

**UNIVERSIDADE DE SÃO PAULO**

Instituto de Ciências Matemáticas e de Computação

**Implementação de métodos multiescala para escoamento em meios porosos na plataforma de elementos finitos *FEniCS***

**Maria Victória Paulino de Souza**

Dissertação de Mestrado do Programa de Pós-Graduação em Ciências de Computação e Matemática Computacional (PPG-CCMC)



SERVIÇO DE PÓS-GRADUAÇÃO DO ICMC-USP

Data de Depósito:

Assinatura: \_\_\_\_\_

**Maria Victória Paulino de Souza**

Implementação de métodos multiescala para escoamento  
em meios porosos na plataforma de elementos finitos  
*FEniCS*

Dissertação apresentada ao Instituto de Ciências  
Matemáticas e de Computação – ICMC-USP,  
como parte dos requisitos para obtenção do título  
de Mestra em Ciências – Ciências de Computação  
e Matemática Computacional. *EXEMPLAR DE  
DEFESA*

Área de Concentração: Ciências de Computação e  
Matemática Computacional

Orientador: Prof. Dr. Roberto Federico Ausas

**USP – São Carlos**  
**Março de 2023**

Ficha catalográfica elaborada pela Biblioteca Prof. Achille Bassi  
e Seção Técnica de Informática, ICMC/USP,  
com os dados inseridos pelo(a) autor(a)

S729i Souza, Maria Victória Paulino de  
Implementação de métodos multiescala para  
escoamento em meios porosos na plataforma de  
elementos finitos FEniCs. / Maria Victória Paulino  
de Souza; orientador Roberto Federico Ausas. -- São  
Carlos, 2023.  
118 p.

Dissertação (Mestrado - Programa de Pós-Graduação  
em Ciências de Computação e Matemática  
Computacional) -- Instituto de Ciências Matemáticas  
e de Computação, Universidade de São Paulo, 2023.

1. Meios Porosos. 2. Elementos Finitos. 3.  
Método Multiescala de Robin Acoplado. 4. FEniCS. 5.  
Simulação de Reservatórios. I. Ausas, Roberto  
Federico, orient. II. Título.

**Maria Victória Paulino de Souza**

Implementation of multiscale methods for flow in porous  
media on the *FEniCS* finite element platform

Dissertation submitted to the Instituto de Ciências  
Matemáticas e de Computação – ICMC-USP – in  
accordance with the requirements of the Computer  
and Mathematical Sciences Graduate Program, for  
the degree of Master in Science. *EXAMINATION  
BOARD PRESENTATION COPY*

Concentration Area: Computer Science and  
Computational Mathematics

Advisor: Prof. Dr. Roberto Federico Ausas

**USP – São Carlos**  
**March 2023**



*Aos meus pais.*



# AGRADECIMENTOS

---

---

Agradeço primeiramente à Deus, pois sem Ele nada disso existiria, por ter me dado sabedoria e força quando mais precisei, por ter me concedido o direito à vida. Agradeço aos meus pais, Maria Aparecida e José Onaldo, por terem me educado da melhor forma possível, por me amarem, me motivarem, me ensinar os princípios da vida, por nunca medirem esforços para realizar todos os meus sonhos e por terem vivido cada sonho e cada etapa da minha vida junto comigo, obrigada por serem meus melhores amigos, sem eles tudo isso seria apenas um sonho. Aos meus irmãos Júnior, Márcio e Marcos e minha irmã Elaine, por terem cuidado de mim, por sempre me incentivarem nos estudos, por comemorarem a cada conquista e cada etapa concluída, por me ensinarem o amor em lecionar. Agradeço à minha tia Maria Cecília, por ter sido quem me alfabetizou, quem acompanhou toda minha trajetória acadêmica, por sempre me motivar e vibrar com cada conquista alcançada. Agradeço a todos os meus amigos que de alguma maneira contribuíram para o desenvolvimento deste trabalho, às minhas amigas de apartamento que se tornaram minha família em São Carlos durante esses anos, e ao meu namorado Kevyn Mendes, pelo companheirismo, incentivo, e suportar mais essa etapa ao meu lado.

Agradeço ao meu orientador Professor Roberto Federico Ausas por aceitar me orientar, pela paciência que sempre teve comigo, por todos os conselhos dados, por conduzir minha formação acadêmica com dedicação, me mostrando os melhores caminhos a seguir tanto nas disciplinas quanto no desenvolvimento desta dissertação, por ter acreditado no meu potencial. Agradeço à todos os professores do ICMC que contribuíram para minha formação nesta trajetória. Aos meus colegas do Laboratório de Matemática Aplicada e Computação Científica (LMAC-C/USP) por todas as conversas, cafés, horas de estudos e por proporcionarem um ambiente de trabalho agradável.

Agradeço ao Programa de Pós-Graduação em Ciências de Computação e Matemática Computacional do ICMC/USP pela oportunidade do desenvolvimento deste trabalho e pela excelente formação. Agradeço ao apoio financeiro da Coordenação de Aperfeiçoamento de Pessoal de Nível Superior (CAPES).



*"Consagre ao Senhor tudo o que você faz, e os seus planos serão bem-sucedidos. "*

*(Provérbios 16:3)*



# RESUMO

SOUZA, M. V. P. **Implementação de métodos multiescala para escoamento em meios porosos na plataforma de elementos finitos FEniCS**. 2023. 118 p. Dissertação (Mestrado em Ciências – Ciências de Computação e Matemática Computacional) – Instituto de Ciências Matemáticas e de Computação, Universidade de São Paulo, São Carlos – SP, 2023.

Esta dissertação apresenta a primeira implementação do (Multiscale Robin Coupled Method) (*MRCM*) com resolutores locais  $H(\text{div})$ , em malhas não estruturadas triangulares e com geometrias complexas, na plataforma de elementos finitos de código aberto FEniCS. A implementação foi desenvolvida e testada em problemas bidimensionais. Primeiramente foi validada a implementação de um resolutor de malha fina, considerado um estudo de convergência para um problema com solução manufaturada e seguido por um estudo comparativo com um método de volumes finitos num problema com campo de permeabilidades heterogêneo. Na sequência, foi realizada a implementação do método multiescala *MRCM* na plataforma de elementos finitos e foram realizados vários estudos numéricos, incluindo um caso com campo de permeabilidades suave e uma solução manufaturada, a fim de avaliar a convergência do método, um estudo da precisão do método num caso com campo de permeabilidade heterogênea para avaliar a qualidade da aproximação, quando comparada com a solução de malha fina do problema, e por fim, um caso em geometrias complexas. O estudo realizado neste trabalho, mostra o potencial da plataforma de código aberto FEniCS para implementar métodos numéricos sofisticados de grande interesse para indústria de Óleo e Gás.

**Palavras-chave:** Meios Porosos, Elementos Finitos, Método Multiescala de Robin Acoplado, FEniCS, Formulação Variacional, Simulação de Reservatórios.



# ABSTRACT

SOUZA, M. V. P. **Implementation of multiscale methods for flow in porous media on the *FEniCS* finite element platform.** 2023. 118 p. Dissertação (Mestrado em Ciências – Ciências de Computação e Matemática Computacional) – Instituto de Ciências Matemáticas e de Computação, Universidade de São Paulo, São Carlos – SP, 2023.

This dissertation presents the first implementation of the Multiscale Robin Coupled Method (MRCM) with local  $H(\text{div})$  solvers on unstructured triangular meshes and complex geometries on the opensource finite element platform FEniCS. The implementation was developed and tested on two-dimensional problems. Firstly, the implementation of a fine grid solver was validated, considering a convergence study for a problem with manufactured solution, followed by a comparative study with a finite volume method in a problem with a heterogeneous permeability field. Secondly, the implementation of the MRCM on the finite element platform was introduced and several numerical studies were carried out. Initially, a case with smooth permeability field and a manufactured solution was considered, so as to assess the convergence properties of the method. Next, a case with heterogeneous permeability field was address to evaluate the accuracy of the approximation when compared to the fine grid solution of the problem, and finally, a case involving complex geometries. The numerical study in this work shows the potential of the opensource platform FEniCS to implement sophisticated numerical methods of great interest for the Oil & Gas industry.

**Keywords:** Porous Media, Finite Elements, Multiscale Robin Coupled Method , FEniCS, Variational Formulation, Reservoir Simulation.



# LISTA DE ILUSTRAÇÕES

---

---

Figura 1 – Exemplo de discretização do domínio com uma malha estruturada e não estruturada em uma geometria complexa. . . . .	33
Figura 2 – Representação gráfica de um meio poroso. . . . .	38
Figura 3 – Esquema do experimento de filtragem de Darcy. . . . .	41
Figura 4 – Funções de base no espaço de Raviart-Thomas - $RT_0$ . . . . .	49
Figura 5 – Graus de Liberdade para Raviart-Thomas em um triângulo - ( $RT_0$ ). . . . .	49
Figura 6 – Funções de base no espaço de Raviart-Thomas - $RT_1$ . . . . .	50
Figura 7 – Graus de Liberdade para Raviart-Thomas em um triângulo - ( $RT_1$ ). . . . .	50
Figura 8 – Funções de base no espaço de Brezzi-Douglas-Marini - $BDM_1$ . . . . .	51
Figura 9 – Graus de Liberdade para Brezzi-Douglas-Marini em um triângulo - ( $BDM_1$ ). . . . .	52
Figura 10 – Funções de base no espaço de Brezzi-Douglas-Marini - $BDM_2$ (primeira parte). . . . .	52
Figura 11 – Funções de base no espaço de Brezzi-Douglas-Marini - $BDM_2$ (segunda parte). . . . .	53
Figura 12 – Graus de Liberdade para Brezzi-Douglas-Marini em um triângulo - ( $BDM_2$ ). . . . .	53
Figura 13 – Erro de discretização como função de $h$ para o elemento $RT_0$ . . . . .	56
Figura 14 – Erro de discretização como função de $h$ para o elemento $RT_1$ . . . . .	56
Figura 15 – Erro de discretização como função de $h$ para o elemento $BDM_1$ . . . . .	57
Figura 16 – Erro de discretização como função de $h$ para o elemento $BDM_2$ . . . . .	57
Figura 17 – Saturação em diferentes tempos para o caso com campo de permeabilidade absoluta homogênea. . . . .	62
Figura 18 – Campo de permeabilidade, Camada 36 do <i>benchmark</i> - SPE10 . . . . .	63
Figura 19 – Comparativo entre o o Método de Elementos Finitos e o Método de Volumes Finitos, do perfil de saturação em diferentes tempos, para o campo de permeabilidade da Camada 36. . . . .	63
Figura 23 – Representação dos detalhes da malha não estruturada, com geometria complexa do campo de saturação. . . . .	66
Figura 24 – Campo de saturação em diferentes tempos, referente a camada 36 do SPE10, com malha não estruturada e cavidades circulares no domínio com imposição de pressão na cavidade central e $\Delta t = 0.25\Delta t_{CFL}$ . . . . .	67
Figura 25 – Magnitude do campo de velocidades para o problema com cavidades circulares e campo de permeabilidade heterogêneo. . . . .	68
Figura 26 – Representação do campo de pressão em 3D. . . . .	68
Figura 27 – Domínio computacional com esquema de decomposição de domínio adotado. . . . .	70
Figura 28 – Campos de pressão e velocidade da solução exata no caso homogêneo. . . . .	83

Figura 29 – Campos de pressões do método multiescala com decomposição de domínio $4 \times 4$ e utilizando o elemento $BDM_1$ . . . . .	85
Figura 30 – Campos de pressões do método multiescala com decomposição de domínio $4 \times 4$ e utilizando o elemento $BDM_2$ . . . . .	86
Figura 31 – Solução para os campos de velocidade do método multiescala com decomposição de domínio $4 \times 4$ utilizando espaço $BDM_1$ . . . . .	87
Figura 32 – Solução para os campos de velocidade do método multiescala com decomposição de domínio $4 \times 4$ utilizando espaço $BDM_2$ . . . . .	88
Figura 33 – Permeabilidade da camada 36 do SPE10 na escala log. . . . .	92
Figura 34 – Campo de velocidades para o problema na camada 36 do SPE10 na escala log. . . . .	93
Figura 35 – Campo de pressões da solução de malha fina. . . . .	93
Figura 36 – Corte do subdomínio 22, representação da malha de elementos finitos triangular. . . . .	94
Figura 37 – Campo de pressões da solução de malha fina com os três cortes horizontais, $y=0.15$ , $y=0.5$ , $y=0.85$ . . . . .	94
Figura 38 – Campo de pressões da solução do método multiescala quando utilizado polinômios do tipo $P_1(\Gamma)$ com $\alpha = 0.01$ , $\alpha = 1.0$ e $\alpha = 100$ , com discretização $220 \times 60$ , para $BDM_1$ . . . . .	95
Figura 39 – Solução do campo de pressão ao longo das linhas horizontais da comparação da solução da malha fina com o método multiescala para $\alpha = 1.0$ , com polinômio $P_1(\Gamma)$ e espaço $BDM_1$ . . . . .	96
Figura 40 – Comparação da solução da malha fina com o método multiescala para $\alpha = 0.01$ , $\alpha = 1.0$ e $\alpha = 100$ com $P_0(\Gamma)$ e $P_1(\Gamma)$ . . . . .	98
Figura 41 – Comparação da solução da malha fina com o método multiescala para $\alpha = 0.01$ , $\alpha = 1.0$ e $\alpha = 100$ para $P_2(\Gamma)$ com $BDM_1$ . . . . .	99
Figura 42 – Comparação da solução de malha fina com a solução multiescala, considerando valores distintos para $\alpha$ e utilizando os espaços $P_0(\Gamma)$ , $P_1(\Gamma)$ e $P_2(\Gamma)$ . . . . .	100
Figura 43 – Comparação ao longo da linha central, da solução da malha fina (curva preta) com a solução multiescala (curva colorida) para $\alpha = 0.01$ , utilizando espaço $BDM_2$ . . . . .	103
Figura 44 – Permeabilidade da camada 1 do SPE1 na escala log. . . . .	104
Figura 45 – Campo de velocidades para o problema na camada 1 do SPE10 em escala log. . . . .	104
Figura 46 – Campo de pressões da solução de malha fina aplicado ao método. . . . .	105
Figura 47 – Solução ao longo da linha central entre a solução da malha fina e o método multiescala para $\alpha = 0.01$ e $\alpha = 1.0$ com $P_0(\Gamma)$ , $P_1(\Gamma)$ e $P_2(\Gamma)$ , utilizando espaço $BDM_1$ . . . . .	107
Figura 48 – Campos de pressões da solução do método multiescala quando utilizado o espaço $BDM_2$ , com $\alpha = 0.01$ para os polinômios do tipo $P_0(\Gamma)$ , $P_1(\Gamma)$ , $P_2(\Gamma)$ . . . . .	108
Figura 49 – Campos de velocidades da solução do método multiescala quando utilizado o espaço $BDM_2$ , com $\alpha = 0.01$ para os polinômios do tipo $P_0(\Gamma)$ , $P_1(\Gamma)$ , $P_2(\Gamma)$ . . . . .	109

Figura 50 – Campo de pressões para o benchmark SPE10, utilizando $RT_0$ . . . . .	110
Figura 51 – Campo de velocidades para o benchmark SPE10, utilizando $RT_0$ . . . . .	110
Figura 52 – Permeabilidade do benchmark SPE10, pressão e velocidade obtidos pelo método de malha fina (não decomposto) usando $BDM_2$ . . . . .	111



# LISTA DE CÓDIGOS-FONTE

---

---

<code>tex/solvefine.py</code> . . . . .	54
<code>tex/solveTransport.py</code> . . . . .	61
<code>tex/preprocess.py</code> . . . . .	75
<code>tex/genmeshes.py</code> . . . . .	76
<code>tex/computebasis.py</code> . . . . .	77
<code>tex/assemblyglobal.py</code> . . . . .	78
<code>tex/resolreconsglobal.py</code> . . . . .	79



# LISTA DE TABELAS

---

---

Tabela 1 – Erro de discretização da pressão $\ p - p_h\ _{L^2(\Omega)}$ do método multiescala para um problema com solução manufaturada. Decomposição de domínio fixa: $N_x \times N_y = 4 \times 4$ . . . . .	85
Tabela 2 – Erros de discretização da velocidade $\ \mathbf{u} - \mathbf{u}_h\ _{L^2(\Omega)}$ do método multiescala para um problema com solução manufaturada. Decomposição de domínio fixa: $N_x \times N_y = 4 \times 4$ . . . . .	86
Tabela 3 – Erros de discretização da pressão $\ p - p_h\ _{L^2(\Omega)}$ do método multiescala para um problema com solução manufaturada. Decomposição de domínio fixa: $N_x \times N_y = 8 \times 8$ . . . . .	89
Tabela 4 – Erro de discretização da velocidade $\ \mathbf{u} - \mathbf{u}_h\ _{L^2(\Omega)}$ do método multiescala para um problema com solução manufaturada. Decomposição de domínio fixa: $N_x \times N_y = 8 \times 8$ . . . . .	89
Tabela 5 – Erro de discretização da pressão $\ p - p_h\ _{L^2(\Omega)}$ do método multiescala para um problema com solução manufaturada. Malha fina fixa ( $N_{locx} \times N_{locy} = 40 \times 40$ ). . . . .	90
Tabela 6 – Erro de discretização da velocidade $\ \mathbf{u} - \mathbf{u}_h\ _{L^2(\Omega)}$ do método multiescala para um problema com solução manufaturada. Malha fina fixa ( $N_{locx} \times N_{locy} = 40 \times 40$ ). . . . .	90
Tabela 7 – Erro de discretização da pressão $\ p - p_h\ _{L^2(\Omega)}$ do método multiescala para um problema com solução manufaturada. Malha fina fixa ( $N_{locx} \times N_{locy} = 160 \times 160$ ). . . . .	91
Tabela 8 – Erro de discretização da velocidade $\ \mathbf{u} - \mathbf{u}_h\ _{L^2(\Omega)}$ do método multiescala para um problema com solução manufaturada. Malha fina fixa ( $N_{locx} \times N_{locy} = 160 \times 160$ ). . . . .	91
Tabela 9 – Resultados do erro da pressão em norma $L_2(R)$ comparando a solução da malha fina e a solução multiescala, com polinômios distintos e diferentes valores de $\alpha$ na condição de Robin e espaço $BDM_1$ . . . . .	101
Tabela 10 – Erro na pressão entre a solução da malha fina e a solução multiescal, na norma $L^2(R)$ , para diferentes valores de $\alpha$ , usando o espaço $P_0(\Gamma)$ . . . . .	104
Tabela 11 – Cálculo do erro na pressão, entre a solução de malha fina e a do método multiescala ( $\ p_h - p_H\ _{L^2(R)}$ ), para diferentes valores de $\alpha$ e graus polinômiais, na camada 36 do SPE10. . . . .	105



# LISTA DE ABREVIATURAS E SIGLAS

---

---

(ABF)	Arnold- Brezzi-Falk
(AC)	Arbogast- Correa
(BDM)	Brezzi-Douglas-Marini
(DG)	Galerkin Descontínuo
(GMFEM)	Generalized Multiscale Finite Element Method
(MEF)	Método de Elementos Finitos
(MHM)	Multiscale Hybrid Mixed Method
(MMMFEM)	Multiscale Mixed Mortar Finite Element Method
(MRCM)	Multiscale Robin Coupled Method
(MSFV)	Multiscale Finite Volume Method
(MuMM)	Multiscale Mixed Method
(RT)	Raviart-Thomas
(SPE)	Society of Petroleum Engineers



# SUMÁRIO

---

---

1	INTRODUÇÃO . . . . .	29
1.1	Revisão bibliográfica dos métodos multiescala . . . . .	30
1.2	Motivação e contribuições do trabalho . . . . .	33
1.3	Organização deste documento . . . . .	34
2	ESCOAMENTO EM MEIOS POROSOS: MODELAGEM E RESOLUÇÃO PELO MÉTODO DE ELEMENTOS FINITOS . . . . .	37
2.1	Meio Poroso . . . . .	37
2.1.1	<i>Porosidade</i> . . . . .	37
2.1.2	<i>Permeabilidade</i> . . . . .	38
2.1.3	<i>Saturação</i> . . . . .	39
2.1.4	<i>Viscosidade</i> . . . . .	39
2.1.5	<i>Mobilidade</i> . . . . .	40
2.2	Formulação Matemática . . . . .	40
2.2.1	<i>A Lei de Darcy</i> . . . . .	40
2.2.2	<i>Conservação da Massa</i> . . . . .	41
2.2.3	<i>Equações de Transporte em meios porosos</i> . . . . .	42
2.3	Formulação variacional do problema de malha fina . . . . .	45
2.3.1	<i>Formulação variacional contínua para o problema de Darcy</i> . . . . .	45
2.3.2	<i>Formulação variacional discreta</i> . . . . .	46
2.3.3	<i>Caracterização dos espaços discretos <math>H(\text{div}, \Omega)</math></i> . . . . .	46
2.3.3.1	<i>Espaços de Raviart-Thomas (RT)</i> . . . . .	47
2.3.3.2	<i>Espaços de Brezzi-Douglas-Marini (BDM)</i> . . . . .	50
2.4	Implementação do problema de malha fina na plataforma FEniCS . . . . .	53
2.5	Estudo de convergência num problema com solução manufaturada . . . . .	55
2.6	Um exemplo com campo heterogêneo . . . . .	57
2.6.1	<i>Implementação na plataforma FEniCS</i> . . . . .	60
3	FORMULAÇÃO MULTIESCALA PARA O PROBLEMA DE DARCY E A SUA IMPLEMENTAÇÃO EM FENICS . . . . .	69
3.1	Formulação diferencial do método MRCM . . . . .	69
3.2	Formulação variacional MRCM . . . . .	72
3.3	Detalhes de implementação do MRCM na plataforma FEniCS . . . . .	74

4	<b>ESTUDOS NUMÉRICOS COM O <i>MULTISCALE ROBIN COUPLED METHOD</i> (MRCM)</b> . . . . .	81
4.1	<b>Caso Homogêneo: solução manufaturada</b> . . . . .	82
4.1.1	<b><i>Análise dos resultados para o Experimento 1</i></b> . . . . .	84
4.1.2	<b><i>Análise de resultados para o Experimento 2</i></b> . . . . .	89
4.1.3	<b><i>Comentários finais sobre o estudo da convergência no problema com solução manufaturada</i></b> . . . . .	91
4.2	<b>Estudos de precisão no caso de permeabilidade heterogênea</b> . . . . .	92
4.3	<b>Estudo em geometrias complexas</b> . . . . .	109
5	<b>COMENTÁRIOS FINAIS E TRABALHOS FUTUROS</b> . . . . .	113
	<b>REFERÊNCIAS</b> . . . . .	115





---

## INTRODUÇÃO

---

A simulação numérica do escoamento de fluidos em meios porosos é fundamental em várias áreas da engenharia, como na análise de transporte de contaminantes em aquíferos (BEAR, 1972), na simulação de escoamentos multifásicos em reservatórios de petróleo (PEACEMAN, 1977), (CARVALHO, 2005), (SILVA, 2008) entre outros.

