

INSTITUTO NACIONAL DE MATEMÁTICA PURA E APLICADA

ESQUEMAS NUMÉRICOS PARA FILTRAÇÃO EM MEIOS POROSOS

Autor: Julio Daniel Machado Silva

Orientador: Dan Marchesin

2007



Ministério
da Ciência
e Tecnologia



Resumo

O processo de recuperação de petróleo atravessa diferentes etapas, ao longo da vida útil de um reservatório. Por breve fração deste tempo a pressão natural do óleo comprimido, sob as camadas superiores de rocha da crosta terrestre, é suficiente para expelir o óleo em produção. Contudo, a maior parte da produção se dá pela injeção de água no poço, para que esta force o óleo a ser expelido por outro poço. A razão entre o fluxo injetado e a pressão necessária para manter este fluxo chamamos *injetividade*. A perda de injetividade pela deposição de partículas trazidas pela água no meio poroso onde reside o óleo chamamos *dano de formação por filtração profunda*. Grande é o interesse em simular numericamente a perda de injetividade seja para poder minimizá-la ou, pelo menos, determinar o momento em que medidas devem ser tomadas para remediar esta perda, bastante caras. O modelo para esta perda de permeabilidade do meio poroso é um sistema de equações diferenciais parciais de convecção e reação. Propomos para uma das variantes do modelo de filtração profunda um método numérico implícito que é incondicionalmente estável. Isto posto ressaltamos que todos os métodos numéricos propostos anteriormente, em nosso conhecimento, sofrem de severas restrições de CFL. Deduzimos uma solução explícita particular que utilizamos para validar o método numérico proposto para o problema.

Sumário

1	Introdução.	3
2	Modelo contínuo unidimensional	6
2.1	Condições iniciais e de contorno.	8
3	Solução explícita particular.	9
3.1	Normalização da escala.	10
3.2	Limitação de c e σ	10
3.3	Solução explícita.	11
3.4	O método de energia.	13
4	Esquema box unidimensional.	16
4.1	Esquema box.	17
4.2	Discretização na fronteira.	19
4.3	Estabilidade do esquema box.	20
5	Problema radial.	24
5.1	Esquema box em simetria radial.	25
5.2	Condição de fronteira para o esquema box radial.	26
5.3	Verificação numérica da modelagem radial.	27
6	Conclusão.	32
	Referências Bibliográficas.	34
A	Verificação da solução explícita.	36

B	Esquema trapezoidal unidimensional.	38
B.1	Discretização trapezoidal.	38
B.1.1	Ordem de precisão.	39
B.2	Comparação entre os esquemas.	40
C	Inaplicabilidade do esquema trapezoidal.	44
C.1	Limitação dos autovalores.	46
C.2	Limitação das normas.	47

Capítulo 1

Introdução.

Reservatórios de petróleo atravessam diferentes estágios de produção em sua vida útil. A recuperação primária de óleo se dá sob pressão natural do reservatório — responsável por expelir inicialmente o óleo de um poço em produção. Durante a recuperação secundária de óleo, água é injetada dentro do reservatório para empurrar o óleo através de outro poço. Esta última é empregada durante a maior parte da vida útil de um reservatório, sendo portanto responsável pela maior parte do óleo produzido, mundialmente. A eficiência de um “poço de injeção” é medida em termos de sua *injetividade*: a razão entre o fluxo injetado e a pressão necessária para manter este fluxo. O fluxo injetado é proporcional à razão de recuperação e a pressão de injeção representa custo operacional.

Poços marítimos usualmente utilizam água do mar para injeção. Esta água contém partículas suspensas, tanto minerais quanto orgânicas, além de um incontável espectro de agentes poluentes. Naturalmente, o uso desta água causa uma queda na injetividade do poço, uma vez que o meio poroso age como um filtro retendo estas impurezas. A captura de partículas suspensas dentro do meio poroso e a conseqüente perda de permeabilidade caracteriza o fenômeno conhecido como *dano de formação por filtração profunda*. A experiência mostra que outro fenômeno acontece na superfície de injeção do meio poroso, este chamado *formação de “cake”*. O “*cake*” é um aglomerado de partículas no exterior do meio poroso, e assim distinto da *filtração profunda*. Ele também causa perda de injetividade, como é de se esperar, mas será ignorado por estar fora do escopo da dissertação.

A modelagem desta perda de injetividade depende de determinação de funções empíricas, como a função de filtração que fornece a taxa de deposição de partículas por unidade de tempo. Trabalhos como [1] e [4] descrevem métodos para determinar esta função através da solução

de um problema inverso. Também [2] faz uso da solução de um problema inverso para obter a função redução de permeabilidade. Contudo o custo de resolver problemas inversos é alto, pois trata-se da resolução de algum problema direto repetidas vezes. Isto motiva a busca por métodos diretos precisos e eficientes para o problema. Em [6], Fasano já observa que o problema da modelagem da filtração em meios porosos alcançou solidez. São escassos, porém, métodos numéricos de boa qualidade para modelagem de filtração.

O objetivo deste trabalho é a determinação de um esquema numérico preciso, eficiente e estável para uma versão particular do problema de filtração, a versão proposta por Herzig *et alii* em [7]. Nas escalas espaciais e temporais de interesse em filtração profunda, uma das velocidades características é zero enquanto a outra é muito grande (transporte). A simplificação proposta por Herzig *et alii* torna esta segunda velocidade característica infinita. Paradoxalmente, graças a esta simplificação conseguimos desenvolver um método implícito incondicionalmente estável de alta precisão, o que não foi conseguido até então para o problema completo de filtração profunda.

Para a prova de estabilidade, seguimos a metodologia de [12] onde a estabilidade forte do esquema é demonstrada através do método de energia. Desenvolvemos então esta metodologia para a versão linearizada do esquema a ser provado estável. Isto já motiva *per se* o emprego do mesmo a problemas não lineares de interesse.

Não obstante a necessidade de simular dados de laboratório, para experimentos em campo é primordial dispor de uma discretização de geometria radial cilíndrica. Neste sentido, desenvolvemos uma versão radial do método numérico de diferenças finitas e exibimos evidências numéricas de estabilidade.

Os resultados básicos da teoria geral são encontrados em [10], [9] e [15]. O desenvolvimento e uso do método de energia pode ser encontrado em [16].

O texto conta com uma introdução ao problema físico no capítulo 2, onde são apresentadas as equações do modelo contínuo. No capítulo 3 encontramos uma solução exata para uma versão linearizada do problema físico, que posteriormente é usada para validar os esquemas numéricos. Neste também discorremos sobre o método da energia, onde mostramos uma “energia” da solução associada ao modelo tem crescimento limitado. Este é o passo fundamental para a demonstração da estabilidade do esquema box no capítulo 4. Nele definimos o esquema box, junto a apropriadas condições de fronteira. No capítulo 5 discorremos sobre o problema para fluxos cilíndricos, onde propomos uma discretização baseada no esquema box para coordenadas cilíndricas e avaliamos seu desempenho. A dissertação conta ainda de três apêndices onde o

primeiro, apêndice A, contém a verificação do solução explícita obtida. O apêndice B contém o esquema trapezoidal, um esquema semelhante ao esquema box, contudo mais simples, que já foi usado com sucesso [5] em um caso particular de estabilidade (a saber $\alpha = 0$) embora seja instável para uma larga faixa de CFL – fato verificado no apêndice C.

Capítulo 2

Modelo contínuo unidimensional

Usamos um modelo físico baseado em [7], para o fenômeno chamado *dano de formação por filtração profunda*. Tais modelos tem por objetivo prever o perfil de deposição $\sigma(x, t)$ ao longo da rocha porosa, onde σ é fração de volume que está preenchido por partículas retidas. De forma semelhante o modelo prevê o perfil ocupado por partículas suspensas $c(x, t)$.

Escrevemos a lei de conservação de massa:

$$\frac{\partial}{\partial t} (\phi c + \sigma) + \frac{\partial}{\partial x} cu = 0, \quad (2.1)$$

onde

- ϕ é a porosidade da rocha, a qual supomos uniforme;
- $\sigma(x, t)$ e $c(x, t)$ são as concentrações (massa por unidade de volume) de partículas presas nos poros da rocha e suspensas na fase líquida, respectivamente;
- L é o comprimento da amostra de rocha;
- $0 \leq x \leq L$ é a posição ao longo da amostra de rocha, desde a posição de injeção;
- $t \geq 0$ é o tempo gasto desde o início da injeção;
- u é a taxa de escoamento do fluxo; em uma dimensão a incompressibilidade do fluxo permite-nos supô-la independente de x e positiva, de modo que ela se torna igual à taxa de injeção de fluido, que frequentemente é constante, e por isto será tomada constante neste trabalho.

A lei para a taxa de deposição de partículas é

$$\frac{\partial \sigma}{\partial t} = \widehat{\Lambda}(\sigma, c)u. \quad (2.2)$$

As quantidades σ e c tem valores entre 0 e 1. Usualmente $c \cong 10^{-4}$, enquanto σ cresce a valores da ordem de 10^{-2} , i.e., exceto para tempos iniciais, temos que c e $\frac{\partial c}{\partial t}$ são muito menores que σ e $\frac{\partial \sigma}{\partial t}$, respectivamente. Por causa deste fato, uma equação simplificada de conservação de massa foi proposta por Herzig *et alii* em [7]:

$$\frac{\partial \sigma}{\partial t} + u \frac{\partial c}{\partial x} = 0. \quad (2.3)$$

A equação simplificada (2.3) é apropriada para nossos propósitos uma vez que, normalmente, medidas experimentais nos tempos iniciais são pouco precisas. De fato, em tempos pequenos tanto σ como c são tão pequenos que erros experimentais predominam nos dados medidos, considerando o atual estado da arte das técnicas de medida.

O elemento chave deste modelo é a *função de filtração*, obtida de modo empírico, denotada $\widehat{\Lambda}(\sigma, c)$ e que não pode ser medida diretamente. Deste modo, e uma vez que não é possível determinar a *função de filtração* por qualquer princípio físico, as equações (2.3) e (2.2) tem natureza heurística. Uma observação importante: no caso de $\widehat{\Lambda}$ não tender rapidamente a zero, com o tempo, a equação (2.2) diz que σ cresce indefinidamente, em contradição à física do problema. Deste modo o modelo (2.1) e (2.2) não pode valer para tempos arbitrariamente grandes.

Herzig *et alii* requerem que a *função de filtração* seja não negativa, o que exclui a possibilidade de partículas depositadas voltarem a suspensão i.e., a deposição de partículas é irreversível. Deste princípio, temos que

$$\widehat{\Lambda}(\sigma, 0) \equiv 0. \quad (2.4)$$

Se supusermos $\widehat{\Lambda}$ real e analítica e considerarmos sua expansão em série de potências em termos de c e σ em torno da origem, (2.4) diz que $\widehat{\Lambda}(\sigma, c)$ pode ser escrita como $\widetilde{\Lambda}(\sigma, c)c$. Como já foi citado anteriormente, este modelo deixa de valer para σ grande, e por isso estamos interessados na simulação para tempos grandes, contudo cotados, e qualquer L inclusive $L = \infty$.

Por simplicidade tornamos o domínio físico adimensional pelas mudanças de variáveis

$$X = \frac{x}{L}, \quad T = \frac{u}{L}t, \quad \text{e} \quad \Lambda = L\widehat{\Lambda}, \quad (2.5)$$

onde X está restrito ao intervalo $[0, 1]$; uma unidade da variável “tempo adimensional” T é tempo necessário para injetar um volume de fluido correspondente ao volume da amostra, de

onde vem o termo “*volume injected*” (VI). No caso geral, onde u é não constante em t , a (2.5(b)) é substituída por

$$\frac{dT}{dt} = \frac{u(t)}{L}, \quad T = 0, \text{ para } t = 0.$$

Aqui, consideramos apenas o caso particular (2.5). Removemos os tils e chapéus nesta forma adimensional e, ainda sem prejudicar a coerência da notação, retornamos às letras “ t ” e “ x ” para o tempo e a posição adimensionais.

Escrevemos o sistema (2.3) e (2.2) nas novas variáveis simplesmente como

$$\begin{cases} \frac{\partial \sigma}{\partial t} = \Lambda(\sigma, c) & \text{(a);} \\ \frac{\partial c}{\partial x} = -\Lambda(\sigma, c) & \text{(b).} \end{cases} \quad (2.6)$$

Analizando (2.6) vemos que as velocidades características associadas ao sistema são zero ao longo das retas verticais e ∞ ao longo das retas horizontais. Isto vem imediatamente se nós tomarmos $\varepsilon, \eta > 0$ e reescrevermos (2.6) como

$$\begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & \varepsilon \end{pmatrix} \frac{\partial}{\partial t} \begin{pmatrix} \sigma \\ c \end{pmatrix} + \begin{pmatrix} \eta & 0 \\ 0 & 1 \end{pmatrix} \frac{\partial}{\partial x} \begin{pmatrix} \sigma \\ c \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} +1 \\ -1 \end{pmatrix} \Lambda(\sigma, c), \quad (2.7)$$

tendo assim para a primeira característica $(dx, dt) = (\eta, 1)$ com velocidade η , e para a segunda $(dx, dt) = (1, \varepsilon)$ com velocidade $\frac{1}{\varepsilon}$. O resultado segue imediatamente fazendo $\varepsilon, \eta \rightarrow 0$.

2.1 Condições iniciais e de contorno.

Como dado inicial, supomos que a rocha seja desprovida de partículas depositadas:

$$t = 0 : \quad \sigma \equiv 0 \quad \text{quando} \quad x \in [0, 1] \text{ ou } x \in [0, \infty). \quad (2.8)$$

Escreveremos a concentração de partículas sólidas que entram no meio poroso como

$$c(0, t) = c_0(t) \geq 0, \quad c_0(t) \leq C_0, \quad (2.9)$$

onde C_0 é uma constante positiva.

Na ausência de formação de “cake” c_0 é a concentração volumétrica de partículas sólidas na injeção de fluido; na presença de “cake”, é a concentração que realmente penetra no meio poroso após sofrer alguma retenção na camada do “cake”.

Capítulo 3

Solução explícita particular.

Para verificarmos propriedades de esquemas numéricos é muito útil dispor de uma solução explícita, mesmo que para um caso particular. Nesta direção, desenvolveremos nesta seção tal solução.

Tendo em vista que o problema (2.6) é por demais geral propomos a linearização

$$\Lambda(\sigma, c) = \Lambda(0, 0) + \frac{\partial}{\partial \sigma} \Lambda(0, 0) \sigma + \frac{\partial}{\partial c} \Lambda(0, 0) c + \mathcal{O}((\sigma, c)^2), \quad (3.1)$$

onde o termo de segunda ordem é desprezado.

Repare que pela (2.4) o termo constante é zero. Fisicamente, espera-se que a deposição aumente com a presença de partículas em suspensão, o que nos leva a $\beta = \frac{\partial}{\partial c} \Lambda(0, 0) > 0$. Da mesma forma, espera-se que a deposição diminua com o entupimento do meio poroso, o que nos leva a escrever $-\alpha = \frac{\partial}{\partial \sigma} \Lambda(0, 0) \leq 0$. Trataremos apenas do caso $\alpha > 0$, pois o caso $\alpha = 0$ se reduz a duas EDO's cuja solução é simples, bem como o processo de discretização para as mesmas. A solução de um problema semelhante que contém este caso como limite pode ser encontrada em [3].

