bar{p} = \frac{p_w + p_n}{2}$ e propõe a solução analítica

$$\bar{p}(\mathbf{x}, t) = tx(1-x)y(1-y), \quad (3.7)$$

$$S_w(\mathbf{x}, t) = \frac{1}{2} + tx(1-x)y(1-y), \quad (3.8)$$

definida no domínio espacial $\Omega = [0,1] \times [0,1]$ no intervalo de tempo $[0,1]$, com condições iniciais e de contorno dadas por $\bar{p}(\mathbf{x}, 0) = \bar{p}(0, y, t) = \bar{p}(1, y, t) = \bar{p}(x, 0, t) = p(x, 1, t) = 0$ e $S_w(\mathbf{x}, 0) = S_w(0, y, t) = S_w(1, y, t) = S_w(x, 0, t) = S_w(x, 1, t) = \frac{1}{2}$.

Por razões análogas às explicadas na seção anterior, também são realizadas as adaptações na formulação pressão-saturação, resultando em um sistema com as variáveis p_w e p_n , utilizando as equações 3.4 também para o caso bidimensional. Consequentemente, manipulações algébricas similares às do caso unidimensional, resultam nos termos fontes adequados que atendam ao sistema 3.1.

4 MODELO NUMÉRICO

Neste capítulo, são apresentados detalhes sobre a discretização temporal, seguidos do esquema de linearização (incluindo a manipulação para tornar as variáveis p_w e p_n as principais do sistema) e a discretização espacial. Neste contexto, será abordado apenas o modelo numérico do caso unidimensional, pois a extensão para o caso bidimensional segue procedimentos análogos.

É considerado o sistema dado pela equação (3.1). Como $\lambda_\alpha = \frac{k_{r\alpha}}{\mu_\alpha}$ e $K_\alpha = k_{r\alpha}K$, o sistema pode ser reescrito como

$$\begin{cases} \frac{\partial \theta_w}{\partial t} - \nabla \cdot \left(\frac{K_w}{\mu_w} \nabla p_w \right) = \frac{F_w}{\rho_w} \\ \frac{\partial \theta_n}{\partial t} - \nabla \cdot \left(\frac{K_n}{\mu_n} \nabla p_n \right) = \frac{F_n}{\rho_n} \end{cases}, \quad (4.1)$$

ou seja,

$$\begin{cases} \frac{\partial \theta_w}{\partial t} - \frac{\partial}{\partial x} \left(\frac{K_w}{\mu_w} \frac{\partial p_w}{\partial x} \right) = \frac{F_w}{\rho_w} \\ \frac{\partial \theta_n}{\partial t} - \frac{\partial}{\partial x} \left(\frac{K_n}{\mu_n} \frac{\partial p_n}{\partial x} \right) = \frac{F_n}{\rho_n} \end{cases}. \quad (4.2)$$

4.1 Discretização temporal

Agora é realizada a discretização da equação (4.2) usando o método de Euler implícito para a discretização temporal (Fortuna, 2012; Burden; Faires, 2016), obtendo

$$\begin{cases} \frac{\theta_w^{n+1} - \theta_w^n}{\tau} - \frac{\partial}{\partial x} \left[\frac{K_w^{n+1}}{\mu_w} \frac{\partial (p_w^{n+1})}{\partial x} \right] = \frac{F_w^{n+1}}{\rho_w} \\ \frac{\theta_n^{n+1} - \theta_n^n}{\tau} - \frac{\partial}{\partial x} \left[\frac{K_n^{n+1}}{\mu_n} \frac{\partial (p_n^{n+1})}{\partial x} \right] = \frac{F_n^{n+1}}{\rho_n} \end{cases}, \quad (4.3)$$

onde $n + 1$ representa o nível de tempo atual, $\tau = \frac{t_f}{N_t}$ é o tamanho dos passos de tempo com N_t denotando o número de passos no tempo.

4.2 Linearização

Em seguida, o sistema representado pela equação (4.3) é linearizado. Para isso, é criado um processo iterativo para realizar a linearização. Tal processo é dado por

$$\begin{cases} \frac{\theta_w^{n+1,s+1} - \theta_w^n}{\tau} - \frac{\partial}{\partial x} \left[\frac{K_w^{n+1,s}}{\mu_w} \frac{\partial (p_w^{n+1,s+1})}{\partial x} \right] = \frac{F_w^{n+1,s}}{\rho_w} \\ \frac{\theta_n^{n+1,s+1} - \theta_n^n}{\tau} - \frac{\partial}{\partial x} \left[\frac{K_n^{n+1,s}}{\mu_n} \frac{\partial (p_n^{n+1,s+1})}{\partial x} \right] = \frac{F_n^{n+1,s}}{\rho_n} \end{cases}, \quad (4.4)$$

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

Neste trabalho é utilizado o método de linearização de Picard modificado (Celia; Binning, 1992; Oliveira *et al.*, 2024) para estabelecer um novo processo iterativo em que uma das variáveis de interesse será aproximada pela série de Taylor e a outra será aproximada por uma condição inicial. Com o objetivo de isolar as variáveis p_w e p_n , a fim de obter um sistema de equações elípticas após sua discretização, é usada a série de Taylor para calcular $\theta_\alpha^{n+1,s+1}$, que depende da pressão capilar p_c . Dessa forma, segue que

$$\theta_\alpha^{n+1,s+1} = \theta_\alpha^{n+1,s} + \frac{\partial \theta_\alpha^{n+1,s}}{\partial p_c} (p_c^{n+1,s+1} - p_c^{n+1,s}) + O(\delta p_c^2). \quad (4.5)$$

Ao desconsiderar os termos de ordem mais elevada, a equação (4.4) pode ser reescrita como

$$\begin{cases} \frac{1}{\tau} \left[\theta_w^{n+1,s} + \frac{\partial \theta_w^{n+1,s}}{\partial p_c} (\delta p_c^{n+1,s+1}) - \theta_w^n \right] - \frac{\partial}{\partial x} \left[\frac{K_w^{n+1,s}}{\mu_w} \frac{\partial}{\partial x} (p_w^{n+1,s+1}) \right] = \frac{F_w^{n+1,s}}{\rho_w} \\ \frac{1}{\tau} \left[\theta_n^{n+1,s} + \frac{\partial \theta_n^{n+1,s}}{\partial p_c} (\delta p_c^{n+1,s+1}) - \theta_n^n \right] - \frac{\partial}{\partial x} \left[\frac{K_n^{n+1,s}}{\mu_n} \frac{\partial}{\partial x} (p_n^{n+1,s+1}) \right] = \frac{F_n^{n+1,s}}{\rho_n} \end{cases}, \quad (4.6)$$

onde $\delta p_c^{n+1,s+1} = p_c^{n+1,s+1} - p_c^{n+1,s}$. Ao organizar tais equações, tem-se

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

Para resolver o sistema, tendo as correções das pressões como variáveis principais, é adicionado $\frac{\partial}{\partial x} \left[\frac{K_\alpha^{n+1,s}}{\mu_\alpha} \frac{\partial}{\partial x} (p_\alpha^{n+1,s}) \right]$ em ambos os lados das igualdades substituindo $\delta p_\alpha^{n+1,s+1} = p_\alpha^{n+1,s+1} - p_\alpha^{n+1,s}$. Dessa forma, obtém-se

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

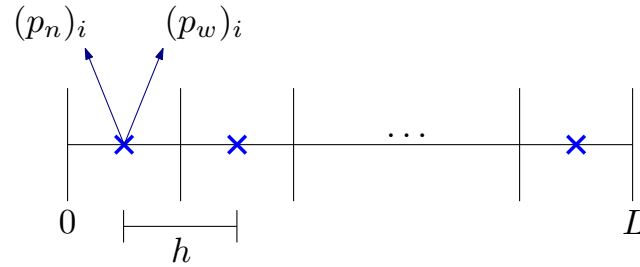
Usando $C_w^{n+1,s} = \frac{\partial \theta_w}{\partial p_c} = -\frac{\partial \theta_n}{\partial p_c}$ e a definição da pressão capilar ($p_c = p_n - p_w$), após algumas manipulações algébricas obtém-se

$$\left(\begin{array}{l} C_w^{n+1,s} \frac{\delta p_n^{n+1,s+1} - \delta p_w^{n+1,s+1}}{\tau} - \frac{\partial}{\partial x} \left[\frac{K_w^{n+1,s}}{\mu_w} \frac{\partial}{\partial x} (\delta p_w^{n+1,s+1}) \right] \\ = \frac{\partial}{\partial x} \left[\frac{K_w^{n+1,s}}{\mu_w} \frac{\partial}{\partial x} (p_w^{n+1,s}) \right] + \frac{F_w^{n+1}}{\rho_w} - \frac{\theta_w^{n+1,s} - \theta_w^n}{\tau} \\ - C_w^{n+1,s} \frac{\delta p_n^{n+1,s+1} - \delta p_w^{n+1,s+1}}{\tau} - \frac{\partial}{\partial x} \left[\frac{K_n^{n+1,s}}{\mu_n} \frac{\partial}{\partial x} (\delta p_n^{n+1,s+1}) \right] \\ = \frac{\partial}{\partial x} \left[\frac{K_n^{n+1,s}}{\mu_n} \frac{\partial}{\partial x} (p_n^{n+1,s}) \right] + \frac{F_n^{n+1}}{\rho_n} - \frac{\theta_n^{n+1,s} - \theta_n^n}{\tau} \end{array} \right) \cdot \quad (4.7)$$

4.3 Discretização espacial

Na sequência, o domínio espacial é discretizado através do MVF (Maliska, 2004) com discretização espacial do tipo CDS (Fortuna, 2012). Para isso, considera-se que o domínio é um segmento de reta de comprimento L e que a malha é uniforme, $D_h = \{(x_i) | x_i = (i - \frac{1}{2})h, i = 1, \dots, N_x\}$ onde $h = \frac{L}{N_x}$ sendo que N_x é o número de volumes no espaço (veja a Figura 18).

Figura 18 – Discretização espacial unidimensional.



FONTE: O autor (2024).

Apresenta-se a seguir o desenvolvimento da discretização envolvendo apenas a primeira equação do sistema (4.7), ou seja, a equação para a fase úmida w , considerando os volumes internos. Para a fase não úmida n , o procedimento é análogo.

Integrando-se a primeira equação do sistema, obtém-se

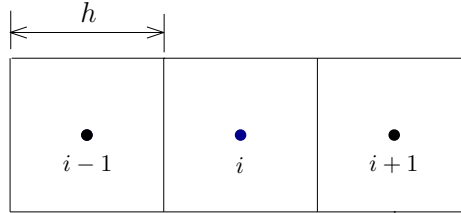
$$\begin{aligned} & \iiint_{VC} \left\{ C_w^{n+1,s} \frac{\delta p_n^{n+1,s+1} - \delta p_w^{n+1,s+1}}{\tau} - \frac{\partial}{\partial x} \left[\frac{K_w^{n+1,s}}{\mu_w} \frac{\partial}{\partial x} (\delta p_w^{n+1,s+1}) \right] \right\} dV \\ & = \iiint_{VC} \left\{ \frac{\partial}{\partial x} \left[\frac{K_w^{n+1,s}}{\mu_w}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

Observa-se que esta integral tripla, para o caso unidimensional, elimina as integrais nas outras duas direções. Ao aplicar o teorema da divergência de Gauss, calculando as integrais e usando a localização dos volumes na forma matricial como mostra a Figura 19,

obtém-se

$$\begin{aligned} & \left[C_w^{n+1,s} \frac{\delta p_n^{n+1,s+1} - \delta p_w^{n+1,s+1}}{\tau} \right]_i h - \left[\left(\frac{K_w^{n+1,s}}{\mu_w} \right)_{i+\frac{1}{2}} \frac{\partial}{\partial x} (\delta p_w^{n+1,s+1})_{i+\frac{1}{2}} - \right. \\ & \left. \left(\frac{K_w^{n+1,s}}{\mu_w} \right)_{i-\frac{1}{2}} \frac{\partial}{\partial x} (\delta p_w^{n+1,s+1})_{i-\frac{1}{2}} \right] = \left[\left(\frac{K_w^{n+1,s}}{\mu_w} \right)_{i+\frac{1}{2}} \frac{\partial}{\partial x} (p_w^{n+1,s})_{i+\frac{1}{2}} - \right. \\ & \left. \left(\frac{K_w^{n+1,s}}{\mu_w} \right)_{i-\frac{1}{2}} \frac{\partial}{\partial x} (p_w^{n+1,s})_{i-\frac{1}{2}} \right] + \left[\frac{F_w^{n+1}}{\rho_w} - \frac{\theta_w^{n+1,s} - \theta_w^n}{\tau} \right]_i h. \end{aligned}$$

Figura 19 – Disposição de um volume de controle i e seus vizinhos em uma malha uniforme unidimensional.



FONTE: O autor (2024).

As aproximações nas faces para as pressões e suas correções são calculadas com os valores nodais conforme vimos nas equações (2.18) e (2.19). Com essas aproximações obtém-se uma expressão linear do tipo

$$\begin{aligned} & (C_w)_i^{n+1,s} \left[(\delta p_n)_i^{n+1,s+1} - (\delta p_w)_i^{n+1,s+1} \right] \frac{h}{\tau} - \left\{ (K_w)_{i+\frac{1}{2}}^{n+1,s} \left[\frac{(\delta p_w)_{i+1}^{n+1,s+1} - (\delta p_w)_i^{n+1,s+1}}{h} \right] - \right. \\ & \left. (K_w)_{i-\frac{1}{2}}^{n+1,s} \left[\frac{(\delta p_w)_i^{n+1,s+1} - (\delta p_w)_{i-1}^{n+1,s+1}}{h} \right] \right\} \frac{1}{\mu_w} = \left\{ (K_w)_{i+\frac{1}{2}}^{n+1,s} \left[\frac{(p_w)_{i+1}^{n+1,s+1} - (p_w)_i^{n+1,s+1}}{h} \right] - \right. \\ & \left. (K_w)_{i-\frac{1}{2}}^{n+1,s} \left[\frac{(p_w)_i^{n+1,s+1} - (p_w)_{i-1}^{n+1,s+1}}{h} \right] \right\} \frac{1}{\mu_w} + \left[\frac{(F_w)_i^{n+1,s}}{\rho_w} - \frac{(\theta_w)_i^{n+1,s} - (\theta_w)_i^n}{\tau} \right] h. \end{aligned} \quad (4.8)$$

Ao multiplicar a equação (4.8) por $\frac{\tau}{h}$, obtém-se

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

Ao reorganizar esta equação com o objetivo de resolver a variável da correção da pressão úmida δp_w e repetir todo o processo para a equação da correção da pressão

Para a condição de contorno de Dirichlet $i = 1$ tem-se que

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

onde $(p_\alpha)_{cc}$ é a condição de contorno da pressão da fase α aplicada em $i = 1$. O procedimento é análogo para o outro contorno.

5 RESULTADOS NUMÉRICOS

Neste capítulo são apresentados os resultados desta tese. Na seção 5.1, é exposta uma breve verificação do código com a solução analítica fabricada e os resultados obtidos com a utilização da MER para dois experimentos numéricos bifásicos unidimensionais. Já na seção 5.2, são apresentados os resultados obtidos para uma sequência de experimentos numéricos bifásicos bidimensionais caracterizados por modificações em parâmetros do modelo matemático, destacando-se a aplicação da MER em diferentes contextos.