Os reservatórios de petróleo consistem em formações rochosas sedimentares localizadas no subterrâneo e que possuem diversos espaços vazios. Esses espaços vazios formam redes de poros interconectados que armazenam e permitem o escoamento de fluidos, como é o caso do petróleo. A exploração dos reservatórios de petróleo consiste basicamente na retirada desse fluido através de poços de produção. Para auxiliar nas estimativas e caracterização dessa produção, é essencial contar com ferramentas analíticas e numéricas que permitam simular o escoamento no meio poroso. No entanto, este é um problema de alta complexidade. Os reservatórios apresentam alta heterogeneidade devido as deformações estruturais, além de contornos complexos e descontinuidades materiais dificultando a previsão do caminho que o óleo assumirá. Também apresentam alta variabilidade na permeabilidade das formações rochosas, podendo variar de 1 mD(millidarcy) até 1000 mD. Logo, simular todas as escalas envolvidas requer vários bilhões de células, o que torna essas simulações numéricas caras, como notado por (CHEN; HUAN; MA, 2006). A situação é ainda mais dramática nos reservatórios de petróleo situados no pré-sal do Brasil, em que a espessura dos reservatórios pode chegar a até 1 km, em detrimento a reservatórios mais costumeiros, que possuem apenas alguns metros a dezenas de metros na direção vertical. Mesmo com a criação de computadores rápidos ainda existem problemas com a simulação numérica de reservatórios de petróleo devido ao grande volume de dados e tempo de processamento, já que estes simuladores não dispõem de soluções adequadas, pois são muito lentos, uma vez que foram desenvolvidos tendo em vista reservatórios menores, deste modo, existem limitações quando usados em reservatórios do pré-sal.

Dada a natureza multiescala (espacial e temporal) dos problemas encontrados, a reso-

lução numérica acurada e robustas apresenta grandes desafios (ZHOU, 2010). De início, para tentar resolver os problemas de múltiplas escalas, pensou-se nos métodos tradicionais de *ups-caling* baseados em teoria de homogeneização, que se utilizam de médias dos parâmetros em escalas mais finas para fornecer informações nas escalas maiores, mas esses métodos podem não ser apropriados ou aplicáveis, pois os problemas típicos encontrados nas aplicações não admitem separação de escalas. Alguns autores tentaram sanar este problema utilizando hipóteses empíricas ou simulações estocásticas, como (DAGAN, 2012), (CORTIS *et al.*, 2004)) entre outros. Posteriormente (COATS; DEMPSEY; HENDERSON, 1971) introduziu as pseudo-funções multifásicas para permitir a passagem de uma escala mais refinada para outra menos refinada, onde era feita a substituição das curvas de permeabilidades relativas e pressão capilar originais, por curvas aproximadas obtidas por meio de procedimentos algébricos. Apesar de que estes métodos possam ter sucesso em alguns casos, neste trabalho optamos por estudar os chamados métodos multiescala, que são revisitados na sequência.

## 1.1 Revisão bibliográfica dos métodos multiescala

A fim de superar a complexidade algorítmica e seus custos computacionais, foram introduzidos os métodos multiescala, os quais exploram a estrutura multiescala do problema decompondo grandes tarefas computacionais em problemas menores, que podem ser solucionados de maneira concomitante em máquinas diferentes. Assim, usando metodologias multiescala é possível resolver o problema em uma escala com número razoável de graus de liberdade e mantendo uma precisão aceitável. A sua vez, os métodos multiescala possuem implementações baseadas em métodos de volumes finitos, métodos de elementos finitos primais e/ou métodos de elementos finitos mistos. Os métodos multiescala possuem simplicidade na hora da implementação e possibilitam a inclusão de detalhes de escala fina do problema com custo computacional reduzido. Em termos gerais, esta classe de métodos aproxima a solução do problema, resolvendo primeiramente problemas independentes definidos em subdomínios (com ou sem sobreposição) obtendo soluções locais em paralelo. Posteriormente, um problema global de dimensão reduzida, é resolvido para acoplar as soluções locais.

Um dos trabalhos fundacionais na área, foi proposto por (HOU; WU, 1997) o *Multiscale Finite Element Method* (MsFEM) para resolver uma classe de problemas elípticos, decorrentes de materiais compostos e fluxos em meios porosos, que contêm muitas escalas espaciais. O método foi projetado para capturar com eficiência o comportamento de grande escala da solução sem resolver todos os detalhes de pequena escala. Isso se dá definindo as funções de base em cada elemento e considerando condições de contorno do tipo oscilatórias para evitar erros de ressonância entre os elementos. Porém, mesmo com o problema elíptico sendo resolvido de forma satisfatória, ainda assim o campo de velocidades obtido não era conservativo, devido ao fato de as funções de base não garantirem conservação nas interfaces entre os elementos. Então (CHEN; HOU, 2003) mostraram que um campo de velocidades conservativo é primordial para a obtenção

de uma solução acurada para o problema de transporte, foi então que, utilizando um *Mixed Finite-Element Multiscale Method*, conseguiram obter um campo de velocidades conservativo na escala fina. A partir disto foram desenvolvidos outros métodos mistos multiescala, para simular problemas de fluxo bifásico em meios porosos, como *Multiscale Mixed Mortar Finite Element Method* (MMMFEM) (ARBOGAST *et al.*, 2007), onde a continuidade da pressão é satisfeita na escala da malha fina, enquanto a continuidade do fluxo normal é garantida fracamente em uma escala maior. Temos também o *Multiscale Hybrid Mixed Method* (MHM) (HARDER; PAREDES; VALENTIN, 2013), no qual a continuidade do fluxo normal é satisfeita na escala da malha fina e a continuidade da pressão é imposta fracamente em uma escala maior. Temos também o *Multiscale Mixed Method* (MuMM) (Francisco, 2014), *Multiscale Robin Coupled Method* (MRCM) (GUIRALDELLO *et al.*, 2018), baseados em uma decomposição de domínio não sobreposto, que considera a continuidade fraca de fluxos e pressões normais através da imposição de condições de contorno de Robin. Em alguns destes casos, o método precisa ser complementados com esquemas de post-processo ou *Downscaling* para recuperar um campo de velocidades contínuo na escala fina. Neste contexto, dentro dos métodos multiescala de interesse, o Método de Volumes Finitos Multiescala (MsFVM), desenvolvido por (JENNY; LEE; TCHELEPI, 2003) para domínios bidimensionais e malhas estruturadas, merece um destaque. Neste, o objetivo é capturar os efeitos da transmissibilidade da malha fina usando funções de base. Para garantir que o problema seja conservativo em malhas grossas primais, eles criaram uma nova malha denominada como malha grossa dual, formada a partir da malha grossa primal. Para garantir um campo de velocidade na malha fina conservativo, Jenny e coautores resolveram um novo conjunto de funções de base na malha grossa primal.

Nesta dissertação nos concentraremos nos **Métodos de Elementos Finitos Mistos Multiescala**, em especial utilizaremos o *Multiscale Robin Coupled Method* (MRCM). O MRCM pode ser compreendido como uma generalização dos métodos MMMFEM e MHM com determinadas escolhas que representam as incógnitas de interface. O método também pode-se ver como uma generalização do método MuMM. Como mencionado em (GUIRALDELLO *et al.*, 2018), no MRCM, uma das características salientes do método é que este permite definir de forma independente os espaços de pressão e fluxo sobre o esqueleto da decomposição. A precisão do MRCM depende da escolha destes espaços de interface bem como um parâmetro algorítmico  $\beta$  que aparece nas condições de acoplamento impostas nas interfaces entre os subdomínios. Este método vem sendo analisado em diversos trabalhos com diferentes formas de espaços de interface adotados no esqueleto da decomposição do domínio, tais como, espaços polinomiais (GUIRALDELLO *et al.*, 2020), (JARAMILLO *et al.*, 2022)), espaços informados (GUIRALDELLO *et al.*, 2019), (ROCHA *et al.*, 2020)) e espaços baseados na física do problema (ROCHA *et al.*, 2021)). Os autores em (GUIRALDELLO *et al.*, 2019) fizeram uma extensa avaliação numérica do MRCM empregando espaços polinomiais e espaços *informados*, i.e., funções de base que levam em conta a estrutura local do meio poroso na vizinhança das interfaces entre os subdomínios. Foram estudadas diferentes distribuições das incógnitas entre pressão e

fluxo, e varias escolhas para o parâmetro  $\beta$  e foi feita uma comparação da precisão das soluções com dois dos métodos multiescala já mencionados, o MMMFEM e o MHM, considerando campos de permeabilidade realistas e muito heterogêneos tomados do famoso benchmark SPE (SPE10). Outro fator que foi possível observar e destacar na utilização do MRCM, é que ao realizar uma distribuição equilibrada das incógnitas da interface entre pressão e fluxo, o método se torna bastante atraente tanto em precisão quanto em custo computacional.

Para completar o panorama, em (GUIRALDELLO *et al.*, 2020) foram propostos dois tipos de pós processamento ou técnicas de *Downscaling* com o objetivo de recuperar um campo de velocidades conservativo na escala fina, que seja apropriado portanto para resolver um problema de transporte hiperbólico. Os métodos propostos foram testados em problemas de escoamento monofásico considerando campos de permeabilidade altamente heterogêneos para modelar o transporte de contaminantes no subsolo. Estes métodos operam em pequenas regiões sobrepostas e são projetadas para serem implementados em máquinas paralelas, tornando-os assim, relativamente baratos. Houve ainda a realização de simulações numéricas que comparam o desempenho dos métodos com o procedimento de post-processo padrão de *downscaling*, que consiste em tomar a média das velocidades a cada lado das interfaces.

Já, em (JARAMILLO *et al.*, 2022) o método MRCM foi testado numa implementação paralela tridimensional em computadores *multi-core* e seu desempenho computacional é avaliado por meio de experimentação numérica. No trabalho são exibidos resultados para problemas numéricos que variam de milhões à bilhões de células computacionais em formações rochosas anisotrópicas altamente heterogêneas e os resultados são muito promissores em termos de custo e acurácia.

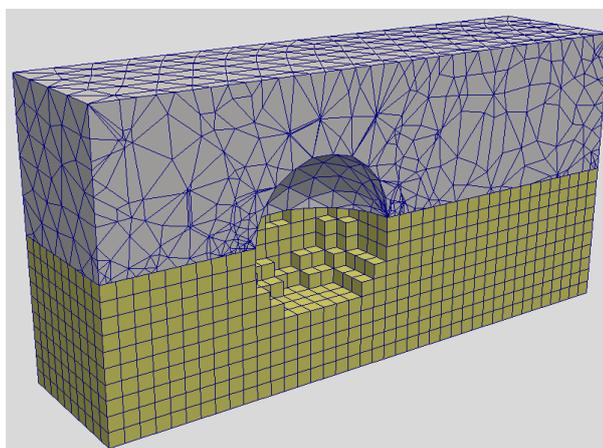
Continuando, em (ROCHA *et al.*, 2020) foi realizada uma investigação do escoamento bifásico (não linear) em meios porosos usando o MRCM para resolver o problema da Darcy a fim de encontrar os campos de velocidade e pressão. Como usual, foi considerada uma estratégia de segregação do operador, onde a saturação de uma das fases e o campo de velocidade são atualizados de forma sequencial. Uma das principais conclusões do trabalho é que o acoplamento de subdomínios vizinhos através da imposição de uma pressão contínua é a melhor estratégia para aproximar o problema de escoamento bifásico na presença de canais de alta permeabilidade, enquanto que para regiões com formações de baixa permeabilidade, ocorre o contrário, *i.e.*, a melhor estratégia é acoplar os subdomínios através de um fluxo contínuo. Assim como nos trabalhos precedentes, neste artigo, a importância relativa das condições de contorno de tipo Dirichlet e Neumann no acoplamento de subdomínios foi controlada ajustando o coeficiente algorítmico na condição de Robin. Para tal fim, foi proposta uma estratégia adaptativa do parâmetro de Robin, de maneira de ajustar o seu valor dependendo das propriedades locais do campo de permeabilidades. Novamente, para tornar o campo de velocidades contínuo nas interfaces, e portanto, apropriado para resolver o problema de transporte da saturação, um esquema de *Downscaling* foi aplicado. Observou-se uma precisão sem precedentes ao aplicar tal

estratégia, quando comparado às soluções obtidas utilizando outros métodos mistos multiescala padrão. Finalmente, em (ROCHA *et al.*, 2021) foram propostos novos espaços de interface, **baseados na física** para lidar com campos de permeabilidade na presença simultânea de fraturas e barreiras, acomodados respectivamente pelos espaços de pressão e fluxo, com objetivo de capturar os efeitos de alto contraste de estruturas canalizadas. A versão adaptativa do MRCM apresentada em (ROCHA *et al.*, 2020) foi combinada com o uso destes espaços e as simulações para resolver problemas de escoamentos monofásico e bifásico em diferentes meios formações heterogêneos, obtendo resultados superiores em comparação com outros métodos multiescala com custo computacional similar.

## 1.2 Motivação e contribuições do trabalho

No presente trabalho será considerada a simulação do escoamento em meios porosos pelo método multiescala MRCM. Nos trabalhos citados anteriormente, nos quais o método MRCM foi estudado numericamente com grande detalhe para resolver problemas de escoamento monofásico e bifásico, a maior ênfase foi dada ao estudo das melhores opções de acoplamento entre os subdomínios, escolha de parâmetros algorítmicos e espaços de interface. No entanto, pouca atenção foi dada ao estudo dos resolutores locais de malha fina, que são essenciais para construir as funções de base multiescala e para resolver o problema global de malha fina com o qual as soluções são comparadas. Nas referências bibliográficas apresentadas na seção anterior, foram utilizados métodos de volumes finitos de baixa ordem em malhas cartesianas ortogonais. Neste trabalho, o principal objetivo é preencher esta lacuna, explorando o uso de espaços de elementos finitos *Hdiv* de maior ordem em malhas não estruturadas que eventualmente possam se adaptar a geometrias mais complexas, tal como é ilustrado na figura 1, a qual exhibe a diferença entre a discretização com malhas de volumes finitos ortogonais e malhas de elementos finitos não estruturadas.

Figura 1 – Exemplo de discretização do domínio com uma malha estruturada e não estruturada em uma geometria complexa.



Fonte:(PIC-C, 2023)

Neste ponto é importante lembrar que os métodos de elementos finitos para aproximar o problema de Darcy que utilizam espaços contínuos de Lagrange, podem apenas ser usados para simular escoamentos em meios porosos homogêneos ou nos quais o coeficiente de permeabilidade varia suavemente. No entanto, interpolações contínuas não são adequadas para aproximar problemas em meios altamente heterogêneos devido as suas propriedades descontínuas. Isto se deve ao fato de que na interface das descontinuidades a componente normal da velocidade de Darcy deve ser contínua (conservação da massa), mas a componente tangencial é descontínua, e qualquer formulação baseada em interpolações Lagrangianas contínuas para a velocidade falha na representação da descontinuidade tangencial, produzindo aproximações imprecisas e oscilações espúrias (CORREA; LOULA, 2007). Uma alternativa para superar esta limitação são os métodos de Galerkin Descontínuo (DG) (BREZZI F., 2005). Outra alternativa são os espaços de aproximação de Raviart-Thomas ( $RT_k$ ), que são caracterizados pela imposição da continuidade da componente normal da velocidade aliada com específicas interpolações descontínuas para a pressão (RAVIART; THOMAS, 1977). Também o espaço de Brezzi - Douglas - Marini (BDM) (WANG, 1985) é uma escolha clássica. Outros exemplos de aproximações estáveis para o problema de Darcy são os espaços de Arnold, Brezzi e Falk (ABF) (ARNOLD; BOFFI; FALK, 2005) e o espaço de Arbogast e Correa (AC) (ARBOGAST; CORREA, 2016). No presente trabalho, iremos utilizar os espaços de Raviart-Thomas e os espaços de Brezzi-Douglas-Marini. Estes espaços possam ser usados tanto em malhas quadrilaterais como triangulares.

Para atingir este objetivo, a proposta é utilizar a plataforma de elementos finitos FEniCS (LOGG *et al.*, 2012), a qual permite grande flexibilidade na escolha dos espaços de aproximação. Não temos conhecimento de muitos trabalhos em que a plataforma FEniCS tenha sido usada para implementar métodos multiescala para resolver o mesmo tipo de problemas de escoamento em meios porosos. O único trabalho que compartilha algumas similaridades é (SPIRIDONOV; VASILYEVA; CHUNG, 2020), porém o método multiescala usado é o *Generalized Multiscale Finite Element Method* (CHUNG; EFENDIEV; HOU, 2016) e as aplicações consideradas são bastante distintas, estando focadas no tratamento de meios porosos não saturados e fraturados. Por outra parte, não está claro no trabalho, quais espaços discretos são usados no nível dos subdomínios. Finalmente, é interessante mencionar que atualmente encontra-se em desenvolvimento uma biblioteca chamada *Multiphenics*, a qual é baseada no projeto FEniCS e permite lidar com formulações baseadas em decomposição de domínio. Em princípio, o uso da biblioteca foi considerado, no entanto, foram encontradas algumas limitações que impediram a implementação do método multiescala MRCM.