Prosseguimos, então, com o problema

$$\begin{cases} \frac{\partial \sigma}{\partial t} = \beta c - \alpha \sigma & \text{(a);} \\ \frac{\partial c}{\partial x} = \alpha \sigma - \beta c & \text{(b),} \end{cases} \quad (3.2)$$

definido no subconjunto $\Omega = \{(x, t) \in \mathbb{R}^2 \mid x \geq 0, t \geq 0\}$ do \mathbb{R}^2 onde c é continuamente diferenciável no interior de Ω e se estende continuamente junto com sua derivada $\frac{\partial c}{\partial x}$ até o eixo Ot , enquanto σ é continuamente diferenciável e se estende continuamente junto com sua

derivada $\frac{\partial \sigma}{\partial t}$ até o eixo Ox . A condição inicial (2.8) e de fronteira (2.9) se aplicam e na última fazemos $L = \infty$, onde os casos $L < \infty$ serão tratados como a restrição desta ao intervalo $[0, L]$.

3.1 Normalização da escala.

A despeito do interesse físico que motiva a existência das constantes α e β , definidas na seção anterior, do ponto de vista matemático elas não desempenham nenhum papel fundamental. Faremos, portanto, uso da grande simetria do sistema (3.6) para simplificar esta notação, removendo tais constantes. Para $\alpha, \beta > 0$, propomos a mudança de coordenadas:

$$\tilde{x} = \beta x, \quad \tilde{t} = \alpha t, \quad (3.3)$$

a qual nos permite escrever imediatamente:

$$\frac{\partial c}{\partial \tilde{x}} = \frac{\partial c}{\partial x} \frac{\partial x}{\partial \tilde{x}} + \frac{\partial c}{\partial t} \frac{\partial t}{\partial \tilde{x}} = \frac{1}{\beta} \frac{\partial c}{\partial x} \Rightarrow \frac{\partial c}{\partial x} = \frac{\partial(\beta c)}{\partial \tilde{x}}; \quad (3.4)$$

e a análoga para σ . Introduzindo as concentrações normalizadas:

$$\tilde{c} = \beta c, \quad \tilde{\sigma} = \alpha \sigma, \quad (3.5)$$

podemos reescrever o sistema (3.2) de forma independente de α e β :

$$\left\{ \begin{array}{l} \frac{\partial \sigma}{\partial t} = c - \sigma \quad (\text{a}); \\ \frac{\partial c}{\partial x} = \sigma - c \quad (\text{b}), \end{array} \right. \quad (3.6)$$

onde já foram removidos os tils correspondentes às mudanças na notação.

3.2 Limitação de c e σ .

Grande parte do que segue depende não somente da regularidade das funções c e σ , mas também da natureza de seu crescimento para $t > 0$. Este fator é crucial para o desenvolvimento das transformações integrais empregadas para achar a solução. Supomos que c, σ sejam de ordem exponencial na segunda variável, *i.e.*:

$$\exists \xi > 0 \text{ tal que para qualquer } \psi > \xi \Rightarrow \lim_{t \rightarrow \infty} e^{-\psi t} c(x, t) \leq \lim_{t \rightarrow \infty} e^{-(\psi - \xi)t} = 0, \quad (3.7)$$

para todo x fixo. Para σ vale o mesmo: encontramos um novo ξ com tais propriedades.

Em poucas palavras está sendo pedido que c, σ no pior caso cresçam “tão rápido quanto uma função exponencial”.

A motivação imediata destas limitações é permitir o uso da Transformada de Laplace [14], na seção seguinte onde será desenvolvida a solução explícita do problema (3.6), sujeito às condições (2.9) e (2.8), bem como às relações de regularidade impostas no início desta seção. Escrevemos

$$C(x, s) = \int_0^\infty e^{-st} c(x, t) dt \quad \text{e} \quad S(x, s) = \int_0^\infty e^{-st} \sigma(x, t) dt, \quad (3.8)$$

para as transformadas de $c(x, t)$ e $\sigma(x, t)$, respectivamente. As integrais existem pela limitação do crescimento de c, σ dada em (3.7).

3.3 Solução explícita.

Multiplicando o sistema (3.6) por e^{-st} e integrando de 0 até ∞ em relação à variável t obtemos o sistema no domínio de Laplace:

$$\begin{cases} (s+1)S(x, s) - \sigma(x, 0) = C(x, s) & \text{(a);} \\ \frac{d}{dx}C(x, s) + C(x, s) = S(x, s) & \text{(b).} \end{cases} \quad (3.9)$$

Observação 3.1. Note que a regra de Leibniz permite a derivação sob o sinal de integração, sendo para isto suficiente que o integrando seja diferenciável, a integral convirja absolutamente e a integral da derivada convirja uniformemente. Assim podemos escrever:

$$\frac{d}{dx}C(x, s) = \frac{d}{dx} \int_0^\infty e^{-st} c(x, t) dt = \int_0^\infty e^{-st} \frac{\partial}{\partial x} c(x, t) dt, \quad (3.10)$$

que vale pois o integrando é composição de funções contínuas no interior do domínio Ω , a derivada $\frac{\partial}{\partial x} c(x, t)$ é por hipótese contínua até o zero, donde limitada e pela condição (3.7), absolutamente integrável em \mathbb{R}^+ .

Da equação (3.9(a)) e usando a condição inicial (2.8) obtemos:

$$S(x, s) = \frac{1}{s+1} C(x, s). \quad (3.11)$$

Usando esta informação em (3.9(b)), escrevemos

$$\frac{d}{dx}C(x, s) + \left(1 - \frac{1}{s+1}\right) C(x, s) = 0. \quad (3.12)$$

Sua solução é

$$C(x, s) = e^{-x} e^{\frac{1}{s+1}x} C(0, s), \quad (3.13)$$

onde lembramos que $C(0, s)$ é a transformada de Laplace de $c_0(t)$. Junto com a (3.11) fornece a solução completa no domínio de Laplace. O processo de inverter a transformada de modo a obter a solução dependente do tempo é feito através da integral de Mellin [13].

O sistema a ser resolvido é (3.11) e (3.13). Destas obtemos a solução no domínio do tempo escrevendo

$$S(x, s) = e^{-x} \left(\frac{e^{\frac{1}{s+1}x}}{s+1} \right) C(s, 0) = e^{-x} K(s+1) C(s, 0), \quad (3.14)$$

onde

$$K(s) = \exp(x/s)/s. \quad (3.15)$$

A transformada inversa de $K(s)$, que denotamos $\mathcal{L}^{-1}\{K(s)\}$, pode ser encontrada em tabelas de transformadas [13], e vale:

$$\mathcal{L}^{-1}\{K(s)\} = I_0(2\sqrt{tx}), \quad (3.16)$$

onde I_0 é a função modificada de Bessel de ordem zero e primeira espécie

$$I_0(z) = \frac{1}{\pi} \int_0^\pi \exp(z \cos(\tau)) d\tau. \quad (3.17)$$

Fazendo uso da propriedade $\mathcal{L}^{-1}\{K(s+1)\} = e^{-t} \mathcal{L}^{-1}\{K(s)\}$ e do fato de que o produto de Transformadas de Laplace é igual à convolução das respectivas inversas no domínio do tempo, escrevemos $\sigma(x, t)$ como:

$$\sigma(x, t) = e^{-x} \int_0^t e^{-\tau} I_0(2\sqrt{\tau x}) c_0(t - \tau) d\tau. \quad (3.18)$$

De (3.13) podemos escrever

$$C(x, s) = e^{-x} (s+1) K(s+1) C(0, s), \quad (3.19)$$

usando a regra da derivação para a Transformada de Laplace, a qual diz que se $F(s)$ é a transformada de uma certa função $f(t)$ então $sF(s) - f(0)$ é a transformada de $\frac{d}{dt}f(t)$, escrevemos:

$$\begin{aligned} \mathcal{L}^{-1}\{sK(s)\} &= \mathcal{L}^{-1}\{sK(s) - I_0(0) + I_0(0)\} = \mathcal{L}^{-1}\{sK(s) - I_0(0)\} + \mathcal{L}^{-1}\{I_0(0)\} \\ &= \frac{\partial}{\partial t} \left(I_0(2\sqrt{tx}) \right) + \delta(t), \end{aligned} \quad (3.20)$$

pois pela (3.17) temos $I_0(0) = 1$. O termo $\delta(t)$ representa a distribuição delta de Dirac. A expressão para $c(x, t)$ é dada pela seguinte convolução:

$$c(x, t) = e^{-x} \int_0^t e^{-\tau} \left(\frac{\partial}{\partial \tau} (I_0(2\sqrt{\tau x})) + \delta(t) \right) c_0(t - \tau) d\tau. \quad (3.21)$$

Finalmente a solução do problema proposto se escreve:

$$\begin{cases} \sigma(x, t) = e^{-x} \int_0^t e^{-\tau} I_0(2\sqrt{\tau x}) c_0(t - \tau) d\tau & \text{(a);} \\ c(x, t) = e^{-x} \int_0^t e^{-\tau} \frac{\partial}{\partial \tau} (I_0(2\sqrt{\tau x})) c_0(t - \tau) d\tau + e^{-x} c_0(t) & \text{(b).} \end{cases} \quad (3.22)$$

Exibimos alguns gráficos plotadas para a solução, na figura 3.1.

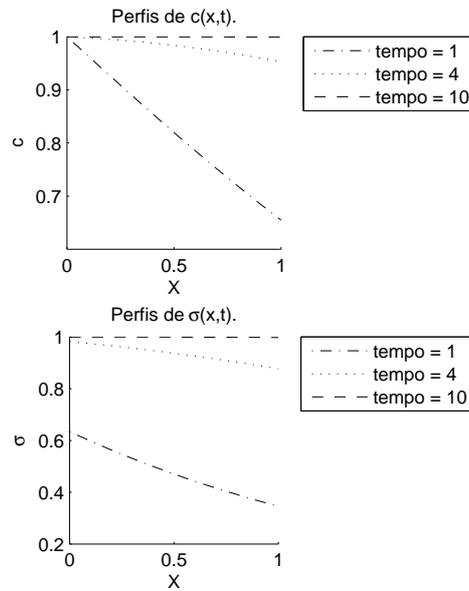


Figura 3.1: Solução exata evoluindo no tempo, para o problema normalizado.

3.4 O método de energia.

Nesta seção usaremos o conceito de energia associada a um sistema de EDP's para provar que o crescimento das funções c e σ está limitado para todo t finito, mesmo em $0 \leq x < \infty$. Isto será fundamental para o subsequente desenvolvimento da estabilidade do método numérico, feito em total analogia ao presente caso contínuo.

Desejamos definir matematicamente a energia das soluções σ , c como

$$\int_0^\infty (\sigma^2 + c^2) dx, \quad (3.23)$$

e para isso, mostraremos que esta de fato existe no lema a seguir.

Lema 3.2. *Seja c, σ a solução do problema (3.6) obtida em 3.3. As funções c^2 , $\frac{\partial}{\partial x}c^2$, σ^2 , $\frac{\partial}{\partial t}\sigma^2$ são absolutamente integráveis no intervalo $(0, \infty)$.*

Demonstração. Faremos uso do comportamento assintótico das equações modificadas de Bessel [13]:

$$I_n(u) = \frac{e^u}{\sqrt{2\pi u}} \left(1 + \mathcal{O}\left(\frac{1}{u}\right) \right); \quad u \rightarrow \infty, \quad n = 0, 1. \quad (3.24)$$

Então, para t fixo, existe $x_0 > 0$ tal que podemos obter a estimativa (com $w(x) = 2\sqrt{tx}$, $w(x) - x \rightarrow -\infty$ quando $x \rightarrow \infty$):

$$\begin{aligned} |\sigma(x, t)| &= e^{-x} \left| \int_0^t e^{-\tau} I_0(2\sqrt{\tau x}) c_0(t - \tau) d\tau \right| \\ &\leq e^{-x} \max_{\tau \in [0, t]} |e^{-\tau} I_0(2\sqrt{\tau x}) c_0(t - \tau)| \\ &\leq C_0 e^{-x} |I_0(2\sqrt{tx})| \\ &\leq \frac{C_0}{\sqrt{2\pi w(x)}} e^{-x} e^{w(x)} \left(1 + \mathcal{O}\left(\frac{1}{w(x)}\right) \right), \quad x \geq x_0. \end{aligned} \quad (3.25)$$

Vem imediatamente da estimativa que σ^2 é absolutamente integrável em relação a x , no intervalo $[x_0, \infty)$; e como σ é contínua no intervalo compacto $[0, x_0]$ o resultado segue. Argumentos totalmente análogos conduzem aos mesmos resultados para c^2 , $\frac{\partial}{\partial x}c^2$, $\frac{\partial}{\partial t}\sigma^2$. \square

De posse da existência das integrais passamos ao método, propriamente dito. Multiplicando (3.6(b)) por c e a equação (3.6(a)) por σ podemos escrever, reordenando seus termos:

$$\frac{1}{2} \frac{\partial}{\partial x} c^2 = c(c - \sigma), \quad (3.26)$$

e

$$\frac{1}{2} \frac{\partial}{\partial t} \sigma^2 = \sigma(\sigma - c). \quad (3.27)$$

Integrando (3.26) e (3.27) em relação a x , de 0 a ∞ obtemos o sistema:

$$\begin{cases} \frac{1}{2} \frac{d}{dt} \int_0^\infty \sigma^2 dx = \int_0^\infty \sigma(c - \sigma) dx & \text{(a);} \\ \frac{1}{2} \int_0^\infty \frac{\partial}{\partial x} c^2 dx = \int_0^\infty c(\sigma - c) dx & \text{(b).} \end{cases} \quad (3.28)$$

onde $\sigma = \sigma(x, t)$ e $c = c(x, t)$.

Somando (3.28(a)) e (3.28(b)) obtemos

$$\frac{1}{2} \frac{d}{dt} \int_0^\infty \sigma^2 dx + \frac{1}{2} \int_0^\infty \frac{\partial}{\partial x} c^2 dx = - \int_0^\infty (c - \sigma)^2 dx. \quad (3.29)$$

Usando (2.9) e lembrando que $c^2(x, t)$ permanece limitado quando $x \rightarrow \infty$, vale:

$$- \int_0^\infty \frac{\partial}{\partial x} c^2 dx = c_0^2(t) - \overline{\lim}_{x \rightarrow \infty} c^2(x, t) \leq C_0^2. \quad (3.30)$$

Observando que o integrando no segundo membro da (3.29) é positivo, temos que:

$$\frac{d}{dt} \int_0^\infty \sigma^2 dx \leq C_0^2. \quad (3.31)$$

Assim o crescimento da energia está dominado por uma constante positiva e o teorema fundamental do cálculo nos dá (usando que $\sigma(x, 0) \equiv 0$):

$$\int_0^\infty \sigma^2 dx \leq C_0^2 t. \quad (3.32)$$

Provamos portanto que a integral correspondente à função σ^2 está limitada para todo t finito, por uma função linear.

Para obter um resultado análogo em c , elevamos ao quadrado os dois membros da equação (3.6(b)) e integramos em relação à variável x de 0 a ∞ para obter

$$\int_0^\infty \left(\frac{\partial}{\partial x} c \right)^2 dx + \int_0^\infty \frac{\partial}{\partial x} c^2 dx + \int_0^\infty c^2 dx = \int_0^\infty \sigma^2 dx. \quad (3.33)$$

Usando (3.30) e (3.31) encontramos limitação semelhante para $c^2(t, x)$:

$$\int_0^\infty c^2 dx \leq C_0^2 t + C_0^2. \quad (3.34)$$

Vemos que a energia total do sistema é de fato limitada para todo t finito.

Capítulo 4

Esquema box unidimensional.