Os experimentos numéricos foram executados no MATLAB R2021a usando o método *multigrid* com os seguintes componentes: esquema *CS*, ciclo $W(2,2)$, razão de engrossamento padrão $re = 2$, suavizador Gauss-Seidel, operador de restrição por ponderação completa e operador de prolongação por interpolação linear. Para o critério de parada da linearização, é utilizado o valor absoluto máximo das correções das pressões úmida e não úmida, de acordo com o sistema dado pela equação 4.9, logo tal critério é $\max(|\delta p_w|, |\delta p_n|) \leq TOL$, onde TOL é a tolerância para a linearização. Para o processo iterativo, o critério de parada utilizado é a norma infinito do resíduo adimensionalizada pela estimativa inicial, isto é, $\|r^k\|_\infty / \|r^0\|_\infty \leq TOL$, onde r^k é o resíduo na iteração k , r^0 é o resíduo na estimativa inicial e TOL é a tolerância do método *multigrid*. Como o principal objetivo deste trabalho é a análise do erro de discretização, com o intuito de minimizar, ou mesmo eliminar as demais fontes de erro (E_π e E_h), em ambos os critérios (linearização e *multigrid*) foram realizadas iterações até se atingir o erro de máquina, ou seja, o erro de arredondamento, que neste trabalho foi em precisão dupla.

Em todos os experimentos numéricos, por simplificação, as saturações residuais são desconsideradas, ou seja, $S_{\alpha r} = 0$, e a viscosidade em ambas as fases é 1, ou seja, $\mu_\alpha = 1$.

5.1 Problemas unidimensionais

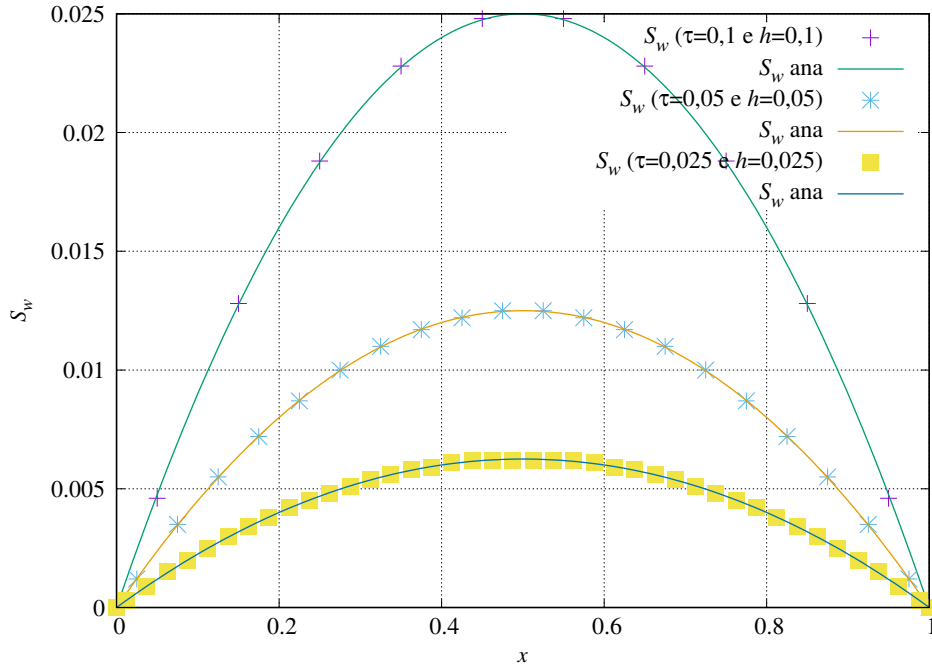
Inicialmente, para a verificação do código em relação ao problema unidimensional, utiliza-se o modelo matemático descrito na seção 3.1 proposto por Illiano (2016). Para esta verificação são utilizados os dados físicos da Tabela 5. De acordo com Illiano, esses dados foram escolhidos para obter cálculos simples, pois sua intenção era apenas de verificar o código. A Figura 20 apresenta a solução analítica e numérica obtida para a saturação úmida (S_w) para diversos passos de tempo. Esta figura confirma que nossos resultados estão de acordo com os apresentados por Illiano.

A Tabela 6 apresenta os dados físicos que serão utilizados neste trabalho no intuito de caracterizar os dois experimentos numéricos a serem abordados nesta seção, denominados experimento numérico 1 e experimento numérico 2, os quais também foram utilizados por Oliveira *et al.* (2020) e Oliveira (2022). Com base na metodologia descrita

Tabela 5 – Dados de entrada para a verificação do código.

Símbolo	Grandeza	Valor	Unidade
λ_w	Mobilidade do fluido na fase w	1	$(Pa\ s)^{-1}$
λ_n	Mobilidade do fluido na fase n	2	$(Pa\ s)^{-1}$
ρ_w	Densidade do fluido na fase w	1	kg/m^3
ρ_n	Densidade do fluido na fase n	1	kg/m^3
K	Permeabilidade	1	m^2
Φ	Porosidade	1	

Fonte: O autor (2024).

Figura 20 – Solução analítica e numérica da saturação S_w obtida no primeiro passo de tempo para diversos τ e h .

FONTE: O autor (2024).

na seção 2.7 são apresentados os resultados obtidos com o emprego da MER em dois experimentos numéricos, a qual foi abordada na concepção de redução do erro numérico para variáveis com mesma localização nodal em malhas distintas, conforme a seção 2.8. Para essas variáveis, têm-se como representantes as pressões p_n e p_w no ponto central do domínio. A malha mais grossa considerada apresenta $N_x = 4$ e a mais refinada $N_x = 256$ volumes de cálculo, totalizando com isso $G = 7$ malhas.

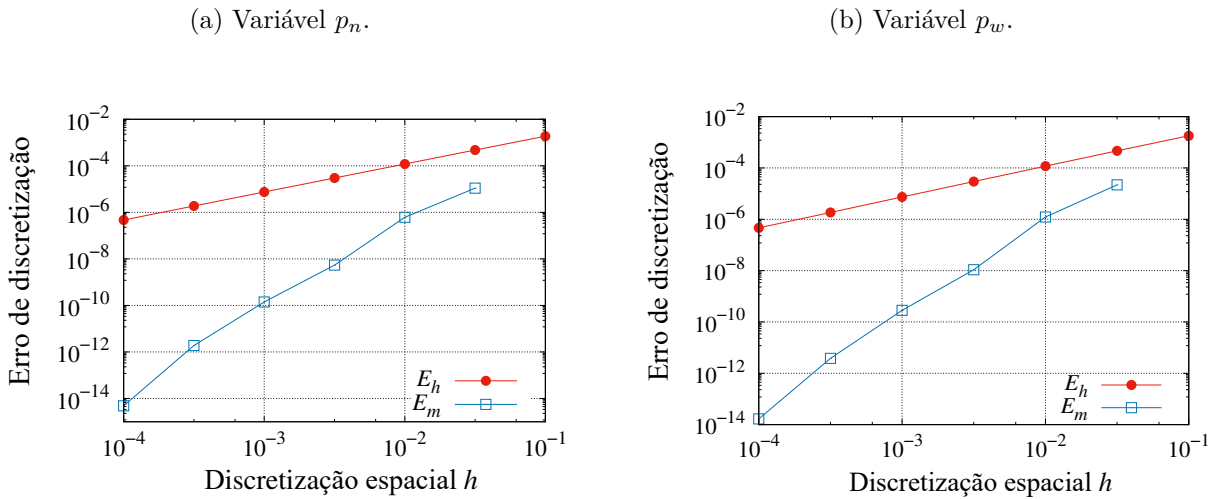
Os resultados obtidos para o erro sem o emprego da MER (E_h) e com seu emprego (E_m), são apresentados nas Figuras 21 e 22, respectivamente para os valores de porosidade $\Phi = 0,4$ (experimento numérico 1) e $\Phi = 0,9$ (experimento numérico 2). Ao realizar uma análise comparativa das curvas do erro de discretização associadas às variáveis p_n

Tabela 6 – Dados de entrada para os experimentos numéricos 1 e 2.

Símbolo	Grandeza	Experimento 1		Experimento 2	
		Valor	Unidade	Valor	Unidade
λ_w	Mobilidade do fluido na fase w	1	$(Pa\ s)^{-1}$	1	$(Pa\ s)^{-1}$
λ_n	Mobilidade do fluido na fase n	2	$(Pa\ s)^{-1}$	2	$(Pa\ s)^{-1}$
ρ_w	Densidade do fluido na fase w	1	kg/m^3	1	kg/m^3
ρ_n	Densidade do fluido na fase n	1	kg/m^3	1	kg/m^3
K	Permeabilidade	10^{-2}	m^2	10^{-2}	m^2
Φ	Porosidade	0,4		0,9	

Fonte: O autor (2024).

Figura 21 – Erro de discretização considerando $\Phi = 0,4$, com e sem o emprego da MER para as variáveis: (a) p_n e (b) p_w .



Fonte: O autor (2024).

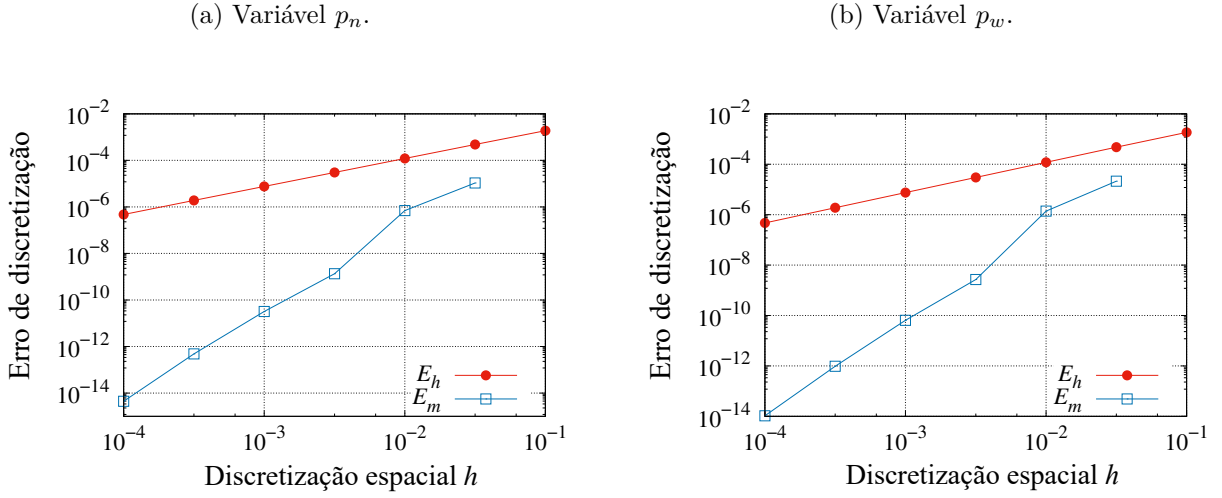
e p_w , observa-se claramente a eficácia da utilização da MER na minimização do erro de discretização, ou seja, a aplicação da MER resulta em uma redução significativa de E_m com relação a E_h para ambos experimentos numéricos.

Considera-se agora a razão da redução do erro E_h no experimento numérico 1 ($\Phi = 0,4$) para as variáveis p_n e p_w . Os resultados apresentados nas Tabelas 7 e 8, respectivamente para as variáveis p_n e p_w , caracterizam o efeito da MER sobre a redução de E_h , os quais foram avaliados mediante o cálculo da razão $|E_h|/|E_m|$. Para o experimento numérico 2 ($\Phi = 0,9$), os resultados numéricos foram semelhantes.

Verifica-se na Tabela 7, por exemplo, que na malha com 256 volumes, aplicando seis níveis da MER, o erro para a variável p_n foi reduzido em mais de 96 milhões de vezes e para a variável p_w , Tabela 8, essa redução foi superior a 27 milhões de vezes.

Na seção 2.6 é apresentado o procedimento para se calcular as ordens efetiva p_E e aparente p_U do erro de discretização E_h . Como foi visto, trata-se de um teste a *posteriori*

Figura 22 – Erro de discretização considerando $\Phi = 0,9$, com e sem o emprego da MER para as variáveis: (a) p_n e (b) p_w .



Fonte: O autor (2024).

Tabela 7 – Redução do erro em três malhas distintas, para a variável p_n considerando $\Phi = 0,4$.

Malha h	32 volumes	64 volumes	256 volumes
m	3	4	6
$ E_h $	$3,0038 \times 10^{-5}$	$7,5139 \times 10^{-6}$	$4,6978 \times 10^{-7}$
$ E_m $	$5,4271 \times 10^{-9}$	$1,4134 \times 10^{-10}$	$4,8652 \times 10^{-15}$
$ E_h / E_m $	$5,5348 \times 10^3$	$5,3162 \times 10^4$	$9,6558 \times 10^7$

Fonte: O autor (2024).

Tabela 8 – Redução do erro em três malhas distintas, para a variável p_w considerando $\Phi = 0,4$.

Malha h	32 volumes	64 volumes	256 volumes
m	3	4	6
$ E_h $	$2,9558 \times 10^{-5}$	$7,3984 \times 10^{-6}$	$4,6272 \times 10^{-7}$
$ E_m $	$1,0854 \times 10^{-8}$	$2,8269 \times 10^{-10}$	$1,6720 \times 10^{-14}$
$ E_h / E_m $	$2,7232 \times 10^3$	$2,6172 \times 10^4$	$2,7675 \times 10^7$

Fonte: O autor (2024).

para verificarmos se tais ordens tendem a ordem assintótica p_L do problema, mediante o refino da malha. Para o problema considerado, tem-se ordem $p_L = 2$ (Oliveira, 2022; Kvashchuk, 2015).

Considerando os dados do experimento numérico 1 e a variável p_n , a Tabela 9 mostra que as ordens efetiva e aparente tendem à ordem assintótica do problema.

Frequentemente não é possível calcular a solução analítica de um modelo matemático, logo, o erro da solução numérica para uma determinada variável de interesse também não pode ser calculado. Quando isso ocorre, uma estimativa para esse erro pode

Tabela 9 – Ordens efetiva (p_E) e aparente (p_U) para a variável p_n , no experimento numérico 1.

h	p_E	p_U
$1,25000 \times 10^{-1}$	1,97486	
$6,25000 \times 10^{-2}$	1,99244	1,96892
$3,12500 \times 10^{-2}$	1,99760	1,99071
$1,56250 \times 10^{-2}$	1,99915	1,99709
$7,81250 \times 10^{-3}$	1,99966	1,99898
$3,90625 \times 10^{-3}$	1,99985	1,99960

Fonte: O autor (2024).

ser obtida. A seguir apresentam-se alguns resultados para essas estimativas usando a metodologia descrita na seção 2.9, usando os dados do experimento numérico 1 ($\Phi = 0,4$). Para os dados do experimento numérico 2, ou seja, quando fazemos $\Phi = 0,9$, os resultados numéricos são semelhantes.