### 1.3 Organização deste documento

O restante desta dissertação está estruturada da seguinte forma:

- o No [Capítulo 2](#) serão apresentados o problema de Darcy e o problema de transporte de

massa em meios porosos. Serão lembradas algumas definições de conceitos físicos e a formulação matemática do problema, *i.e.*, as equações governantes, as formulações variacionais e a sua discretização e implementação na plataforma *FEniCS*. Por fim serão apresentados dois estudos do escoamento em meios porosos, ainda no nível da malha fina, para ilustrar as capacidades da plataforma.

- No [Capítulo 3](#) será apresentada a formulação do método multiescala MRCM, tanto na sua forma diferencial quanto variacional, e os detalhes da implementação na plataforma *FEniCS*.

- O [Capítulo 4](#) aborda os estudos numéricos realizados com o método MRCM, no qual serão exibidos, por um lado, experimentos numéricos envolvendo campos de permeabilidades homogêneos, para uma análise do erros numéricos, baseado numa solução manufaturada, e por outro lado, vários casos envolvendo campos de permeabilidade altamente heterogêneos e geometrias complexas, discretizadas com malhas não estruturadas de elementos finitos.

- Por fim, no [Capítulo 5](#) são apresentadas as conclusões de todo o estudo realizado nesta dissertação e a proposta dos trabalhos futuros.



---

# ESCOAMENTO EM MEIOS POROSOS: MODELAGEM E RESOLUÇÃO PELO MÉTODO DE ELEMENTOS FINITOS

---

---

## 2.1 Meio Poroso

Meio poroso ou material poroso é um material composto de uma fase sólida que contém espaços vazios ou ocos, chamados de poros, que podem ser preenchidos por um ou mais fluido. Normalmente, a porção esquelética deste material é chamada de matriz ou estrutura. A distribuição espacial da matriz sólida e dos poros não é necessariamente uniforme, podendo apresentar alta heterogeneidade ou ser considerada aleatória. Já, o espaço poroso interconectado é o espaço por onde o fluido escoar. Exemplos de meios porosos naturais são: rochas, solos, zeólitos, tecidos biológicos, entre outros. Já os materiais produzidos pelo homem, temos como exemplo: concretos, cerâmicas, cimentos. Os meios porosos orgânicos, por exemplo, são os ossos, pulmões e rins.

Para modelar escoamentos em rochas sedimentares é necessário descrever a geometria e as propriedades físicas das rochas, na qual refletem a capacidade que a mesma tem em transmitir e acumular fluidos em seus poros, e as propriedades do fluido que dependem da pressão do reservatório, como: porosidade, permeabilidade absoluta, permeabilidade relativa, saturação, viscosidade e densidade.

### 2.1.1 Porosidade

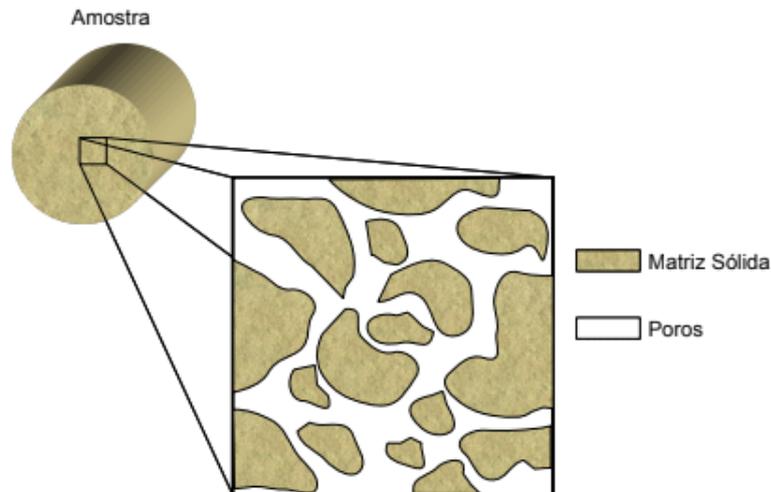
A porosidade  $\phi$  é um parâmetro físico utilizado para quantificar os espaços vazios em um determinado material, ou seja, a porosidade de um meio é a fração do volume que é ocupada

por espaços vazios (BERRYMAN; WANG, 2000), isto é

$$\phi = \frac{V_p}{V_t}, \quad (2.1)$$

onde  $V_p$  é o volume do poro e  $V_t$  é o volume total. Os espaços vazios são divididos entre poros interconectados, onde há escoamento, e poros desconectados.

Figura 2 – Representação gráfica de um meio poroso.



Fonte: (LUNA, 2012)

### 2.1.2 Permeabilidade

A *permeabilidade absoluta*, denotada por  $\mathbf{K}$  representa a habilidade do meio poroso em transmitir fluidos através dos seus poros interconectados. Para (ROSA; CARVALHO; XAVIER, 2006) é uma propriedade que indica o quanto um meio poroso permite o escoamento de um fluido. A permeabilidade do solo pode ser classificada através do coeficiente de permeabilidade e tal coeficiente pode ser determinado experimentalmente através da Lei de Darcy. Denominamos permeabilidade absoluta quando o meio transmite um único fluido. Em geral, a permeabilidade absoluta é representada na forma de um tensor, que no caso 2D se escreve

$$\mathbf{K} = \begin{bmatrix} K_{xx} & K_{xy} \\ K_{yx} & K_{yy} \end{bmatrix}. \quad (2.2)$$

Fazendo uma mudança de base, ( $\mathbf{K}$ ), às vezes, pode ser diagonalizado. De fato, na maioria dos casos, devido às estruturas do reservatório, considerar o caso de tensor diagonal, caracterizado por uma permeabilidade horizontal e uma vertical é suficientes (HASLE; LIE; QUAK, 2007). Se as componentes diagonais do tensor são idênticas ( $K_{xx} = K_{yy}$ ) e as outras componentes do tensor são nulas ( $K_{xy} = K_{yx} = 0$ ), então, podemos dizer que o meio poroso será isotrópico. Caso contrário, é chamado de meio porosos anisotrópico.

No que diz respeito as equações que modelam os escoamentos em meios porosos, a permeabilidade é um fator de proporcionalidade entre a taxa de escoamento e a diferença de pressão ao longo de uma distância. Sua unidade no Sistema Internacional de Unidades (SI) é  $m^2$ , sendo mais comumente expressa em unidades de Darcy [ $D$ ] ou mili-Darcy [ $mD$ ], onde  $1D \approx 0.987 \times 10^{-12} m^2$ . Tipicamente, reservatórios tem permeabilidade variando de 0.1 mD a 20D para líquidos e menos de 10mD para gases.

Um conceito importante quando temos mais de um fluido no meio, é o da *permeabilidade relativa*, que são definidas como a razão entre a permeabilidade efetiva e a permeabilidade absoluta. Existem vários modelos de permeabilidades relativas. Um exemplo é o modelo de Brooks-Corey e Van Genuchten. Outro modelo muito utilizado pela indústria petrolífera é o chamado modelo modificado de Brooks-Corey, porém estes modelos introduzem muitos parâmetros. Em modelos mais simplificados, as permeabilidades relativas são consideradas como funções monótonas (EWING, 1983) que assumem valores únicos em  $[0, 1]$  para cada valor da saturação  $S \in [0, 1]$  definida na sequência, sendo assim, no presente trabalho serão utilizadas as seguintes expressões

$$k_{rw}(S_w) = (S_w)^2 \quad \text{e} \quad k_{ro}(S_w) = (1 - S_w)^2. \quad (2.3)$$

onde,  $w$  e  $o$ , representam água e óleo respectivamente.

### 2.1.3 Saturação

A saturação ( $S_\alpha$ ) de um fluido em um meio poroso é a dado pela razão entre o volume do fluido e o volume dos poros, definido como

$$S_\alpha = \frac{V_\alpha}{V_p}. \quad (2.4)$$

onde,  $\alpha$ , denota a fase água  $w$  e a fase óleo  $o$ . Sendo assim, para o fluxo bifásico em um meio poroso completamente saturado, considera-se

$$S_w + S_o = 1. \quad (2.5)$$

### 2.1.4 Viscosidade

Viscosidade  $\mu$  é a propriedade física referente à resistência de um fluido ao escoamento, isto é, ao transporte microscópico de quantidade de movimento por difusão molecular, ou seja, quanto maior a viscosidade, menor será a velocidade com que o fluido se movimenta. Além disso, a viscosidade é uma função de pressão e de temperatura, e está presente em qualquer equação que descreve movimento de fluidos, e sua unidade de medida é [ $Pa \cdot s$ ].

### 2.1.5 Mobilidade

A mobilidade de uma fase é definida como sendo a relação entre sua permeabilidade relativa e viscosidade, isto é

$$\lambda_w = \frac{k_{rw}}{\mu_w} \quad \text{e} \quad \lambda_o = \frac{k_{ro}}{\mu_o} \quad (2.6)$$

para água e óleo, respectivamente.

## 2.2 Formulação Matemática

Será apresentado as equações que modelam o escoamento de um fluido, que podem ser representados por um sistema de equações diferenciais parciais não-lineares. Com o objetivo de reduzir a complexidade do modelo matemático as seguintes hipóteses foram consideradas:

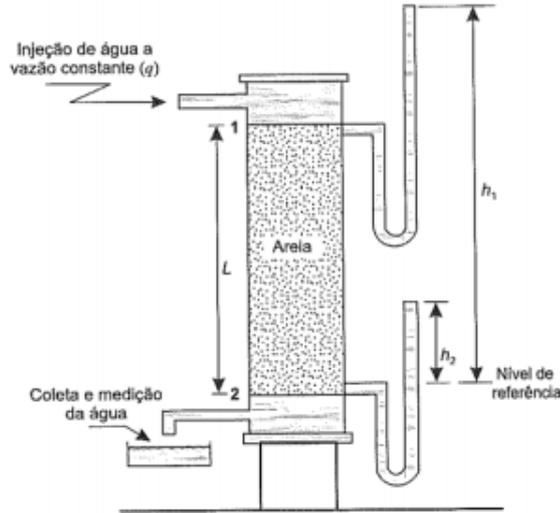
- incompressibilidade da rocha e dos fluidos;
- viscosidade constante;
- escoamento imiscível;
- meio poroso rígido;
- temperatura constante;
- capilaridade desconsiderada, ou seja,  $p_o = p_w$ ;
- efeitos gravitacionais desprezados.

Apesar de introduzir estas hipóteses simplificadoras, o problema considerado ainda é importante para o estudo do escoamento em meios porosos e preserva os ingredientes relevantes que são de interesse para este trabalho, que é a resolução pelo método multiescala MRCM, usando o método dos elementos finitos em espaços Hdiv nos subdomínios e a plataforma FEniCS.

### 2.2.1 A Lei de Darcy

Em 1856 Henry Darcy observou através do sistema municipal de água de sua cidade, Dijon- França, o escoamento da água em um filtro de areia homogêneo (Figura 3). A partir desta análise ele percebeu que havia uma relação direta entre a vazão que atravessa o leito de areia e a diferença de carga associada a essa vazão, com isso foi obtido o primeiro estudo de escoamento em meios porosos. (DARCY, 1856), estabeleceu uma relação para a taxa de fluxo de água em filtros de areia, onde a velocidade de filtração é proporcional ao gradiente de pressão, desta forma, a relação encontrada nos originou a conhecida Lei de Darcy (2.7), a qual é capaz de tornar possível estudar a porosidade, a vazão da água e a permeabilidade.

Figura 3 – Esquema do experimento de filtragem de Darcy.



Fonte: (ROSA; CARVALHO; XAVIER, 2006)

A equação conhecida como Lei de Darcy é dada da seguinte forma:

$$\mathbf{u}_\alpha = -\mathbf{K}\lambda_\alpha(\nabla p_\alpha - \rho_\alpha g \nabla z). \quad (2.7)$$

onde  $\mathbf{K}$  é o tensor de permeabilidade absoluta do meio poroso,  $\lambda_\alpha = k_{r\alpha}/\mu_\alpha$  é a mobilidade do fluido,  $\mathbf{u}$  é a velocidade da fase  $\alpha$ ,  $p_\alpha$  é a pressão da fase  $\alpha$ ,  $\rho_\alpha$  é a massa específica da fase  $\alpha$ ,  $\mathbf{g}$  é o módulo da aceleração gravitacional,  $z$  é o componente do vetor deslocamento orientado para baixo, mas que no presente trabalho será desprezado.

### 2.2.2 Conservação da Massa

O escoamento de um fluido em um meio poroso é o fluxo que ocorre nos espaços vazios interconectados do reservatório. Se for considerado um volume elementar representativo  $V$ , a conservação de massa do fluido implica que a massa acumulada em  $V$  deve ser igual a taxa de fluxo pelas bordas de  $V$  mais a quantidade de massa injetada em  $V$ , ou seja

$$\frac{\partial}{\partial t} \int_V \phi \rho \, dx + \int_{\partial V} \rho \mathbf{u} \cdot \mathbf{n} \, ds = \int_V q \, dx. \quad (2.8)$$

Aplicando o Teorema de Gauss (STEWART; ROMO, 1999), temos

$$\frac{\partial}{\partial t} \int_V \phi \rho \, dx + \int_V \nabla \cdot (\rho \mathbf{u}) \, dx = \int_V q \, dx \quad (2.9)$$

manipulando a equação anterior, podemos escrever

$$\int_V \left( \frac{\partial}{\partial t} (\phi \rho) + \nabla \cdot (\rho \mathbf{u}) \right) dx = \int_V q \, dx. \quad (2.10)$$

Como a equação 2.10 vale para qualquer volume elementar  $V$ , obtemos a equação diferencial parcial

$$\frac{\partial}{\partial t}(\phi\rho) + \nabla \cdot (\rho\mathbf{u}) = q. \quad (2.11)$$

### 2.2.3 Equações de Transporte em meios porosos

Considerando os escoamentos bifásicos em meios porosos, pode-se considerar o fluxo de dois fluidos (água e óleo), nestes modelos tratamos o transporte para a saturação dos fluidos envolvidos no escoamento. Estes escoamentos, assim como nos casos monofásicos, são induzidos devido à aplicação de pressão ou devido à imposição de fluxo nas bordas do domínio.

Assumindo um modelo bifásico que tem como incógnitas o campo de velocidades ( $\mathbf{u}$ ), o campo de pressões ( $p$ ) e a saturação ( $S$ ) apenas da fase água, utilizaremos uma formulação segregada em que as equações básicas de movimento serão obtidas a partir da Equação de Conservação de massa e da Lei de Darcy, onde o escoamento é descrito por uma equação elíptica de pressões e uma equação hiperbólica de saturações, acopladas através do campo de velocidades. No caso do problema hiperbólico pode ser resolvido implicitamente ou explicitamente, o que introduz severas restrições no passo de tempo quando discretizado. Com isso, para a solução das equações que descrevem o escoamento bifásico no interior dos reservatórios de petróleo, utiliza-se a metodologia (*Implicit Pressure Explicit Saturation*) (*IMPES*), a qual é bastante popular na indústria de petróleo (EWING, 1983)

Considerando a saturação  $S_\alpha \in [0, 1]$  a fração do volume que é ocupado pela fase  $\alpha$ , com  $\alpha \in \{w, o\}$ , onde  $w$  e  $o$  representam água e óleo respectivamente, e considerando um meio completamente saturado, ou seja  $S_w + S_o = 1$ , então a conservação da massa para cada uma das fases, é dada por

$$\frac{\partial}{\partial t}(\phi\rho_\alpha S_\alpha) + \nabla \cdot (\rho_\alpha\mathbf{u}_\alpha) = q_\alpha, \quad (2.12)$$

a fim de obtermos a equação da pressão, primeiramente iremos expandir as derivadas temporais

$$\frac{\partial\phi}{\partial t}\rho_o S_o + \phi\rho_o \frac{\partial S_o}{\partial t} + \nabla \cdot (\rho_o\mathbf{u}_o) = q_o, \quad (2.13)$$

$$\frac{\partial\phi}{\partial t}\rho_w S_w + \phi\rho_w \frac{\partial S_w}{\partial t} + \nabla \cdot (\rho_w\mathbf{u}_w) = q_w, \quad (2.14)$$

dividindo as equações 2.13 e 2.14 por  $\rho_o$  e  $\rho_w$  respectivamente, pois foi considerado que as densidades são constantes, obtemos

$$\frac{\partial\phi}{\partial t}S_o + \phi \frac{\partial S_o}{\partial t} + \nabla \cdot (\mathbf{u}_o) = q_o/\rho_o, \quad (2.15)$$

$$\frac{\partial\phi}{\partial t}S_w + \phi \frac{\partial S_w}{\partial t} + \nabla \cdot (\mathbf{u}_w) = q_w/\rho_w, \quad (2.16)$$

Definindo a velocidade total  $\mathbf{u} = \mathbf{u}_w + \mathbf{u}_o$  e  $q = q_o/\rho_o + q_w/\rho_w$ , obtém-se

$$(S_w + S_o) \frac{\partial \phi}{\partial t} + \phi \frac{\partial}{\partial t} (S_w + S_o) + \nabla \cdot \mathbf{u} = q, \quad (2.17)$$

como estamos considerando um meio totalmente saturado e negligenciando os efeitos de compressibilidade do meio poroso, então obtemos

$$\nabla \cdot \mathbf{u} = q. \quad (2.18)$$

Considerando a Lei de Darcy para escoamentos bifásicos, dada em 2.7

$$\mathbf{u}_\alpha = -\mathbf{K} \lambda_\alpha (\nabla p_\alpha - \rho_\alpha g \nabla z).$$

tomando as hipóteses simplificadoras, em que o escoamento é incompressível, isotérmico, sem efeitos gravitacionais e de pressão capilar das fases imiscíveis cujas respectivas massas específicas são constantes num meio poro incompressível, e assumindo a pressão global do sistema como  $p = p_w = p_o$ , podemos escrever a velocidade para cada uma das fases, nas quais serão multiplicadas por  $\lambda_o$  e  $\lambda_w$ , teremos

$$\lambda_o \mathbf{u}_w = -\mathbf{K} \lambda_w \lambda_o \nabla p, \quad (2.19)$$

$$\lambda_w \mathbf{u}_o = -\mathbf{K} \lambda_o \lambda_w \nabla p, \quad (2.20)$$

subtraindo 2.19 de 2.20, rearranjando os termos e utilizando  $\mathbf{u}_o = \mathbf{u} - \mathbf{u}_w$ , temos

$$\lambda_o \mathbf{u}_w - \lambda_w \mathbf{u} + \lambda_w \mathbf{u}_w = -\mathbf{K} \lambda_w \lambda_o \nabla p + \mathbf{K} \lambda_o \lambda_w \nabla p, \quad (2.21)$$

$$\lambda_o \mathbf{u}_w - \lambda_w \mathbf{u} + \lambda_w \mathbf{u}_w = 0. \quad (2.22)$$

Assim, encontramos que

$$\mathbf{u}_w = \frac{\lambda_w \mathbf{u}}{\lambda_o + \lambda_w}. \quad (2.23)$$

Definindo ainda  $\lambda_\alpha = \lambda_\alpha(S_\alpha)$  como a mobilidade da fase  $\alpha$ , dada por  $\lambda_\alpha = \frac{kr_\alpha(S_\alpha)}{\mu_\alpha}$ , onde  $kr_\alpha(S_\alpha)$  é a permeabilidade relativa à fase  $\alpha$ . Com o objetivo de escrever a equação hiperbólica em função apenas da saturação da água, considera-se fluxo fracionado da água como  $f_w = \lambda_w/\lambda$ , onde  $\lambda = \lambda_w + \lambda_o$ , desta forma, podemos reescrever a equação 2.23 como

$$\mathbf{u}_w = f_w \mathbf{u}. \quad (2.24)$$

Substituindo 2.24 em 2.12 em função da fase água, temos

$$\phi \frac{\partial S_w}{\partial t} + \nabla \cdot (f_w \mathbf{u}) = \frac{q_w}{\rho_w}. \quad (2.25)$$