No problema de deposição profunda típico temos uma taxa de deposição muito pequena, como foi explanado no parágrafo que antecede (2.3). Isto se dá mesmo em escalas temporais da ordem de $\phi L/u$ (comumente usada em engenharia de petróleo), veja equação (2.1); ou mesmo em escalas da ordem de L/u , consulte equação (2.3). Torna-se, portanto, imperativo o uso de métodos implícitos precisos e incondicionalmente estáveis, para que seja possível discretizar o tempo em passos bem maiores que os intervalos espaciais (reescalados pelo fluxo u), de maneira precisa. Caso contrário, uma parcela considerável do esforço computacional seria desperdiçada em cálculos cujos resultados refletiriam mínimas mudanças na solução.

Como é lembrado em [12] uma maneira usual de transpor este desafio é o uso do esquema compacto implícito box. A desvantagem deste esquema está no fato dele introduzir oscilações espúrias na solução numérica. Uma maneira usual de amenizar estas oscilações consiste em trocar o operador média por uma média ponderada na discretização do tempo como feito por [12]. Esta tática tem, contudo, a desvantagem de reduzir a precisão do esquema para primeira ordem. Livramo-nos das oscilações espúrias de outra forma: aproveitamos as propriedades da filtração profunda e usamos a aproximação de Herzig *et alii* (2.3) para desprezar um termo de derivada temporal. O erro introduzido por esta aproximação é mínimo nas aplicações em filtração profunda e de nenhuma maneira abaixa a ordem de precisão numérica. Isto muda a natureza do problema, que deixa de ser hiperbólico, mas como veremos, dá ao esquema box ótimas propriedades numéricas.

Passamos agora à discretização usada daqui em diante. Considere para o eixo Ox a discretização do intervalo $[0, L]$, tal que para $h > 0$ escrevemos $\{x_m = mh, m = 0, 1, 2, \dots, M\}$,

onde

$$M = \frac{L}{h}. \quad (4.1)$$

Igualmente para o eixo Ot escrevemos a discretização do intervalo \mathbb{R}^+ , tal que para $k > 0$ pomos $\{t_n = nk, n = 0, 1, 2, \dots\}$. Estas nos permitem indexar $c(x, t)$ na notação mais simples:

$$(c)_m^n = c(x_m, t_n), \quad (4.2)$$

e analogamente para a função $\sigma(x, t)$:

$$(\sigma)_m^n = \sigma(x_m, t_n). \quad (4.3)$$

Reservamos então os termos c_m^n, σ_m^n para as funções discretas avaliadas no ponto (x_n, y_n) da grade. Usamos ainda a notação $(\Lambda)_m^n = \Lambda((\sigma)_m^n, (c)_m^n)$, que nos permite reservar Λ_m^n para seu correspondente discreto.

Devido a natureza do sistema de EDP's, o problema numérico se reduz a composição de dois problemas distintos. O primeiro é a resolução de um par de EDO's na fronteira e o segundo a solução de fato no interior. Trataremos primeiro o interior, onde reside o real interesse para após tecer algumas considerações sobre o problema na fronteira.

4.1 Esquema box.

Nesta seção definiremos o esquema box. Por questões de notação definiremos, antes disto, um operador de média.

Definição 4.1. Seja $v(z)$ uma função real na variável z , que toma valores num subconjunto dos reais Z . Dado o incremento Δz definimos o operador média em relação à variável z , μ_z , pondo para $z, z + \Delta z \in Z$:

$$\mu_z v(z + \Delta z/2) = \frac{v(z) + v(z + \Delta z)}{2}. \quad (4.4)$$

Observação 4.2. Se v é uma função real tal que $v \in C^1$, duas vezes diferenciável, o operador média assim definido é de segunda ordem.

Para a demonstração, podemos escrever para v sua série de Taylor com resto de Lagrange, obtendo:

$$v(z + \Delta z) = v(z + \Delta z/2) + \frac{\Delta z}{2} \frac{d}{dz} v(z + \Delta z/2) + \mathcal{O}(\Delta z^2); \quad (4.5)$$

$$v(z) = v(z + \Delta z/2) - \frac{\Delta z}{2} \frac{d}{dz} v(z + \Delta z/2) + \mathcal{O}(\Delta z^2). \quad (4.6)$$

Somando (4.5) e (4.6) obtemos o resultado.

Introduzimos o esquema box:

$$\left\{ \begin{array}{l} \frac{(\sigma_{m+1}^{n+1} + \sigma_m^{n+1}) - (\sigma_{m+1}^n + \sigma_m^n)}{k} + \frac{(c_{m+1}^{n+1} + c_m^{n+1}) - (c_{m+1}^n + c_m^n)}{h} = 0 \quad (a); \\ \frac{c_{m+1}^{n+1} - c_m^{n+1}}{h} = -\frac{1}{2} [\Lambda_{m+1}^{n+1} + \Lambda_m^{n+1}] \quad (b). \end{array} \right. \quad (4.7)$$

Sua dedução se dá tomando os operadores média em x da (2.6a)

$$\frac{\sigma_{m+1/2}^{n+1} - \sigma_{m+1/2}^n}{k} = +\frac{1}{2} [\Lambda_{m+1/2}^{n+1} + \Lambda_{m+1/2}^n], \quad (4.8)$$

e média em t da (2.6b)

$$\frac{c_{m+1}^{n+1/2} - c_m^{n+1/2}}{h} = -\frac{1}{2} [\Lambda_{m+1}^{n+1/2} + \Lambda_m^{n+1/2}], \quad (4.9)$$

onde escrevemos:

$$\left\{ \begin{array}{l} \frac{\mu_x \sigma_{m+1/2}^{n+1} - \mu_x \sigma_{m+1/2}^n}{k} = +\frac{\mu_x}{2} [\Lambda_{m+1/2}^{n+1} + \Lambda_{m+1/2}^n] \quad (a); \\ \frac{\mu_t c_{m+1}^{n+1/2} - \mu_t c_m^{n+1/2}}{h} = -\frac{\mu_t}{2} [\Lambda_{m+1}^{n+1/2} + \Lambda_m^{n+1/2}] \quad (b). \end{array} \right. \quad (4.10)$$

Como o lado direito destas equações ainda contém médias, temos uma simplificação:

$$\left\{ \begin{array}{l} \frac{\mu_t c_{m+1}^{n+1/2} - \mu_t c_m^{n+1/2}}{h} = -\mu_t \mu_x \Lambda_{m+1/2}^{n+1/2} \quad (a); \\ \frac{\mu_x \sigma_{m+1/2}^{n+1} - \mu_x \sigma_{m+1/2}^n}{k} = +\mu_x \mu_t \Lambda_{m+1/2}^{n+1/2} \quad (b). \end{array} \right. \quad (4.11)$$

Daí obtemos (4.7(a)) somando (4.10(a)) e (4.10(b)). O leitor poderá verificar que as (4.9) e (4.8) são de fato uma discretização de segunda ordem no tempo e no espaço da (2.6) no apêndice B. Disto segue imediatamente que o esquema box possui a mesma precisão.

O uso deste esquema se dá explicitando c_{m+1}^{n+1} e σ_{m+1}^{n+1} , para então marchar a partir da origem (usando o que foi calculado na fronteira, seção 4.2). Nosso interesse reside no caso particular (3.6), e assim pondo

$$A = \frac{h}{2(1 + \frac{h}{2})} \quad \text{e} \quad B = \frac{1 - \frac{h}{2}}{1 + \frac{h}{2}}, \quad (4.12)$$

obtemos:

$$\begin{cases} c_{m+1}^{n+1} = Bc_m^{n+1} + A(\sigma_{m+1}^{n+1} + \sigma_m^{n+1}) & \text{(a);} \\ \sigma_{m+1}^{n+1} = -\sigma_m^{n+1} + \frac{1}{1 + \lambda A} \{ \sigma_{m+1}^n + \sigma_m^n - \lambda [c_{m+1}^n + (B - 1)c_m^{n+1} - c_m^n] \} & \text{(b).} \end{cases} \quad (4.13)$$

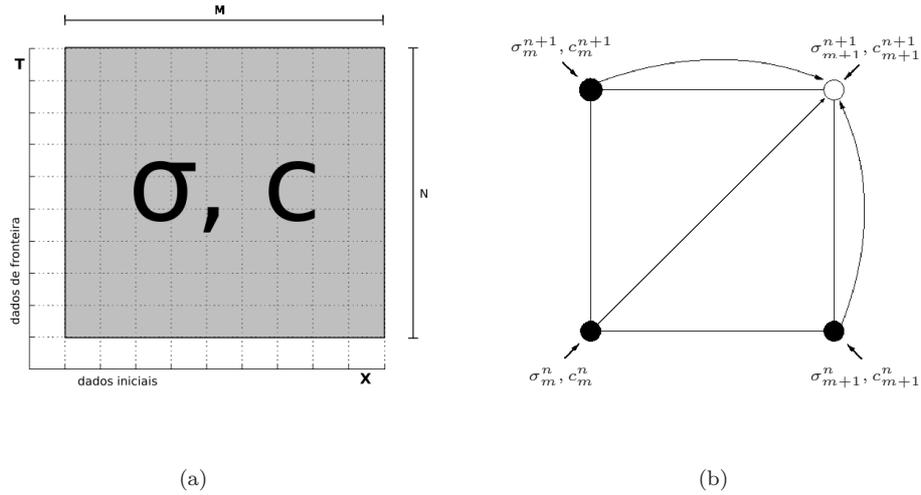


Figura 4.1: Dados iniciais e de contorno e dependência dos dados: (a) a matriz completa dos perfis de (σ, c) , e as diferentes regiões em respeito a dependência dos dados; (b) dependência de dados que não são iniciais ou de fronteira: os valores desconhecidos no círculo vazio são obtidos usando os valores conhecidos nos nodos adjacentes da grade, como está indicado pelas setas.

4.2 Discretização na fronteira.

Naturalmente o esquema box depende do cálculo antecipado de c_m^0 e σ_0^n , como pré-requisito para sua validação. Mostraremos agora um método para tratar este problema, dispondo apenas dos resultados já obtidos. Usando (4.9) temos para o eixo Ox :

$$c_{m+1}^0 = c_m^0 - h \left[\frac{(c_{m+1}^0 + c_m^0)}{2} \right], \quad (4.14)$$

onde foi usada a (2.8). Este é um caso simples de esquema implícito estável (como esquema numérico para EDO's) de segunda ordem. Reescrevendo (4.14) obtemos a recorrência:

$$c_{m+1}^0 = \frac{2 - h}{2 + h} c_m^0, \quad (4.15)$$

cuja convergência obtemos para:

$$h \leq 2. \quad (4.16)$$

Para o eixo Ot usamos a (4.8) para obter:

$$\sigma_0^{n+1} = \sigma_0^n - k \left[\frac{(c_0^{n+1} + c_0^n)}{2} - \frac{(\sigma_0^{n+1} + \sigma_0^n)}{2} \right], \quad (4.17)$$

que é um esquema implícito com c_0^n dado pela (2.9). Ele é estável pela teoria geral de aproximação numérica para EDO's, e analisando a recorrência

$$\sigma_0^{n+1} = \frac{2-k}{2+k} \sigma_0^n + \frac{k}{2+k} (c_0^{n+1} + c_0^n), \quad (4.18)$$

vemos que é convergente para:

$$k \leq 2. \quad (4.19)$$

4.3 Estabilidade do esquema box.

Nesta seção será provada a estabilidade do esquema (4.7), através do método da energia discreto, de maneira totalmente análoga ao que foi feito na seção 3.4 – neste sentido o método usado aqui segue [12]. A equivalência entre estabilidade e estabilidade forte para equações diferenciais parciais a coeficientes constantes pode ser encontrado em [16], no contexto do método de energia. Retomando a notação

$$\Lambda = c - \sigma, \quad (4.20)$$

reescrevemos a (4.10) como:

$$\begin{cases} \lambda \mu_t (c_{m+1}^{n+1/2} - c_m^{n+1/2}) = -\frac{1}{2} k \mu_x (\Lambda_{m+1/2}^{n+1} + \Lambda_{m+1/2}^n) & \text{(a);} \\ \mu_x (\sigma_{m+1/2}^{n+1} - \sigma_{m+1/2}^n) = \frac{1}{2} k \mu_x (\Lambda_{m+1/2}^{n+1} + \Lambda_{m+1/2}^n) & \text{(b).} \end{cases} \quad (4.21)$$

Para proceder em analogia à seção 3.4 multiplicamos (4.21(b)) por $\mu_x (\sigma_{m+1/2}^{n+1} + \sigma_{m+1/2}^n)$, o que fornece para o primeiro membro:

$$\left(\mu_x \sigma_{m+1/2}^{n+1} - \mu_x \sigma_{m+1/2}^n \right) \left(\mu_x \sigma_{m+1/2}^{n+1} + \mu_x \sigma_{m+1/2}^n \right) = (\mu_x \sigma_{m+1/2}^{n+1})^2 - (\mu_x \sigma_{m+1/2}^n)^2, \quad (4.22)$$

e conseqüentemente:

$$(\mu_x \sigma_{m+1/2}^{n+1})^2 - (\mu_x \sigma_{m+1/2}^n)^2 = \frac{k}{2} \mu_x (\Lambda_{m+1/2}^{n+1} + \Lambda_{m+1/2}^n) \cdot \mu_x (\sigma_{m+1/2}^{n+1} + \sigma_{m+1/2}^n). \quad (4.23)$$

De maneira semelhante, multiplicando a (4.21(a)) à direita por $\mu_x(c_{m+1/2}^{n+1} + c_{m+1/2}^n)$ obtemos para o primeiro membro

$$\begin{aligned} & \lambda \mu_t(c_{m+1}^{n+1/2} - c_m^{n+1/2}) \cdot \mu_x(c_{m+1/2}^{n+1} + c_{m+1/2}^n) = \lambda \mu_t(c_{m+1}^{n+1/2} - c_m^{n+1/2}) \cdot 2\mu_x \mu_t(c_{m+1/2}^{n+1/2}) = \\ & = \lambda \mu_t(c_{m+1}^{n+1/2} - c_m^{n+1/2}) \cdot \mu_t(c_{m+1}^{n+1/2} + c_m^{n+1/2}) = \lambda \left[(\mu_t c_{m+1}^{n+1/2})^2 - (\mu_t c_m^{n+1/2})^2 \right], \end{aligned} \quad (4.24)$$

e subsequenteemente:

$$\lambda \left[(\mu_t c_{m+1}^{n+1/2})^2 - (\mu_t c_m^{n+1/2})^2 \right] = -\frac{k}{2} \mu_x(\Lambda_{m+1/2}^{n+1} + \Lambda_{m+1/2}^n) \cdot \mu_x(c_{m+1/2}^{n+1} + c_{m+1/2}^n). \quad (4.25)$$

Para cada n e M fixos, usando a notação usual $\|v\|_2^2 = \sum v_m^2$, somando (4.23) e (4.25) em m temos:

$$\left\{ \begin{aligned} \lambda \sum_{m=0}^{M-1} \left[(\mu_t c_{m+1}^{n+1/2})^2 - (\mu_t c_m^{n+1/2})^2 \right] &= -\frac{k}{2} \sum_{m=0}^{M-1} [\mu_x(\Lambda^{n+1} + \Lambda^n) \cdot \mu_x(c^{n+1} + c^n)] & (a); \\ \|\mu_x \sigma^{n+1}\|_2^2 - \|\mu_x \sigma^n\|_2^2 &= +\frac{k}{2} \sum_{m=0}^{M-1} [\mu_x(\Lambda^{n+1} + \Lambda^n) \cdot \mu_x(\sigma^{n+1} + \sigma^n)] & (b). \end{aligned} \right. \quad (4.26)$$

O objetivo agora é provar estimativas de limitação quanto ao crescimento de $\mu_x c_m^n$ e $\mu_x \sigma_m^n$, para então usálas na prova de estabilidade do esquema box. Este é o conteúdo dos dois lemas à seguir:

Lema 4.3. *Para a função de grade σ_m^n que satisfaz o esquema box (4.7), existe uma constante positiva K tal que:*

$$h \|\mu_x \sigma^n\|_2^2 \leq h \|\mu_x \sigma^0\|_2^2 + K t_n. \quad (4.27)$$

Temos também que $K = C_0^2$.