Ao se calcular uma estimativa de erro, é desejável que ela seja acurada e confiável. Uma forma de verificar se uma estimativa possui tais propriedades, é mediante o cálculo de sua efetividade ($\Theta = \frac{U}{E}$). Na Tabela 10 apresentam-se os resultados para o cálculo de U_{ψ^*} e $U_{p_{mc}}$, baseados em E_m , para as variáveis p_n e p_w , obtidos para os estimadores U_{ψ^*} e $U_{p_{mc}}$. Observa-se que, para essas variáveis, ambos os estimadores se apresentam acurados, sendo o estimador $U_{p_{mc}}$ o que se mostra mais confiável. Entretanto, para a malha mais refinada analisada ($h = 3,90 \times 10^{-3}$), $\Theta(U)$ não se apresenta acurado nem confiável. Isso está relacionado às expressões dos estimadores U_{ψ^*} e $U_{p_{mc}}$, conforme já apontado por Martins (2013) e Rodrigues (2023). Por exemplo, E_m na malha mais refinada é afetado pelos efeitos do erro de arredondamento, uma vez que encontra-se no limite da precisão estabelecida, ou seja, precisão dupla. Entretanto, o cálculo do estimador $U_{p_{mc}}$ envolve mais um refino da malha, o que torna o seu resultado inacurado e não confiável.

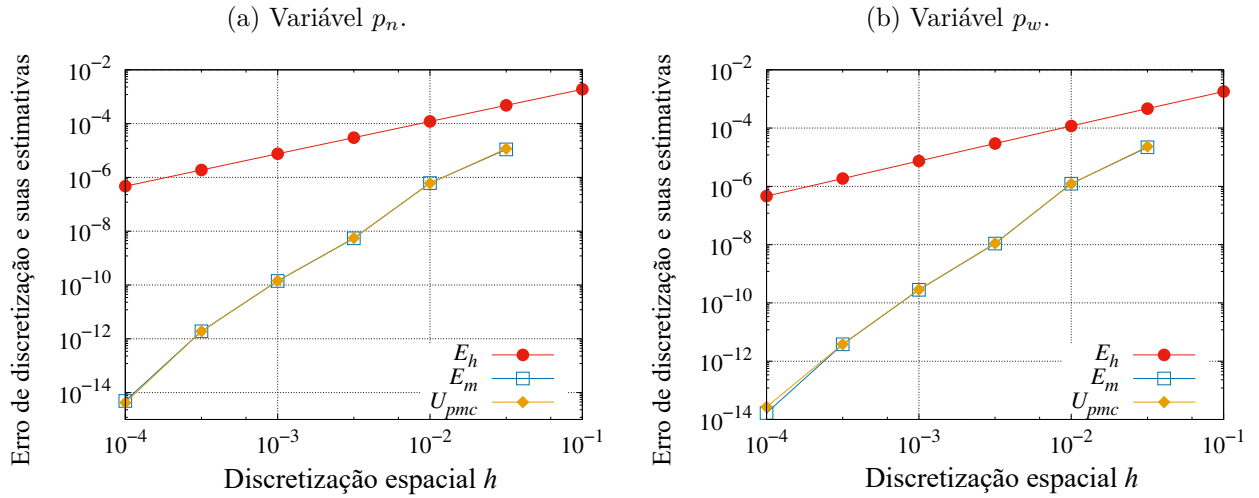
Na Figura 23 são ilustrados os resultados para E_h , E_m e sua estimativa $U_{p_{mc}}$. Pode-

Tabela 10 – Efetividade dos estimadores U_{ψ^*} e $U_{p_{mc}}$ para as variáveis p_n e p_w considerando o experimento numérico 1.

h	variável p_n		variável p_w	
	U_{ψ^*}/E_m	$U_{p_{mc}}/E_m$	U_{ψ^*}/E_m	$U_{p_{mc}}/E_m$
$1,2500 \times 10^{-1}$	1,0625	1,0559	1,0699	1,0559
$6,2500 \times 10^{-2}$	$9,4169 \times 10^{-1}$	$9,9117 \times 10^{-1}$	$9,4169 \times 10^{-1}$	$9,9117 \times 10^{-1}$
$3,1250 \times 10^{-2}$	1,0354	1,0260	1,0355	1,0260
$1,5625 \times 10^{-2}$	$9,8801 \times 10^{-1}$	1,0134	$9,8805 \times 10^{-1}$	1,0134
$7,8125 \times 10^{-3}$	$9,8942 \times 10^{-1}$	1,0025	$9,9115 \times 10^{-1}$	1,0043
$3,9062 \times 10^{-3}$	$8,6005 \times 10^{-1}$	$8,6194 \times 10^{-1}$	1,6018	1,6131

Fonte: O autor (2024).

Figura 23 – Erro de discretização sem o emprego da MER (E_h), com o emprego da MER (E_m) e sua estimativa (U_{pmc}) versus discretização espacial h , considerando $\Phi = 0,4$, para as variáveis: (a) p_n e (b) p_w .



Fonte: O autor (2024).

se observar nessas figuras que o estimador U_{pmc} é compatível com o erro de discretização após o emprego da MER (E_m) nas malhas analisadas, ou seja, mostrou-se confiável e acurado. Assim, o seu uso pode ser considerado em casos cuja a solução analítica é desconhecida, para fins de verificação numérica.

5.2 Problemas bidimensionais

5.2.1 Experimento numérico 3

Em relação ao problema bidimensional, utiliza-se o modelo matemático descrito na seção 3.2 com os dados da Tabela 11, além da pressão capilar dada por $p_c = 1 - S_w^2$. Os dados desta tabela correspondem a um problema acadêmico proposto por Kvashchuk (2015). Este será o denominado experimento numérico 3. Tal modelo matemático também foi utilizado por Oliveira (2022).

Tabela 11 – Dados de entrada para o experimento numérico 3.

Símbolo	Grandeza	Valor	Unidade
λ_w	Mobilidade do fluido na fase w	$\frac{1}{4}$	$(Pa\ s)^{-1}$
λ_n	Mobilidade do fluido na fase n	$\frac{3}{4}$	$(Pa\ s)^{-1}$
ρ_w	Densidade do fluido na fase w	1	kg/m^3
ρ_n	Densidade do fluido na fase n	1	kg/m^3
K	Permeabilidade	1	m^2
Φ	Porosidade	1	

Fonte: O autor (2024).

Inicialmente, para verificar o código, são calculadas as ordens efetiva p_E e aparente p_U das variáveis p_n e p_w . Nas Tabelas 13 e 12, respectivamente para as variáveis p_n e p_w , observa-se que p_E e p_U tendem a $p_L = 2$ com o refino da malha.

Tabela 12 – Ordens efetiva (p_E) e aparente (p_U) para a variável p_n , no experimento numérico 3.

malha	p_E	p_U
$5,0000 \times 10^{-2}$	1,99870	
$2,5000 \times 10^{-2}$	2,00105	1,99791
$1,2500 \times 10^{-2}$	2,00096	2,00108
$6,2500 \times 10^{-3}$	2,00059	2,00108
$3,1250 \times 10^{-3}$	2,00032	2,00068

Fonte: O autor (2024).

Tabela 13 – Ordens efetiva (p_E) e aparente (p_U) para variável p_w , no experimento numérico 3.

malha	p_E	p_U
$5,0000 \times 10^{-2}$	1,99145	
$2,5000 \times 10^{-2}$	1,99778	1,98933
$1,2500 \times 10^{-2}$	1,99940	1,99723
$6,2500 \times 10^{-3}$	1,99983	1,99926
$3,1250 \times 10^{-3}$	1,99995	1,99979

Fonte: O autor (2024).

Em seguida é examinada a taxa de convergência, analisando os erros para diferentes parâmetros de discretização e comparando resultados de Kvashchuk (2015) (Tabela 14) aos apresentados na Tabela 15. É importante observar que a variável encontrada na Tabela 14 é dada pelo erro de $\bar{p} = \frac{p_w + p_n}{2}$ e a redução do erro correspondente $E_{\bar{p}}^{i-1}/E_{\bar{p}}^i$, já na Tabela 15 é dada pelo erro das variáveis p_n e p_w e a redução do erro correspondente $E_{p_\alpha}^{i-1}/E_{p_\alpha}^i$. Tais erros são calculados na norma-2 ($\|\cdot\|_2$).

É possível observar que o erro das pressões tornou-se quatro vezes menor à medida que h diminuiu pela metade, concordando com a teoria estabelecida na literatura. Além disso, observa-se nas Tabelas 14 e 15 um certo padrão de comportamento em relação à redução do erro, embora pequenas diferenças quantitativas sejam justificáveis, uma vez que Kvashchuk (2015) utiliza \bar{p} em vez de p_w e p_n , e suas variáveis de interesse são \bar{p} e S_w , e neste trabalho são p_w e p_n , resultando em variáveis distintas para as soluções do sistema.

Os resultados obtidos com a utilização da MER são apresentados adiante, a qual foi abordada na concepção de redução e estimativa de E_h para as variáveis com mesma localização nodal em malhas distintas, aplicada ao problema bidimensional. Para essas variáveis, têm-se como representantes as pressões p_n e p_w no ponto central do domínio.

Tabela 14 – Erros na $\|\cdot\|_2$ da pressão \bar{p} para diferentes valores dos parâmetros de discretização espacial e temporal, com $t_f = 1$, para o experimento numérico 3.

i	$h = \tau^*$	$E_{\bar{p}}^i$	$E_{\bar{p}}^{i-1}/E_{\bar{p}}^i$
1	$1,0000 \times 10^{-1}$	$2,2958 \times 10^{-4}$	
2	$5,0000 \times 10^{-2}$	$4,9383 \times 10^{-5}$	4,6491
3	$2,5000 \times 10^{-2}$	$1,2223 \times 10^{-5}$	4,0401
4	$1,2500 \times 10^{-2}$	$3,0972 \times 10^{-6}$	3,9465
5	$6,2500 \times 10^{-3}$	$7,6654 \times 10^{-7}$	4,0405

* Os valores de h e τ são numericamente iguais, mas possuem unidades diferentes: h em metros, enquanto τ em segundos.

Fonte: Adaptado de Kvaschchuk (2015).

Tabela 15 – Erros na $\|\cdot\|_2$ das pressões p_w e p_n para diferentes valores dos parâmetros de discretização espacial e temporal, com $t_f = 1$, para o experimento numérico 3.

i	$h = \tau^*$	$E_{p_w}^i$	$E_{p_n}^i$	$E_{p_w}^{i-1}/E_{p_w}^i$	$E_{p_n}^{i-1}/E_{p_n}^i$
1	$1,0000 \times 10^{-1}$	$6,8838 \times 10^{-4}$	$3,2508 \times 10^{-4}$		
2	$5,0000 \times 10^{-2}$	$1,7292 \times 10^{-4}$	$8,1524 \times 10^{-5}$	3,9809	3,9876
3	$2,5000 \times 10^{-2}$	$4,3284 \times 10^{-5}$	$2,0401 \times 10^{-5}$	3,9950	3,9961
4	$1,2500 \times 10^{-2}$	$1,0824 \times 10^{-5}$	$5,1019 \times 10^{-6}$	3,9988	3,9987
5	$6,2500 \times 10^{-3}$	$2,7063 \times 10^{-6}$	$1,2756 \times 10^{-6}$	3,9997	3,9995
6	$3,1250 \times 10^{-3}$	$6,7658 \times 10^{-7}$	$3,1893 \times 10^{-7}$	3,9999	3,9998

* Os valores de h e τ são numericamente iguais, mas possuem unidades diferentes: h em metros, enquanto τ em segundos.

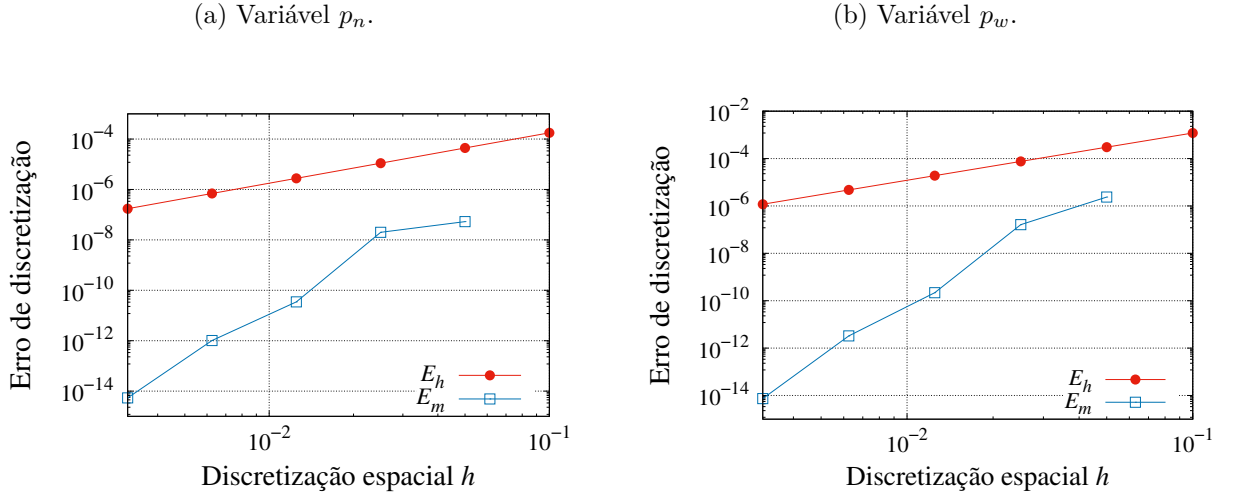
Fonte: O autor (2024).

Neste experimento numérico, a malha mais grossa adotada apresenta $N_x \times N_y = 10 \times 10$ volumes e a mais refinada $N_x \times N_y = 320 \times 320$ volumes, totalizando com isso $G = 6$ malhas. A Figura 24 mostra os resultados obtidos para erro sem MER (E_h) e erro com MER (E_m). Ao se observar as curvas do erro de discretização associadas as variáveis p_n e p_w , conforme ilustrado nesta figura, verifica-se que o emprego da MER resulta em uma redução significativa de E_h .

Os resultados apresentados na Tabela 16, para as variáveis p_n e p_w , caracterizam o efeito da MER sobre a redução de E_h , para o experimento numérico 3, os quais foram avaliados mediante o cálculo da razão $|E_h|/|E_m|$. Verifica-se para a variável p_w , por exemplo, que para a malha $N_x \times N_y = 40 \times 40$, ao aplicar dois níveis de MER, o erro se reduz em mais de 465 vezes e para a malha $N_x \times N_y = 320 \times 320$, ao utilizar cinco níveis de MER, essa redução é de mais de 159 milhões de vezes.

Na Tabela 17, apresentam-se os valores das efetividades dos estimadores U_{Ri} , U_{ψ^*} e $U_{p_{mc}}$ para a variável p_w . Verifica-se neste caso que os estimadores U_{Ri} e $U_{p_{mc}}$ são os mais

Figura 24 – Erro de discretização para o experimento numérico 3, com e sem o emprego da MER para as variáveis: (a) p_n e (b) p_w .



Fonte: O autor (2024).

Tabela 16 – Redução do erro em duas malhas distintas para as variáveis p_n e p_w , no experimento numérico 3.

$N_x \times N_y$	variável p_n		variável p_w	
	40×40	320×320	40×40	320×320
m para E_m	2	5	2	5
$ E_h $	$1,1062 \times 10^{-5}$	$1,7261 \times 10^{-7}$	$7,5699 \times 10^{-5}$	$1,1835 \times 10^{-6}$
$ E_m $	$1,9909 \times 10^{-8}$	$5,3734 \times 10^{-15}$	$1,6265 \times 10^{-7}$	$7,4036 \times 10^{-15}$
$ E_h / E_m $	$5,5561 \times 10^2$	$3,2124 \times 10^7$	$4,6540 \times 10^2$	$1,5985 \times 10^8$

Fonte: O autor (2024).

acurados e confiáveis. Para a variável p_n , os resultados numéricos são semelhantes.