Utilizando a definição dada anteriormente por 2.3, onde temos que  $k_{rw}(S_w) = (S_w)^2$  e  $k_{ro}(S_w) = (1 - S_w)^2$ , com isso temos que

$$\lambda = \lambda_w(S_w) + \lambda_o(S_w) = \frac{k_{rw}(S_w)}{\mu_w} + \frac{k_{ro}(S_w)}{\mu_o} = \frac{(S_w)^2}{\mu_w} + \frac{(1 - S_w)^2}{\mu_o} \quad (2.26)$$

e

$$f_w = \frac{\lambda_w(S_w)}{\lambda(S_w)} = \frac{M(S_w)^2}{M(S_w)^2 + (1 - S_w)^2}, \quad (2.27)$$

onde  $M = \mu_o/\mu_w$ . Como o termo fonte neste trabalho é considerado como 0, e escrevendo  $S_w = S$  e  $f_w = f$ , podemos reescrever a equação 2.25, da seguinte forma

$$\phi \frac{\partial S}{\partial t} + \nabla \cdot (f\mathbf{u}) = \frac{q_w}{\rho_w}. \quad (2.28)$$

Desta forma, podemos escrever o escoamento bifásico de água e óleo, considerando todas as simplificações feitas, já considerando condições de borda apropriadas por, denotando o domínio computacional por  $\Omega$ , com borda  $\partial\Omega = \Gamma_u \cup \Gamma_p$ ,

$$\left\{ \begin{array}{ll} \nabla \cdot \mathbf{u} = q & \text{em } \Omega \\ \mathbf{u} = -\lambda(S) \mathbf{K} \nabla p & \text{em } \Omega \\ \frac{\partial S}{\partial t} + \nabla \cdot (f\mathbf{u}) = \frac{q_w}{\rho_w} & \text{em } \Omega \\ \mathbf{u} \cdot \mathbf{\check{n}} = \bar{g}_u & \text{em } \Gamma_u \\ p = \bar{g}_p & \text{em } \Gamma_p \\ S = S_{\text{inlet}} & \text{em } \Gamma_- = \{\mathbf{x} \in \partial\Omega, \mathbf{u} \cdot \mathbf{\check{n}} \leq 0\} \end{array} \right. \quad (2.29)$$

Como pode-se ver, existe um acoplamento não linear entre o problema elítico envolvendo  $\mathbf{u}$  e  $p$  dados pelas primeiras duas equações e o problema hiperbólico envolvendo a saturação  $S$  dado pela terceira equação. Note que tiramos a porosidade  $\phi$  no termo da derivada temporal, já que esta sendo constante, pode ser absorvida dentro da derivada definindo uma escala de tempo  $t/\phi$ . Um caso particular do modelo anterior, que apesar de ser linear, também apresenta grande interesse, é o transporte passivo de um escalar ou traçador, que serve por exemplo para modelizar o transporte de contaminantes em aquíferos. Neste caso o problema é dado por

$$\left\{ \begin{array}{ll} \nabla \cdot \mathbf{u} = q & \text{em } \Omega \\ \mathbf{u} = -\mathbf{K} \nabla p & \text{em } \Omega \\ \frac{\partial \mathcal{C}}{\partial t} + \nabla \cdot (\mathcal{C}\mathbf{u}) = \frac{q_c}{\rho_c} & \text{em } \Omega \\ \mathbf{u} \cdot \mathbf{\check{n}} = \bar{g}_u & \text{em } \Gamma_u \\ p = \bar{g}_p & \text{em } \Gamma_p \\ \mathcal{C} = \mathcal{C}_{\text{inlet}} & \text{em } \Gamma_- = \{\mathbf{x} \in \partial\Omega, \mathbf{u} \cdot \mathbf{\check{n}} \leq 0\} \end{array} \right. \quad (2.30)$$

em que  $\mathcal{C} \in [0, 1]$  é a concentração da especie. Neste caso, os problemas aparecem desacoplados, podendo ser resolvido primeiro o problema de Darcy e a posteriori a evolução temporal do traçador passivo.

## 2.3 Formulação variacional do problema de malha fina

### 2.3.1 Formulação variacional contínua para o problema de Darcy

Nesta dissertação estamos principalmente interessando em discretizar o problema de Darcy pelo método multiescala MRCM. Por este motivo, é importante contar com um método de resolução conservativo do problema na malha fina, que discutimos na sequência. Primeiramente, o problema será rescrito de maneira simplificada como

$$\mathbf{u} = -\mathbf{K}(\mathbf{x})\nabla p, \quad \nabla \cdot \mathbf{u} = f(\mathbf{x}, t), \quad \mathbf{x} \in \Omega \quad (2.31)$$

Para resolver o problema (2.31), será considerado o método de elementos finitos mistos, baseados na formulação de Galerkin. Para formular o problema, serão utilizado os espaços de *Sobolev*,  $H(\text{div}, \Omega)$  e  $L^2(\Omega)$ , os quais são definidos como:

$$L^2(\Omega) = \left\{ q : \Omega \rightarrow \mathbb{R}, \int_{\Omega} |q(x)|^2 \Omega < \infty \right\}, \quad (2.32)$$

$$H(\text{div}, \Omega) = \left\{ \mathbf{v} \in [L^2(\Omega)]^d, \nabla \cdot \mathbf{v} \in L^2(\Omega) \right\}. \quad (2.33)$$

lembrando que  $H(\text{div}, \Omega)$  é uma espaço de Hilbert com a norma

$$\|\mathbf{v}\|_{H(\text{div}, \Omega)}^2 = \|\mathbf{v}\|_{L^2(\Omega)}^2 + \|\nabla \cdot \mathbf{v}\|_{L^2(\Omega)}^2$$

Para o caso em que  $\Gamma_p = \emptyset$ , a solução  $p$  deve ser dada no espaço  $L^2(\Omega)/\mathbb{R}$ . Na simulação do escoamento em meios porosos, a escolha de subespaços discreto de  $H(\text{div}, \Omega)$  será essencial para garantir conservatividade local, assim como acontece com os métodos de volumes finitos e os métodos de Galerkin descontínuo.

A formulação variacional contínua do problema pode ser definida de maneira usual, ou seja, a formulação pode ser obtida multiplicando as equações (2.31) por funções teste  $(\mathbf{v}, q)$ , e integrando por partes: Encontrar  $\mathbf{u} \in V_g \subset H(\text{div}, \Omega)$  e  $p \in L^2(\Omega)$  tais que

$$\int_{\Omega} \mathbf{K}^{-1} \mathbf{u} \cdot \mathbf{v} \, d\mathbf{x} - \int_{\Omega} p \nabla \cdot \mathbf{v} \, d\mathbf{x} = - \int_{\Gamma_p} \bar{g}_p (\mathbf{v} \cdot \hat{\mathbf{n}}) \, ds = 0, \quad \forall \mathbf{v} \in V_0, \quad (2.34)$$

$$\int_{\Omega} q \nabla \cdot \mathbf{u} \, d\mathbf{x} = \int_{\Omega} f q \, d\mathbf{x}, \quad \forall q \in L^2(\Omega). \quad (2.35)$$

em que  $V_g = \{\mathbf{v} \in H(\text{div}, \Omega), \mathbf{v} \cdot \hat{\mathbf{n}} = \bar{g}_u \, \forall \mathbf{x} \in \Gamma_u\}$ . O problema em sua forma abstrata pode ser escrito como: Encontrar o par  $(\mathbf{u}, p) \in H(\text{div}, \Omega) \times L^2(\Omega)$ , tal que

$$\begin{aligned} a(\mathbf{u}, \mathbf{v}) + b(\mathbf{v}, p) &= c(\mathbf{v}) \\ b(\mathbf{u}, q) &= \ell(q) \end{aligned} \quad (2.36)$$

$\forall \mathbf{v} \in H(\text{div}, \Omega)$  e  $\forall q \in L^2(\Omega)$ , com as formas dadas por

$$a(\mathbf{u}, \mathbf{v}) = \int_{\Omega} \mathbf{K}^{-1} \mathbf{u} \cdot \mathbf{v} \, d\mathbf{x}, \quad b(\mathbf{v}, q) = - \int_{\Omega} q \nabla \cdot \mathbf{v} \, d\mathbf{x}, \quad (2.37)$$

$$c(\mathbf{v}) = - \int_{\Gamma_p} \bar{g}_p (\mathbf{v} \cdot \hat{\mathbf{n}}) \, ds, \quad \ell(q) = - \int_{\Omega} f q \, d\mathbf{x}. \quad (2.38)$$

Note-se que na formulação mista, a condição de borda essencial é definida para o fluxo  $\mathbf{u}$  na própria construção do conjunto  $V_g \subset H(\text{div}, \Omega)$ , enquanto a condição de borda natural é dada para o campo de pressões  $p$ , a qual aparece na formulação variacional, ao contrário do que acontece na formulação primal do problema.

### 2.3.2 Formulação variacional discreta

A formulação variacional discreta do problema de malha fina é obtida considerando subespaços de dimensão finita dos espaços em que foi formulado o problema contínuo,

$$V_{hg} \subset V_g \subset H(\text{div}, \Omega), \quad Q_h \subset L^2(\Omega)$$

O problema variacional discreto é dado por: Encontrar o par  $(\mathbf{u}_h, p_h) \in V_{hg} \times Q_h$ , tais que

$$\begin{aligned} a(\mathbf{u}_h, \mathbf{v}_h) + b(\mathbf{v}_h, p_h) &= c(\mathbf{v}_h) \\ b(\mathbf{u}_h, q_h) &= \ell(q_h) \end{aligned} \quad (2.39)$$

$\forall (\mathbf{v}_h, q_h) \in V_{h0} \times Q_h$ . Como dito anteriormente, na formulação do método multiescala MRCM, também será necessário resolver o problema de malha fina no nível dos subdomínios sujeito a condições de Robin. A forma geral de uma condição de Robin e como esta é tratada na forma variacional do problema pode ser escrita da seguinte forma, denotando por  $\Gamma_R$  a parte da fronteira com condições de Robin

$$-\gamma(\mathbf{x}) \mathbf{u} \cdot \check{\mathbf{n}} + p = \bar{g}_r, \quad \mathbf{x} \in \Gamma_R \quad (2.40)$$

em que, dependendo do valor adotado para o parâmetro  $\gamma$ , a imposição fraca do valor do fluxo na interface será favorecida (se  $\gamma \rightarrow +\infty$ ) ou a imposição fraca do valor da pressão será favorecida (se  $\gamma \rightarrow 0$ ). Neste caso o problema variacional muda para

$$\begin{aligned} a(\mathbf{u}_h, \mathbf{v}_h) + b(\mathbf{v}_h, p_h) + (\gamma \mathbf{u}_h \cdot \check{\mathbf{n}}, \mathbf{v}_h \cdot \check{\mathbf{n}})_{\Gamma_R} &= c(\mathbf{v}_h) - (\bar{g}_r, \mathbf{v}_h \cdot \check{\mathbf{n}})_{\Gamma_R} \\ b(\mathbf{u}_h, q_h) &= \ell(q_h) \end{aligned} \quad (2.41)$$

em que  $(\cdot, \cdot)_{\Gamma}$  representa o produto escalar  $L^2(\Gamma)$ .

### 2.3.3 Caracterização dos espaços discretos $H(\text{div}, \Omega)$

Para resolver o problema de Darcy na sua forma variacional discreta como apresentado na seção anterior, precisamos definir os espaços de elementos finitos  $H(\text{div})$  que serão utilizados, seja, como dito anteriormente, para resolver o problema global de malha fina no domínio  $\Omega$  ou para resolver os problemas locais nos subdomínios de uma decomposição de  $\Omega$  para fins de implementação do método multiescala, o qual será apresentado no capítulo seguinte. Neste capítulo iremos seguir principalmente as notas de (DURAN, 2008). Outras referências clássicas sobre o assunto que podem ser consultadas são (RAVIART; THOMAS, 1977; BREZZI F., 2005). A ideia é apenas lembrar alguns conceitos e definições importantes sobre estes espaços, pois o assunto é clássico e já tem sido discutido extensamente na literatura. Em particular, nos interessam

os conhecidos espaços de Raviart-Thomas (RT) e os espaços de Brezzi-Douglas-Marini (BDM), que estão disponíveis na plataforma FEniCS. De fato, os detalhes precisos de como estes espaços são implementados dentro da biblioteca FEniCS permanecem bastante "ocultos" para o usuário, só precisando-se preocupar com a definição do problema, formulação variacional e condições de borda. Neste trabalho vamos nos restringir aos elementos triangulares/tetraédricos, para os quais estes espaços foram introduzidos originalmente, no entanto, vale salientar que a sua extensão para elementos quadrilaterais/hexaédricos é mais ou menos direta. Primeiramente, lembramos que estamos interessados em introduzir espaços para aproximar o campo de velocidades  $\mathbf{u}$  (incógnita vetorial) e o campo de pressões  $p$  (incógnita escalar) no problema de Darcy 2.34-2.35. Em particular, os espaços para aproximar  $\mathbf{u}$  serão espaços com requerimentos de continuidade da sua componente normal nas arestas/faces dos elementos da triangulação. Já, o campo de pressões poderá ser aproximado por funções que não necessariamente sejam contínuas entre elementos.

### 2.3.3.1 Espaços de Raviart-Thomas (RT)

Resulta conveniente introduzir as ideias principais com o espaço de Raviart-Thomas, que é o mais simples e também até por motivos históricos. Isto facilitará posteriormente o estudo dos espaços de Brezzi-Douglas-Marini na subseção seguinte, que serão de fato os mais utilizados neste trabalho. O primeiro passo para definir os espaços de Raviart-Thomas é introduzir os espaços locais aos elementos, então, dado um triângulo/tetraédro  $E$  em 2D/3D, o espaço de Raviart-Thomas de ordem  $k \geq 0$  é dado por

$$RT_k(E) = [P_k(E)]^d + \mathbf{x}P_k(E), \quad (2.42)$$

em que  $d$  é a dimensão espacial e  $P_k$  é o espaço de polinômios até ordem  $k$  em  $E$ . As principais propriedades desse espaço são apresentadas no [Lema 1](#) cuja prova pode-se consultar em ([DURAN, 2008](#)):

**Lema 1** (Propriedades do espaço local  $RT_k(E)$ ). Seja um símplice  $E \subset \mathbb{R}^d$  e seja  $F_i$ ,  $i = 1, \dots, d+1$  as suas arestas/faces com  $\check{\mathbf{n}}_i$  a sua normal exterior, então:

- a dimensão do espaço local é:

$$\dim(RT_k(E)) = d \binom{k+d}{k} + \binom{k+d-1}{k}$$

- se  $\mathbf{v} \in RT_k$ , então  $\mathbf{v} \cdot \check{\mathbf{n}}_i \in P_k(F_i)$ ,  $i = 1, \dots, d+1$
- se  $\mathbf{v} \in RT_k$  verifica que  $\nabla \cdot \mathbf{v} = 0$ , então  $\mathbf{v} \in P_k(E)$ .

Note que para triângulos, o espaço  $RT_0(E)$  é de dimensão 3 e o espaço  $RT_1(E)$  é de dimensão 8<sup>1</sup>. Os graus de liberdade para o elemento de Raviart-Thomas estão ilustrados na

<sup>1</sup> Em algumas referencias, a nomenclatura para se referir ao espaço RT de ordem  $k$  é  $RT_{k+1}$ ,  $k \geq 0$ . Por exemplo, no nosso caso, o espaço de Raviart-Thomas de mais baixo ordem que aqui denotamos por  $RT_0$ , às vezes é denotado de fato por  $RT_1$ .

Figura 5 e Figura 4 para o elemento de ordem  $k = 0$  e  $k = 1$ , respectivamente. Nas figuras que ilustram as funções de base, é interessante observar como cada função de base vetorial tem componente normal não nula apenas numa das faces do triângulo, e zero nas restantes, em que o campo é puramente tangencial. Como pode-se ver, a escolha dos graus de liberdade incorpora o valor da componente normal da velocidade nas arestas, e no caso do elemento  $RT_1$ , também incorpora dois graus de liberdade internos ao elemento. Os graus de liberdade de tipo fluxo são definidos por

$$\sigma_i(\mathbf{v}) = \int_{F_i} \mathbf{v} \cdot \check{\mathbf{n}}_i d\ell$$

Por exemplo, para o elemento  $RT_0$ , um conjunto de funções de base locais pode-se escrever como

$$\mathbf{N}_i(\mathbf{x}) = \frac{1}{d \text{meas}(E)} (\mathbf{x} - \mathbf{a}_i), \quad i = 1, \dots, (d + 1)$$

em que  $\mathbf{a}_i$  é o vértice oposto à face  $F_i$  e  $\text{meas}$  denota a medida da aresta/face. Nota-se que este tipo de graus de liberdade é diferente dos graus de liberdade de valor que se usam nos clássicos elementos de Lagrange. Esta escolha de graus de liberdade é essencial para obter formulações localmente conservativas ao definir os espaços globais  $RT_k(\mathcal{T}_h)$  associados à uma família de triangulações  $\mathcal{T}_h$  do domínio  $\Omega$ , com  $\Omega = \cup_{E \in \mathcal{T}_h} E$ .

O principal requerimento que temos sobre a malha é que seja conforme, o que é estandar, implicando que a interseção de dois elementos quaisquer seja:

- vazia;
- ou um vértice;
- ou uma aresta/face completa;

ou seja, não são admitidos os chamados *hanging nodes* ou nós em metade de aresta/face. O espaço global de Raviart-Thomas é definido por

$$V_h = RT_k(\mathcal{T}_h) = \{\mathbf{v} \in H(\text{div}, \Omega) : \mathbf{v}|_E \in RT_k(E) \forall E \in \mathcal{T}_h\}, \quad (2.43)$$

Finalmente, para aproximar o campo de pressões iremos usar o espaço de funções descontínuas

$$Q_h = P_k^{\text{disc}}(\mathcal{T}_h) = \{q \in L^2(\Omega) : q|_E \in P_k : \forall E \in \mathcal{T}_h\}. \quad (2.44)$$

Observe que isto é possível pois na formulação variacional não aparecem derivadas do campo  $p$ . Para concluir, lembremos que as estimativas globais de erro estão baseadas no cálculo de estimativas locais, as quais, a sua vez precisam de um ingrediente essencial que é a chamada transformação de Piola para relacionar o elemento máster  $\hat{E}$  e o elemento no espaço físico  $E$ , de forma tal a preservar os graus de liberdade de fluxo. Então, dada uma transformação  $F : \hat{E} \rightarrow E$ , tal que se  $|J| = \det(\partial \mathbf{F} / \partial \hat{\mathbf{x}})$  não se anula em  $\hat{E}$

$$\mathbf{v}(\mathbf{x}) = \frac{1}{|J|} \frac{\partial \mathbf{F}}{\partial \hat{\mathbf{x}}} \cdot \hat{\mathbf{v}}(\hat{\mathbf{x}})$$

Por exemplo, para o caso da transformação afim  $\mathbf{F}(\hat{\mathbf{x}}) = \mathbb{A} \cdot \hat{\mathbf{x}} + \mathbf{b}$ , com  $\mathbb{A} \in \mathbb{R}^{d \times d}$  e  $\mathbf{b} \in \mathbb{R}^d$ , o determinante da Jacobiana é  $|J| = \det(\mathbb{A})$ . Esta transformação também é aplicada na hora de fazer a montagem das matrizes de elementos finitos na plataforma FEniCS. Novamente, estes cálculos acontecem num nível no qual o usuário em geral não precisa intervir.