Demonstração. Somando (4.26(a)) e obtemos:

$$\begin{aligned} \|\mu_x \sigma^{n+1}\|_2^2 - \|\mu_x \sigma^n\|_2^2 &= \\ &= -\frac{k}{2} \|\mu_x(\Lambda^{n+1} + \Lambda^n)\|_2^2 - \lambda (\mu_t c_M^{n+1/2})^2 + \lambda (\mu_t c_0^{n+1/2})^2 \\ &\leq \lambda (\mu_t c_0^{n+1/2})^2, \end{aligned} \quad (4.28)$$

e usando a (2.9) obtemos, em analogia com a (3.31) a condição de estabilidade:

$$h \|\mu_x \sigma^{n+1}\|_2^2 - h \|\mu_x \sigma^n\|_2^2 \leq k C_0^2. \quad (4.29)$$

Finalmente da recorrência em n (lembrando que $\lambda = k/h$ e $t_n = nk$):

$$h \|\mu_x \sigma^n\|_2^2 \leq h \|\mu_x \sigma^0\|_2^2 + C_0^2 t_n. \quad (4.30)$$

Com isto, o lema está provado. \square

Seguimos com a demonstração de limitação análoga para $\mu_x c_m^n$.

Lema 4.4. *Para a função de grade c_m^n que satisfaz o esquema box (4.7), existem constantes positivas K_1 e K_2 tais que:*

$$h\|\mu_x c^n\|_2^2 \leq h\|\mu_x c^0\|_2^2 + K_1 t_n + K_2. \quad (4.31)$$

Demonstração. Para obter a condição de estabilidade em c começamos reescrevendo a equação (4.7(b)) como

$$\lambda(c_{m+1}^n - c_m^n) + k(\mu_x c_{m+1/2}^n) = k(\mu_x \sigma_{m+1/2}^n), \quad (4.32)$$

que então elevamos ao quadrado

$$\lambda^2(c_{m+1}^n - c_m^n)^2 + k\lambda[(c_{m+1}^n)^2 - (c_m^n)^2] + k^2(\mu_x c_{m+1/2}^n)^2 = k^2(\mu_x \sigma_{m+1/2}^n)^2; \quad (4.33)$$

dividimos por k^2 e somamos em m :

$$h \sum_{n=0}^M h^{-2}(c_{m+1}^n - c_m^n)^2 + [(c_M^n)^2 - (c_0^n)^2] + h\|\mu_x c^n\|_2^2 = h\|\mu_x \sigma^n\|_2^2. \quad (4.34)$$

Os termos $h \sum_{n=0}^M h^{-2}(c_{m+1}^n - c_m^n)^2$ e $(c_M^n)^2$ são positivos e podem ser imediatamente desprezados. Usando (2.9), (2.8) e o lema 4.3, obtemos:

$$h\|\mu_x c^n\|_2^2 \leq h\|\mu_x c^0\|_2^2 + C_0^2 t_n + C_0^2. \quad (4.35)$$

O lema está provado. □

O resultado central desta seção é:

Teorema 4.5. *Se as funções de grade c_m^n e σ_m^n são não negativas então o esquema box (4.7) é estável.*

Demonstração. Nosso objetivo é correlacionar as grandezas $\|c^n\|_2^2$ e $\|\sigma^n\|_2^2$, com as $\|\mu_x c^n\|_2^2$ e $\|\mu_x \sigma^n\|_2^2$. Sem perda de generalidade procederemos para c sendo o resultado em σ totalmente análogo.

Como para todo m, n inteiros não negativos temos $c_m^n \geq 0$, vale a relação simples:

$$\left(\max\{c_m^n, c_{m+1}^n\}\right)^2 \leq \left(2\mu_x c_{m+1/2}^n\right)^2 = \left(2\frac{c_m^n + c_{m+1}^n}{2}\right)^2; \quad (4.36)$$

e pela convexidade da função quadrado temos:

$$\max\{(c_m^n)^2, (c_{m+1}^n)^2\} \leq (2\mu_x c_{m+1/2}^n)^2 \leq 2(c_m^n)^2 + 2(c_{m+1}^n)^2. \quad (4.37)$$

Somando (4.37) em m de 0 até $M - 1$ obtemos:

$$\sum_{m=0}^{M-1} (c_m^n)^2 \leq 4 \sum_{m=0}^{M-1} (\mu_x c_{m+1/2}^n)^2 \leq 2 \sum_{m=0}^{M-1} [(c_m^n)^2 + (c_{m+1}^n)^2]. \quad (4.38)$$

Usando novamente (4.37) para $m = M$ e o fato que $(\mu_x c_{m+1/2}^n)^2 \leq \|\mu_x c_{m+1/2}^n\|_2^2$ vem finalmente:

$$\|c^n\|_2^2 \leq 8 \|\mu_x c^n\|_2^2 \leq 8 \|c^n\|_2^2. \quad (4.39)$$

Agora basta usar os lemas 4.3 e 4.4 de onde o resultado segue. \square

Um resultado que prova a equivalência entre estabilidade forte e estabilidade pode ser encontrado em [16] donde o teorema 4.5 e a resultante convergência do método, teorema de Lax-Richtmyer [15], seguem como corolário.

Resta-nos apenas a:

Observação 4.6. A fim de que as funções de grade c_m^n e σ_m^n sejam não negativas para qualquer condição de fronteira c_0^n que satisfaça (2.9) é necessário que sejam satisfeitas as condições (2.8) e (2.9).

Capítulo 5

Problema radial.

O maior interesse no desenvolvimento do esquema box é utilizá-lo na modelagem de problemas físicos. Nesta direção aplicaremos este esquema ao problema de fluxo incompressível em coordenadas cilíndricas. Impomos simetria radial nas soluções, e o tomamos o domínio espacial limitado ao intervalo $[r_i, r_e]$. O problema resultante pode, portanto, ser simplificado ao seguinte problema unidimensional:

$$\begin{cases} \frac{\partial \sigma}{\partial t} = \Lambda(c, \sigma)u(r) & \text{(a);} \\ \frac{\partial c}{\partial r} = -\Lambda(c, \sigma) & \text{(b).} \end{cases} \quad (5.1)$$

onde a velocidade não é mais constante. Na equação vetorial sem qualquer simetria que antecede a (5.1) teríamos módulo do vetor velocidade $u(r)$, na equação que correspondente a (5.1a). Mesmo sabendo que o correto seria escrever o módulo não o faremos, pois isto não será necessário para os escoamentos considerados na dissertação.

A incompressibilidade do fluxo impõe que:

$$\frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial r} (ru(r)) = 0. \quad (5.2)$$

Isto nos diz que:

$$u(r) = \frac{q}{2\pi r}, \quad (5.3)$$

onde q é o fluxo por unidade de altura de um cilindro de raio r . A mudança de variável

$T = 2\pi u(r)t/q$ nos dá (retornando á variável “ t ”):

$$\begin{cases} \frac{\partial \sigma}{\partial t} = \frac{\Lambda(c, \sigma)}{r} & \text{(a);} \\ \frac{\partial c}{\partial r} = -\Lambda(c, \sigma) & \text{(b).} \end{cases} \quad (5.4)$$

Infelizmente a solução analítica do problema (5.4) não pode ser obtida com a ajuda da elementar Transformada de Laplace. Seguimos portanto com a análise numérica do problema, aplicando o bem sucedido esquema box.

5.1 Esquema box em simetria radial.

Para o problema (5.4) propomos o seguinte esquema, cuja precisão é de ordem dois no tempo e no espaço, como veremos.

$$\begin{cases} (\sigma_{m+1}^{n+1} + \sigma_m^{n+1}) - (\sigma_{m+1}^n + \sigma_m^n) + \lambda \frac{(c_{m+1}^{n+1} + c_{m+1}^n) - (c_m^{n+1} + c_m^n)}{r_{m+1/2}} = 0 & \text{(a);} \\ \frac{c_{m+1}^{n+1} - c_m^{n+1}}{h} = -\frac{1}{2} [\Lambda_{m+1}^{n+1} + \Lambda_m^{n+1}] & \text{(b).} \end{cases} \quad (5.5)$$

Multiplicando (5.4b) por $1/r$ e procedendo de maneira análoga à seção (B.1), encontramos para seu lado esquerdo a expressão:

$$\frac{1}{r_{m+1/2}} \frac{(c)_{m+1}^n - (c)_m^n}{h} = \left(\frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial r} c \right)_{m+1/2}^n + \mathcal{O}(h^2). \quad (5.6)$$

Observe para o lado direito que discretizamos Λ/r , onde aplicando os resultados (B.8) e (B.9) escrevemos:

$$\frac{1}{r_{m+1/2}} \frac{(c)_{m+1}^n - (c)_m^n}{h} = \frac{1}{2} \left(\frac{\Lambda((c)_{m+1}^n, (\sigma)_{m+1}^n)}{r_{m+1}} + \frac{\Lambda((c)_m^n, (\sigma)_m^n)}{r_m} \right) + \mathcal{O}(h^2). \quad (5.7)$$

Para (5.4a) usamos, sem modificação, a discretização para a derivada no tempo feita em B.1, que nos dá:

$$\frac{(\sigma)_m^{n+1} - (\sigma)_m^n}{k} = \frac{1}{2r_m} [\Lambda((c)_m^{n+1}, (\sigma)_m^{n+1}) + \Lambda((c)_m^n, (\sigma)_m^n)] + \mathcal{O}(k^2). \quad (5.8)$$

Tomando a média em r de (5.8) avaliada no ponto $m + 1/2$, a média em t de (5.7) avaliada no ponto $n + 1/2$ e somando, obtemos o resultado:

$$[(\sigma)_{m+1}^{n+1} + (\sigma)_m^{n+1}] - [(\sigma)_{m+1}^n + (\sigma)_m^n] + \lambda \frac{[(c)_{m+1}^{n+1} + (c)_{m+1}^n] - [(c)_m^{n+1} + (c)_m^n]}{r_{m+1/2}} = 0, \quad (5.9)$$

que é a discretização (5.5a), e pela observação 4.2 de segunda ordem no tempo e no espaço. Por fim, a (5.5b) é a mesma do esquema Box (4.7b).

Para resolver o esquema (5.5), basta explicitar c_{m+1}^{n+1} e σ_{m+1}^{n+1} e marchar a partir da fronteira como foi feito na seção 4.1, onde escrevemos:

$$A = \frac{\alpha h}{2(1 + h\beta/2)} \quad \text{e} \quad B = \frac{1 - h\beta/2}{1 + h\beta/2}, \quad (5.10)$$

para então obter:

$$\begin{cases} c_{m+1}^{n+1} = Bc_m^{n+1} + A(\sigma_{m+1}^{n+1} + \sigma_m^{n+1}) & \text{(a);} \\ \sigma_{m+1}^{n+1} = -\sigma_m^{n+1} + \frac{r_{m+1/2}}{r_{m+1/2} + \lambda A} \left\{ \sigma_{m+1}^n + \sigma_m^n - \lambda/r_{m+1/2} [c_{m+1}^n + (B-1)c_m^{n+1} - c_m^n] \right\} & \text{(b).} \end{cases} \quad (5.11)$$

5.2 Condição de fronteira para o esquema box radial.

Enquanto os valores de c_m^0 são calculados da mesma forma que em 4.2, obtendo a mesma condição (4.16) para a convergência, necessitamos rever o cálculo de σ_0^n . Desta vez, partimos da (5.8), para obter:

$$\sigma_0^{n+1} = \sigma_0^n - \frac{k}{2r_0} [\beta(c_0^{n+1} + c_0^n) - \alpha(\sigma_0^{n+1} + \sigma_0^n)]; \quad (5.12)$$

que é uma discretização implícita para o eixo Ot com c_0^n dado pela (2.9) e r_0 o raio interno no modelo físico. Ela é estável, novamente, pela teoria geral de aproximação numérica para EDO's, e analisando a recorrência

$$\sigma_0^{n+1} = \frac{2r_0 - \alpha k}{2r_0 + \alpha k} \sigma_0^n + \frac{\beta k}{2r_0 + \alpha k} (c_0^{n+1} + c_0^n); \quad (5.13)$$

vemos que é convergente para:

$$k \leq \frac{2r_0}{\alpha}. \quad (5.14)$$

5.3 Verificação numérica da modelagem radial.

Verificamos agora o resultado numérico de aplicabilidade do esquema box em simetria radial. Simulando o uso do esquema na região de interesse físico, $\alpha < \beta$ obtemos as figuras 5.1 e 5.2 que contém os perfis de c e σ para malhas de 40 passos no tempo por 10 intervalos no espaço e de 200 passos no tempo por 50 intervalos no espaço. Veja que a solução não degenera com o refinamento.

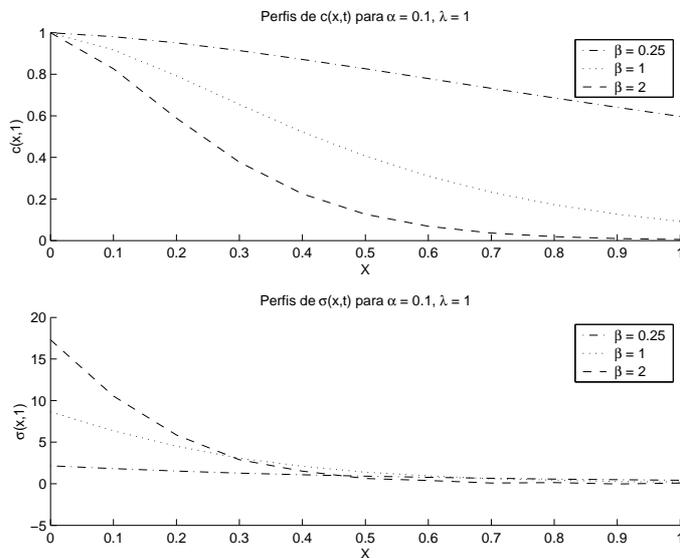


Figura 5.1: Comportamento do esquema box radial, com a discretização temporal de 40 passos e discretização espacial de 10 passos. Caso $\alpha < \beta$.

Uma característica do esquema trapezoidal é que seu resultado mostrou-se sensível à variação de λ . Nas figuras 5.3 e 5.4 ainda para $\alpha < \beta$, mostramos que não há desvio aparente nos resultados do esquema box radial quando se varia λ .

Nas figuras 5.5 e 5.6 exibimos resultados complementares onde fazemos $\beta < \alpha$. Novamente os resultados foram calculados para as malhas de 40 passos no tempo por 10 intervalos no espaço e de 200 passos no tempo por 50 intervalos no espaço. Como se vê, os resultados concordam bastante bem.