Na Figura 25 apresentam-se os erros de discretização e suas estimativas para as variáveis p_n e p_w , em relação aos estimadores U_{Ri} e $U_{p_{mc}}$. Observa-se primeiramente

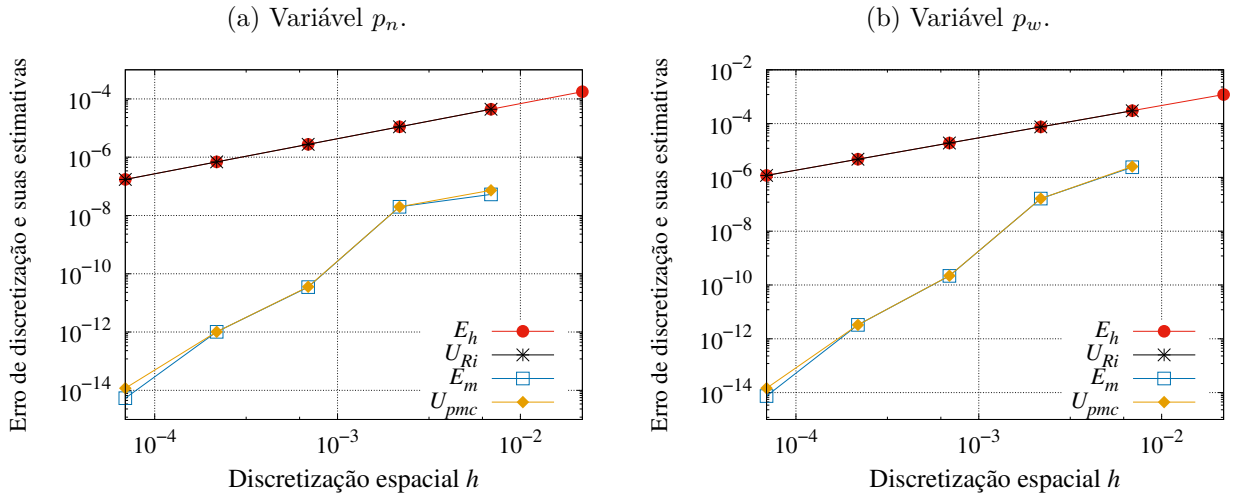
Tabela 17 – Efetividade dos estimadores U_{Ri} , U_{ψ^*} e $U_{p_{mc}}$ para a variável p_w , no experimento numérico 3.

h	U_{Ri}/E_h	U_{ψ^*}/E_m	$U_{p_{mc}}/E_m$
$5,0000 \times 10^{-2}$	$9,921277 \times 10^{-1}$	1,070609	1,068340
$2,5000 \times 10^{-2}$	$9,979499 \times 10^{-1}$	$9,386907 \times 10^{-1}$	$9,986569 \times 10^{-1}$
$1,2500 \times 10^{-2}$	$9,994547 \times 10^{-1}$	1,016404	1,015017
$6,2500 \times 10^{-3}$	$9,998478 \times 10^{-1}$	$9,832290 \times 10^{-1}$	$9,977431 \times 10^{-1}$
$3,1250 \times 10^{-3}$	$9,999540 \times 10^{-1}$	1,975099	1,966314

Fonte: O autor (2024).

nessas figuras o comportamento do erro de discretização sem (E_h) e com (E_m) o emprego

Figura 25 – Erro de discretização sem o emprego da MER (E_h), com o emprego da MER (E_m) e suas estimativas (U_{Ri} e U_{pmc}) versus discretização espacial h , no experimento numérico 3, para as variáveis: (a) p_n e (b) p_w .



Fonte: O autor (2024).

da MER, com destaque para a diferença significativa de suas magnitudes. Em relação aos estimadores, verifica-se a concordância entre E_h e U_{Ri} e, E_m e U_{pmc} , isto é, ambos são acurados e confiáveis. Com isso, o seu emprego representa uma alternativa para a verificação numérica de problemas cuja solução analítica não é conhecida.

5.2.2 Experimento numérico 4

Diferentemente do que foi feito no experimento numérico 3, pequenas modificações usando dados utilizados por Kvashchuk (2015) e Oliveira (2022) são realizadas a fim de gerar os experimentos numéricos 4 e 5. No experimento numérico 4, para as mobilidades, utilizam-se dados baseados na parametrização de Van Genuchten para as permeabilidades relativas descritas na seção 2.1.2 (equações (2.7) e (2.8)). Observa-se que, neste caso, a permeabilidade relativa de cada fase não possui solução analítica e depende da saturação do fluido, conforme as equações

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

e

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

em que o parâmetro de Van Genuchten usado é $n_{vg} = 2$ (Kvashchuk, 2015). Neste experimento numérico, são utilizados os dados da Tabela 18, que também foram empregados por Oliveira (2022), e a pressão capilar que é dada pela equação polinomial $p_c = 1 - S_w^2$. Assim sendo, observa-se que neste experimento numérico tem-se uma situação mais realística, pois estas permeabilidades geram mobilidades λ_α dependentes de S_w e não mais valores constantes, como no experimento numérico 3.

Tabela 18 – Dados de entrada para o experimento numérico 4.

Símbolo	Grandeza	Valor	Unidade
λ_w	Mobilidade do fluido na fase w	$\frac{k_{rw}}{\mu_w}$	$(Pa\ s)^{-1}$
λ_n	Mobilidade do fluido na fase n	$\frac{k_{rn}}{\mu_n}$	$(Pa\ s)^{-1}$
ρ_w	Densidade do fluido na fase w	1	kg/m^3
ρ_n	Densidade do fluido na fase n	1	kg/m^3
K	Permeabilidade	1	m^2
Φ	Porosidade	0,9	

Fonte: O autor (2024).

O experimento numérico 4 inicia-se com os cálculos das ordens efetiva p_E e aparente p_U das variáveis p_n e p_w . Nas Tabelas 20 e 19, respectivamente para as variáveis p_n e p_w , observa-se que p_E e p_U tendem a $p_L = 2$ com o refino da malha, conforme esperado.

Tabela 19 – Ordens efetiva (p_E) e aparente (p_U) para a variável p_n , no experimento numérico 4.

malha	p_E	p_U
$5,0000 \times 10^{-2}$	1,98526	
$2,5000 \times 10^{-2}$	1,99641	1,98151
$1,2500 \times 10^{-2}$	1,99947	1,99539
$6,2500 \times 10^{-3}$	2,00008	1,99927

Fonte: O autor (2024).

Tabela 20 – Ordens efetiva (p_E) e aparente (p_U) para a variável p_w , no experimento numérico 4.

malha	p_E	p_U
$5,0000 \times 10^{-2}$	1,98857	
$2,5000 \times 10^{-2}$	1,99512	1,98637
$1,2500 \times 10^{-2}$	1,99788	1,99420
$6,2500 \times 10^{-3}$	1,99903	1,99750

Fonte: O autor (2024).

Os resultados obtidos por Kvashchuk (2015) para a queda do erro da variável \bar{p} com o refino da malha (medido na $\|\cdot\|_2$) são apresentados na Tabela 21 e os resultados deste estudo são apresentados na Tabela 22 (para o erro nas variáveis p_n e p_w). Observa-se concordância entre as informações apresentadas nestas tabelas, apesar das pequenas diferenças quantitativas, uma vez que Kvashchuk (2015) utiliza \bar{p} como variável de interesse, enquanto que neste trabalho são p_n e p_w . Além disso, nota-se que o erro das pressões tornou-se quatro vezes menor à medida que h diminuiu pela metade.

Os resultados obtidos com a utilização da MER são apresentados adiante, a qual foi abordada a concepção de redução e estimativa de E_h para as variáveis com mesma

Tabela 21 – Erros na $\|\cdot\|_2$ da pressão \bar{p} para diferentes valores dos parâmetros de discretização espacial e temporal, com $t_f = 1$, para o experimento numérico 4.

i	$h = \tau^*$	$E_{\bar{p}}^i$	$E_{\bar{p}}^{i-1}/E_{\bar{p}}^i$
1	$1,0000 \times 10^{-1}$	$9,9101 \times 10^{-5}$	
2	$5,0000 \times 10^{-2}$	$2,2000 \times 10^{-5}$	4,5046
3	$2,5000 \times 10^{-2}$	$5,5877 \times 10^{-6}$	3,9372
4	$1,2500 \times 10^{-2}$	$1,4325 \times 10^{-6}$	3,9007
5	$6,2500 \times 10^{-3}$	$3,5866 \times 10^{-7}$	3,9940

* Os valores de h e τ são numericamente iguais, mas possuem unidades diferentes: h em metros, enquanto τ em segundos.

Fonte: Adaptado de Kvashchuk (2015).

Tabela 22 – Erros na $\|\cdot\|_2$ das pressões p_w e p_n para diferentes valores dos parâmetros de discretização espacial e temporal, com $t_f = 1$, para o experimento numérico 4.

i	$h = \tau^*$	$E_{p_w}^i$	$E_{p_n}^i$	$E_{p_w}^{i-1}/E_{p_w}^i$	$E_{p_n}^{i-1}/E_{p_n}^i$
1	$1,0000 \times 10^{-1}$	$2,9860 \times 10^{-4}$	$3,3700 \times 10^{-4}$		
2	$5,0000 \times 10^{-2}$	$8,4562 \times 10^{-5}$	$8,5160 \times 10^{-5}$	3,5312	3,9573
3	$2,5000 \times 10^{-2}$	$2,2167 \times 10^{-5}$	$2,1347 \times 10^{-5}$	3,8149	3,9892
4	$1,2500 \times 10^{-2}$	$5,6144 \times 10^{-6}$	$5,3406 \times 10^{-6}$	3,9481	3,9972
5	$6,2500 \times 10^{-3}$	$1,4083 \times 10^{-6}$	$1,3354 \times 10^{-6}$	3,9868	3,9992

* Os valores de h e τ são numericamente iguais, mas possuem unidades diferentes: h em metros, enquanto τ em segundos.

Fonte: O autor (2024).

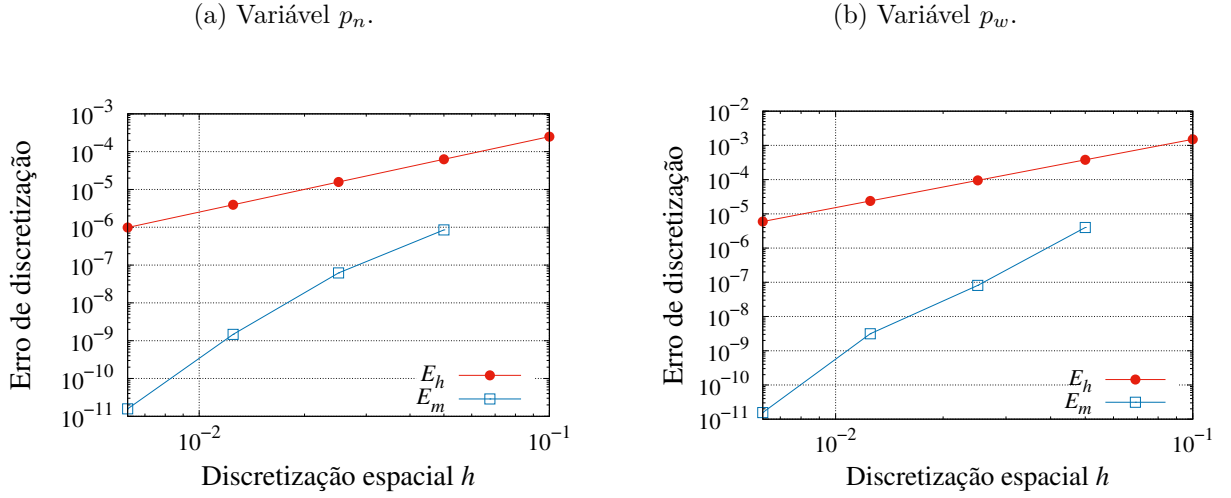
localização nodal em malhas distintas. Para essas variáveis, têm-se como representantes as pressões p_n e p_w no ponto central do domínio.

Neste experimento numérico, a malha mais grossa considerada apresenta $N_x \times N_y = 10 \times 10$ volumes e a mais refinada $N_x \times N_y = 160 \times 160$ volumes, totalizando com isso $G = 5$ malhas. Na Figura 26 são ilustrados os resultados obtidos para erro sem MER (E_h) e erro com MER (E_m). Ao comparar as curvas do erro de discretização associadas às variáveis p_n e p_w , observa-se que o emprego da MER resulta em uma redução significativa de E_h .

Os resultados apresentados na Tabela 23, para as variáveis p_n e p_w , caracterizam o efeito da MER sobre a redução de E_h , os quais foram avaliados mediante o cálculo da razão $|E_h|/|E_m|$. Verifica-se para a variável p_w , por exemplo, que para a malha $N_x \times N_y = 40 \times 40$, ao aplicar dois níveis de MER, o erro se reduz em mais de mil vezes e para a malha $N_x \times N_y = 160 \times 160$, ao utilizar cinco níveis de MER, essa redução é de mais de 383 mil vezes.

Na Tabela 24, apresentam-se os valores das efetividades dos estimadores U_{Ri} , U_{ψ^*}

Figura 26 – Erro de discretização para o experimento numérico 4, com e sem o emprego da MER para as variáveis: (a) p_n e (b) p_w .



Fonte: O autor (2024).

Tabela 23 – Redução do erro em duas malhas distintas das variáveis p_n e p_w , para o experimento numérico 4.

$N_x \times N_y$	variável p_n		variável p_w	
	40×40	160×160	40×40	160×160
m para E_m	2	4	2	4
$ E_h $	$1,5755 \times 10^{-5}$	$9,8501 \times 10^{-7}$	$9,5246 \times 10^{-5}$	$5,9656 \times 10^{-6}$
$ E_m $	$6,2107 \times 10^{-8}$	$1,5743 \times 10^{-11}$	$8,0965 \times 10^{-8}$	$1,5537 \times 10^{-11}$
$ E_h / E_m $	$2,5368 \times 10^2$	$6,2567 \times 10^4$	$1,1764 \times 10^3$	$3,8396 \times 10^5$

Fonte: O autor (2024).