Com respeito às estimativas de erro temos o seguinte:

**Teorema 1** (Estimativas de erro para os elementos  $RT_k$  (BOFFI *et al.*, 2006)). Seja  $(\mathbf{u}, p) \in [H^m(\Omega)]^d \times H^m(\Omega)$  a solução do problema 2.36 e  $(\mathbf{u}_h, p_h) \in V_h(\mathcal{T}_h) \times Q_h(\mathcal{T}_h)$  solução do problema 2.39,  $1 \leq m \leq k+1$ , então, existem constantes  $C_1, C_2$  tais

$$\|\mathbf{u} - \mathbf{u}_h\|_{L^2(\Omega)} \leq C_1 h^m \left\| \sum_{|\alpha|=m} D^\alpha \mathbf{u} \right\|_{L^2(\Omega)}$$

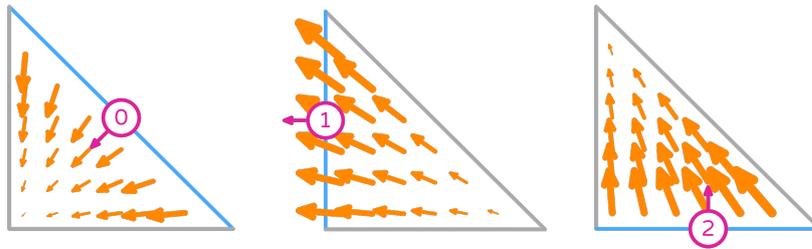
e

$$\|p - p_h\|_{L^2(\Omega)} \leq C_2 h^m \left( \left\| \sum_{|\alpha|=m} D^\alpha \mathbf{u} \right\|_{L^2(\Omega)} + \left\| \sum_{|\alpha|=m} D^\alpha p \right\|_{L^2(\Omega)} \right)$$

com  $C_1, C_2$  dependendo de  $k, d, \|\mathbf{K}\|_{L^\infty(\Omega)}$  e  $\|\mathbf{K}^{-1}\|_{L^\infty(\Omega)}$ .

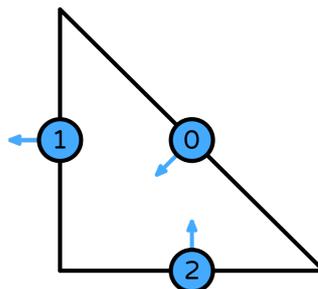
Do teorema surge que a ordem de convergência, para ambos os campos, velocidade e pressão, para o elemento  $RT_0$  será  $\mathcal{O}(h)$  e para o elemento  $RT_1$  será  $\mathcal{O}(h^2)$ .

Figura 4 – Funções de base no espaço de Raviart-Thomas -  $RT_0$ .



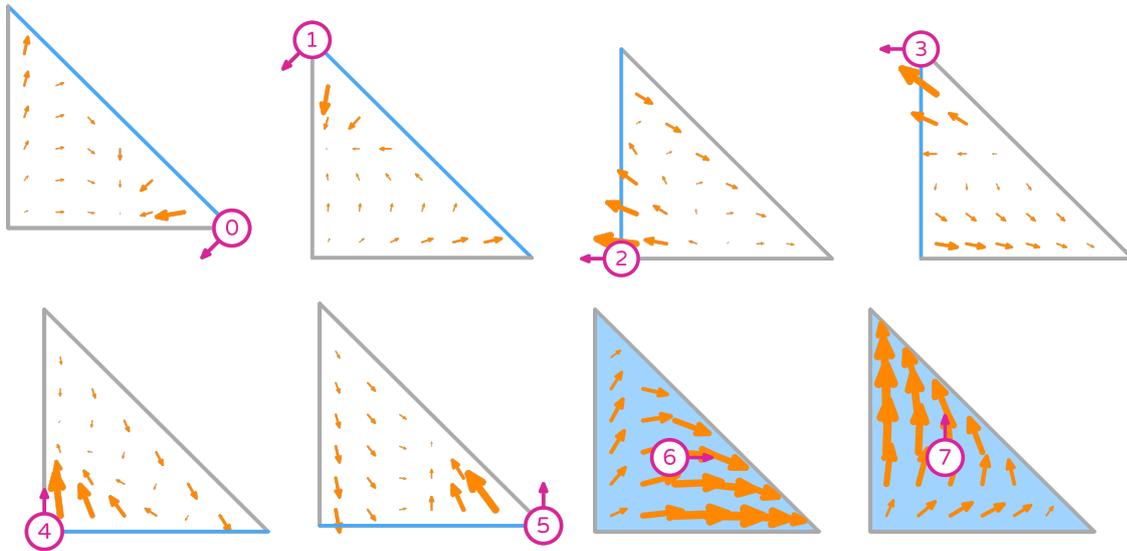
Fonte: (The DefElement contributors, 2023)

Figura 5 – Graus de Liberdade para Raviart-Thomas em um triângulo - ( $RT_0$ ).



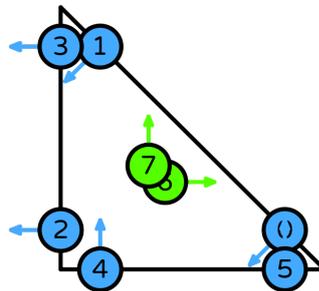
Fonte: (The DefElement contributors, 2023)

Figura 6 – Funções de base no espaço de Raviart-Thomas -  $RT_1$ .



Fonte: (The DefElement contributors, 2023)

Figura 7 – Graus de Liberdade para Raviart-Thomas em um triângulo - ( $RT_1$ ).



Fonte: (The DefElement contributors, 2023)

### 2.3.3.2 Espaços de Brezzi-Douglas-Marini ( $BDM$ )

Como dito anteriormente, também iremos empregar os conhecidos espaços de Brezzi-Douglas-Marini. A vantagem deste espaço é que permite aproximar velocidade e pressão com diferentes ordens. O espaço local  $BDM_k(E)$  é definido para  $k \geq 1$  como

$$BDM_k(E) = P_k^2(E) \quad (2.45)$$

A dimensão do espaço local é

$$\dim(BDM_k(E)) = (k + 1)(k + 2)$$

Note-se que a diferença do espaço  $RT_k$  que é definido para  $k \geq 0$  o espaço  $BDM_k$  é definido para  $k \geq 1$ . Claramente, o elemento mais econômico é o  $RT_0$  tendo um grau de liberdade por aresta. Já

os elementos  $RT_1$  e  $BDM_2$  possuem dois graus de liberdade por aresta, representados na [Figura 7](#) e [Figura 9](#). O espaço global é definido naturalmente como

$$V_h = \{\mathbf{v} \in H(\text{div}, \Omega) : \mathbf{v}|_E \in BDM_k(E) \forall E \in T_h\} \quad (2.46)$$

o qual é também usado em combinação com o espaço de pressões

$$Q_h = P_{k-1}^{\text{disc}}(\mathcal{T}_h) = \{q \in L^2(\Omega) : q|_E \in P_{k-1} : \forall E \in \mathcal{T}_h\}. \quad (2.47)$$

As estimativas de erro para o elemento  $BDM_k$  são similares aos do elemento  $RT_k$ , exceto que a pressão converge com uma ordem a menos que a velocidade, isto é enunciado no seguinte:

**Teorema 2** (Estimativas de erro para os elementos  $BDM_k$  ([BOFFI et al., 2006](#))). Seja  $(\mathbf{u}, p) \in [H^m(\Omega)]^d \times H^m(\Omega)$  a solução do problema 2.36 e  $(\mathbf{u}_h, p_h) \in V_h(\mathcal{T}_h) \times Q_h(\mathcal{T}_h)$  solução do problema 2.39,  $1 \leq m \leq k+1$ , então, existem uma constante  $C_1$  tal que

$$\|\mathbf{u} - \mathbf{u}_h\|_{L^2(\Omega)} \leq C_1 h^m \left\| \sum_{|\alpha|=m} D^\alpha \mathbf{u} \right\|_{L^2(\Omega)}$$

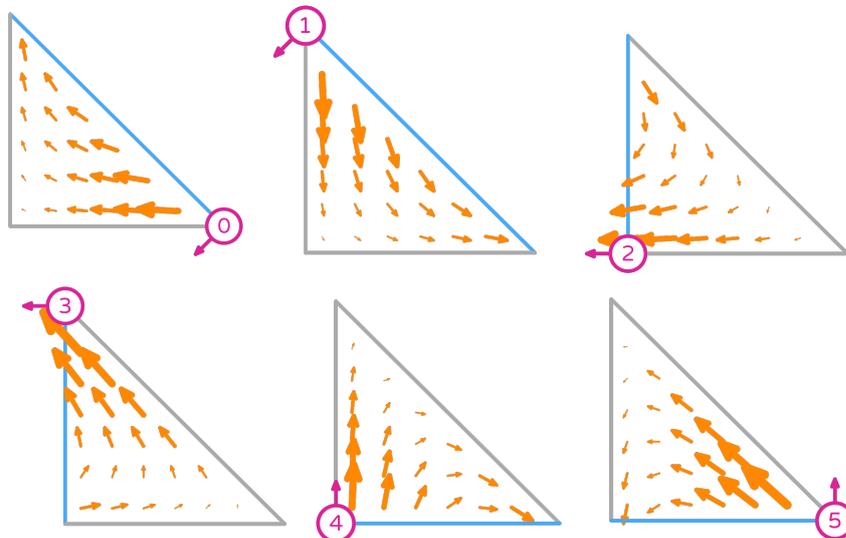
e para a pressão, existe uma constante  $C_2$  tal que, se  $1 \leq m \leq k$

$$\|p - p_h\|_{L^2(\Omega)} \leq C_2 h^m \left( \left\| \sum_{|\alpha|=m} D^\alpha \mathbf{u} \right\|_{L^2(\Omega)} + \left\| \sum_{|\alpha|=m} D^\alpha p \right\|_{L^2(\Omega)} \right)$$

com  $C_1, C_2$  dependendo de  $k, d, \|\mathbf{K}\|_{L^\infty(\Omega)}$  e  $\|\mathbf{K}^{-1}\|_{L^\infty(\Omega)}$ .

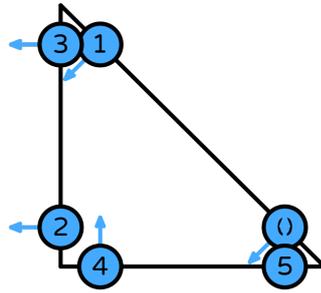
Do teorema surge que a ordem de convergência, para a velocidade é  $\mathcal{O}(h^2)$  e para a pressão  $\mathcal{O}(h)$  para o elemento  $BDM_1$ , enquanto que para o elemento  $BDM_2$  será  $\mathcal{O}(h^3)$  para velocidade e  $\mathcal{O}(h^2)$  para pressão.

Figura 8 – Funções de base no espaço de Brezzi-Douglas-Marini -  $BDM_1$ .



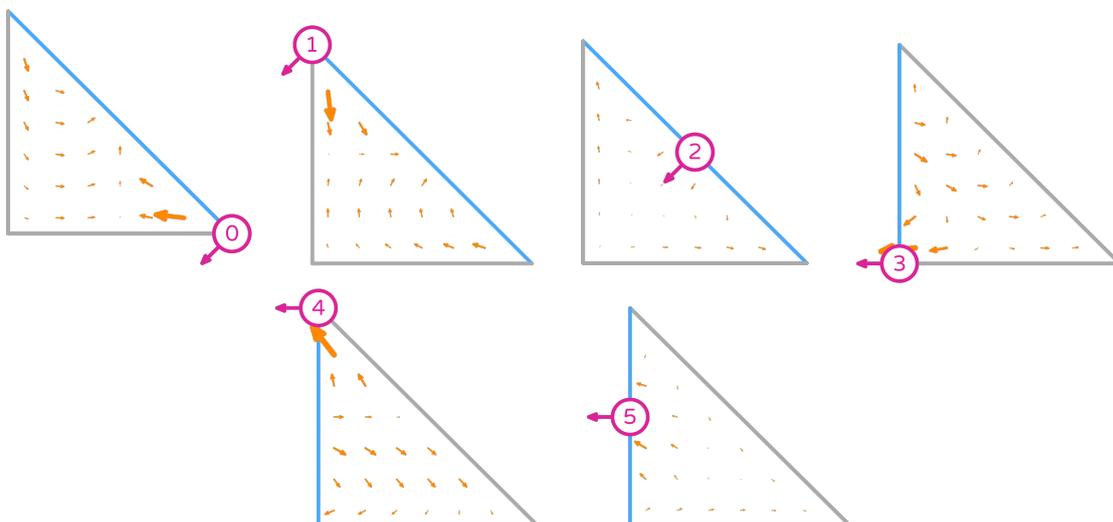
Fonte: ([The DefElement contributors, 2023](#))

Figura 9 – Graus de Liberdade para Brezzi-Douglas-Marini em um triângulo - ( $BDM_1$ ).

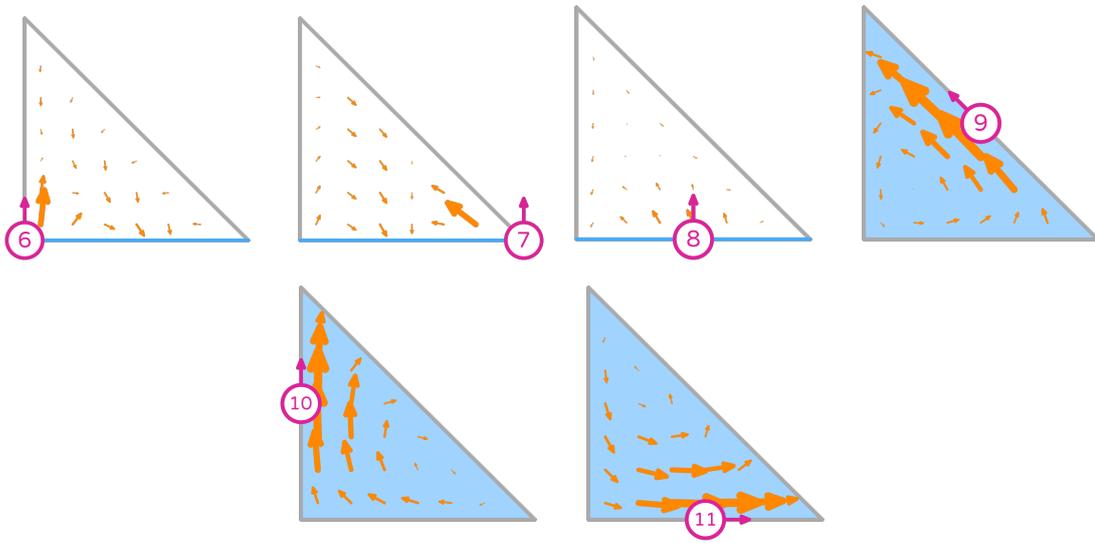


Fonte: (The DefElement contributors, 2023)

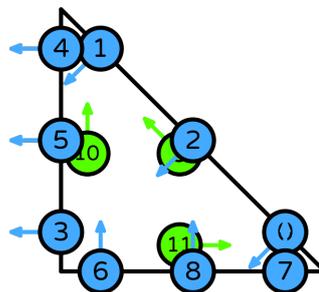
Figura 10 – Funções de base no espaço de Brezzi-Douglas-Marini -  $BDM_2$  (primeira parte).



Fonte: (The DefElement contributors, 2023)

Figura 11 – Funções de base no espaço de Brezzi-Douglas-Marini -  $BDM_2$  (segunda parte).

Fonte: (The DefElement contributors, 2023)

Figura 12 – Graus de Liberdade para Brezzi-Douglas-Marini em um triângulo - ( $BDM_2$ ).

Fonte: (The DefElement contributors, 2023)

## 2.4 Implementação do problema de malha fina na plataforma FEniCS

Nesta seção pretendemos dar alguns exemplos de como resulta a implementação dos problemas de interesse na plataforma de elementos finitos FEniCS. No capítulo seguinte mostraremos alguns trechos de código da implementação do método multiescala adotado no trabalho, e no presente capítulo, mostraremos exemplos de implementação para resolver o problema de malha fina, que de fato é um ingrediente essencial para implementar o MRCM. O interessante da plataforma, e em particular de sua interface python, é que o código se parece bastante com a formulação matemática que acabamos de apresentar. Como ilustração, na sequência mostramos a implementação típica da formulação mista que será empregada, por exemplo, para resolver um problema com gradiente de pressão imposto e condições de fluxo zero na parede inferior

e superior de um domínio retangular. Por questões de espaço, alguns detalhes que não são essenciais serão omitidos sem prejudicar a exposição.

```
def SolveDarcy(mesh, boundaries, kappa, Pleft, Pright, source):

    # Compute inverse of permeability on each element
    invkappa = ...

    dx = Measure("dx", domain=mesh)
    ds = Measure("ds", domain=mesh, subdomain_data=boundaries)

    EJ = FiniteElement(Hdivtype, celltype, orderu)
    EP = FiniteElement('DG', celltype, orderp)
    EM = MixedElement([EJ, EP])
    W = FunctionSpace(mesh, EM)

    (v, q) = TestFunctions(W)
    (u, p) = TrialFunctions(W)
    ne = FacetNormal(mesh)
    a = (inner(invkappa*u, v) - div(v)*p - div(u)*q) * dx
    L = -source * q * dx
    L += -Pleft*dot(v, ne)*ds(tag_left)
    L += -Pright*dot(v, ne)*ds(tag_right)

    bcs = [DirichletBC(W.sub(0), noflow, tag_top),
           DirichletBC(W.sub(0), noflow, tag_bottom)]

    sol_Darcy = Function(W) # Where the final solution is stored
    problem = LinearVariationalProblem(a, L, sol, bcs)
    solver = LinearVariationalSolver(problem)
    prm = solver.parameters
    prm["linear_solver"] = "umfpack"
    # Add more solver options if needed
    ....

    solver.solve()
    (u, p) = sol_Darcy.split(True)

    return u, p
```

No código que acabamos de apresentar é interessante salientar as seguintes partes:

- A definição do espaço de funções misto  $W$ , que combina uma aproximação  $Hdiv$  para o campo de velocidades e uma aproximação descontínua por elementos para o campo de pressões. Neste caso, a variável  $Hdivtype$  pode ser  $RT$  ou  $BDM$ ;
- A definição da forma bilinear e linear do problema de Darcy, a partir da declaração das `TrialFunctions` and `TestFunctions`, assim como vários operadores simbólicos (`inner`, `div`, etc.);
- A definição das condições de borda essenciais, neste caso sobre o espaço de velocidades;
- Finalmente, a definição do resolutor variacional e resolução do problema.

Posteriormente, neste capítulo, mostraremos também a implementação em FEniCS da resolução do problema de transporte via uma formulação de tipo Discontinuous Galerkin (DG). Antes disso, na sequência avaliamos a precisão do código que acabamos de mostrar para resolver dois exemplos.

## 2.5 Estudo de convergência num problema com solução manufacturada

Nesta seção realizaremos o estudo de convergência em malhas do método, com uma solução manufacturada com coeficiente de permeabilidade suave, a fim de testar e validar o método de malha fina implementado, o qual será usado posteriormente para implementar e testar o método multiescala. Foram utilizados os dois espaços, Brezzi-Douglas-Marini ( $BDM_k$ ) e Raviart-Thomas ( $RT_k$ ), ambos os casos com  $k = 1, 2$ . O estudo da convergência tanto para pressão quanto para velocidade, foi dado através da diferença do erro da solução numérica e da solução analítica, em norma  $L^2(\Omega)$ , para malhas de tamanhos  $30 \times 30$ ,  $60 \times 60$ ,  $120 \times 120$  e  $240 \times 240$ .

Para a análise resolvemos o problema de Darcy considerando a solução manufacturada:

$$p(x, y) = \cos(2\pi x) \cos(2\pi y) \quad (2.48)$$

um coeficiente de permeabilidade  $\kappa(x, y) = 1 + x^2 + y^2$ ,  $\forall (x, y) \in \Omega$ , sendo  $\Omega$  o domínio computacional  $[0, 1] \times [0, 1]$ . A velocidade de Darcy correspondente é dada por

$$\mathbf{u} = [(1 + x^2 + y^2)2\pi \sin(2\pi x) \cos(2\pi y), (1 + x^2 + y^2)2\pi \cos(2\pi x) \sin(2\pi y)]^\top. \quad (2.49)$$

Logo, o termo fonte será

$$f = 4\pi x(\sin(2\pi x) \cos(2\pi y) + 8\pi^2 \cos(2\pi x) \cos(2\pi y)(1 + x^2 + y^2) + 4\pi y \cos(2\pi x) \sin(2\pi y))$$

Primeiramente foi realizado o estudo da convergência para a pressão e velocidade considerando o espaço  $RT_0$  e  $RT_1$ , como as mesmas malhas ditas inicialmente. Quando realizada a comparação dos erros utilizando-se a norma  $L^2(\Omega)$ , obteve-se para a pressão uma ordem de convergência de  $\mathcal{O}(h)$  tanto para pressão quanto para velocidade (Figura 13). E no caso  $RT_1$  obteve-se uma ordem de convergência de ordem  $\mathcal{O}(h^2)$  novamente tanto para pressão quanto para velocidade, como podemos ver na Figura 14. Desta forma, foi possível analisar que os resultados foram satisfatórios, e esperado como mostrado no Teorema 1.