Ressaltamos com maior destaque que nas simulações o esquema box em simetria radial tem se mostrado estável. Na figura 5.7, a solução do esquema converge quando se refina a malha para uma discretização do tempo bem maior que a espacial (cinquenta vezes). Esta é uma

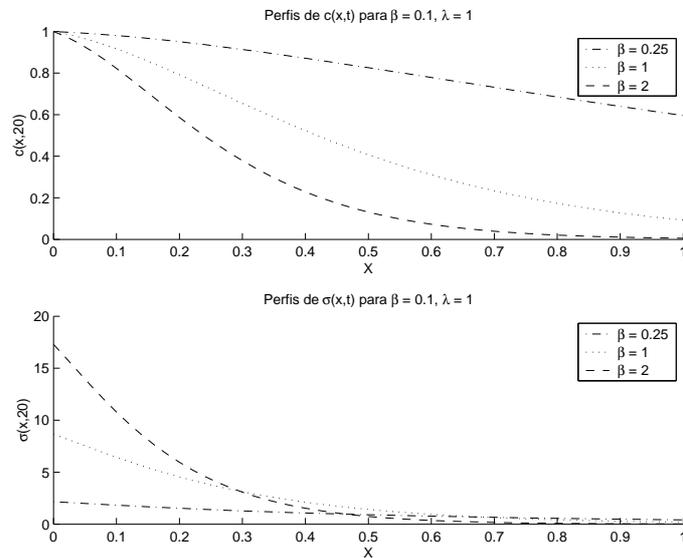


Figura 5.2: Comportamento do esquema box radial, com a discretização temporal de 200 passos e discretização espacial de 50 passos. Caso $\alpha < \beta$.

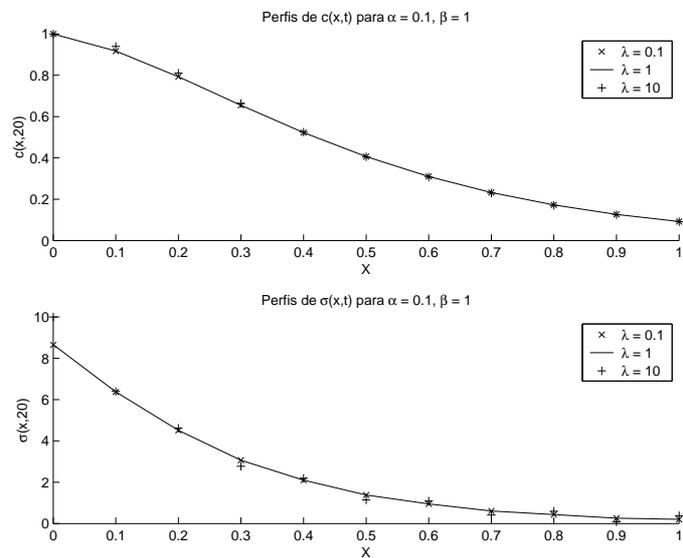


Figura 5.3: Comportamento do esquema trapezoidal para $\alpha = 0.1, \beta = 1$. Utilizou-se novamente uma discretização espacial de 40 passos.

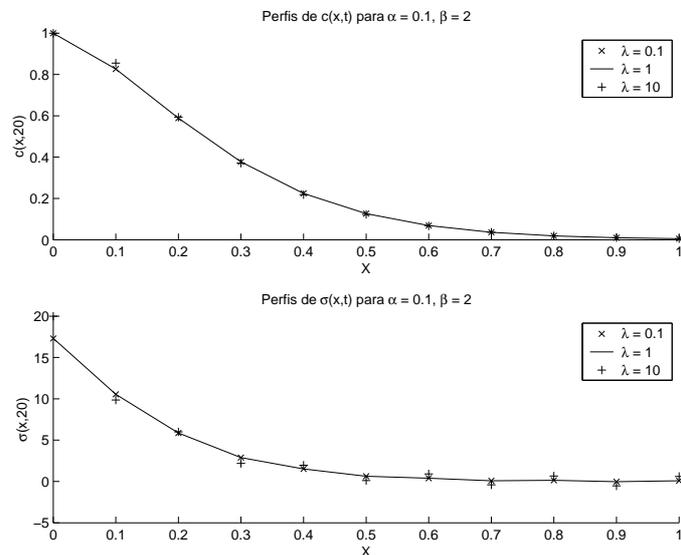


Figura 5.4: Comportamento do esquema box radial para $\alpha = 0.1$ e $\beta = 2$. Utilizou-se novamente uma discretização espacial de 40 passos.

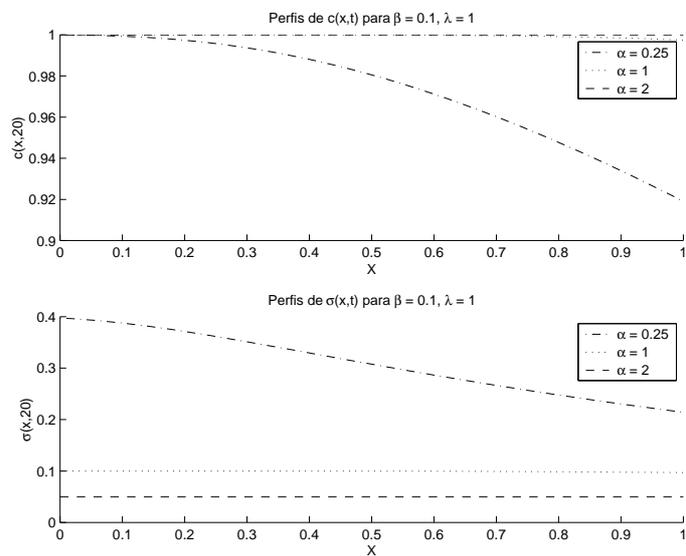


Figura 5.5: Comportamento do esquema box radial, com a discretização temporal de 40 passos e discretização espacial de 10 intervalos. Caso $\alpha > \beta$.

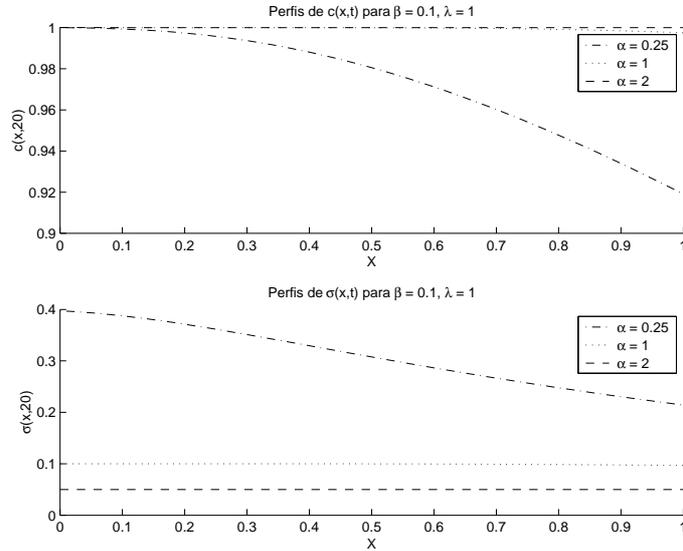


Figura 5.6: Comportamento do esquema box radial, com a discretização temporal de 200 passos e discretização espacial de 50 intervalos. Caso $\alpha > \beta$.

representante de muitos testes que conduziram a resultados análogos, sugerindo evidência de ampla aplicabilidade para este método. Podemos afirmar que o esquema box tem se mostrado uma alternativa realmente boa para simulação da deposição profunda, sendo o primeiro esquema compacto implícito para este problema a fornecer resultados satisfatórios [11].

Contudo se as condições (5.14) e (4.16) não forem atendidas a divergência na fronteira se propaga para o interior – da mesma forma que no caso linear. Uma possível solução para este problema é o uso de algum método numérico para EDOs na fronteira que combine eficiência com uma precisão maior que aquelas das discretizações propostas na seção 5.2. Para os problemas de filtração profunda, α é próximo de zero de modo que qualquer passo de tempo k razoável satisfará (5.14). Quanto a condição (4.16), ele tem sido satisfeita para as simulações feitas até agora.

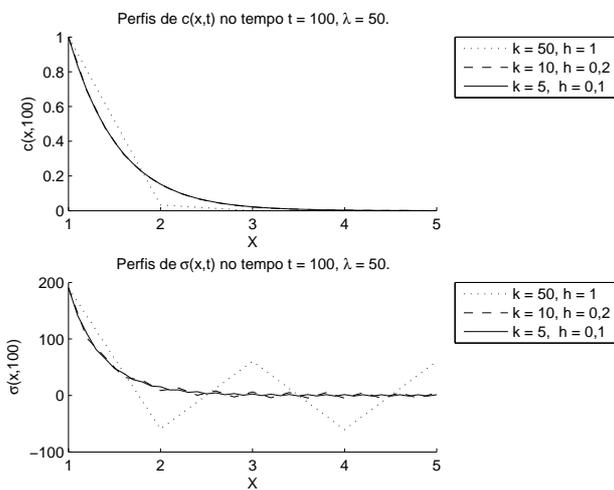


Figura 5.7: Convergência do esquema box radial, no caso $\alpha = 0.001$, $\beta = 2$. Com o refinamento da malha nota-se convergência da solução.

Capítulo 6

Conclusão.

Apresentamos um método numérico implícito e compacto, o esquema box (4.7). O método destina-se a resolver as equações de reação advecção (2.3) e (2.2) que regem a deposição profunda em meios porosos. Aquele é um método preciso, de segunda ordem, e incondicionalmente estável para o caso linear em que a função de filtração varia com c e σ (3.2) – a estabilidade é dada pelo método de energia. Para fins de comparação e validação do método, obtivemos uma solução exata para este caso linear. Esquemas explícitos não podem exceder a condição $\Delta t \leq u\Delta x$, onde u é a velocidade de Darcy do fluido, por questões de estabilidade enquanto esquemas implícitos, geralmente, não podem exceder esta condição por questões de precisão. A estabilidade incondicional torna-se então particularmente importante neste problema, pois tal condição é espúria: a velocidade de Darcy u sequer aparece na de velocidades características do modelo.

Ressalta-se que a natureza dos modedo físico, agrupando duas equações de velocidades características tão díspares (a saber zero e infinito) constitui o cerne da dificuldade e fonte de erros para os métodos numéricos. De fato, o esquema box proposto é o primeiro a apresentar resultados satisfatórios para este tipo de problema [11], permitindo discretizar o tempo em passos muito maiores que os intervalos da discretização do espaço de modo estável e preciso.

Aplicamos este esquema a um problema com simetria radial cilíndrica e verificamos numericamente que ele fornece bons resultados para passos temporais bem maiores que os espaciais.

Em trabalhos futuros há interesse em estudar o problema de deposição em formulação radial (5.1) e (5.3) onde a velocidade u passa a variar com o tempo, digamos $u(r, t) = u(r)q(t)$ – onde esta $u(r)$ é dada por (5.3). Também desejamos resolver o caso não linear para o problema radial (5.1). No interior do domínio, onde ambos c e σ são desconhecidos, resolveríamos o sistema

(5.1) com a versão matricial do método de Newton, o que é razoável, pois o custo corresponde a inverter uma matriz dois por dois para cada ponto.

Referências Bibliográficas

- [1] A. C. Alvarez, P. G. Bedrikovetsky, G. Hime, A. O. Marchesin, D. Marchesin, and J. R. Rodrigues. A fast inverse solver for the filtration function for flow of water with particles in porous media. *Inverse Problems*, (22):69–88, 2006.
- [2] A. C. Alvarez, G. Hime, D. Marchesin, and P. G. Bedrikovetsky. The inverse problem of determining the permeability reduction in flow of water with particles in porous media. In *Proceedings of the XXVI Iberian Latin-American Congress on Computational Methods in Engineering CILAMCE*, 2005. 2006, a aparecer em Transport in Porous Media.
- [3] A. C. Alvarez and D. Marchesin. A simple inverse solver for the filtration function for flow in porous media. Report IMPA, www.impa.br, 2005.
- [4] P. G. Bedrikovetsky, D. Marchesin, G. Hime, A. G. Siqueira, J. R. P. Rodrigues, Marchesin A., and M. Vinicius. Inverse problems for treatment of laboratory data in injectivity impairment. In *SPE International Symposium and Exhibition on Formation Damage Control*, pages 18–20, 2004.
- [5] J. Bruining and D. Marchesin. Maximal oil recovery by simultaneous condensation of alkane and steam. *Physical Review*, 1(75), 2007. A aparecer.
- [6] M. S. Espedal, A. Fasano, and A. Mikelic. Filtration in porous media and industrial application. In *Lecture Notes in Mathematics, 1734*. Springer, 1981.
- [7] J. P. Herzig, D. M. Leclerc, and P. Le. Goff. Flow of suspensions through porous media-application to deep filtration. *Industrial and Engineering Chemistry*, 65(5):8–35, 1970.
- [8] G. Hime and D. Marchesin. Determining the filtration function from X-ray data for flow of water with particles in porous media. Report IMPA, www.impa.br, 2006.

- [9] F. John. *Partial Differential Equations*. Springer, 4 edition, 1982.
- [10] E. L. Lima. *Curso de Análise*, volume 2. IMPA, 2005.
- [11] D. Marchesin and G. Hime. 2006. Comunicação privada.
- [12] S. L. Mitchell, K. W. Morton, and A. Spence. Analysis of box schemes for reactive flow problems. *SIAM J. Sci. Comput.*, 27(4):1202–1225, 2006.
- [13] L. Rade and B. Westergren. *Mathematics Handbook for Science and Engineering*. Springer, 2004.
- [14] J. L. Schiff. *The Laplace Transform*. Springer, 1999.
- [15] J. C. Strikwerda. *Finite Difference Schemes and Partial Differential Equations*. Wadsworth, 1989.
- [16] B. Wendroff. *Theoretical Numerical Analysis*. Academic Press, 1966.

Apêndice A

Verificação da solução explícita.

É conveniente verificar que, de fato, a solução obtida na seção (3.3) satisfaz a EDP. Podemos escrever (3.22(b)) como

$$c(x, t) = e^{-x} \left(\int_0^t e^{-\tau} \frac{I_1(2\sqrt{\tau x})\sqrt{x}}{\sqrt{\tau}} c_0(t - \tau) d\tau + c_0(t) \right); \quad (\text{A.1})$$

onde usamos a identidade [13]

$$\frac{d}{du} I_0(u) = I_1(u). \quad (\text{A.2})$$

Tomando a derivada de (A.1) em relação à variável x obtemos

$$\frac{\partial}{\partial x} c(x, t) = -c(x, t) + e^{-x} \int_0^t e^{-\tau} \frac{\partial}{\partial x} \left(\frac{I_1(2\sqrt{\tau x})\sqrt{x}}{\sqrt{\tau}} \right) c_0(t - \tau) d\tau; \quad (\text{A.3})$$

onde a derivada sob o sinal de integração se justifica, novamente, pelo uso da regra de Leibniz. Usando a relação [13]

$$\frac{d}{du} I_1(u) = I_0(u) - \frac{I_1(u)}{u}; \quad (\text{A.4})$$

a derivada no integrando é facilmente calculada

$$\begin{aligned} \frac{\partial}{\partial x} \left(\frac{I_1(2\sqrt{\tau x})\sqrt{x}}{\sqrt{\tau}} \right) &= \left(I_0(2\sqrt{\tau x}) - \frac{I_1(2\sqrt{\tau x})}{2\sqrt{\tau x}} \right) + \frac{I_1(2\sqrt{\tau x})}{2\sqrt{\tau x}} \\ &= I_0(2\sqrt{\tau x}); \end{aligned} \quad (\text{A.5})$$

e por fim

$$e^{-x} \int_0^t e^{-\tau} \frac{\partial}{\partial x} \left(\frac{I_1(2\sqrt{\tau x})\sqrt{x}}{\sqrt{\tau}} \right) c_0(t - \tau) d\tau = \sigma(x, t); \quad (\text{A.6})$$

onde usamos a (3.22(a)). Note-se que a equação (3.6b) foi satisfeita. Derivando agora (3.22(a)) com relação a variável t e usando a propriedade $f * g = g * f$ da convolução obtemos

$$\frac{\partial}{\partial t} \sigma(x, t) = e^{-x} \frac{\partial}{\partial t} \left(\int_0^t e^{-(t-\tau)} I_0(2\sqrt{(t-\tau)x}) c_0(\tau) d\tau \right); \quad (\text{A.7})$$

onde a derivada sob a integral é calculada usando a regra da cadeia (e a posterior derivação sob o sinal de integração novamente é válida por Leibniz)

$$\begin{aligned} \frac{\partial}{\partial t} \left(\int_0^t e^{-(t-\tau)} I_0(2\sqrt{(t-\tau)x}) c_0(\tau) d\tau \right) &= \int_0^t \frac{\partial}{\partial t} \left(e^{-(t-\tau)} I_0(2\sqrt{(t-\tau)x}) c_0(\tau) \right) d\tau \\ &+ c_0(t); \end{aligned} \quad (\text{A.8})$$

Segue facilmente de (3.22), que

$$\frac{\partial}{\partial t} \sigma(x, t) = -\sigma(x, t) + c(x, t); \quad (\text{A.9})$$

donde satisfaz a (3.6(a)). Por fim vemos que o sistema (3.22) é solução do sistema de EDPs (3.6).