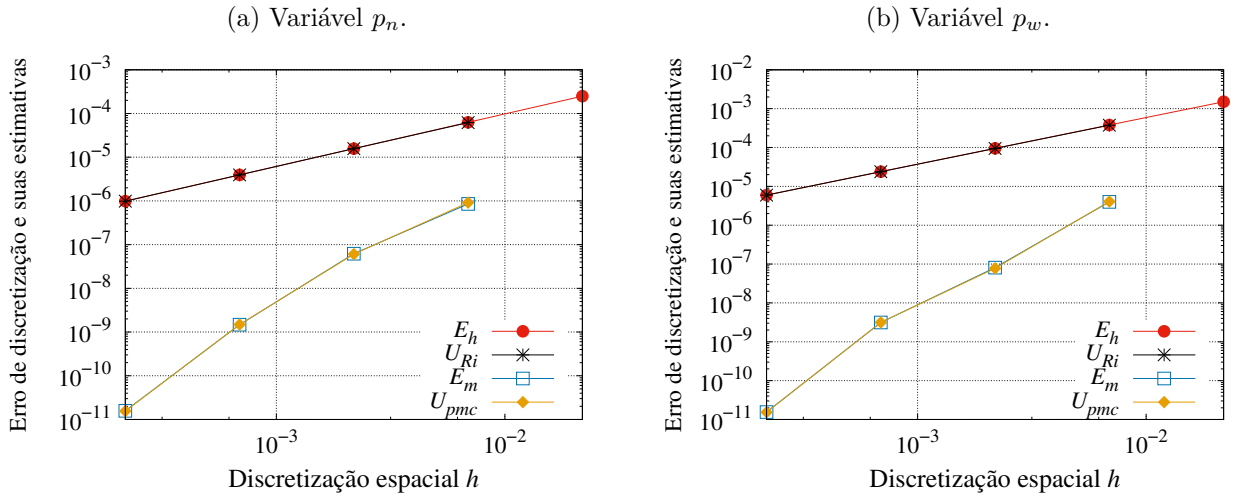
e $U_{p_{mc}}$ para a variável p_w . Verifica-se que entre os estimadores estudados, os estimadores U_{Ri} e $U_{p_{mc}}$ são os mais acurados e o estimador $U_{p_{mc}}$ é o mais confiável. Para a variável p_n os resultados numéricos são semelhantes. Os resultados para os erros de discretização e os estimadores U_{Ri} e $U_{p_{mc}}$ são apresentados na Figura 27 para a variáveis p_n e p_w . Da mesma forma como observado anteriormente na Figura 25 foi identificado a acurácia e confiabilidade dos estimadores estudados.

Tabela 24 – Efetividade dos estimadores U_{Ri} , U_{ψ^*} e $U_{p_{mc}}$ para a variável p_w , no experimento numérico 4.

h	U_{Ri}/E_h	U_{ψ^*}/E_m	$U_{p_{mc}}/E_m$
$5,0000 \times 10^{-2}$	$9,894819 \times 10^{-1}$	1,023047	1,020273
$2,5000 \times 10^{-2}$	$9,955025 \times 10^{-1}$	$9,432913 \times 10^{-1}$	$9,613097 \times 10^{-1}$
$1,2500 \times 10^{-2}$	$9,980479 \times 10^{-1}$	1,047320	1,004959
$6,2500 \times 10^{-3}$	$9,991093 \times 10^{-1}$	$9,811215 \times 10^{-1}$	$9,858953 \times 10^{-1}$

Fonte: O autor (2024).

Figura 27 – Erro de discretização sem o emprego da MER (E_h), com o emprego da MER (E_m) e suas estimativas (U_{Ri} e U_{pmc}) versus discretização espacial h , no experimento numérico 4, para as variáveis: (a) p_n e (b) p_w .



Fonte: O autor (2024).

5.2.3 Experimento numérico 5

Nesta seção trata-se o experimento numérico 5. Diferentemente do experimento numérico 4 da seção anterior, no experimento numérico desta seção foram utilizados dados baseados na parametrização de Van Genuchten tanto para as permeabilidades relativas de cada fase quanto para a pressão capilar p_c (equação (2.5)), além dos outros dados da Tabela 18.

Por questões didáticas, repetimos a expressão da pressão capilar, que é dada por

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

em que os parâmetros de Van Genuchten adotados serão $n_{vg} = p_e = 2$. Dessa maneira, observa-se que este experimento numérico apresenta uma situação mais realística se comparada ao experimento numérico 4, pois aqui a pressão capilar é baseada na parametrização de Van Genuchten e não mais em uma solução analítica conhecida.

Neste experimento numérico também foram obtidas as ordens efetiva p_E e aparente p_U das variáveis p_n e p_w . Nas Tabelas 26 e 25, respectivamente para as variáveis p_n e p_w , observa-se que p_E e p_U tendem a $p_L = 2$ com o refino da malha, conforme esperado.

Os resultados obtidos por Kvashchuk (2015) para a queda do erro de \bar{p} , são apresentados na Tabela 27 e os resultados deste trabalho para p_n e p_w são apresentados na Tabela 28. Observe-se concordância entre os valores apresentados nestas tabelas. Além disso, nota-se que o erro das pressões tornou-se quatro vezes menor à medida que h diminuiu pela metade.

Tabela 25 – Ordens efetiva (p_E) e aparente (p_U) para a variável p_n , no experimento numérico 5.

malha	p_E	p_U
$5,0000 \times 10^{-2}$	1,98681	
$2,5000 \times 10^{-2}$	1,99653	1,98354
$1,2500 \times 10^{-2}$	1,99910	1,99567
$6,2500 \times 10^{-3}$	1,99976	1,99888

Fonte: O autor (2024).

Tabela 26 – Ordens efetiva (p_E) e aparente (p_U) para p_w , no experimento numérico 5.

malha	p_E	p_U
$5,0000 \times 10^{-2}$	1,99600	
$2,5000 \times 10^{-2}$	1,99878	1,99508
$1,2500 \times 10^{-2}$	1,99958	1,99851
$6,2500 \times 10^{-3}$	1,99984	1,99950

Fonte: O autor (2024).

Tabela 27 – Erros na $\|\cdot\|_2$ da pressão \bar{p} para diferentes valores dos parâmetros de discretização espacial e temporal, com $t_f = 1$, para o experimento numérico 5.

i	$h = \tau^*$	$E_{\bar{p}}^i$	$E_{\bar{p}}^{i-1}/E_{\bar{p}}^i$
1	$1,0000 \times 10^{-1}$	$1,2577 \times 10^{-4}$	
2	$5,0000 \times 10^{-2}$	$3,7186 \times 10^{-5}$	3,3823
3	$2,5000 \times 10^{-2}$	$1,0848 \times 10^{-5}$	3,4280
4	$1,2500 \times 10^{-2}$	$2,7961 \times 10^{-6}$	3,8796

* Os valores de h e τ são numericamente iguais, mas possuem unidades diferentes: h em metros, enquanto τ em segundos.

Fonte: Adaptado de Kvashchuk (2015).

Tabela 28 – Erros na $\|\cdot\|_2$ das pressões p_w e p_n para diferentes valores dos parâmetros de discretização espacial e temporal, com $t_f = 1$, para o experimento numérico 5.

i	$h = \tau^*$	$E_{p_w}^i$	$E_{p_n}^i$	$E_{p_w}^{i-1}/E_{p_w}^i$	$E_{p_n}^{i-1}/E_{p_n}^i$
1	$1,0000 \times 10^{-1}$	$1,2608 \times 10^{-3}$	$2,7552 \times 10^{-3}$		
2	$5,0000 \times 10^{-2}$	$3,2764 \times 10^{-4}$	$6,9949 \times 10^{-4}$	3,8483	3,9389
3	$2,5000 \times 10^{-2}$	$8,2739 \times 10^{-5}$	$1,7556 \times 10^{-4}$	3,9599	3,9843
4	$1,2500 \times 10^{-2}$	$2,0735 \times 10^{-5}$	$4,3934 \times 10^{-5}$	3,9903	3,9960
5	$6,2500 \times 10^{-3}$	$5,1864 \times 10^{-6}$	$1,0986 \times 10^{-5}$	3,9979	3,9990

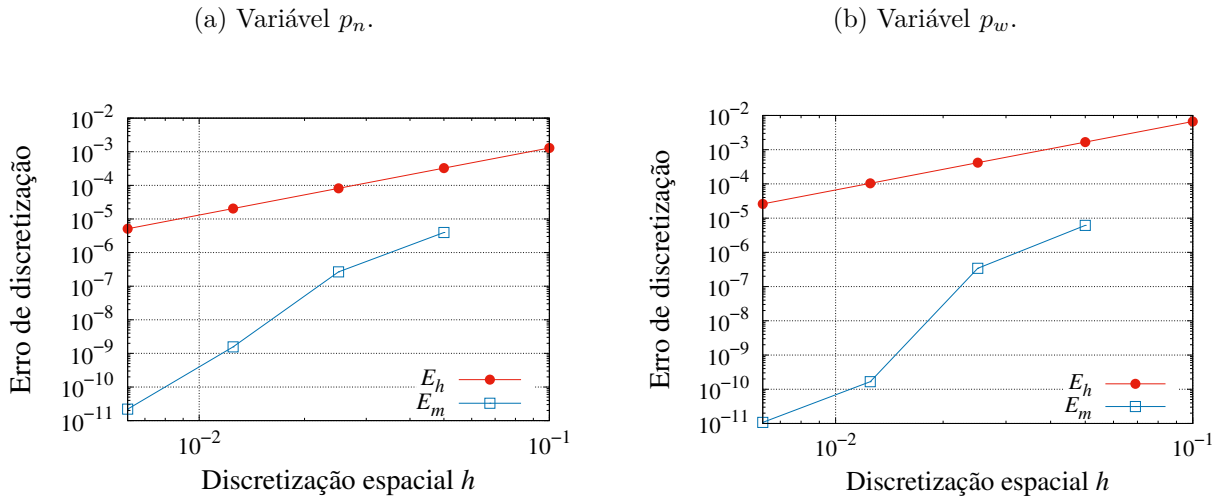
* Os valores de h e τ são numericamente iguais, mas possuem unidades diferentes: h em metros, enquanto τ em segundos.

Fonte: O autor (2024).

Os resultados obtidos com a utilização da MER são apresentados adiante, a qual foi abordada a concepção de redução e estimativa de E_h para as variáveis com mesma localização nodal em malhas distintas. Para essas variáveis, têm-se como representantes as pressões p_n e p_w no ponto central do domínio.

Neste experimento numérico, a malha mais grossa considerada apresenta $N_x \times N_y = 10 \times 10$ volumes e a mais refinada $N_x \times N_y = 160 \times 160$ volumes, totalizando com isso $G = 5$ malhas. A Figura 28 mostra os resultados obtidos para o erro sem MER (E_h) e o erro com MER (E_m). Ao se observar as curvas do erro de discretização associadas as variáveis p_n e p_w , verifica-se que o emprego da MER resulta em uma redução significativa de E_h .

Figura 28 – Erro de discretização para o experimento numérico 5, com e sem o emprego da MER para as variáveis: (a) p_n e (b) p_w .



Fonte: O autor (2024).

Os resultados apresentados na Tabela 29, para as variáveis p_n e p_w , caracterizam o efeito da MER sobre a redução de E_h , os quais foram avaliados mediante o cálculo da razão $|E_h|/|E_m|$. Verifica-se para a variável p_w , por exemplo, que para a malha $N_x \times N_y = 40 \times 40$, ao aplicar dois níveis de MER, o erro se reduz em mais de 306 vezes e para a malha $N_x \times N_y = 160 \times 160$, ao utilizar cinco níveis de MER, essa redução é de mais de 232 mil vezes.

Na Tabela 30, apresentam-se os valores das efetividades dos estimadores U_{Ri} , U_{ψ^*} e $U_{p_{mc}}$ para a variável p_w . Neste caso, verifica-se que os estimadores U_{Ri} e $U_{p_{mc}}$ são os mais acurados e que o estimador $U_{p_{mc}}$ é o mais confiável. Para a variável p_n os resultados numéricos são semelhantes. Os resultados para os erros de discretização e os estimadores U_{Ri} e $U_{p_{mc}}$ são ilustrados na Figura 29 para as variáveis p_n e p_w . Assim como observado nas Figuras 25 e 27 o emprego dos estimadores mostrou-se promissor.

Neste capítulo, foi avaliada a eficiência da MER aplicada às variáveis p_n e p_w do problema de escoamento bifásico em meio poroso rígido, buscando reduzir e estimar o

Tabela 29 – Redução do erro em duas malhas distintas para as variáveis p_n e p_w , no experimento numérico 5.

$N_x \times N_y$	variável p_n		variável p_w	
	40×40	160×160	40×40	160×160
m para E_m	2	4	2	4
$ E_h $	$8,1636 \times 10^{-5}$	$5,1062 \times 10^{-6}$	$4,1670 \times 10^{-4}$	$2,6054 \times 10^{-5}$
$ E_m $	$2,6592 \times 10^{-7}$	$2,1992 \times 10^{-11}$	$3,4188 \times 10^{-7}$	$1,0722 \times 10^{-11}$
$ E_h / E_m $	$3,0699 \times 10^2$	$2,3218 \times 10^5$	$3,0699 \times 10^2$	$2,3218 \times 10^5$

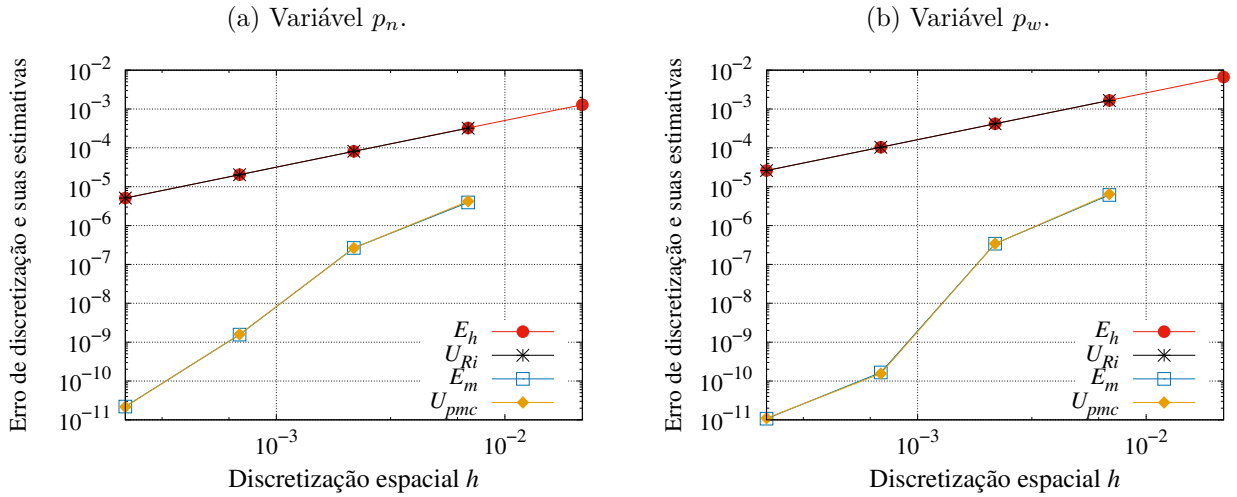
Fonte: O autor (2024).

Tabela 30 – Efetividade dos estimadores U_{Ri} , U_{ψ^*} e $U_{p_{mc}}$ da variável p_w , no experimento numérico 5.

h	U_{Ri}/E_h	U_{ψ^*}/E_m	$U_{p_{mc}}/E_m$
$5,0000 \times 10^{-2}$	$9,963172 \times 10^{-1}$	1,056773	1,055742
$2,5000 \times 10^{-2}$	$9,988780 \times 10^{-1}$	$9,494108 \times 10^{-1}$	$9,995148 \times 10^{-1}$
$1,2500 \times 10^{-2}$	$9,996199 \times 10^{-1}$	$9,357855 \times 10^{-1}$	$9,353606 \times 10^{-1}$
$6,2500 \times 10^{-3}$	$9,998556 \times 10^{-1}$	1,109348	1,030358

Fonte: O autor (2024).