Na sequência considerando o espaço  $BDM_1$  obteve-se uma ordem de convergência  $\mathcal{O}(h)$  para o campo de pressão e  $\mathcal{O}(h^2)$  para o campo de velocidade, como é mostrado na Figura 15. Para  $BDM_2$  foi realizado o cálculo do erro nas malhas  $30 \times 30$ ,  $60 \times 60$  e  $120 \times 120$ , pela Figura 16 nota-se que para a pressão atingiu uma convergência de ordem  $\mathcal{O}(h^2)$  e para a velocidade ordem  $\mathcal{O}(h^3)$ , como esperado e apresentado no Teorema 2.

Figura 13 – Erro de discretização como função de  $h$  para o elemento  $RT_0$ .

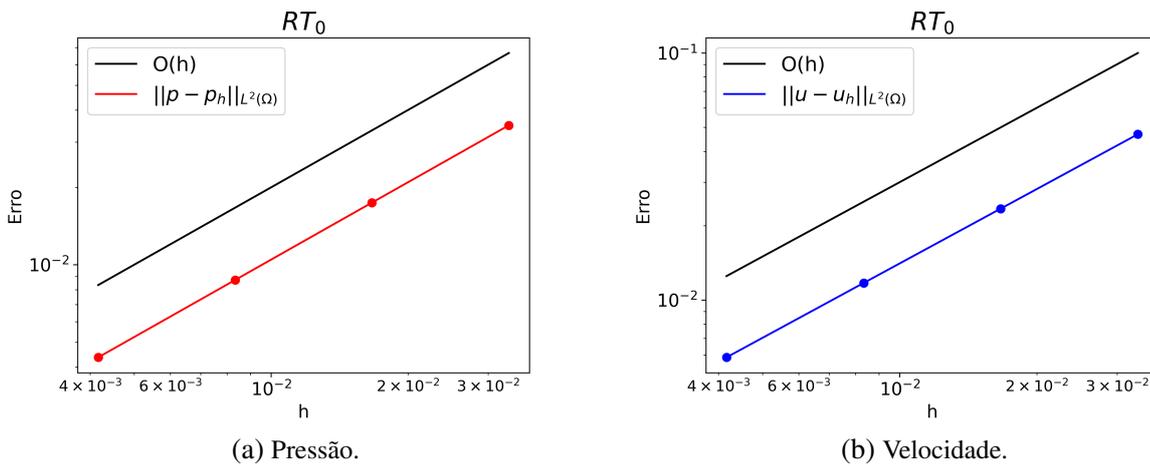


Figura 14 – Erro de discretização como função de  $h$  para o elemento  $RT_1$ .

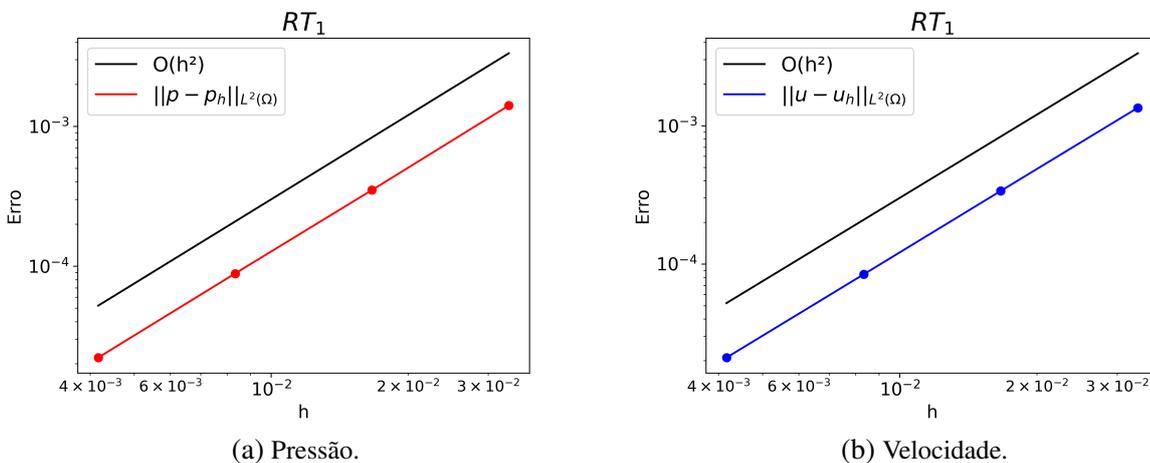
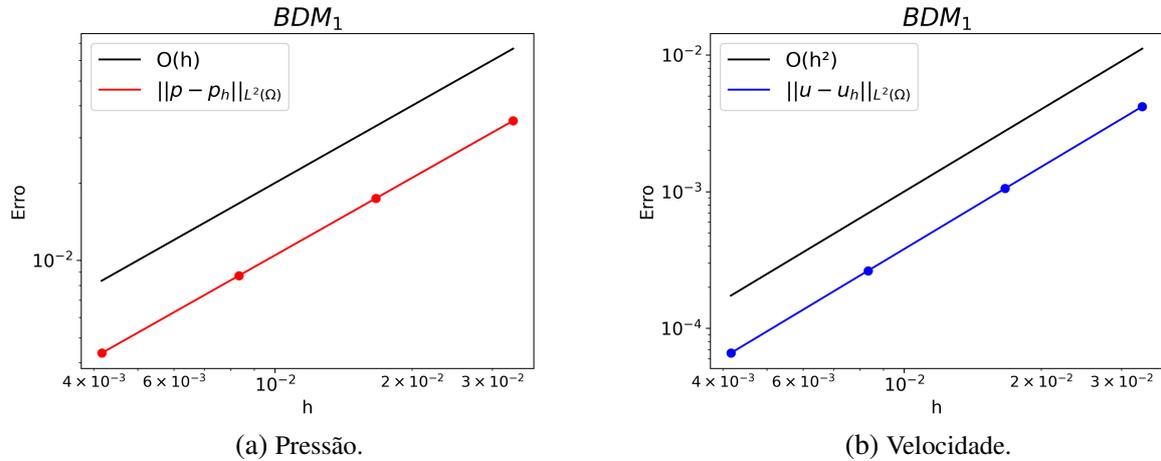
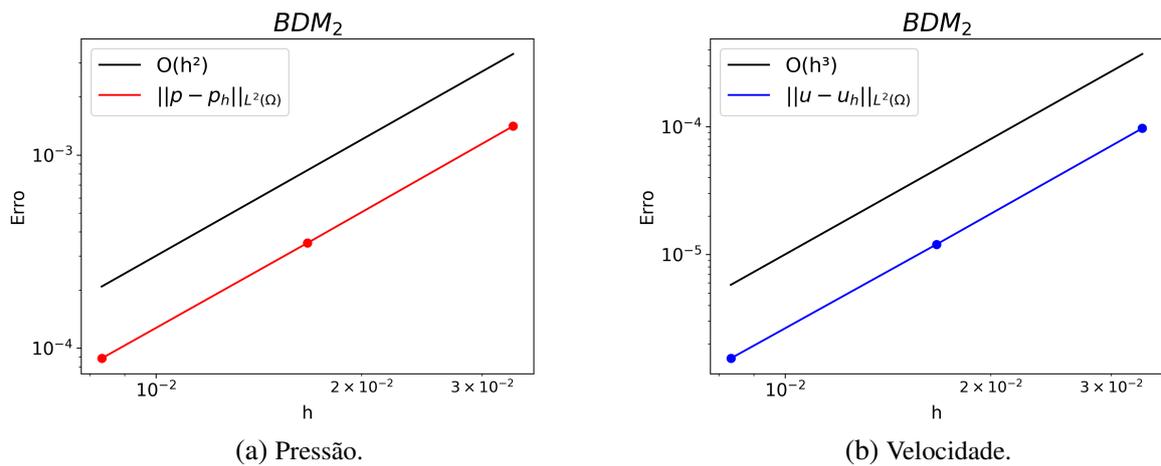


Figura 15 – Erro de discretização como função de  $h$  para o elemento  $BDM_1$ .Figura 16 – Erro de discretização como função de  $h$  para o elemento  $BDM_2$ .

## 2.6 Um exemplo com campo heterogêneo

O acoplamento entre a equação elíptica e a equação hiperbólica para o transporte será resolvido utilizando-se o esquema Pressão Implícita, Saturação Explícita (*Implicit Pressure, Explicit Saturation - IMPES*), (COATS, 2000). Uma possibilidade do método seria resolver o problema elíptico em um passo de tempo, e o problema hiperbólico em vários passos de tempo. Dada a saturação  $S(x, t_0)$  conhecida em um tempo inicial  $t_0$ , a velocidade  $\mathbf{u}(x, t_0)$  nesse mesmo tempo será calculada diretamente pela equação 2.18.

Na utilização de métodos numéricos para a aproximação de soluções de EDPs, a estabilidade linear garante a convergência, porém as soluções de equações diferenciais parciais hiperbólicas podem ser descontínuas, não podendo assumir esta teoria, mostrando a necessidade de criar um outro critério para garantir a estabilidade. Para isto, foram desenvolvidas discretizações espaciais que, quando acopladas ao método *forward* de Euler, têm as propriedades de

estabilidade desejadas para se aproximarem das soluções descontínuas de EDPs hiperbólicas (GOTTLIEB, 2005). Porém, este método é de baixa ordem no tempo. Para contornar isto, tem sido propostos os métodos do tipo *Strong Stability Preserving* (SSP) Runge-Kutta (RK), originalmente para a solução de equações hiperbólicas do tipo  $u_t + f(u)_x = 0$ , onde a derivada espacial  $f(u)_x$ , pode ser discretizada por diferenças finitas ou pela aproximação de elementos finitos (COCKBURN; SHU, 1989) e (COCKBURN *et al.*, 1998). O objetivo da discretização temporal da SSP de alta ordem, é manter a propriedade de estabilidade e, ao mesmo tempo, conseguir uma alta de ordem convergência no tempo. Finalmente, vale a pena lembrar que o cálculo explícito da saturação irá implicar numa restrição para o espaçamento temporal ( $\Delta t$ ), determinada pela condição CFL (Courant-Friedrichs-Lewy). Nos nossos estudos, iremos adotar que  $\Delta t = 0.25\Delta t_{CFL}$ .

Lembrando o problema a ser resolvido: Dado o campo de velocidades  $\mathbf{u}$ , encontrar a saturação  $S$  tal que

$$\begin{cases} \frac{\partial S}{\partial t} + \nabla(\varphi(S)\mathbf{u}) = \tilde{q} & \text{em } \Omega \\ S(x, 0) = S_0 & \text{em } \Omega \\ S(x, t) = S_{\text{inlet}} & \text{em } \Gamma_- = \{\mathbf{x} \in \partial\Omega, \mathbf{u} \cdot \mathbf{\check{n}} \leq 0\} \end{cases} \quad (2.50)$$

onde,  $\tilde{q} = q_w/\rho_w$  e  $\varphi = f_w$ . Primeiramente, discretizando no tempo, a derivada temporal será aproximada por

$$\frac{\partial S}{\partial t} \simeq \frac{S^{n+1} - S^n}{\Delta t}.$$

Sempre assumindo que o campo de velocidades  $\mathbf{u}$  é dado

$$\frac{S^{n+1} - S^n}{\Delta t} + \nabla \cdot (\varphi(S^n)\mathbf{u}) = \tilde{q}, \quad (2.51)$$

ou, reacomodando termos, às vezes escrevemos

$$S^{n+1} = \Delta t \tilde{q}(t_n) + S^n - \Delta t \nabla \cdot (\varphi(S^n)\mathbf{u}). \quad (2.52)$$

A variável  $S$  será procurada no espaço  $V_s$  de funções constantes por elemento e descontínuas:

$$V_s = \{\psi, \psi|_E \in \mathcal{P}_k(E), \forall E \in \mathcal{T}_h\} \subset L^2(\Omega), \quad (2.53)$$

Para obter a forma variacional, que é a que nos interessa neste trabalho, procedemos da seguinte forma. Primeiramente, reescrevemos o segundo termo como

$$\nabla \cdot (\varphi(S^n)\mathbf{u}) = (\nabla \cdot \mathbf{u}) \varphi(S^n) + \mathbf{u} \cdot \nabla \varphi(S^n) = \left(\frac{q_w}{\rho_w} + \frac{q_o}{\rho_o}\right) \varphi(S^n) + \mathbf{u} \cdot \nabla \varphi(S^n)$$

já que, pelo problema de Darcy temos que  $\nabla \cdot \mathbf{u} = \frac{q_w}{\rho_w} + \frac{q_o}{\rho_o} = f$ . Agora, multiplicamos por uma função teste  $\psi_K \in V_s$  do elemento e integramos sobre  $K$

$$\int_K \psi_K \frac{S^{n+1} - S^n}{\Delta t} dx + \int_K [f \varphi(S^n) - \tilde{q}] \psi_K dx - \int_K \mathbf{u} \cdot \nabla \varphi(S^n) \psi_K dx = 0$$

e integrando por partes, resulta

$$\int_K \psi_K \frac{S^{n+1} - S^n}{\Delta t} dx + \int_K [f \varphi(S_n) - \tilde{q}] \psi_K dx + \int_{\partial K} (\mathbf{u} \cdot \check{\mathbf{n}}_E) \psi_K dl - \int_K \varphi(S_n) \nabla \cdot (\mathbf{u} \psi_K) dx = 0$$

Agora, somando sobre todos os elementos da partição  $\mathcal{T}_h$ , obtemos:

$$\begin{aligned} & \int_{\Omega} \psi \frac{S^{n+1} - S^n}{\Delta t} dx + \int_{\Omega} [f \varphi(S_n) - \tilde{q}] \psi dx - \int_{\Omega} \varphi(S_n) \nabla \cdot (\mathbf{u} \psi) dx + \\ & + \int_{\Gamma_{int}} \varphi^{up} (\psi_+ (\mathbf{u} \cdot \check{\mathbf{n}}_+) + \psi_- (\mathbf{u} \cdot \check{\mathbf{n}}_-)) dl + \int_{\Gamma_{inlet}} \varphi(S_{inlet}) \psi \mathbf{u} \cdot \check{\mathbf{n}}_{\partial \Omega} dl = 0. \quad \forall \psi \in V_s. \end{aligned}$$

em que  $\Gamma_{int}$  denota o conjunto de faces internas em  $\mathcal{T}_h$  e  $\Gamma_{inlet}$  as faces da malha que incidem na borda de  $\Omega$  em que a condição de Dirichlet  $S_{inlet}$  é dada. Como é clássico neste tipo de formulações, ao realizar a soma sobre todos os elementos da malha, as integrais sobre uma determinada face ou aresta, aparece duplicada ao considerar a contribuição vinda pelo elemento '+' e pelo elementos '-'. Por simplicidade, na sequência, iremos considerar que o termo fonte  $f$  será nulo. O ponto importante é definir os valores  $\varphi^{up}$  da função  $\varphi$  nas faces/arestas dos elementos, de maneira única, a fim de obter uma formulação localmente conservativa, lembrando que na discretização adotada, em cada elemento da malha há um valor de saturação (aproximação constante por partes). Para isto, foi utilizado o esquema *upwind* desenvolvido por Patankar em 1980 (BALIGA; PATANKAR, 1980). Este esquema refere-se ao fato de que as variáveis transportadas caminham na direção de propagação do fluxo, ou seja, o valor na face ( $\varphi_f$ ) é obtido através da quantidade ( $\varphi^{up}$ ) do elemento que está a "águas acima"(ou, a montante) relativo à direção da velocidade principal do escoamento (TEIXEIRA, 2011). Portanto o esquema *upwind* define um critério escolhendo a saturação dependendo da velocidade de propagação da interface, neste caso dado da seguinte forma:

$$\varphi^{up}(S^n) = \begin{cases} \varphi(S_{n+}) & \text{se } \mathbf{u} \cdot \check{\mathbf{n}}_+ > 0 \\ \varphi(S_{n-}) & \text{se } \mathbf{u} \cdot \check{\mathbf{n}}_- < 0 \end{cases}$$

Para a solução utilizou-se o método Runge-Kutta SSP-K3, de ordem  $\mathcal{O}(\Delta t^3)$  e que é escrito como

$$\text{Esquema multiestágio RK3} \left\{ \begin{array}{l} \hat{S} = S^n + \Delta t \mathcal{L}(S^n) \\ \hat{\hat{S}} = \frac{3}{4} S^n + \frac{1}{4} (\hat{S} + \Delta t \mathcal{L}(\hat{S})) \\ S^{n+1} = \frac{1}{3} S^n + \frac{2}{3} (\hat{\hat{S}} + \Delta t \mathcal{L}(\hat{\hat{S}})) \end{array} \right.$$

em que o operador  $\mathcal{L}(\cdot; \cdot)$  agrupa todos os termos que envolvem os operadores diferenciais. Vale a pena notar que o primeiro passo do método corresponde ao método de Euler explícito. Finalmente, para obter a forma variacional do problema (*Fully discrete*), cada uma das equações acima é multiplicada por uma função teste, se realiza a integração por partes e se soma sobre todos os elementos, tal como foi feito anteriormente. Portanto, a resolução do problema, envolve resolver três problemas variacionais em sequência.