Apêndice B

Esquema trapezoidal unidimensional.

B.1 Discretização trapezoidal.

Nesta parte exibimos um esquema mais simples para o problema de de discretizar (2.6), como é visto em [8]. Deste momento em diante tal esquema será chamado esquema trapezoidal.

$$\left\{ \begin{array}{l} \frac{c_{m+1}^{n+1} - c_m^{n+1}}{h} = -\frac{1}{2} [\Lambda_{m+1}^{n+1} + \Lambda_m^{n+1}] \quad (\text{a}); \\ \frac{\sigma_{m+1}^{n+1} - \sigma_{m+1}^n}{k} = +\frac{1}{2} [\Lambda_{m+1}^{n+1} + \Lambda_{m+1}^n] \quad (\text{b}). \end{array} \right. \quad (\text{B.1})$$

Este esquema tira proveito da simplicidade do sistema de EDP's (2.6), obtendo os novos valores c_{m+1}^{n+1} , σ_{m+1}^{n+1} em função da menor quantidade possível de dados já disponíveis, como é representado na figura B.1.

Ele pode ser resolvido em sua forma geral (B.1) usando o método de Newton [8] e foi usado com sucesso em [5]. Contudo a teoria de esquemas numéricos a diferenças finitas está bem desenvolvida para equações lineares com coeficientes constantes. Portanto, na análise numérica que faremos daqui por diante, usaremos apenas o caso particular (3.6).

Sua utilização depende dos dados de fronteira obtidos em 4.2. De posse destes, resolve-se o sistema de linear (B.1) nas incógnitas c_{m+1}^{n+1} e σ_{m+1}^{n+1} , para então marchar a partir da fronteira.

No que se segue, mostraremos que este é de segunda ordem tanto no tempo quanto na posição.

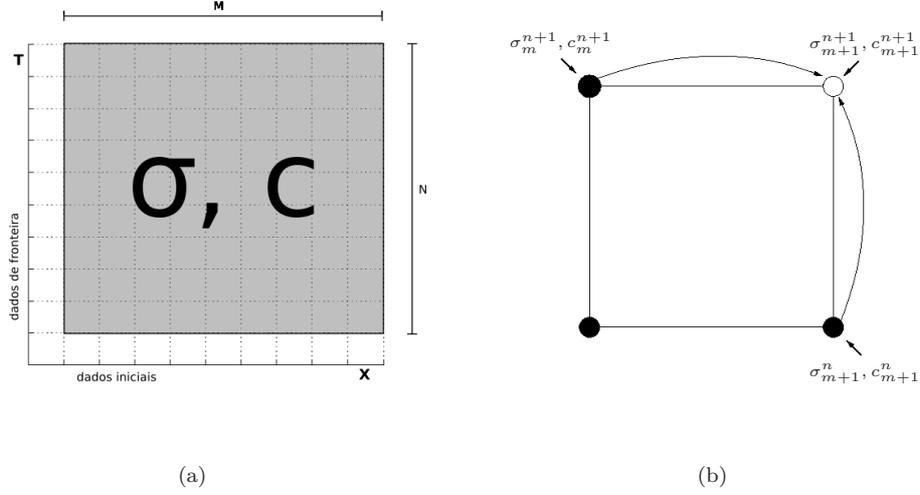


Figura B.1: Dados iniciais e de contorno e dependência dos dados: (a) a matriz completa dos perfis de (σ, c) , e as diferentes regiões em respeito a dependência dos dados; (b) dependência de dados que não são iniciais ou de fronteira: os valores desconhecidos nos círculos vazios são obtidos usando os valores conhecidos nos dois nodos adjacentes da grade, como o indicado pelas setas.

B.1.1 Ordem de precisão.

Os lados esquerdos das duas equações em (B.1) são discretizações de segunda ordem para as derivadas (diferenças centradas), no ponto médio do espaço e do tempo, respectivamente. Para vê-lo, expandiremos (2.6) em série de Taylor, lembrando que $\Lambda = c - \sigma$:

$$(c)_{m+1}^n = (c)_{m+1/2}^n + \frac{1}{2} \frac{\partial}{\partial x} (c)_{m+1/2}^n + \frac{h^2}{8} \frac{\partial^2}{\partial x^2} (c)_{m+1/2}^n + \mathcal{O}(h^3); \quad (\text{B.2})$$

$$(c)_m^n = (c)_{m+1/2}^n - \frac{h}{2} \frac{\partial}{\partial x} (c)_{m+1/2}^n + \frac{h^2}{8} \frac{\partial^2}{\partial x^2} c_{m+1/2}^n + \mathcal{O}(h^3). \quad (\text{B.3})$$

subtraindo (B.3) de (B.2) e rearranjando os termos, obtemos

$$\frac{(c)_{m+1}^n - (c)_m^n}{h} = \frac{\partial}{\partial x} (c)_{m+1/2}^n + \mathcal{O}(h^2). \quad (\text{B.4})$$

Analogamente,

$$\frac{(\sigma)_m^{n+1} - (\sigma)_m^n}{k} = \frac{\partial}{\partial t} (\sigma)_m^{n+1/2} + \mathcal{O}(k^2). \quad (\text{B.5})$$

Uma demonstração similar fornece o lado direito. Escrevemos

$$(\Lambda)_{m+1}^n = (\Lambda)_{m+1/2}^n + \frac{h}{2} \frac{\partial}{\partial x} (\Lambda)_{m+1/2}^n + \mathcal{O}(h^2); \quad (\text{B.6})$$

$$(\Lambda)_m^n = (\Lambda)_{m+1/2}^n - \frac{h}{2} \frac{\partial}{\partial x} (\Lambda)_{m+1/2}^n + \mathcal{O}(h^2). \quad (\text{B.7})$$

Somando (B.7) e (B.6) obtemos

$$\frac{(\Lambda)_{m+1}^n + (\Lambda)_m^n}{2} = (\Lambda)_{m+1/2}^n + \mathcal{O}(h^2). \quad (\text{B.8})$$

Analogamente,

$$\frac{(\Lambda)_m^{n+1} + (\Lambda)_m^n}{2} = (\Lambda)_m^{n+1/2} + \mathcal{O}(k^2). \quad (\text{B.9})$$

Substituindo (B.5) e (B.9) em (2.6(a)) obtemos

$$\frac{(\sigma)_m^{n+1} - (\sigma)_m^n}{k} = \frac{\Lambda((c)_m^{n+1}, (\sigma)_m^{n+1}) + \Lambda((c)_m^n, (\sigma)_m^n)}{2} + \mathcal{O}(k^2), \quad (\text{B.10})$$

da mesma maneira, usando (2.6(b)) podemos escrever com a ajuda de (B.4) e (B.8):

$$\frac{(c)_{m+1}^n - (c)_m^n}{h} = \frac{\Lambda((c)_{m+1}^n, (\sigma)_{m+1}^n) + \Lambda((c)_m^n, (\sigma)_m^n)}{2} + \mathcal{O}(h^2). \quad (\text{B.11})$$

Avaliando a (B.10) na posição $x_m + h$ e a (B.11) no tempo $x_n + k$ concluímos que o esquema é de segunda ordem no tempo e no espaço.

B.2 Comparação entre os esquemas.

Aqui exibimos o resultado das simulações utilizando os dois esquemas, trapezoidal (B.1) e box (4.7). No que concerne a simulação preferimos fazer uso do modelo físico (3.2), anterior a normalização que expurga os parâmetros α e β .

Nas situações de interesse físico temos que $\alpha \ll \beta$, e já notamos sinais da instabilidade do esquema trapezoidal. Vemos na figura B.2 que o resultado numérico dos dois esquemas difere sensivelmente quando fazemos λ variar (o que corresponde a refinar a malha do tempo). Escolhemos para o esquema box apenas dois valores de λ , aqueles que são críticos para o esquema trapezoidal no sentido de alguma evidência de instabilidade, $\lambda = 0.1$, ou de uma forte atenuação, $\lambda = 4$. Observe que para $\lambda < 1$, σ cresce rapidamente, sendo que os melhores resultados do esquema trapezoidal aparecem restritos à região onde λ está próximo ao um. Não há variação perceptível no resultado para o esquema box, sendo que em todos os casos o erro em relação ao resultado exato é muito pequeno. Refininando a malha os resultados não mudam perceptivelmente como se vê na figura B.3. Mais precisamente, a diferença média quadrática é pequena. Em tempo, fornecemos a tabela B.1 que correlaciona λ com a discretização temporal, para comodidade do leitor.

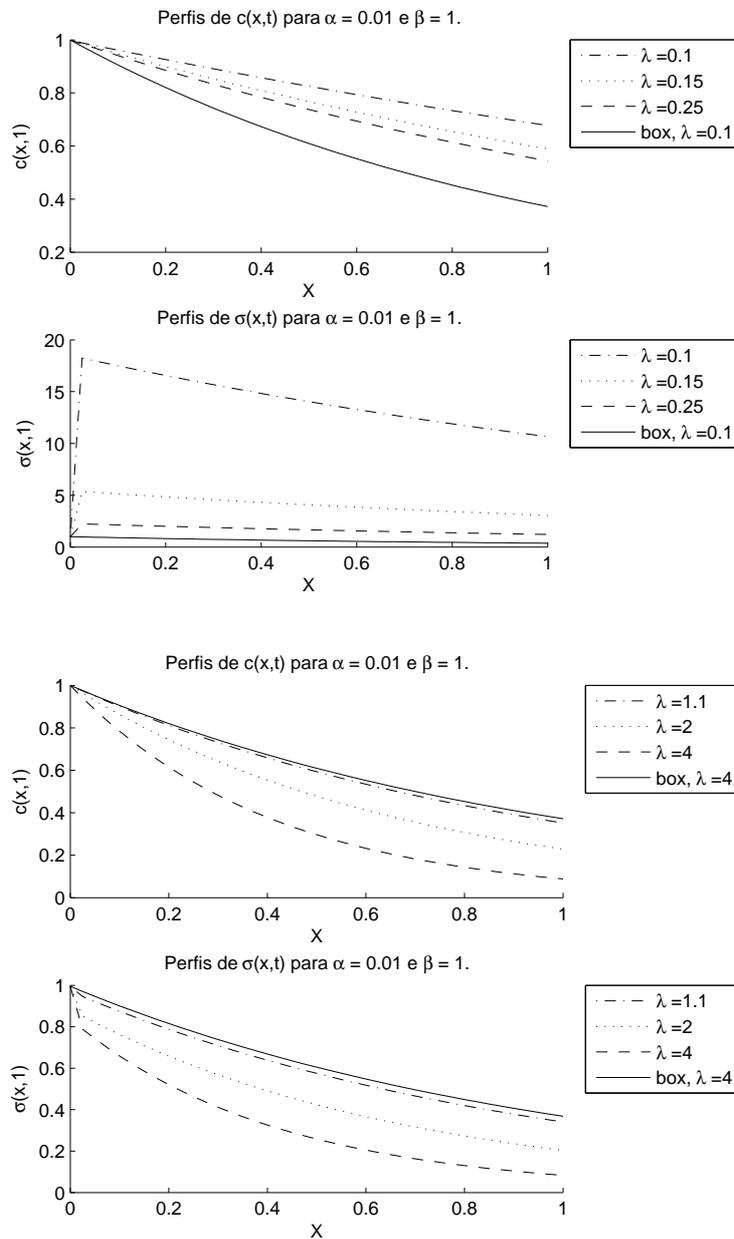


Figura B.2: Comparação entre os esquemas para $\alpha = 0.01$, e $\beta = 1$. A linha cheia corresponde ao esquema box e coincide com a solução exata, as demais ao trapezoidal. Utilizou-se uma discretização espacial $h = 0,025$.

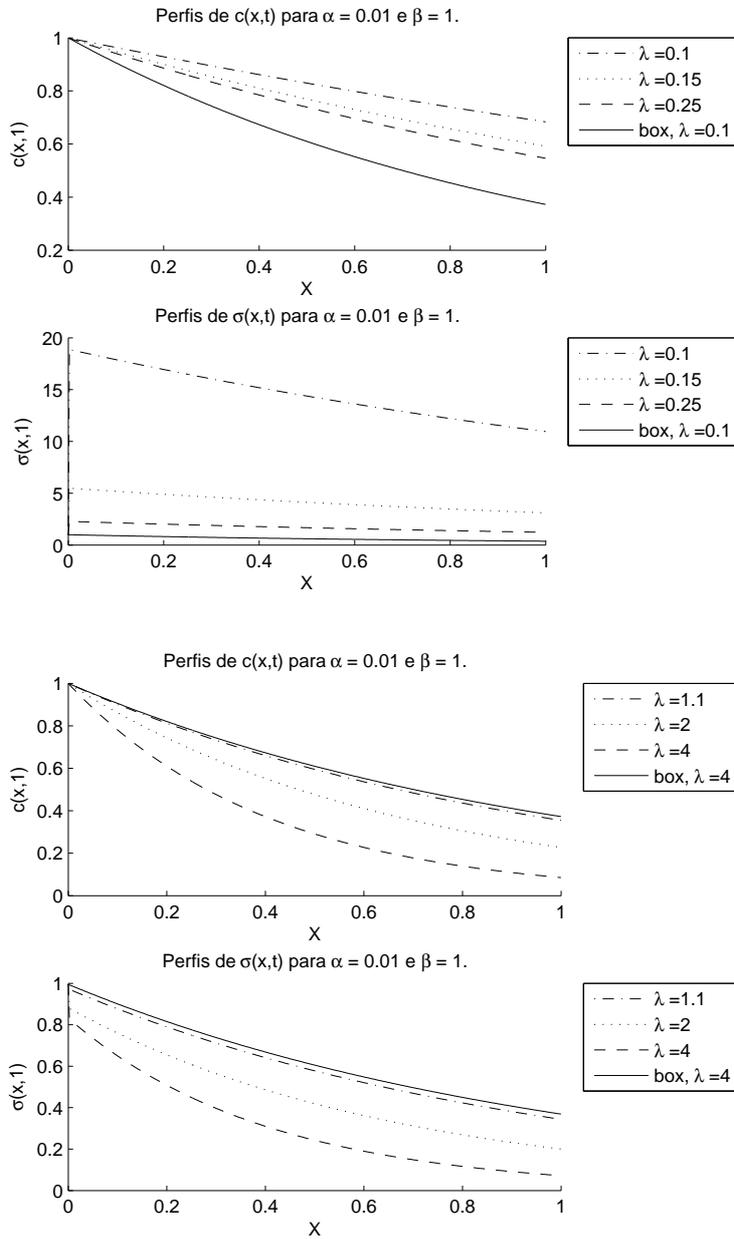


Figura B.3: Comparação entre os esquemas para $\alpha = 0.01$, e $\beta = 1$. A linha cheia corresponde ao esquema box e coincide com a solução exata, as demais ao trapezoidal. Utilizou-se uma discretização espacial $h = 0,0025$.