Figura 29 – Erro de discretização sem o emprego da MER (E_h), com o emprego da MER (E_m) e suas estimativas (U_{Ri} e $U_{p_{mc}}$) versus discretização espacial h , no experimento numérico 5, para as variáveis: (a) p_n e (b) p_w .



Fonte: O autor (2024).

E_h e aumentar a acurácia das soluções numéricas. Verificou-se que: (1) o uso da MER mostrou-se eficaz no sentido de elevar a acurácia das soluções numéricas; (2) em relação às estimativas do erro numérico, considerando as soluções obtidas com o aplicação da MER, os estimadores de Richardson (U_{Ri}) e Richardson corrigido ($U_{p_{mc}}$) são recomendados para fornecer melhor precisão e confiabilidade.

6 CONSIDERAÇÕES FINAIS

Neste capítulo apresenta-se um resumo das principais constatações e contribuições desta tese. Ao final, sugestões de temas para trabalhos futuros são propostas.

6.1 Escopo do trabalho

Neste trabalho, estuda-se um problema envolvendo o escoamento bifásico em meio poroso rígido uni e bidimensional de fluidos incompressíveis e imiscíveis usando a formulação mista pressão-saturação. Entretanto, após a linearização, o sistema é reescrito com as correções das pressões como variáveis principais. Para a análise de erros, as variáveis de interesse analisadas foram as pressões em cada uma das fases úmidas e não úmidas localizadas no ponto central do domínio.

Para o caso unidimensional foram realizados dois experimentos numéricos e para o caso bidimensional, três experimentos com modificações em cada um deles, visando explorar modelos mais realísticos. Para todos os experimentos, foi feita a verificação do código. Dando sequência, foi feito um estudo das ordens efetiva (p_E) e aparente (p_U) do E_h , e constatamos que ambas tendem à ordem assintótica (p_L) em todos os experimentos. Em seguida foi aplicada a MER para reduzir o E_h . Finalmente, foram usados estimadores de erro tanto para o caso com e sem o uso da MER.

6.2 Conclusão geral

Avaliou-se a eficácia de MER a fim de se reduzir e estimar o E_h resultante de soluções numéricas do problema de escoamento bifásico em meio poroso rígido uni e bidimensional para variáveis p_n e p_w localizadas no ponto central do domínio. A partir dos experimentos realizados, conclui-se que:

- o uso de MER mostrou-se promissor na elevação do nível de acurácia das soluções numéricas para os problemas estudados;
- para o tipo de variável estudado, variáveis localizadas no ponto central do domínio, o emprego da MER é recomendado, ou seja, ocorreu uma redução significativa de E_h ;
- no que diz respeito às estimativas para o erro de discretização, considerando as soluções obtidas com a aplicação da MER, o estimador de Richardson corrigido (U_{pmc}) é recomendado por fornecer melhor acurácia e confiabilidade em relação aos demais estimadores estudados neste trabalho.

6.3 Principais contribuições

Em conformidade com os resultados obtidos, considera-se que o objetivo geral da tese foi alcançado. Com isso, as contribuições podem ser sumarizadas como:

- desenvolvimento de verificação numérica no problema de escoamento bifásico em meio poroso rígido uni e bidimensional;
- estabelecimento da MER como uma alternativa para a redução do erro de discretização no tipo de problema estudado;
- estudo sobre estimadores para o erro de discretização resultante da aplicação de MER no tipo de problema estudado.

6.4 Propostas de trabalhos futuros

Os seguintes temas são sugeridos:

- verificação das soluções numéricas mediante o emprego da MER, porém, para escoamento bifásico em meio poroso rígido em problemas sem solução analítica conhecida;
- verificação das soluções numéricas mediante o emprego da MER, porém, para problemas com permeabilidades relativas randômicas;
- verificação das soluções numéricas mediante o emprego da MER, porém, para escoamento multifásico em meio poroso rígido;
- uso de precisão quádrupla nos cálculos.

REFERÊNCIAS

- ABDELMIGID, T. A. *et al.* Revisiting the lid-driven cavity flow problem: review and new steady state benchmarking results using GPU accelerated code. *Alexandria Engineering Journal*, v. 56, n. 1, p. 123 – 135, 2017. Citado na página 22.
- ATAIE-ASHTIANI, B.; RAEESI-ARDEKANI, D. Comparison of numerical formulations for two-phase flow in porous media. *Geotechnical and Geological Engineering*, v. 28(4), p. 373–389, 2010. Citado na página 19.
- BASTIAN, P. *Numerical computation of multiphase flows in porous media*. Tese (Doutorado) — Kiel University, Kiel, Germany, 1999. Citado 8 vezes nas páginas 17, 19, 25, 27, 28, 29, 30 e 31.
- BASTIAN, P. *et al.* Numerical simulation of multiphase flow in fractured porous media. In: *Numerical Treatment of Multiphase Flows in Porous Media*. Berlin, Heidelberg: Springer Berlin Heidelberg, 2000. p. 50–68. Nenhuma citação no texto.
- BRIGGS, W. L.; HENSON, V. E.; MCCORMICK, S. F. *A Multigrid Tutorial*. 2nd. ed. Philadelphia: SIAM, 2000. Citado 3 vezes nas páginas 18, 39 e 40.
- BURDEN, R. L.; FAIRES, J. D. *Numerical Analysis*. 10th. ed. Boston: Cengage Learning, 2016. Citado 6 vezes nas páginas 17, 20, 37, 38, 43 e 53.
- CELIA, M. A.; BINNING, P. A mass conservative numerical solution for two-phase flow in porous media with application to unsaturated flow. *Water Resources Research*, v. 28(10), p. 2819–2828, 1992. Citado 5 vezes nas páginas 17, 20, 28, 33 e 54.
- CELIA, M. A.; BOULOUTAS, E. T.; ZARBA, R. L. A general mass-conservative numerical solution for the unsaturated flow equation. *Water Resources Research*, v. 26(7), p. 1483–1496, 1990. Citado 3 vezes nas páginas 19, 20 e 33.
- CHENG, A. H.-D. Poroelasticity. *Theory and Applications of Transport in Porous Media*, v. 27, p. 1–59, 2016. Citado na página 26.
- CHRISTIANSEN, E.; PETERSEN, H. G. Estimation of convergence orders in repeated Richardson extrapolation. *BIT Numerical Mathematics*, v. 29, p. 48–59, 1989. Citado na página 21.
- CIHAN, A.; BIRKHOLZER, J. T.; BIANCHI, M. Impact of geological heterogeneity on residual trapping of supercritical CO₂ and brine. *Water Resources Research*, v. 48(11), 2012. Citado na página 19.
- DA SILVA, L. P. *et al.* Robust RRE technique for increasing the order of accuracy of SPH numerical solutions. *Mathematics and Computers in Simulation*, v. 199, p. 231–252, 2022. Citado na página 23.
- DA SILVA, N. D. P. *et al.* Completed repeated Richardson extrapolation for compressible fluid flows. *Applied Mathematical Modelling*, v. 77, p. 724–737, 2020. Citado na página 22.
- ERTUK, E.; CORKE, T. C.; GOKÇOL, C. Numerical solutions of 2D steady incompressible driven cavity flow at high Reynolds numbers. *International Journal for Numerical Methods in Fluids*, v. 48, p. 747–774, 2005. Citado na página 21.

- FEDORENKO, R. P. On the speed of convergence of an iteration process. *USSR Comput. Math. and Math. Phys.*, n. 4, p. 227, 1964. Citado na página 38.
- FERZIGER, J. H.; PERIĆ, M. *Computational Methods for Fluid Dynamics*. 3rd. ed. New York: Springer, 2002. Citado 4 vezes nas páginas 18, 33, 38 e 41.
- FOLTRAN, A. C.; MARCHI, C. H.; MOURA, L. M. Verification of numerical solutions of thermal radiation problems in participating and nonparticipating media. *Numerical Heat Transfer, Part B: Fundamentals*, p. 1–23, 2023. Citado na página 23.
- FORTUNA, A. O. *Técnicas computacionais para dinâmica dos fluidos: conceitos básicos e aplicações*. 2. ed. São Paulo: Edusp, 2012. Citado 4 vezes nas páginas 17, 38, 53 e 55.
- FRANCO, S. R. *Métodos multigrid espaço-tempo para resolver as equações do calor e da poroelasticidade*. Tese (Doutorado) — Universidade Federal do Paraná, 2017. Citado 3 vezes nas páginas 38, 39 e 40.
- GASPAR, F. J. *et al.* A systematic comparison of coupled and distributive smoothing in multigrid for the poroelasticity system. *Numer. Linear Algebra Appl.*, v. 11(2-3), p. 93–113, 2004. Citado na página 18.
- GOLUB, G. H.; ORTEGA, J. M. *Scientific Computing and Differential Equations: an Introduction to Numerical Methods*. [S.l.]: Academic Press, 1992. Citado 4 vezes nas páginas 17, 20, 31 e 33.
- HELMIG, R. *Multiphase flow and transport processes in the subsurface: a contribution to the modeling of hydrosystems*. [S.l.]: Springer-Verlag, 1997. Citado 2 vezes nas páginas 19 e 30.
- HUGHES, T. J. R. *The Finite Element Method: Linear Static and Dynamic Finite Element Analysis*. Mineola (USA): Dover Publications, 2000. Citado na página 33.
- ILLIANO, D. *Iterative schemes for solving coupled, non-linear flow and transport in porous media*. Dissertação (Mestrado) — University of Bergen, Bergen, Norway, 2016. Citado 2 vezes nas páginas 51 e 59.
- JOYCE, D. C. Survey of extrapolation processes in numerical analysis. *SIAM Review*, v. 13, p. 435–490, 1971. Citado na página 21.
- KARPINSKI, S.; POP, I. S.; RADU, F. A. Analysis of a linearization scheme for an interior penalty discontinuous galerkin method for two-phase flow in porous media with dynamic capillarity effects. *International Journal for Numerical Methods in Engineering*, v. 112(6), p. 553–577, 2017. Citado na página 20.
- KAVIANY, M. *Principles of heat transfer in porous media*. [S.l.]: Springer Science and Business Media, 2012. Citado na página 27.
- KREYSZIG, E. *Advanced engineering mathematics*. 10th. ed. New Jersey: John Wiley and Sons, Inc., 2011. Citado na página 34.
- KVASHCHUK, A. *A robust implicit scheme for two-phase flow in porous media*. Dissertação (Mestrado) — University of Bergen, Bergen, Norway, 2015. Citado 8 vezes nas páginas 28, 52, 62, 64, 65, 68, 69 e 72.

- KVASHCHUK, A.; RADU, F. A. A fully-implicit iterative scheme for the simulation of two-phase flow in porous media. *European Conference on Numerical Mathematics and Advanced Applications*, Springer, p. 625–633, 2017. Citado na página 27.
- KWIATKOWSKI JUNIOR, J. E. *Múltipla extrapolação de Richardson para reduzir e estimar o erro de discretização na simulação do processo de aeração da massa de grãos*. Tese (Doutorado) — Universidade Federal do Paraná, 2023. Citado na página 23.
- LEDUC, G. The Boyle–Romberg trinomial tree, a highly efficient method for double barrier option pricings. *Mathematics*, v. 12(7), p. 964, 2024. Citado na página 23.
- LI, K.; HORNE, R. N. Comparison of methods to calculate relative permeability from capillary pressure in consolidated water-wet porous media. *Water Resources Research*, Wiley Online Library, v. 42(6), 2006. Citado na página 19.
- LIMA, P. M. Richardson extrapolation in boundary value problems for differential equations with nonregular right-hand side. *Journal of Computational and Applied Mathematics*, v. 50, p. 385–400, 1994. Citado na página 21.
- MALISKA, C. R. *Transferência de Calor e Mecânica dos Fluidos Computacionais*. 2. ed. Rio de Janeiro: LTC, 2004. Citado 6 vezes nas páginas 17, 33, 35, 36, 37 e 55.
- MARCHI, C. H. *Verificação de soluções numéricas unidimensionais em dinâmica dos fluidos*. Tese (Doutorado) — Universidade Federal de Santa Catarina, Florianópolis, 2001. Citado 3 vezes nas páginas 41, 47 e 50.
- MARCHI, C. H. *et al.* Repeated Richardson extrapolation applied to the two-dimensional Laplace equation using triangular and square grids. *Applied Mathematical Modelling*, v. 37, n. 1, p. 4661–4675, 2013a. Citado na página 47.
- MARCHI, C. H.; GERMER, E. M. Effect of ten CFD numerical schemes on repeated Richardson extrapolation (RRE). *Journal of Applied and Computational Mathematics*, v. 2, n. 128, p. 1–8, 2013. Citado 2 vezes nas páginas 18 e 22.
- MARCHI, C. H. *et al.* Polynomial interpolation with repeated Richardson extrapolation to reduce discretization error in CFD. *Applied Mathematical Modelling*, v. 40, p. 8872–8885, 2016. Citado 4 vezes nas páginas 22, 44, 45 e 47.
- MARCHI, C. H. *et al.* Highly accurate numerical solutions with repeated Richardson extrapolation for 2D Laplace equation. *Applied Mathematical Modelling*, v. 37, p. 7386–7397, 2013b. Citado 2 vezes nas páginas 22 e 44.
- MARCHI, C. H.; SILVA, A. F. C. Unidimensional numerical solution error estimation for convergent apparent order. *Numerical Heat Transfer, Part B*, v. 42, p. 167–188, 2002. Citado na página 48.
- MARTINS, M. A. *Multiextrapolação de Richardson com interpolação para reduzir e estimar o erro de discretização em CFD*. Tese (Doutorado) — Universidade Federal do Paraná, 2013. Citado 10 vezes nas páginas 22, 42, 43, 44, 45, 46, 47, 48, 49 e 63.
- OBERKAMPF, W. L.; ROY, C. J. *Verification and validation in scientific computing*. Cambridge: Cambridge University Press, 2010. Citado na página 43.