### 2.6.1 Implementação na plataforma FEniCS

Novamente, resulta instrutivo ilustrar a implementação de um problema variacional na plataforma FEniCS. Neste caso, apresentamos o código (com algumas simplificações por questões de espaço) da formulação dada acima que utiliza um método de Galerkin descontínuo para resolver o problema hiperbólico de transporte. Esta implementação é particularmente interessante, pois mostra como utilizar os operadores de salto (ou *jump*) e estruturas condicionais, no nível simbólico, para calcular os fluxos nas arestas internas da malha, nas quais é possível efetuar integrais usando o símbolo  $dS$  e assim construir as formas bilineares e lineares do problema variacional. Note que, este código utiliza a função que resolve o problema de Darcy, a qual foi introduzida anteriormente. No código da sequência podemos salientar várias seções importantes:

- Etapa de pré-processo, na qual são introduzidos alguns parâmetros importantes e as funções auxiliares que definem  $\varphi(S)$  e a mobilidade;
- A definição do espaço de funções constantes por partes  $V_s$  e as correspondentes funções de trial  $S_{\text{trial}}$  e teste  $\psi_i$ , que serão usadas para descrever a forma variacional do problema na linguagem UFL;
- O cálculo do campo de vetores normais às faces dos elementos usando a função `FacetNormal`;
- A definição da forma variacional do problema dada em  $aT$  e  $L1$  onde se utilizam os operadores  $(\cdot)_{++}$  e  $(\cdot)_{--}$  para denotar o valor de uma variável a ambos lados de uma face;
- A definição de cada estágio no esquema SSP-RK3, como problemas variacionais lineares, a partir das formas definidas anteriormente;
- O laço de passos de tempo, incluindo a atualização da permeabilidade relativa para resolver o problema de Darcy a fim de determinar a velocidade de transporte  $u$  para resolver o problema de evolução, executando cada estágio do método.

```

# Pre-processing steps (BCs, physical params, etc)
...
muo, muw = 10, 1
murat = Constant(muo/muw)
def varphi(S):
    return murat*(S**2)/(murat*(S**2) + (1.0-S)**2)

# Setting the variational forms
Vs = FunctionSpace(mesh, "DG", 0)
S_trial, psi = TrialFunction(Vs), TestFunction(Vs)
Sn = Function(Vs) # Solution at current time

nf = FacetNormal(mesh)
u = Function(Vu) # Vu is the (Hdiv) velocity space
un = 0.5*(dot(u, nf) + abs(dot(u, nf)))

aT = psi*S_trial*dx # Left hand side
L1 = Dt*( varphi(Sn)*div(psi*ut)*dx \
- conditional(dot(u, nf) < 0,psi*dot(u, nf)*varphi(S_inlet), 0.0)
*ds \
- conditional(dot(u, nf) > 0,psi*dot(u, nf)*varphi(Sn), 0.0)*ds \
- (psi('+')-psi('-'))*(un('+')*varphi(Sn('+'))-un('-')*varphi(Sn(
'-')))*dS)

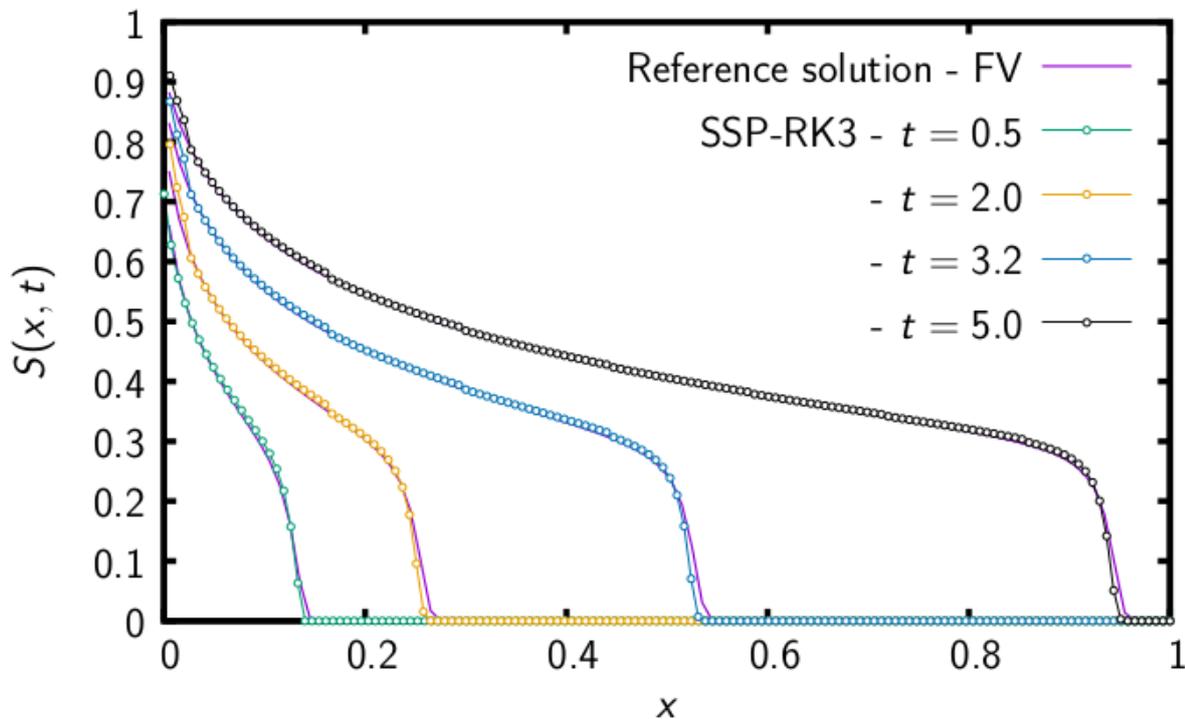
S1 = Function(Vs); L2 = replace(L1, {Sn: S1})
S2 = Function(Vs); L3 = replace(L1, {Sn: S2})
DL = Function(Vs)
# Define the RK stages:
solv1=LinearVariationalSolver(LinearVariationalProblem(aT,L1,DL))
solv2=LinearVariationalSolver(LinearVariationalProblem(aT,L2,DL))
solv3=LinearVariationalSolver(LinearVariationalProblem(aT,L3,DL))

# Loop over time steps
while t < T - 0.5*Dt:
    kapparel = ComputeKappaRel(kappa, Sn)
    sol_darcy = SolveDarcy(mesh, boundaries, kapparel)
    (u, p) = sol_darcy.split(True)
    Dt = ComputeDtCFL(mesh, u)
    solv1.solve(); S1.assign(Sn+DL)#RKS1
    solv2.solve(); S2.assign(0.75*Sn+0.25*(S1+DL))#RKS2
    solv3.solve(); Sn.assign((1.0/3.0)*Sn+(2.0/3.0)*(S2+DL))#RKS3
    t = t + Dt
    outfile << (Sn,t)

```

Na sequência mostramos os resultados obtidos com tal implementação. A princípio realizou-se um estudo sobre o perfil de saturação para um caso imiscível e unidimensional, como visto na figura 17, com campo de permeabilidade absoluta homogêneo. Na figura comparamos o campo de saturação em diferentes tempos ( $t = 0.5, 2.0, 3.2$  e  $5.0$ ) com uma solução de referência obtida pelo método de volumes finitos. Pode-se constatar, quando comparado com a solução de referência, que a medida que aumenta o tempo, a nossa implementação acompanha o comportamento da referência, aproximando assim da solução esperada. Conseqüentemente, estes resultados servem como validação da implementação proposta.

Figura 17 – Saturação em diferentes tempos para o caso com campo de permeabilidade absoluta homogênea.



Elaborado pela autora.

Também foi realizado um estudo comparativo entre a implementação proposta e um método de volumes Finitos apresentado em (ROCHA *et al.*, 2020), para um caso com campo de permeabilidade heterogênea, mais precisamente, a Camada 36 do benchmark SPE10 (SPE, 2022a). Para a resolução foi utilizada uma malha de triângulos com  $\sim 22K$  elementos e um passo de tempo fixo  $\Delta t = 0.001$ , para facilitar a comparação. A solução usada como referencia utiliza um método de volumes finitos em malha cartesiana ortogonal, com resolução espacial equivalente e o mesmo passo de tempo. O campo de saturação é comparado em vários tempos na figura 19, observando uma boa concordância com a solução de referencia. Especialmente, notar que a posição da frente de saturação está sendo muito bem capturada pelo método.

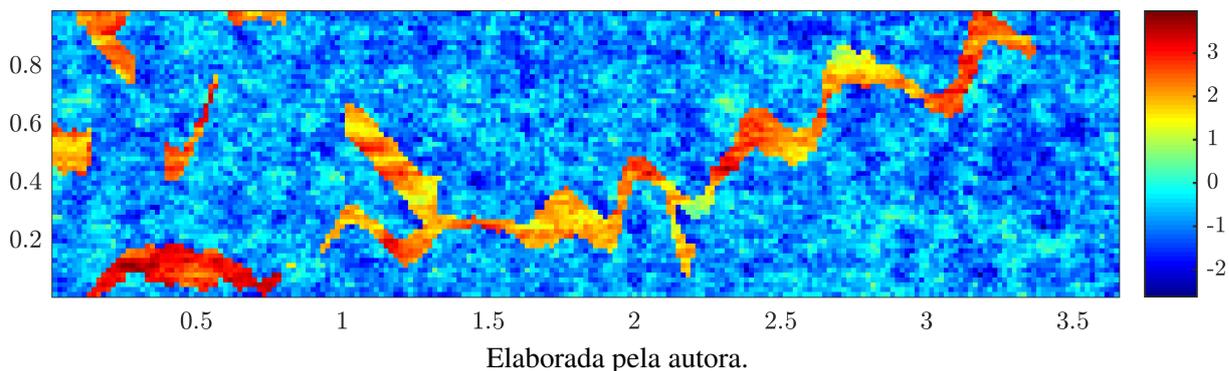
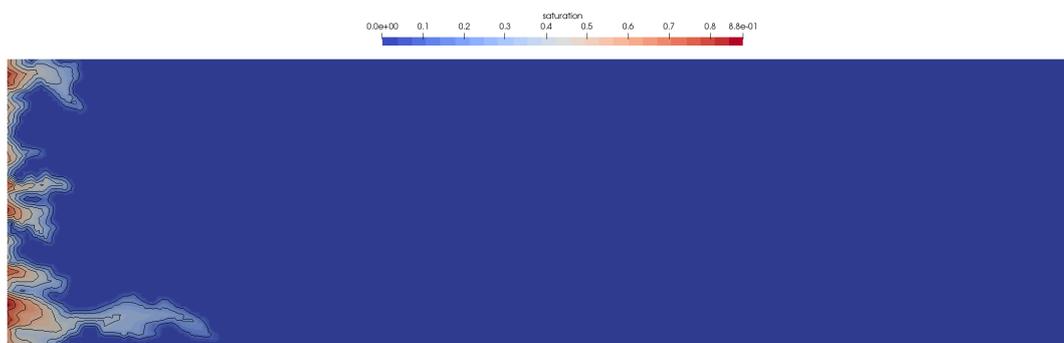
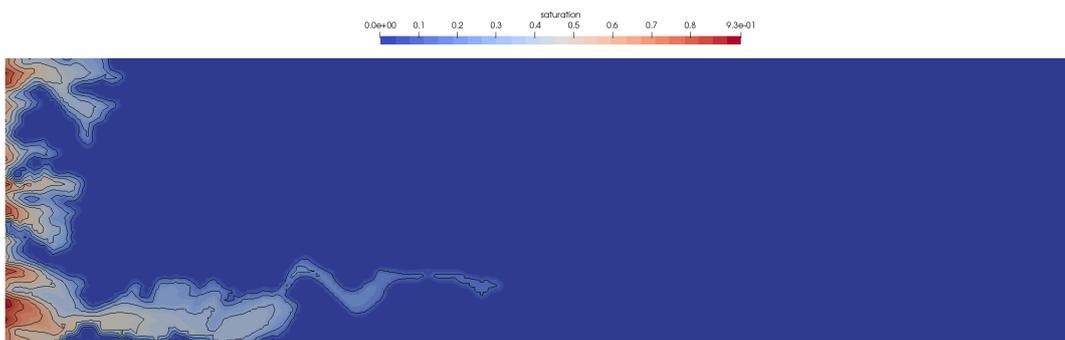
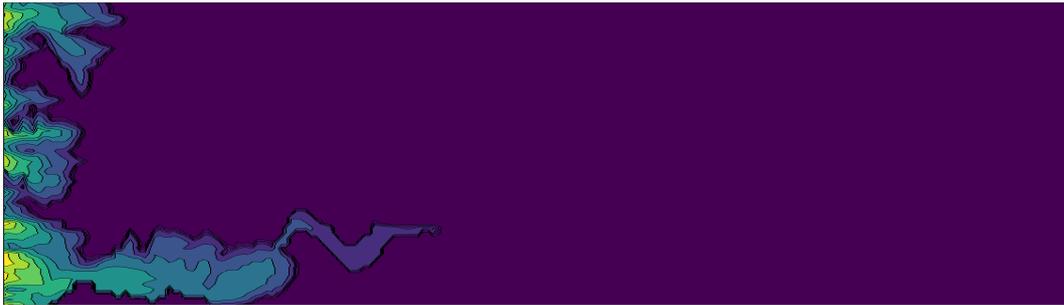
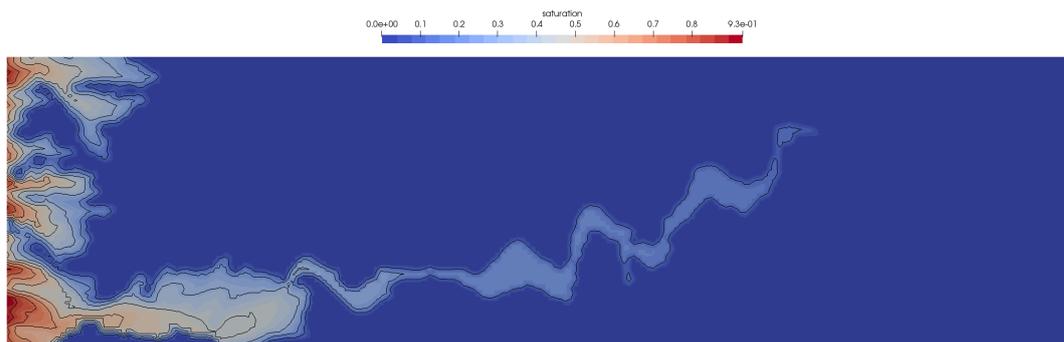
Figura 18 – Campo de permeabilidade, Camada 36 do *benchmark- SPE10*

Figura 19 – Comparativo entre o o Método de Elementos Finitos e o Método de Volumes Finitos, do perfil de saturação em diferentes tempos, para o campo de permeabilidade da Camada 36.

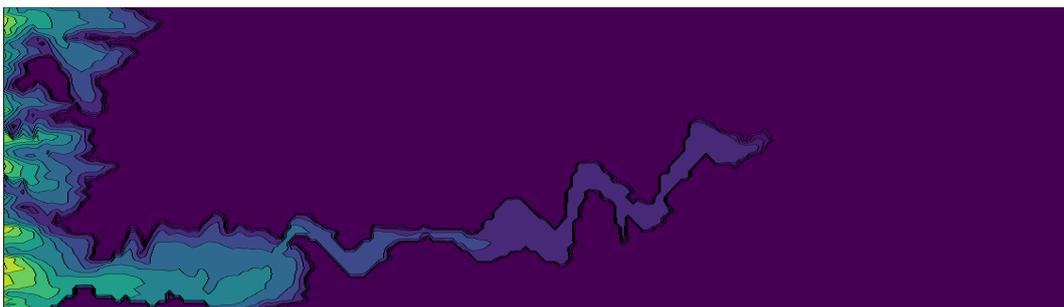
(a) Solução utilizando o método de Elementos Finitos em  $t = 0.2$ .(b) Solução utilizando o método de Volumes Finitos em  $t = 0.2$ (c) Solução utilizando o método de Elementos Finitos em  $t = 0.4$



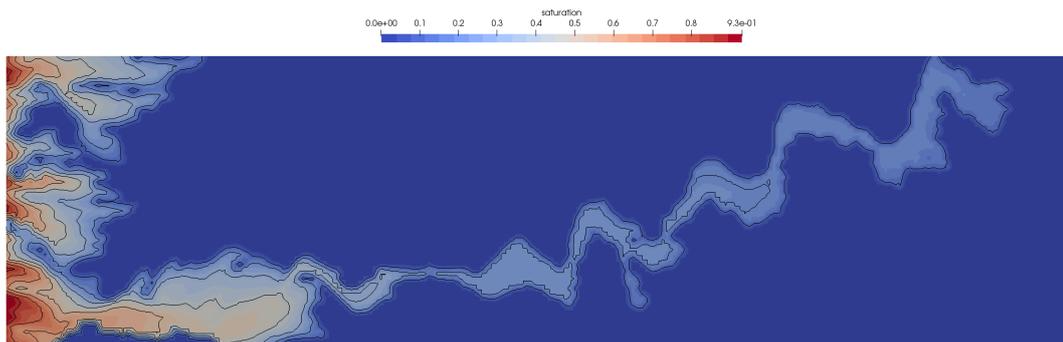
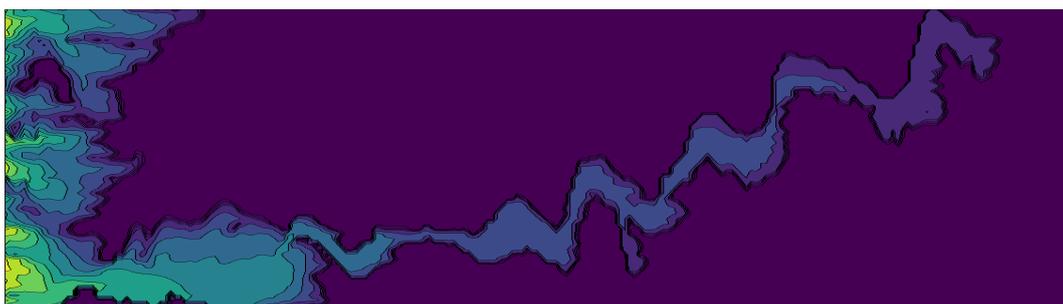
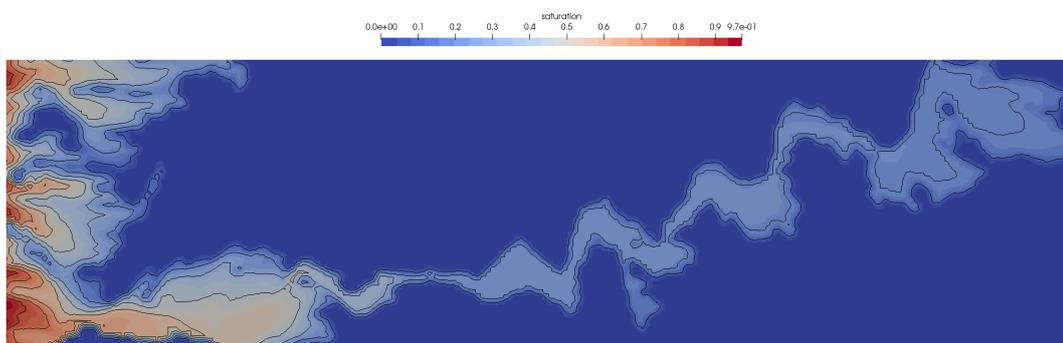
(d) Solução utilizando o método de Volumes Finitos em  $t = 0.4$



(e) Solução utilizando o método de Elementos Finitos em  $t = 0.6$



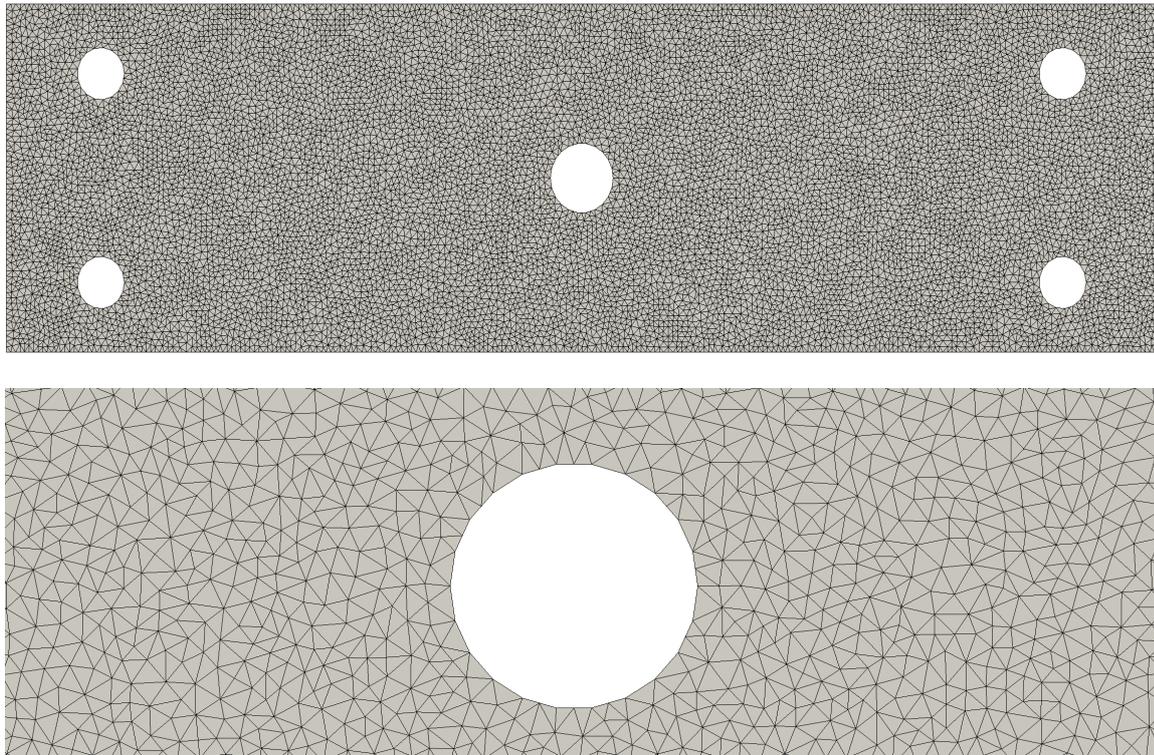
(f) Solução utilizando o método de Volumes Finitos em  $t = 0.6$

(g) Solução utilizando o método de Elementos Finitos em  $t = 0.8$ (h) Solução utilizando o método de Volumes Finitos em  $t = 0.8$ (i) Solução utilizando o método de Elementos Finitos em  $t = 1.0$ (j) Solução utilizando o método de Volumes Finitos em  $t = 1.0$ 

Elaborada pela autora.