λ	$h = 0,025$	$h = 0,0025$
0,10	0,0025	0,00025
0,15	0,0037	0,00037
0,25	0,0063	0,00063
1,10	0,0275	0,00275
2,00	0,0500	0,00500
4,00	0,1000	0,01000

Tabela B.1: Valores de k para cada par h, λ .

Exibimos também o a simulação fora do intervalo de convergência do método da fronteira, por questão de completeza. Para $\alpha = 2$ e $\beta = 2$, vemos o resultado na figura B.4. A consequência de violar as (4.16) e (4.19) é um padrão oscilatório se propagando sem aumento em sua amplitude. Exibimos também o método numa situação de convergência, avaliado no mesmo instante de tempo. Para discretizações não simétricas o comportamento do esquema pode se tornar bastante complicado.

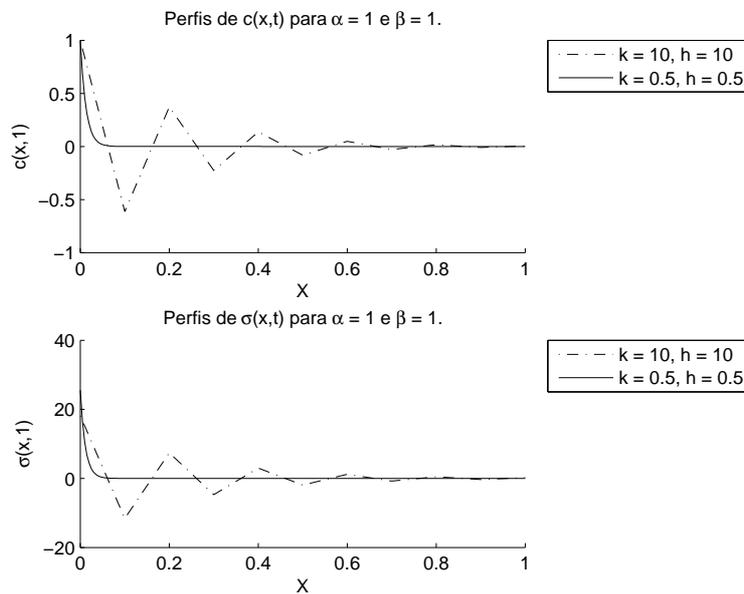


Figura B.4: Esquema box, regiões de convergência e divergência do esquema na fronteira.

Apêndice C

Inaplicabilidade do esquema trapezoidal.

A teoria mostra que para sistemas de EDP's lineares, o fenômeno de instabilidade está, em geral, associado a amplificação de altas frequências (existentes, por exemplo, em descontinuidades dos dados iniciais ou de fronteira) sendo portanto uma perturbação localizada que tende a destruir a convergência conforme se avança no tempo. O que se mostrou foi uma suave modificação nos perfis de c e σ , aparentemente desvinculado de qualquer pacote de ondas de alta frequência, que levava a uma grande variação em relação à solução esperada conforme se avança no tempo, sem contudo qualquer manifestação localizada. Este curioso efeito de instabilidade em adição a existência de uma pequena faixa de estabilidade, corroboraram para a dificuldade em determinar a aplicabilidade do esquema.

Para investigar este fenômeno, buscamos soluções do sistema (B.1) para o problema particular onde

$$\Lambda(\sigma, c) = \beta c - \alpha \sigma, \quad (\text{C.1})$$

em termos de $c_{m+1}^n, c_m^{n+1}, \sigma_{m+1}^n, \sigma_m^{n+1}$. Este pode, portando, ser escrito na forma:

$$\begin{cases} c_{m+1}^{n+1} + \alpha_1 c_m^{n+1} + \alpha_2 \sigma_m^{n+1} = \alpha_3 c_{m+1}^n + \alpha_4 \sigma_{m+1}^n; \\ \sigma_{m+1}^{n+1} + \beta_1 c_m^{n+1} + \beta_2 \sigma_m^{n+1} = \beta_3 c_{m+1}^n + \beta_4 \sigma_{m+1}^n. \end{cases} \quad (\text{C.2})$$

onde, definindo $\Xi = \left\{ \left(1 + \frac{h\alpha}{2}\right) \left(1 + \frac{k\beta}{2}\right) - \frac{(h\alpha)(k\beta)}{4} \right\}^{-1}$ temos:

$$\left\{ \begin{array}{l} \alpha_1 = -\Xi\left(1 + \frac{k\alpha}{2}\right)\left(1 - \frac{h\beta}{2}\right); \\ \alpha_2 = -\Xi\left(1 + \frac{k\alpha}{2}\right)\left(\frac{h\alpha}{2}\right); \\ \alpha_3 = \Xi\left(\frac{h\alpha}{2}\right)\left(\frac{k\beta}{2}\right); \\ \alpha_4 = \Xi\left(1 - \frac{k\alpha}{2}\right)\left(\frac{h\alpha}{2}\right); \end{array} \right. \quad \left\{ \begin{array}{l} \beta_1 = -\Xi\left(1 - \frac{h\beta}{2}\right)\left(\frac{k\beta}{2}\right); \\ \beta_2 = -\Xi\left(\frac{h\alpha}{2}\right)\left(\frac{k\beta}{2}\right); \\ \beta_3 = \Xi\left(1 + \frac{h\beta}{2}\right)\left(\frac{k\beta}{2}\right); \\ \beta_4 = \Xi\left(1 + \frac{h\beta}{2}\right)\left(1 - \frac{k\alpha}{2}\right). \end{array} \right. \quad (\text{C.3})$$

Como primeiro passo na avaliação da estabilidade numérica do método, consideremos o sistema a diferenças finitas matricial de dimensão $2M \times 2M$ onde as incógnitas $c_m^{n+1}, \sigma_m^{n+1}$ com $m \in \{1, \dots, M\}$ escrevem-se vetorialmente na forma $v^{n+1} = (c_1^{n+1}, \sigma_1^{n+1}, \dots, c_M^{n+1}, \sigma_M^{n+1})$:

$$Av^{n+1} = Bv^n + b^n. \quad (\text{C.4})$$

Na equação (C.4) as matrizes $A, B \in \mathbb{R}^{(2M)^2}$ são dadas, em termos da equação (C.2):

$$A = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ \alpha_1 & \alpha_2 & 1 & 0 & 0 & 0 & \cdots & 0 & 0 \\ \beta_1 & \beta_2 & 0 & 1 & 0 & 0 & \cdots & 0 & 0 \\ 0 & 0 & \alpha_1 & \alpha_2 & 1 & 0 & & 0 & 0 \\ 0 & 0 & \beta_1 & \beta_2 & 0 & 1 & & 0 & 0 \\ & & \vdots & & & \ddots & & & \\ 0 & 0 & \cdots & 0 & 0 & \alpha_1 & \alpha_2 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & \cdots & 0 & 0 & \beta_1 & \beta_2 & 0 & 1 \end{pmatrix},$$

$$B = \begin{pmatrix} \alpha_3 & \alpha_4 & \cdots & 0 & 0 \\ \beta_3 & \beta_4 & \cdots & 0 & 0 \\ \vdots & \vdots & \ddots & & \\ 0 & 0 & \cdots & \alpha_3 & \alpha_4 \\ 0 & 0 & \cdots & \beta_3 & \beta_4 \end{pmatrix},$$

O vetor $b^n \in \mathbb{R}^{2M}$ explicita as condições de fronteira, para todo $n \in \mathbb{N}$.

$$b^n = \begin{pmatrix} -\alpha_1 c_0^n - \alpha_2 \sigma_0^n \\ -\beta_1 c_0^n - \beta_2 \sigma_0^n \\ 0 \\ \vdots \\ 0 \end{pmatrix}.$$

Temos imediatamente que $\det(A) = 1$ e podemos escrever $C = A^{-1}B$, $\bar{b}^n = A^{-1}b^n$, e assim o sistema (C.4) fica:

$$v^{n+1} = Cv^n + \bar{b}^n. \quad (\text{C.5})$$

Usaremos o *método das matrizes* para investigar a estabilidade.

É condição necessária para a estabilidade do problema caracterizado na equação C.5 que o módulo dos autovalores da matriz C , no máximo, sejam da ordem de $1 + \mathcal{O}(k)$, *i.e.*

$$\rho(C) = 1 + \mathcal{O}(k). \quad (\text{C.6})$$

Ademais é suficiente que a norma de suas potências esteja uniformemente limitada, *i.e.*

$$\|C^n\| < K, \quad K > 0, \quad \forall n \in \mathbb{N}. \quad (\text{C.7})$$

Embora não possamos verificar a condição de suficiência, e dispormos de casos onde a experiência sugere que ela seja falsa, mostraremos no que se segue que a condição de necessidade é satisfeita.

C.1 Limitação dos autovalores.

Vejamos quais são os autovalores de C . Com efeito, $C = A^{-1}B$, donde vem $\det(C) = \det(A^{-1})\det(B)$ e como A satisfaz $\det(A) = 1$ então $\det(A^{-1}) = 1$. Segue-se que $\det(C) = \det(B)$. Nossa motivação é que este cálculo de autovalores se reduza ao cálculo dos autovalores de B . O que é bem simples mostrar, escrevendo:

$$B_1 = \begin{pmatrix} \alpha_3 & \alpha_4 \\ \beta_3 & \beta_4 \end{pmatrix},$$

vemos que

$$B = \begin{pmatrix} B_1 & & 0 \\ & \ddots & \\ 0 & & B_1 \end{pmatrix},$$

B_1 repetida M vezes, e por fim:

$$\det(A^{-1}B - \mu I) = \det(A^{-1})\det(B - \mu A) = \det^M(B_1 - \mu I) = \mu^2 - \text{tr}(B_1)\mu + \det(B_1), \quad (\text{C.8})$$

onde a segunda igualdade se justifica verificando que apenas o produto dos blocos diagonais de $B - \mu A$ contribuem para o determinante.

Usando (C.3) podemos calcular

$$\det(B_1) = \Xi^2 \left\{ \left(\frac{h\alpha}{2}\right) \left(\frac{k\beta}{2}\right) \left(1 + \frac{h\beta}{2}\right) \left(1 - \frac{k\alpha}{2}\right) - \left(1 - \frac{k\alpha}{2}\right) \left(\frac{h\alpha}{2}\right) \left(1 + \frac{h\beta}{2}\right) \left(\frac{k\beta}{2}\right) \right\}. \quad (\text{C.9})$$

que é igual a zero. Logo, o polinômio (C.8) tem discriminante não negativo donde vem que suas raízes são reais e, claramente, uma delas é o zero. O autovalor não nulo é:

$$\mu = \text{tr}(B_1) = \frac{1 + \frac{1}{2}(h\beta - k\alpha)}{1 + \frac{1}{2}(h\alpha + k\beta)}. \quad (\text{C.10})$$

Como $\lambda = k/h$ podemos escrever (C.10) como:

$$\mu = \frac{1 + \frac{1}{2}k\left(\frac{\beta}{\lambda} - \alpha\right)}{1 + \frac{1}{2}k\left(\frac{\alpha}{\lambda} + \beta\right)}. \quad (\text{C.11})$$

Para λ constante, desenvolvendo (C.11) em Série de Taylor e escrevendo

$$K = \frac{1}{2} \left(\left(\frac{\beta}{\lambda} - 1 \right) - \left(\frac{\alpha}{\lambda} + 1 \right) \right), \quad (\text{C.12})$$

obtemos finalmente que:

$$\mu = 1 + Kk + \mathcal{O}(k^2); \quad (\text{C.13})$$

e então $\rho(C) = 1 + \mathcal{O}(k)$, isto é: (C.6), a condição necessária para a estabilidade é satisfeita.

C.2 Limitação das normas.

O cálculo de $\|C^n\|$, feito diretamente é complicado. Considerando, ainda, que a experiência sugere a presença de certa anomalia no comportamento do esquema trapezoidal, exibiremos o

resultado do cálculo numérico de $\|C^n\|$. Estes foram feitos usando as funções apropriadas do *software* Matlab ©.

Nas tabelas C.1 e C.2, calculamos algumas normas para $\alpha < \beta$. Resaltamos que a condição $\alpha \ll \beta$ é a de maior interesse físico. Nota-se nos cálculos indício de convergência para $\lambda \approx 1$, bem como para o caso em que alfa e beta são próximos. Contudo, em geral temos evidência de divergência para $\lambda < 1$, tornando-se bem forte quando coincidem os fatores lambda pequeno com alfa (bem) menor que beta. Também encontra-se evidência de efeito de dissipativo para $\lambda > 1$. Ele se manifesta como uma sequência de normas convergindo ao zero.

Na figura C.1 exibimos o resultado do esquema para alguns alfa e beta. Notamos um leve efeito de instabilidade, sobretudo para sigma. Como fica claro, a divergência está desvinculada de qualquer pacote de ondas de alta frequência, dificultando sua caracterização. Ressaltamos que a instabilidade torna-se maior quando alfa se afasta de beta e lambda se afasta de um, como é visto na tabela C.2.

O resultado do calculo das normas para alguns $\alpha > \beta$ estão contidos na tabela C.3. Note que temos, em analogia ao caso anterior, evidência de divergência, que contudo aparece para $\lambda > 1$ aqui, e de dissipação para $\lambda < 1$. Nota-se também que para lambda na vizinhança do um, existe alguma evidência a sugerir convergência.

Na figura C.2, plotamos o resultado da simulação para o caso $\alpha > \beta$. Neste a evidência de divergência é mais forte, contudo permanece desassociada de qualquer amplificação de frequências altas. Não obstante, o comportamento geral se assemelha ao caso $\alpha < \beta$, aumentando o efeito da divergência quando alfa se afasta de beta e lambda se afasta de um.

Estes dados foram escolhidos como representação local dos fenômenos observados, pois fornecem uma imagem natural da dificuldade encontrada em determinar a estabilidade do esquema trapezoidal. De fato, tal como se apresenta, este esquema se distancia bastante da solução exata para quase todo α , β e λ , porém sem apresentar as propriedades presentes na maioria dos esquemas instáveis discutidos na teoria.

Isto posto, a evidência experimental torna consistente a afirmação de que há divergência no esquema trapezoidal para $\lambda < 1$ se $\alpha < \beta$ e para $\lambda > 1$ se $\alpha > \beta$. Tal divergência junto a observação de forte caráter dissipativo nos casos complementares leva-nos a considerar o uso do esquema apenas para $\lambda \approx 1$ ou $\alpha \approx \beta$, tornando-o de pouca utilidade para aplicações de interesse. Embora existam casos de uso do esquema trapezoidal com sucesso, como em [5], advogamos o uso do esquema box.