- OLIVEIRA, M. L. *Métodos de resolução eficientes para escoamentos multifásicos em meios porosos rígidos*. Tese (Doutorado) — Universidade Federal do Paraná, 2022. Citado 5 vezes nas páginas 40, 59, 62, 64 e 68.
- OLIVEIRA, M. L. *et al.* L-scheme and modified picard with *Multigrid* method for a 1D two-phase problem in rigid porous media with analytical solution. In: *Proceedings of the XLI Ibero-Latin-American Congress on Computational Methods in Engineering*. Foz do Iguaçu, Brazil: ABMEC, 2020. Citado 3 vezes nas páginas 20, 35 e 59.
- OLIVEIRA, M. L. *et al.* Modified picard with multigrid method for two-phase flow problems in rigid porous media. *International Journal for Numerical Methods in Engineering*, v. 125, n. 5, p. e7397, 2024. Citado 4 vezes nas páginas 21, 31, 33 e 54.
- OVERHOLT, K. Extended aitken acceleration. *BIT Numerical Mathematics*, v. 5, p. 122–132, 1965. Citado na página 21.
- PATANKAR, S. *Numerical heat transfer and fluid flow*. Boca Raton: CRC Press. Taylor & Francis Group, 2018. Citado 2 vezes nas páginas 33 e 35.
- PLETCHER, R. H.; TANNEHILL, J. C.; ANDERSON, D. A. *Computational Fluid Mechanics and Heat Transfer*. USA: CRC Press, 2013. Citado na página 33.
- POP, I. S.; RADU, F.; KNABER, P. Mixed finite elements for the Richards' equation: linearization procedure. *Journal of computational and applied mathematics*, v. 168(1-2), p. 365–373, 2004. Citado na página 20.
- RADU, F. A. *et al.* A robust linearization scheme for finite volume based discretizations for simulation of two-phase flow in porous media. *Journal of Computational and Applied Mathematics, Elsevier*, v. 289, p. 134–141, 2015. Citado na página 20.
- RAHUL, K.; BHATTACHARYYA, S. N. One-sided finite-difference approximations suitable for use with Richardson extrapolation. *Journal of Computational Physics*, v. 219, p. 13–20, 2006. Citado na página 21.
- RICHARD, L. A. Capillary conduction of liquids through porous mediums. *Physics*, v. 1(5), p. 318–333, 1931. Citado na página 19.
- RICHARDSON, L. F.; GAUNT, J. A. The deferred approach to the limit. *Philosophical Proceedings of the Royal Society of London*, v. 226, p. 299–361, 1927. Citado 3 vezes nas páginas 18, 21 e 43.
- ROACHE, P. J. *Fundamentals of Computational Fluid Dynamics*. Albuquerque, USA: Hermosa Publishers, 1998. Citado na página 41.
- ROACHE, P. J. *Fundamentals of Verification and Validation*. [S.l.]: Hermosa Publishers, 2009. Citado 2 vezes nas páginas 18 e 41.
- RODRIGUES, S. *Estimativa e redução do erro de discretização para o problema de poroelasticidade*. Tese (Doutorado) — Universidade Federal do Paraná, 2023. Citado na página 63.

- RODRIGUES, S. *et al.* Reducing the discretization error for global and local variables in poroelasticity problems. In: *Proceedings of the XLI Ibero-Latin-American Congress on Computational Methods in Engineering*. Foz do Iguaçu, Brazil: ABMEC, 2020. Citado na página 22.
- RODRIGUES, S. *et al.* Reducing the discretization error for a poroelasticity problem in variables having extreme values. *J. Braz. Soc. Mech. Sci. Eng.*, v. 44(147), p. 1–11, 2022. Citado na página 23.
- ROY, C. J.; OBEEKAMPF, W. L. A comprehensive framework for verification, validation, and uncertainty quantification in scientific computing. *Comp. Meth. in Appl. Mech. Eng.*, v. 200, p. 2131–2144, 2011. Citado na página 18.
- SAAD, Y. *Iterative Methods for Sparse Linear Systems*. 2nd. ed. Philadelphia: PWS, 2003. Citado na página 33.
- SABATINI, M. H. *et al.* Solving one-dimensional two-phase flow problems in rigid porous media using L -scheme. In: *Proceedings of the XLI Ibero-Latin-American Congress on Computational Methods in Engineering*. Foz do Iguaçu, Brazil: ABMEC, 2020. Citado na página 20.
- SIDI, A. *Practical Extrapolation Methods; Theory and Applications*. Cambridge: Cambridge University Press, 2003. Citado 2 vezes nas páginas 18 e 43.
- SILVA, M.; GASPAR, P. D.; PEREIRA, S. R. Thermal and acoustical insulation materials: analysis of current portuguese market trends. *Energy and Buildings*, v. 75, p. 437–447, 2014. Citado na página 25.
- SLOMPO, P. H. S.; PINTO, M. A. V.; OLIVEIRA, M. L. Comparison between Van Genuchten and Brooks-Corey parameterizations in the solution of multiphase problems in rigid one-dimensional porous media. *Journal of Computational and Theoretical Transport*, v. 52, n. 6, p. 429–451, 2023. Citado na página 31.
- SZABÓ, B.; BABUSKA, I. *Finite element analysis*. New York: Wiley & Sons, 1991. Citado na página 42.
- TANNEHILL, J. C.; ANDERSON, D. A.; PLETCHER, R. H. *Computational Fluid Mechanics and Heat Transfer*. 2nd. ed. Washington: Taylor & Francis, 1997. Citado na página 36.
- THOMPSON, E. *Introduction to the Finite Element Method: Theory, Programming and Applications*. [S.l.]: Wiley, 2005. Citado na página 33.
- THORPE, G. R. *The Mechanics and Physics of Modern Grain Aeration Management*. Boca Raton: CRC Press, 2001. Citado na página 23.
- TROTTEBERG, U.; OOSTERLEE, C.; SCHÜLLER, A. *Multigrid*. San Diego: Academic Press, 2001. Citado 3 vezes nas páginas 18, 39 e 40.
- WESSELING, P. *An Introduction to Multigrid Methods*. Chichester: John Wiley & Sons, 1992. Citado 3 vezes nas páginas 18, 39 e 40.

- WOODRUFF, M. A.; HUTMACHER, D. W. The return of a forgotten polymer—Polycaprolactone in the 21st century. *Progress in Polymer Science*, v. 35(10), p. 1217–1256, 2010. Citado na página 25.
- YILDIZ, T.; KAZEMI, H. *Fundamentals of Enhanced Oil Recovery*. [S.l.]: John Wiley & Sons, 2016. Citado na página 17.
- YU, C. *et al. Data Collection Handbook to Support Modeling Impacts of Radioactive Material in Soil and Building Structures*. [S.l.: s.n.], 2015. Citado na página 27.
- ZHANG, F.; PARKER, J. Contaminant transport in fractured porous media: analytical solutions for a system of parallel fractures. *Water Resources Research*, v. 30(7), p. 2115–2128, 1994. Citado na página 17.
- ZHU, J. Z.; ZIENKIEWICZ, O. C. Superconvergence recovery technique and a *posteriori* error estimators. *Int. J. Numer. Meth. Engng.*, v. 30, p. 1321–1339, 1990. Citado na página 50.
- ZHU, W.; LURA, P.; WEISS, J. Porous cement concrete: history and applications. *Cement and Concrete Research*, v. 54, p. 54–65, 2014. Citado na página 26.

APÊNDICE A – ARTIGO XLI CILAMCE

Solving one-dimensional two-phase flow problems in rigid porous media using L -scheme

Marcelo H. Sabatini^{1,2}, Marcio A. V. Pinto³, Michely L. Oliveira², Sebastião R. Franco⁴

¹*Department of Mathematics, State University of Centro-Oeste
Alameda Élio Antonio Dalla Vecchia, 838, Vila Carli, 85040-167, Guarapuava, Paraná, Brazil*

²*Graduate Program in Numerical Methods in Engineering, Federal University of Paraná
Centro Politécnico, Jardim das Américas, 81531-980, Curitiba, Paraná, Brazil
msabatini@unicentro.br, michely-lais@hotmail.com*

³*Department of Mechanical Engineering, Federal University of Paraná
Bloco IV do Setor de Tecnologia, Centro Politécnico, Jardim das Américas, 81531-980, Curitiba, Paraná, Brazil
marcio_villela@ufpr.br*

⁴*Department of Mathematics, State University of Centro-Oeste
Rua Professora Maria Roza Zanon de Almeida, 84505-677, Irati, Paraná, Brazil
romero@unicentro.br*

Abstract. This work aims to obtain the numerical solution for one-dimensional two-phase flow in rigid porous media. The mathematical model for the problem consists of a system of partial differential equations with a set of algebraic relations using the pressure-pressure formulation based on L -scheme linearization. The finite volume method (FVM) is used to discretize the system of partial differential equations in a uniform grid. The spatial approximation is obtained by the second-order scheme (CDS) and the temporal approximation by the implicit Euler method. Dirichlet boundary conditions are applied. Iterative methods are used to solve the resulting system of algebraic equations. A study on L -scheme was carried out to establish a rule and value of L that guarantees the convergence of this linearization method. The results obtained for the numerical problem are compared with those of a problem with the same characteristics in the literature that uses the pressure-saturation formulation.

Keywords: Finite volumes, L -scheme, Coupled system, Non-linear problem

1 Introduction

Numerical simulations of flows in porous media are famous Engineering problems. Many have been investigated, for instance, in the extraction of oil and natural gas, Hydrology, soil and rock mechanics. In this sense, it is important to understand the flow of fluids in porous media by means of a mathematical model. There are several numerical formulations in the literature to obtain the solution of two-phase flow in rigid porous media based on the pressure-saturation formulation, Bastian [1], Illiano [2], Celia and Binning [3]. However, in this work we use the pressure-pressure formulation, Ataie-Ashtiani and Raeesi-Ardekani [4], Celia and Binning [3], thus the variables of interest are the pressures in each of the two phases. Since the system is non-linear, we used the L -scheme linearization method, and posteriorly, we use the coupled Gauss-Seidel method, Gaspar et al. [5], to solve each system that resulted from the linearization. The goals of this work is to study the pressure-pressure formulation, in order to compare its performance with pressure-saturation formulation and study the L -scheme method.

2 Mathematical and numerical models

The governing equations of two-phase flow in rigid porous media are modeled by a system of differential partial equations that can be written as

$$\frac{\partial(\rho_\alpha \theta_\alpha)}{\partial t} + \nabla \cdot (\rho_\alpha \mathbf{q}_\alpha) = F_\alpha, \quad \text{in } \Omega \times \mathcal{T}, \quad (1)$$

where $\Omega \subset \mathbb{R}^+$, $\mathcal{T} = (0, T)$ is a given interval of time, with T being the final time and $\alpha = w, n$ are the phases of the fluid (w is the wetting and n is the non-wetting). We also have that ρ_α is the density, $\theta_\alpha = \phi S_\alpha$ where ϕ is the porosity and S_α is the saturation, \mathbf{q}_α is the vector of the volumetric flow and F_α is the source term, all from phase α . The volumetric flow is given by Darcy's law adapted for multiphase, which is written as

$$\mathbf{q}_\alpha = -\frac{k_{r\alpha}}{\mu_\alpha} \mathbf{K}(\nabla p_\alpha - \rho_\alpha \mathbf{g}), \quad (2)$$

where \mathbf{K} is the intrinsic permeability tensor, $k_{r\alpha}$ is the relative permeability in the porous media, which is considered as a function of saturation S_α , p_α is the pressure, μ_α is the viscosity, all from phase α and \mathbf{g} is the vector of gravitational acceleration. The quantity $\lambda_\alpha = \frac{k_{r\alpha}}{\mu_\alpha}$ is called mobility, that is, the ratio of relative permeability function to the phase viscosity, Bastian [1]. The system of equations given by eq. (1) and eq. (2) is complemented by the algebraic relations $S_w + S_n = 1$ and $p_n - p_w = p_c$. These relations imply that the sum of the saturation of the phases must be equal to 1 and that the capillary pressure p_c is defined as the difference between the pressures p_n and p_w . Additionally, from the relation $S_w + S_n = 1$ we have that $\theta_w + \theta_n = \phi$.

Considering an incompressible fluid and disregarding gravity, the system of equations can be simplified as

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

Our physical domain will be a segment of length L and parallel to the x axis. The governing equations are subject to the Dirichlet type boundary condition, thus $p_\alpha(0, t)$ and $p_\alpha(L, t)$, $t > 0$, are prescribed value, where L represents the domain size. To complete the mathematical formulation, an initial condition must also be given, thus $p_\alpha(x, 0) = p_\alpha^0$ where p_α^0 is a prescribed value of the variable pressure. We discretized the spatial domain using the finite volume method (FVM), Maliska [6], Ferziger and Perić [7] and central difference scheme (CDS), Fortuna [8]. For the temporal discretization, we used the implicit Euler method, Fortuna [8], Burden and Faires [9]. We denoted n as the time level, m as the number of iterations, $\tau = \frac{T}{N_t}$ where N_t is the number of time steps, and $h = \frac{L}{N_x}$ where L represents the domain size and N_x is the number of volumes in the space. With the temporal discretization, in the wetting phase, eq. (3) can be written as

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

and in the non-wetting phase as

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

where $C_w^{n+1,m} = \frac{\partial \theta_w}{\partial p_c}$, $K_\alpha^{n+1,m} = \mathbf{K} \frac{k_{r\alpha}}{\mu_\alpha}$ and $\delta p_\alpha^{n+1,m+1} = p_\alpha^{n+1,m+1} - p_\alpha^{n+1,m}$.

Considering a uniform grid, we obtain the following system of equations after the spatial discretization

$$(a_w)_i [\delta p_w^{n+1,m+1}]_i + (a_w)_{i+1} [\delta p_w^{n+1,m+1}]_{i+1} + (a_w)_{i-1} [\delta p_w^{n+1,m+1}]_{i-1} + b_i [\delta p_n^{n+1,m+1}]_i = (F_w)_i, \quad (6)$$

$$(a_n)_i [\delta p_n^{n+1,m+1}]_i + (a_n)_{i+1} [\delta p_n^{n+1,m+1}]_{i+1} + (a_n)_{i-1} [\delta p_n^{n+1,m+1}]_{i-1} + b_i [\delta p_w^{n+1,m+1}]_i = (F_n)_i, \quad (7)$$

where

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

We used L -scheme in the numerical experiments. This linearization defines that $L \geq |C_w|$, Illiano [2], Radu et al. [10]. The linear system resulting from the linearization of the equations above is solved by the coupled Gauss-Seidel method, Gaspar et al. [5].

3 Numerical results

3.1 Code verification

For our tests, we used the problem proposed by Illiano [2]. In that work, Illiano considers the pressure-saturation formulation \bar{p} - S_w , where $\bar{p} = \frac{p_w+p_n}{2}$ and proposes the analytical solution $f(x, t) = \bar{p}(x, t) = S_w(x, t) = xt(1-x)$ defined in the domain $D = [0, 1] \times [0, 1]$, with initial and boundary conditions $f(x, 0) = f(0, t) = f(1, t) = 0$.

In this current work, we used the pressure-pressure formulation p_w - p_n , thus, it was necessary to make adjustments to use p_w and p_n instead of \bar{p} . By using the definitions of capillary pressure $p_c = p_w - p_n$ and \bar{p} we obtain $p_w = \bar{p} - \frac{1}{2}p_c$, $p_n = \bar{p} + \frac{1}{2}p_c$, where $p_c(S_w) = 1 - \frac{1}{2}S_w^2$. Since $\theta_\alpha = \phi S_\alpha$, we have that $\theta_w = \phi\sqrt{2-2p_c}$ and $\theta_n = \phi - \theta_w$, implying that $C_w = \frac{\partial\theta_w}{\partial p_c} = -\frac{\phi}{\sqrt{2-2p_c}}$, $p_c \neq 1$. These expressions are used to find the source terms

$$F_w = -\frac{1}{2}\rho_w[2\phi(x-1)x + K\lambda_w t(6tx^2 - 6tx + t - 4)], \quad (8)$$

$$F_n = \frac{1}{2}\rho_n[2\phi(x-1)x + K\lambda_n t(6tx^2 - 6tx + t - 4)]. \quad (9)$$

To verify our results, we compared our solutions with the results obtained by Illiano [2] for the saturation S_w . In this verification, data from Table 1 was used. According to Illiano this data was used to obtain easier computations and can be unrealistic but that is not our concern, since we are trying to verify that our code works, thus we are not interested in a simulation of a realistic physical problem.

Figure 1 and Fig. 2 confirm that the results found are in accordance with those presented by Illiano [2].