		Parâmetros: $\alpha = 0.01, \beta = 0.1$:								
$M \setminus \lambda$		<i>0.1</i>	<i>0.25</i>	<i>0.5</i>	<i>0.9</i>	<i>1</i>	<i>1.1</i>	<i>2</i>	<i>4</i>	<i>10</i>
<i>20</i>		1,484	1,133	1,036	0,994	0,990	0,986	0,968	0,957	0,951
<i>40</i>		1,484	1,133	1,036	0,995	0,990	0,986	0,968	0,957	0,951
<i>80</i>		1,484	1,133	1,036	0,995	0,990	0,986	0,968	0,957	0,951
<i>160</i>		1,485	1,133	1,036	0,995	0,990	0,986	0,968	0,957	0,951
<i>200</i>		1,485	1,133	1,036	0,995	0,990	0,986	0,968	0,957	0,951
<i>400</i>		1,485	1,133	1,036	0,995	0,990	0,986	0,968	0,957	0,951

		Parâmetros: $\alpha = 0.01, \beta = 1$:								
$M \setminus \lambda$		<i>0.1</i>	<i>0.25</i>	<i>0.5</i>	<i>0.9</i>	<i>1</i>	<i>1.1</i>	<i>2</i>	<i>4</i>	<i>10</i>
<i>20</i>		80,50	4,289	1,615	1,043	0,993	0,947	0,783	0,703	0,690
<i>40</i>		82,97	4,338	1,623	1,043	0,993	0,946	0,779	0,693	0,658
<i>80</i>		84,25	4,363	1,626	1,050	0,993	0,951	0,777	0,688	0,645
<i>160</i>		84,90	4,376	1,628	1,050	0,993	0,948	0,776	0,686	0,640
<i>200</i>		85,03	4,378	1,629	1,049	0,993	0,950	0,776	0,686	0,639
<i>400</i>		85,29	4,383	1,629	1,049	0,993	0,950	0,775	0,685	0,637

		Parâmetros: $\alpha = 0.01, \beta = 2$:								
$M \setminus \lambda$		<i>0.1</i>	<i>0.25</i>	<i>0.5</i>	<i>0.9</i>	<i>1</i>	<i>1.1</i>	<i>2</i>	<i>4</i>	<i>10</i>
<i>20</i>		6079	18,07	2,600	1,096	0,996	0,907	0,629	0,521	0,545
<i>40</i>		6839	18,83	2,646	1,097	0,995	0,903	0,616	0,494	0,464
<i>80</i>		7264	19,27	2,670	1,112	0,995	0,913	0,610	0,482	0,432
<i>160</i>		7490	19,49	2,682	1,113	0,995	0,907	0,607	0,476	0,418
<i>200</i>		7536	19,54	2,685	1,110	0,995	0,910	0,607	0,475	0,415
<i>400</i>		7629	19,63	2,690	1,110	0,995	0,910	0,605	0,473	0,410

Tabela C.1: Alguns valores calculados das normas para $\alpha < \beta$. Temos que M é o numero de intervalos na discretização do espaço e λ a relação entre as discretizações do tempo e do espaço.

		Parâmetros: $\alpha = 0.1, \beta = 0.25$:								
$M \setminus \lambda$		<i>0.1</i>	<i>0.25</i>	<i>0.5</i>	<i>0.9</i>	<i>1</i>	<i>1.1</i>	<i>2</i>	<i>4</i>	<i>10</i>
<i>20</i>		1,794	1,146	0,987	0,923	0,916	0,909	0,882	0,866	0,859
<i>40</i>		1,797	1,147	0,987	0,923	0,916	0,909	0,882	0,865	0,855
<i>80</i>		1,799	1,147	0,988	0,924	0,916	0,910	0,882	0,865	0,854
<i>160</i>		1,800	1,148	0,988	0,924	0,916	0,910	0,882	0,865	0,854
<i>200</i>		1,800	1,148	0,988	0,924	0,916	0,910	0,882	0,865	0,854
<i>400</i>		1,800	1,148	0,988	0,924	0,916	0,910	0,882	0,865	0,854

		Parâmetros: $\alpha = 0.1, \beta = 1$:								
$M \setminus \lambda$		<i>0.1</i>	<i>0.25</i>	<i>0.5</i>	<i>0.9</i>	<i>1</i>	<i>1.1</i>	<i>2</i>	<i>4</i>	<i>10</i>
<i>20</i>		51,01	3,555	1,463	0,981	0,939	0,898	0,753	0,679	0,665
<i>40</i>		52,56	3,596	1,470	0,982	0,939	0,898	0,750	0,670	0,635
<i>80</i>		53,37	3,617	1,473	0,988	0,939	0,903	0,748	0,666	0,623
<i>160</i>		53,77	3,628	1,475	0,988	0,939	0,900	0,747	0,665	0,618
<i>200</i>		53,86	3,630	1,476	0,987	0,939	0,901	0,747	0,664	0,617
<i>400</i>		54,02	3,634	1,476	0,987	0,939	0,901	0,747	0,664	0,615

		Parâmetros: $\alpha = 0.1, \beta = 2$:								
$M \setminus \lambda$		<i>0.1</i>	<i>0.25</i>	<i>0.5</i>	<i>0.9</i>	<i>1</i>	<i>1.1</i>	<i>2</i>	<i>4</i>	<i>10</i>
<i>20</i>		3953	15,30	2,406	1,050	0,958	0,875	0,612	0,507	0,528
<i>40</i>		4447	16,00	2,450	1,052	0,958	0,872	0,600	0,481	0,448
<i>80</i>		4724	16,37	2,473	1,066	0,958	0,882	0,595	0,469	0,417
<i>160</i>		4870	16,56	2,484	1,067	0,958	0,876	0,592	0,464	0,404
<i>200</i>		4900	16,60	2,487	1,065	0,958	0,879	0,592	0,463	0,401
<i>400</i>		4961	16,68	2,492	1,065	0,958	0,879	0,590	0,461	0,396

Tabela C.2: Mais alguns valores calculados das normas para $\alpha < \beta$. Temos que M é o número de intervalos na discretização do espaço e λ a relação entre as discretizações do tempo e do espaço.

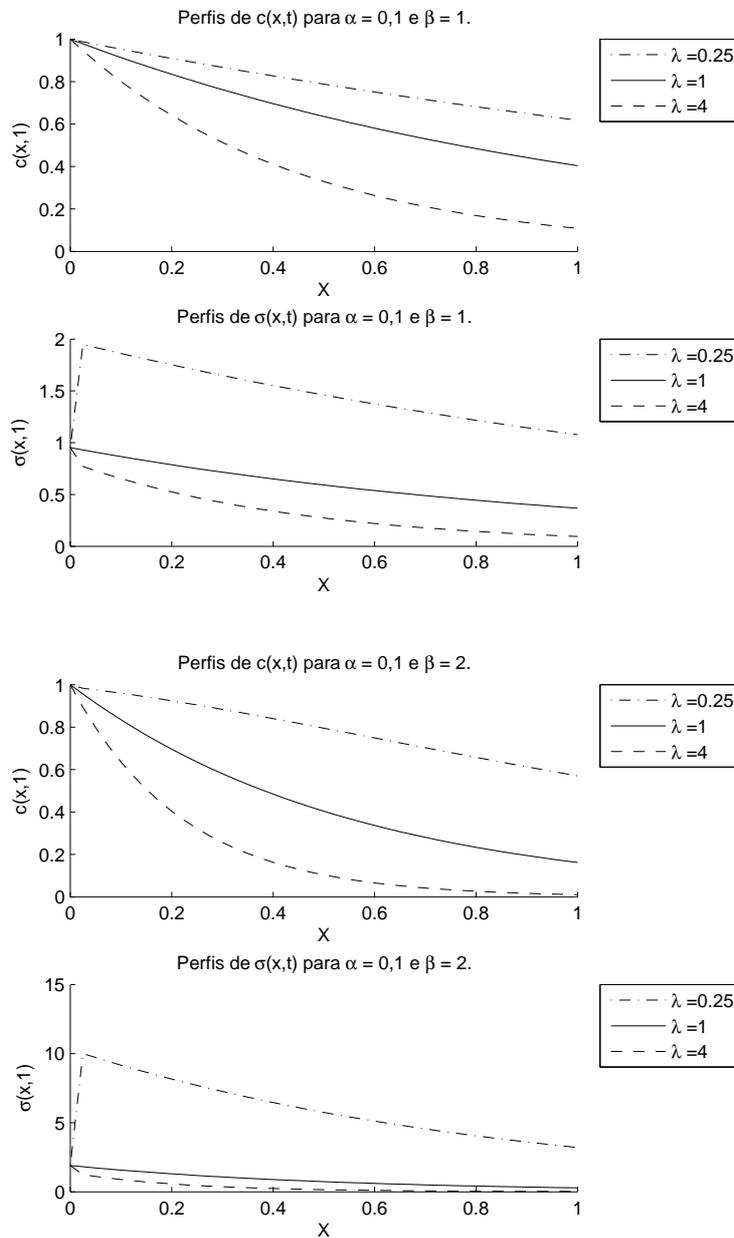


Figura C.1: Comportamento do esquema trapezoidal para $\alpha < \beta$. Utilizou-se uma discretização espacial de 40 intervalos ($h = 0,025$). Cada curva com $\lambda = 1$ é idêntica a solução exata.

		Parâmetros: $\alpha = 0,25, \beta = 0,1$:								
$M \setminus \lambda$		<i>0.1</i>	<i>0.25</i>	<i>0.5</i>	<i>0.9</i>	<i>1</i>	<i>1.1</i>	<i>2</i>	<i>4</i>	<i>10</i>
<i>20</i>		0,406	0,636	0,738	0,790	0,796	0,802	0,826	0,842	0,855
<i>40</i>		0,405	0,636	0,738	0,790	0,796	0,802	0,827	0,844	0,858
<i>80</i>		0,405	0,635	0,738	0,789	0,796	0,801	0,827	0,844	0,859
<i>160</i>		0,405	0,635	0,738	0,789	0,796	0,802	0,827	0,844	0,860
<i>200</i>		0,405	0,635	0,738	0,789	0,796	0,801	0,827	0,844	0,860
<i>400</i>		0,405	0,635	0,738	0,789	0,796	0,802	0,827	0,845	0,861

		Parâmetros: $\alpha = 1, \beta = 0,1$:								
$M \setminus \lambda$		<i>0.1</i>	<i>0.25</i>	<i>0.5</i>	<i>0.9</i>	<i>1</i>	<i>1.1</i>	<i>2</i>	<i>4</i>	<i>10</i>
<i>20</i>		0,007	0,115	0,282	0,427	0,448	0,471	0,590	0,778	2,463
<i>40</i>		0,007	0,113	0,280	0,427	0,449	0,472	0,594	0,801	3,081
<i>80</i>		0,007	0,113	0,280	0,424	0,449	0,469	0,596	0,813	3,477
<i>160</i>		0,007	0,112	0,279	0,424	0,449	0,471	0,598	0,818	3,705
<i>200</i>		0,007	0,112	0,279	0,425	0,449	0,470	0,598	0,820	3,753
<i>400</i>		0,007	0,112	0,279	0,425	0,449	0,470	0,598	0,822	3,853

		Parâmetros: $\alpha = 2, \beta = 0,1$:								
$M \setminus \lambda$		<i>0.1</i>	<i>0.25</i>	<i>0.5</i>	<i>0.9</i>	<i>1</i>	<i>1.1</i>	<i>2</i>	<i>4</i>	<i>10</i>
<i>20</i>		$< 10^{-4}$	0,012	0,083	0,206	0,230	0,259	0,470	1,281	27,19
<i>40</i>		$< 10^{-4}$	0,012	0,082	0,206	0,231	0,260	0,488	1,507	69,83
<i>80</i>		$< 10^{-4}$	0,011	0,081	0,203	0,231	0,257	0,497	1,640	117,3
<i>160</i>		$< 10^{-4}$	0,011	0,080	0,203	0,231	0,259	0,502	1,712	155,3
<i>200</i>		$< 10^{-4}$	0,011	0,080	0,204	0,231	0,258	0,503	1,727	164,6
<i>400</i>		$< 10^{-4}$	0,011	0,080	0,203	0,231	0,258	0,504	1,757	185,3

Tabela C.3: Valores calculados das normas para $\alpha > \beta$. Novamente M é o numero de intervalos na discretização do espaço e λ a relação entre as discretizações do tempo e do espaço. Omitimos os valores exatos na primeira coluna por estarem quatro ordens de grandeza abaixo do valor esperado para a convergência.

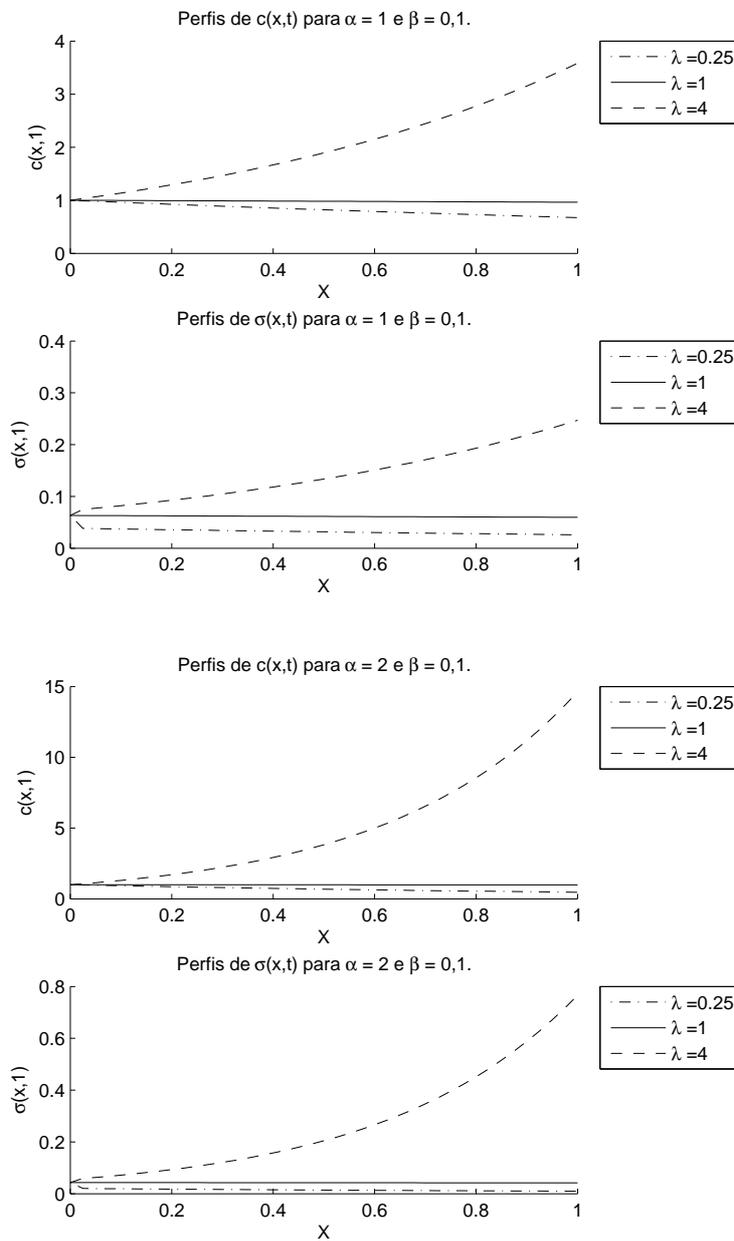


Figura C.2: Comportamento do esquema trapezoidal para $\alpha > \beta$. Utilizou-se novamente uma discretização espacial de 40 intervalos ($h = 0,025$). Cada curva com $\lambda = 1$ é idêntica a solução exata.