Table 1. Data used in the verification

λ_w	λ_n	K	ϕ	ρ_w	ρ_n
1	2	1	1	1	2

3.2 Analysis of the L -scheme

A study on the L -scheme was carried out using the problem from the previous section in order to establish a suitable rule and values of L that help the convergence of this linearization method. In Fig. 3 and Fig. 4, $N_x = 10$

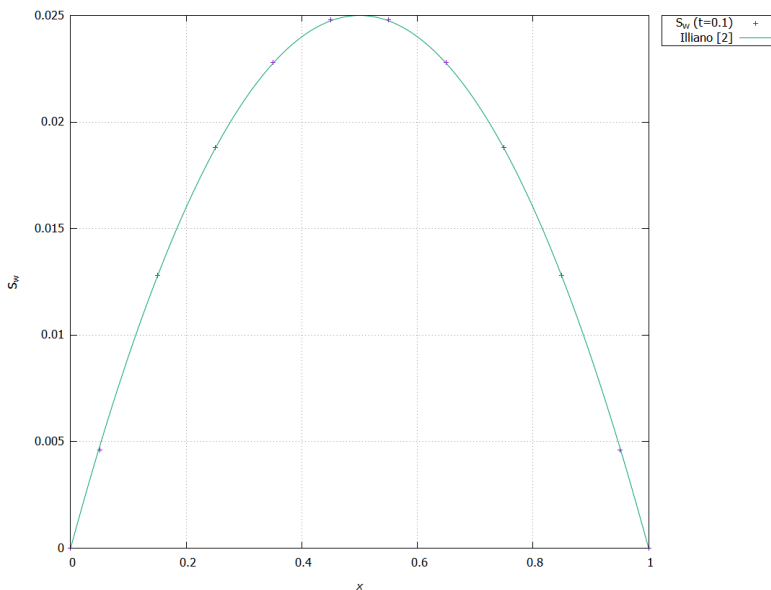


Figure 1. Numerical and analytical solution for saturation for $\tau = h = 0.1$

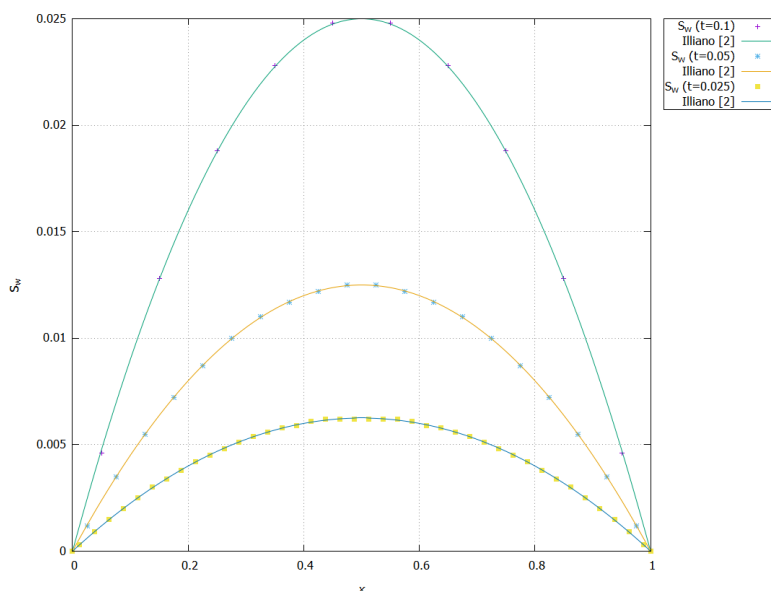


Figure 2. Numerical and analytical solution for saturation for $\tau = h = 0.025$

and $N_x = 20$ respectively, we have $|C_w|$ versus x , where $C_w = \frac{\partial \theta_w}{\partial p_c}$. Data from Table 1 was also used in this verification. It is possible to notice that the maximum value of the derivatives $|C_w|$ is at the first time step ($n_t = 1$) and at the first spatial volume. For this reason, we made a geometric adjustment using the set of data from Table 2, which are values of $\max|C_w|$ located at the first spatial volume at the first time step as a function of the number of volumes N_x in the grid. Table 2 shows the data to be adjusted.

The best-fitting curve to data was $y(N_x) = 2.3314(N_x)^{1.9658}$ (see Fig. 5). By using a different value of N_x we can predict the $\max|C_w|$ and therefore, find the value of L to be used in the linearization scheme. For example, for $N_x = 30$, we obtain $y(30) = 1867.84$. We can affirm that this rule is robust as it meets the convergence criterion of the L -scheme, Illiano [2], Radu et al. [10]. Further studies are needed in order to make the rule more efficient.

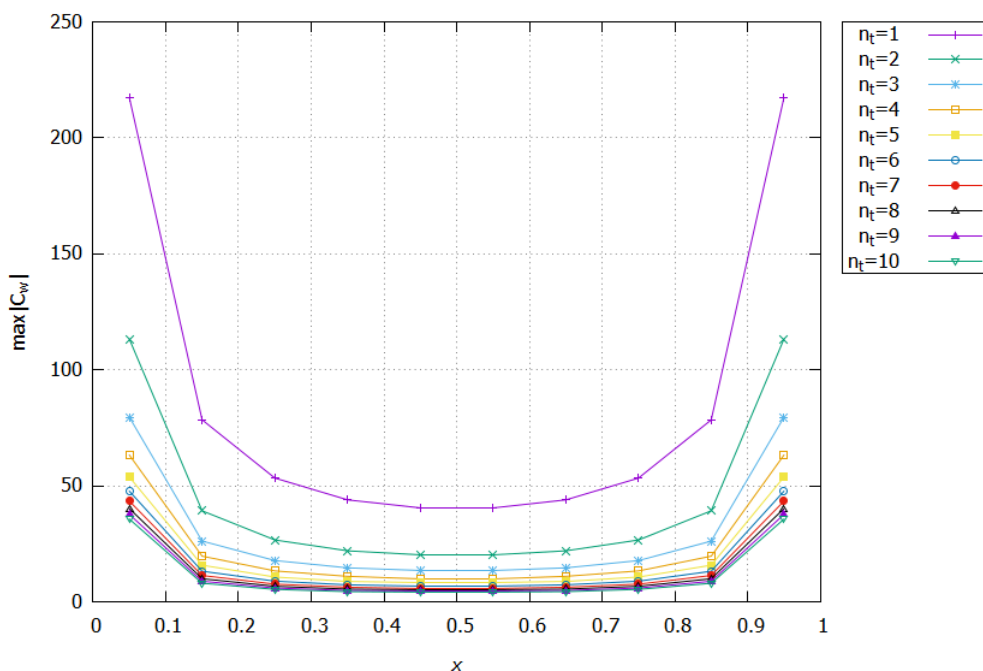


Figure 3. Maximum value of the derivatives $|C_w|$ with $N_x = N_t = 10$ at each time step n_t

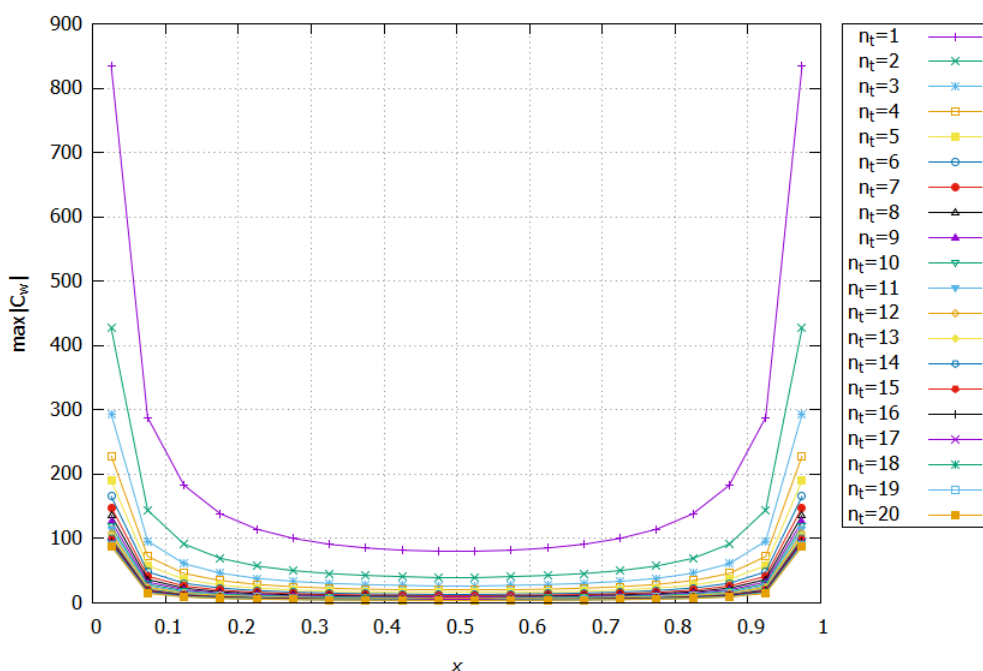


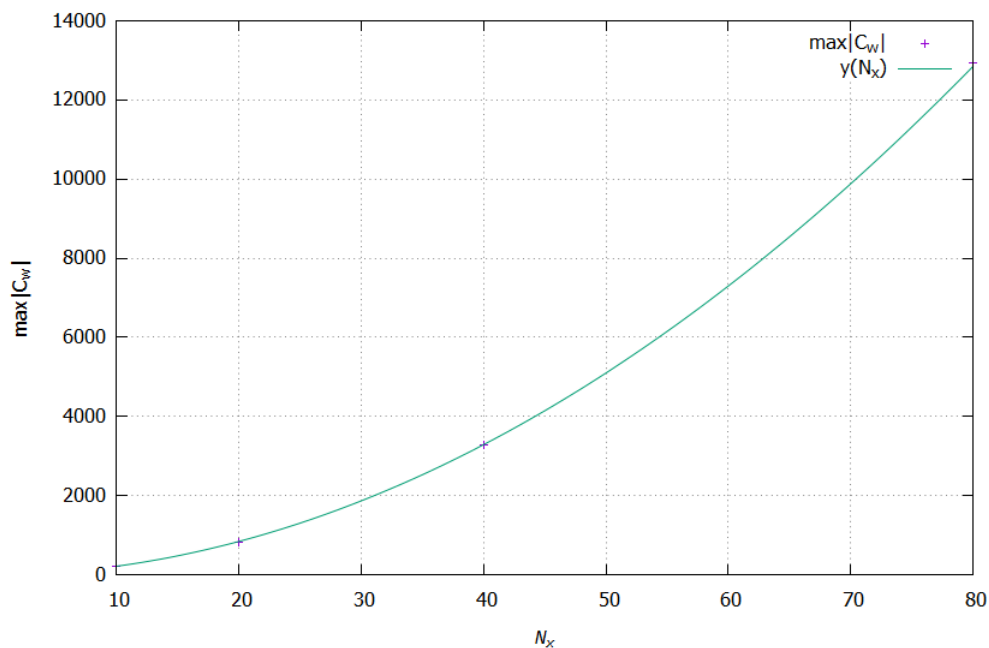
Figure 4. Maximum value of the derivatives $|C_w|$ with $N_x = N_t = 20$ at each time step n_t

Based on the information in Fig. 3 and Fig. 4, we can create a new rule by establishing a vector of the values of \mathbf{L} where each L_i is the $\max|C_w|$ at the time step n_{t_i} . Thus, we will have a vector with the values $\mathbf{L} = (L_1, L_2, \dots, L_{N_t})$, where N_t is the total number of time steps. For example, for the grid size $N_x = 10$, this vector would be $\mathbf{L} = (217.22; 113.20; 79.51; 63.22; 53.77; 47.64; 43.35; 40.16; 37.66; 35.62)$. One can notice that the components of this vector have an asymptotic behavior, starting at a large value of L , to posteriorly decrease and tend to a certain value (this behavior is also seen at the first volume in Fig. 3). For this reason, we will use the value of $\max|C_w|$ at each time step, which is the value $\max|C_w|$ computed at the first spatial volume.

Table 3 shows the column $itmed_L$ (Adjusted), which displays the average number of linearizations, con-

Table 2. $\max|C_w|$ at the first spatial volume at the first time step as a function of N_x

N_x	$\max C_w $
10	217.22
20	833.98
40	3267.35
80	12934.04

Figure 5. Maximum value of the derivatives $|C_w|$

sidering every time step and using the geometrical adjustment of the data from Table 2. Column $itmed_L(\mathbf{L})$ is also shown, displaying the average number of linearizations achieved by using the \mathbf{L} vector. The table highlights that the method proposed by the new rule to choose L (by using \mathbf{L}) noticeably reduces the average number of linearizations performed, thus proven to be more efficient.

Table 3. Average number of linearization according to the rules proposed

N_x	$itmed_L$ (Adjusted)	$itmed_L(\mathbf{L})$
10	195.10	80.90
20	610.96	178.05
40	1936.65	392.65
80	5974.46	1169.72

4 Conclusions

Numerical simulations of flows in porous media have been investigated. In this sense, it is important to understand the flow of fluids in porous media by means of a mathematical model. This work presented a model for

the simulation of two-phase flow in rigid porous media that uses the L -scheme for linearization and the pressure-pressure formulation. The results our code achieved were verified and are in accordance with those proposed by Illiano [2]. After the verifying the code we carried out a study on L -scheme showing how to choose a value of L . A new way to choose a suitable value of L that is more efficient and guarantees the convergence of the method was also proposed.

Acknowledgments. The first author is grateful to the State University of the Centro-Oeste (UNICENTRO) for being granted leave from teaching in order to focus on the PhD graduation. The authors also thank the Graduate Program in Numerical Methods in Engineering of the Federal University of Paraná (UFPR).

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

References

- [1] Bastian, P., 1999. *Numerical computation of multiphase flows in porous media*. PhD thesis, Kiel University, Kiel, Germany.
- [2] Illiano, D., 2016. Iterative schemes for solving coupled, non-linear flow and transport in porous media. Master thesis, University of Bergen, Bergen, Norway.
- [3] Celia, M. A. & Binning, P., 1992. A mass conservative numerical solution for two-phase flow in porous media with application to unsaturated flow. *Water Resources Research*, vol. 28(10), pp. 2819–2828.
- [4] Ataie-Ashtiani, B. & Raeesi-Ardekani, D., 2010. Comparison of numerical formulations for two-phase flow in porous media. *Geotechnical and Geological Engineering*, vol. 28(4), pp. 373–389.
- [5] Gaspar, F. J., Lisbona, F. J., Oosterlee, C. W., & Wienands, R., 2004. A systematic comparison of coupled and distributive smoothing in multigrid for the poroelasticity system. *Numer. Linear Algebra Appl.*, vol. 11(2-3), pp. 93–113.
- [6] Maliska, C. R., 2004. *Computational heat transfer and fluid mechanics (in portuguese)*. Rio de Janeiro: LTC.
- [7] Ferziger, J. H. & Perić, M., 2002. *Computational Methods for Fluid Dynamics*. New York: Springer.
- [8] Fortuna, A. O., 2012. *Computational techniques for fluid dynamics: Basic concepts and applications (in portuguese)*. Academic Collection. São Paulo: EDUSP.
- [9] Burden, R. L. & Faires, J. D., 2010. *Numerical Analysis*. Boston: Brooks/Cole.
- [10] Radu, F. A., Kumar, K., Nordbotten, J. M., & Pop, I. S., 2017. A robust, mass conservative scheme for two-phase flow in porous media including hölder continuous nonlinearities. *IMA Journal of Numerical Analysis*, vol. 38(2), pp. 884–920.