A figura 23, exibe os detalhes da malha utilizada para os resultados nesta seção. Foi gerada uma malha não estruturada contendo aproximadamente 22 mil triângulos, com cavidades

Figura 23 – Representação dos detalhes da malha não estruturada, com geometria complexa do campo de saturação.



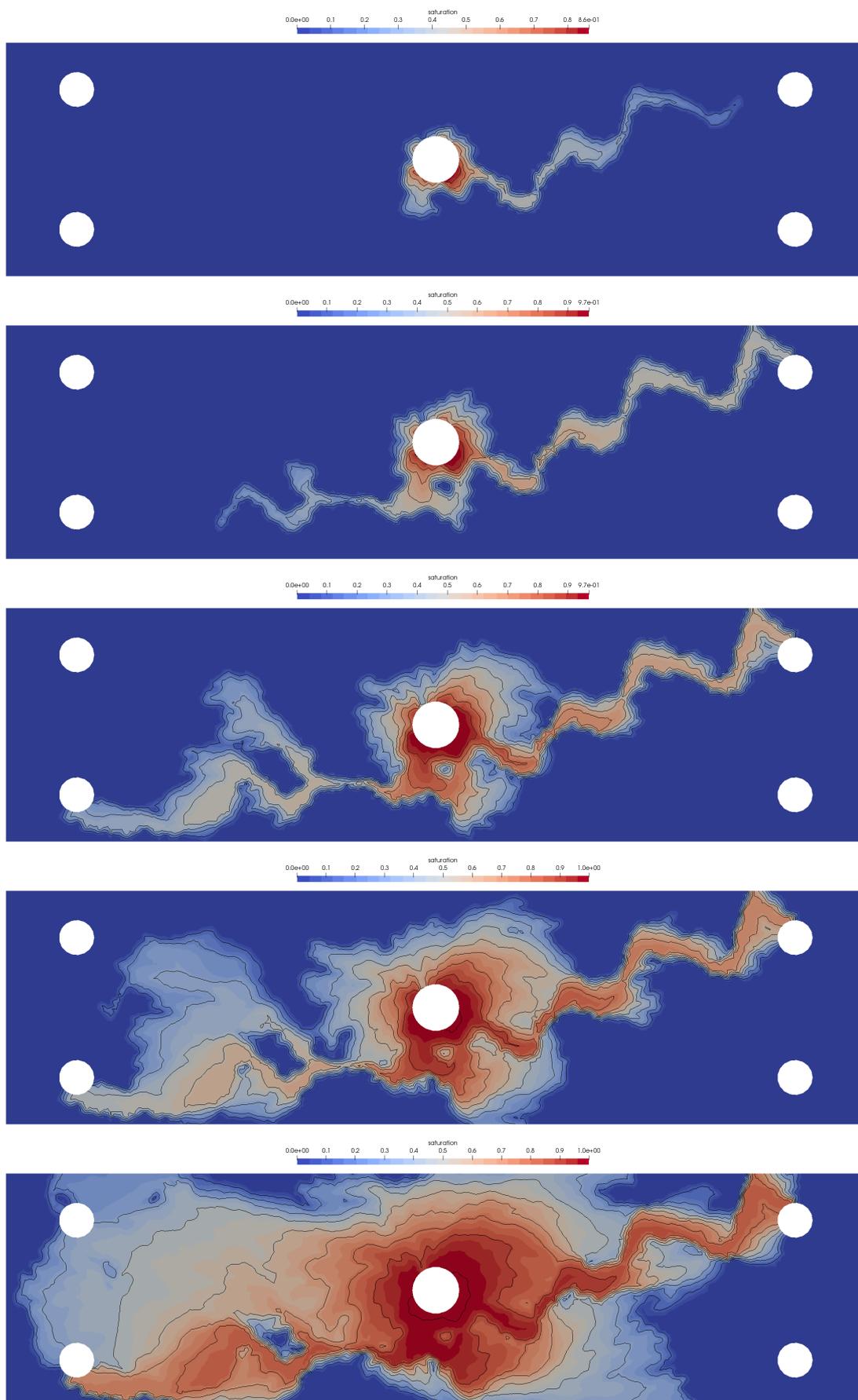
Fonte: Elaborada pela autora.

circulares que representam os *vugs* nas rochas. O software *FEniCS* resolve estes problemas em diferentes tipos de malhas, como ilustrado na imagem 23.

As imagens presentes na figura 24 representam o campo de saturação da Camada 36 do *benchmark* SPE10, em diferentes tempos com uma malha não estruturada, de aproximadamente 22K triângulos e com  $\Delta t = 0.25\Delta t_{CFL}$ . Foi imposta uma pressão maior nos buracos centrais, e pressão nula nas demais cavidades, nas bordas foram impostas condições de contorno nulas no fluxo. A figura 25 apresenta o campo de velocidade, referente a camada 36 do *benchmark* do SPE10, com permeabilidade heterogênea e cavidades circulares. A figura também mostra as linhas de corrente, exibindo o comportamento da velocidade. Na figura 26 é exibido o campo de pressão em 3D.

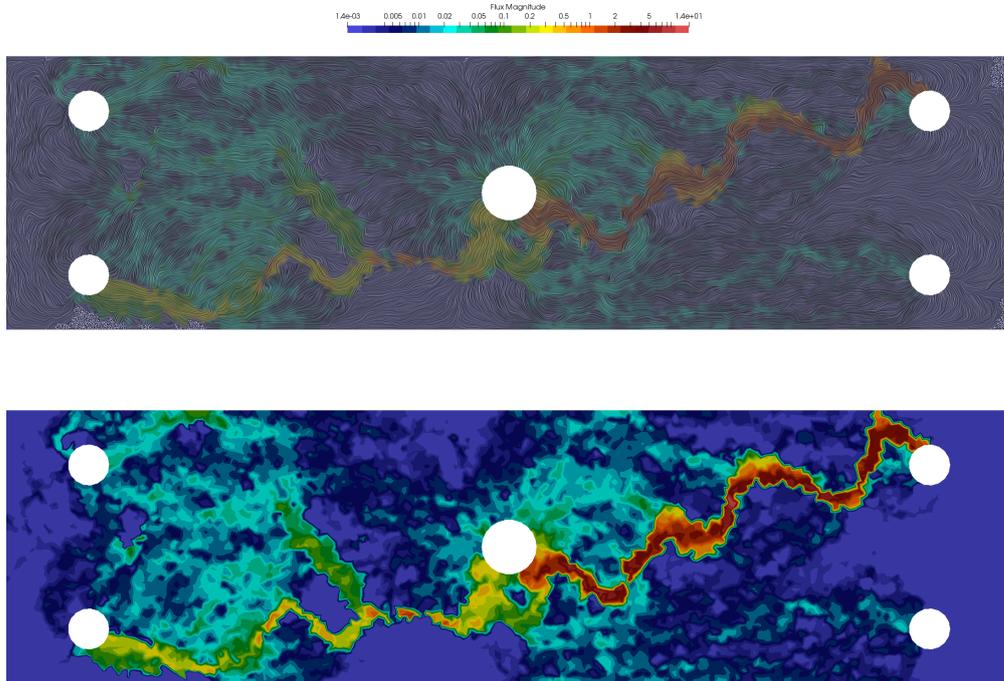
Os testes apresentados neste capítulo servem com validação dos resolvers de malha fina que serão utilizados posteriormente na implementação do método multiescala *Multiscale Robin Coupled Method* (MRCM), na plataforma de elementos finitos *FEniCS legacy* que é o principal foco desta dissertação.

Figura 24 – Campo de saturação em diferentes tempos, referente a camada 36 do SPE10, com malha não estruturada e cavidades circulares no domínio com imposição de pressão na cavidade central e  $\Delta t = 0.25\Delta t_{CFL}$ .



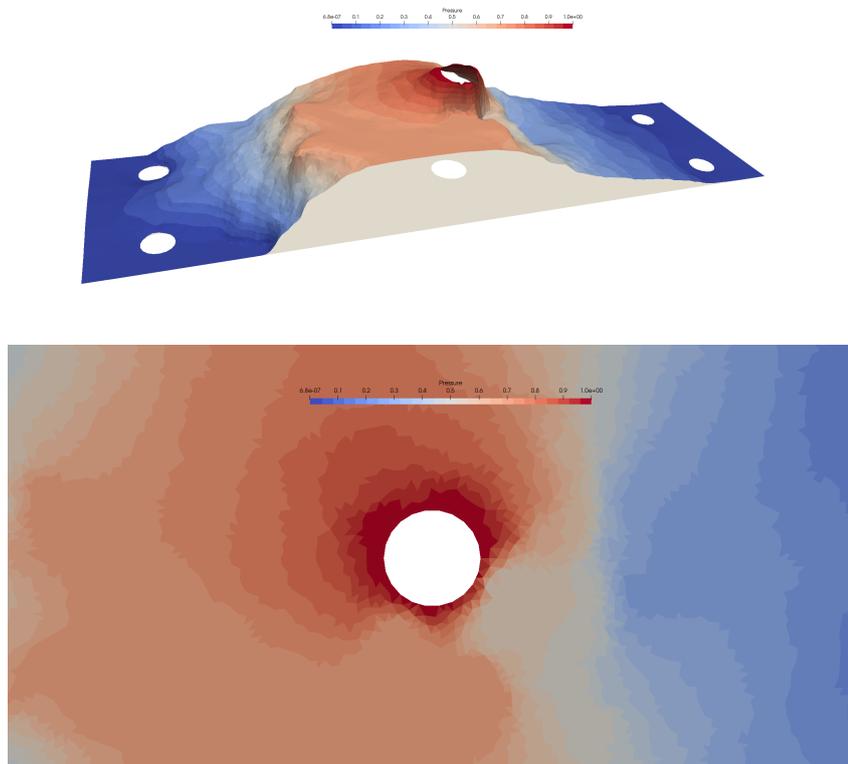
Elaborada pela autora.

Figura 25 – Magnitude do campo de velocidades para o problema com cavidades circulares e campo de permeabilidade heterogêneo.



Elaborada pela autora.

Figura 26 – Representação do campo de pressão em 3D.



Fonte: Elaborada pela autora.

# FORMULAÇÃO MULTIESCALA PARA O PROBLEMA DE DARCY E A SUA IMPLEMENTAÇÃO EM FENICS

## 3.1 Formulação diferencial do método MRCM

Nesta seção será exibida a formulação diferencial do método multiescala de Robin acoplado. Como realizado em (GUIRALDELLO *et al.*, 2020), será considerado um domínio retangular  $\Omega \subset \mathbb{R}^d$  com  $d = 2, 3$  e a subdivisão  $\mathcal{T}_h$  podendo ser bidimensional ou tridimensional. A permeabilidade  $\mathbf{K}$  e o termo fonte  $f$  são funções pertencentes ao espaço  $P_0(\mathcal{T}_h)$ , ou seja, funções que são constantes por partes. Em geral, o contorno de  $\Omega$  pode ser dividido em distintos  $\Gamma_u, \Gamma_p, \Gamma_r$ , em que o fluxo, a pressão e a condição de Robin são impostas como condição de fronteira. Com isso, o problema é dado por:

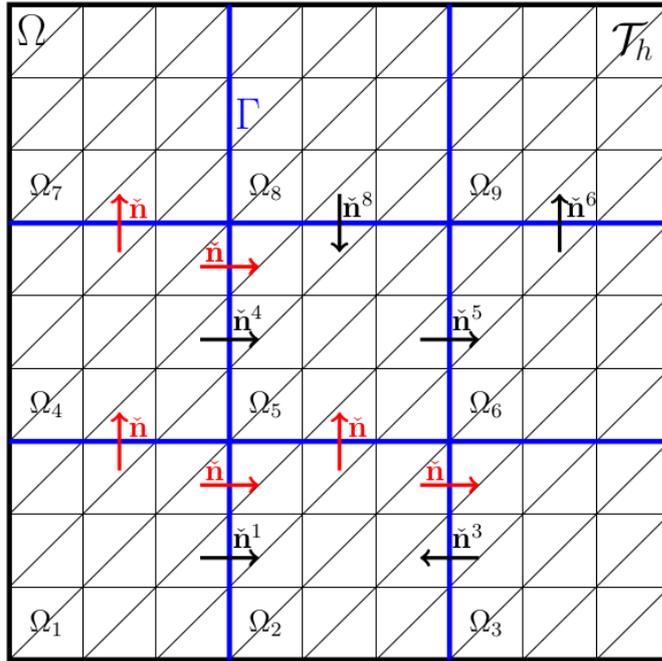
Encontrar o par  $(\mathbf{u}_h, p_h)$  tal que

$$\left\{ \begin{array}{ll} \mathbf{u}_h = -\mathbf{K}\nabla p_h & \text{em } \Omega \\ \nabla \cdot \mathbf{u}_h = f & \text{em } \Omega \\ p_h = g_p & \text{sobre } \Gamma_p \\ \mathbf{u}_h \cdot \mathbf{n} = g_u & \text{sobre } \Gamma_u \\ -\beta \mathbf{u}_h \cdot \mathbf{n} + p = g_r & \text{sobre } \Gamma_r \end{array} \right. \quad (3.1)$$

onde,  $g_u, g_p$  e  $g_r$  são valores impostos na fronteira.

A região  $\Omega$  representa o domínio em que é resolvido o problema global. Dentro do domínio  $\Omega$  temos os subdomínios, tamanho característicos dos subdomínios  $\Omega_i$  é  $H$ . Tais subdomínios são a união das células de malha de tamanho característico  $h$ . Isto é mostrado na figura 27 (adaptada de (GUIRALDELLO *et al.*, 2018)), que apresenta uma decomposição do domínio  $\Omega$ , em subdomínios  $\Omega_i, i = 1, \dots, N$ . Se denota por  $\check{\mathbf{n}}$  a normal exterior a  $\partial\Omega_i$  e por  $\tilde{\mathbf{n}}$  a normal única à interface  $\Gamma_{ij}$  que vai do domínio com menor índice até o domínio com maior índice, ou seja,  $\tilde{\mathbf{n}} = \check{\mathbf{n}}^{\min(i,j)}$ .

Figura 27 – Domínio computacional com esquema de decomposição de domínio adotado.



Fonte: (SOUZA, 2021)

O método multiescala pode ser escrito como:

Encontrar soluções de subdomínios  $(\mathbf{u}_h^i, p_h^i), i = 1, \dots, N$  e interfaces  $(U_H, P_H)$  que satisfaçam os seguintes problemas locais:

$$\left\{ \begin{array}{ll} \mathbf{u}_h^i = -\mathbf{K}\nabla p_h^i & \text{em } \Omega_i \\ \nabla \cdot \mathbf{u}_h^i = f & \text{em } \Omega_i \\ p_h^i = g_p & \text{sobre } \partial\Omega_i \cap \Gamma_p \\ \mathbf{u}_h^i \cdot \check{\mathbf{n}}^i = g_u & \text{sobre } \partial\Omega_i \cap \Gamma_u \\ -\beta \mathbf{u}_h^i \cdot \check{\mathbf{n}}^i + p_h^i = -\beta_i U_H \check{\mathbf{n}} \cdot \check{\mathbf{n}}^i + P_H & \text{sobre } \partial\Omega_i \cap \Gamma \end{array} \right. \quad (3.2)$$

em que os operadores diferenciais são substituídos por operadores adequados as aproximações discretas, juntamente com a compatibilidade das condições no esqueleto  $\Gamma$

$$\left\{ \begin{array}{l} \sum_{i=1}^N \int_{\partial\Omega_i \cap \Gamma} (\mathbf{u}_h^i \cdot \check{\mathbf{n}}^i) \psi \, d\Gamma = 0, \\ \sum_{i=1}^N \int_{\partial\Omega_i \cap \Gamma} (\beta_i (\mathbf{u}_h^i \cdot \check{\mathbf{n}}^i - U_h \check{\mathbf{n}}^i \cdot \check{\mathbf{n}})) \phi \, \check{\mathbf{n}}^i \cdot \check{\mathbf{n}} \, d\Gamma = 0, \end{array} \right. \quad (3.3)$$

que deve ser satisfeito para todas as funções  $\psi \in \mathcal{P}_H$  e  $\phi \in \mathcal{U}_H$ . A interface do fluxo ( $U_H$ ) e da pressão ( $P_H$ ) são funções pertencentes aos espaços  $\mathcal{P}_H$  e  $\mathcal{U}_H$ , respectivamente, as quais são contidas em  $F_h(\mathcal{E}_h)$ , definida como :

$$F_h(\mathcal{E}_h) = \{f : \mathcal{E}_h \rightarrow \mathbf{R} \mid f|_e \in P_0, \forall e \in \mathcal{E}_h\} \quad (3.4)$$

onde,  $\mathcal{E}_h$  é o conjunto de todas as arestas no caso 2D ou todas as faces no caso 3D, de  $\mathcal{T}_h$  contidas em  $\Gamma$ . Estes espaços são compostos por funções constante sobre  $\Gamma$ . Neste trabalho, ficaremos restritos a espaços polinomiais de grau 0, 1 e 2 apenas,  $P_0(\Gamma)$ ,  $P_1(\Gamma)$  e  $P_2(\Gamma)$ , respectivamente.

Um ponto central é a escolha do parâmetro na condição de Robin, o qual é definido em cada subdomínio, tal como visto em (GUIRALDELLO *et al.*, 2019):

$$\beta_i(\mathbf{x}) = \frac{\alpha H}{\mathbf{K}_i(\mathbf{x})} \quad (3.5)$$

em que  $\alpha$  é um parâmetro algorítmico a ser escolhido, o qual nos experimentos numéricos exibidos no capítulo 4 será variável,  $H$  é o tamanho característico do subdomínio e  $\mathbf{K}_i(\mathbf{x})$  é a permeabilidade local.

Primeiramente para resolver o problema de maneira eficiente, será segregada a resolução do problema em cada subdomínio para encontrar as incógnitas de interface. Em cada um dos subdomínios  $\Omega_i$ , a solução  $(\mathbf{u}_h^i, p_h^i)$  do problema de Darcy será decomposta pela soma de duas partes:

$$\mathbf{u}_h^i = \hat{\mathbf{u}}_h^i + \bar{\mathbf{u}}_h^i, \quad p_h^i = \hat{p}_h^i + \bar{p}_h^i, \quad (3.6)$$

as quais satisfazem os seguintes problemas:

$$\left\{ \begin{array}{ll} \bar{\mathbf{u}}_h^i = -\mathbf{K}\nabla\bar{p}_h^i & \text{em } \Omega_i \\ \nabla \cdot \bar{\mathbf{u}}_h^i = f & \text{em } \Omega_i \\ \bar{p}_h^i = g_p & \text{sobre } \partial\Omega_i \cap \Gamma_p \\ \bar{\mathbf{u}}_h^i \cdot \check{\mathbf{n}}^i = g_u & \text{sobre } \partial\Omega_i \cap \Gamma_u \\ -\beta_i \bar{\mathbf{u}}_h^i \cdot \check{\mathbf{n}}^i + \bar{p}_h^i = 0 & \text{sobre } \partial\Omega_i \cap \Gamma \end{array} \right. \quad (3.7)$$

$$\left\{ \begin{array}{ll} \hat{\mathbf{u}}_h^i = -\mathbf{K}\nabla\hat{p}_h^i & \text{em } \Omega_i \\ \nabla \cdot \hat{\mathbf{u}}_h^i = 0 & \text{em } \Omega_i \\ \hat{p}_h^i = 0 & \text{sobre } \partial\Omega_i \cap \Gamma_p \\ \hat{\mathbf{u}}_h^i \cdot \hat{\mathbf{n}}^i = 0 & \text{sobre } \partial\Omega_i \cap \Gamma_u \\ -\beta_i \hat{\mathbf{u}}_h^i \cdot \hat{\mathbf{n}}^i + \hat{p}_h^i = -\beta_i U_H \hat{\mathbf{n}} \cdot \hat{\mathbf{n}}^i + P_H & \text{sobre } \partial\Omega_i \cap \Gamma \end{array} \right. \quad (3.8)$$

Note-se que a solução  $\hat{\mathbf{u}}_h^i$  depende dos dados de interface  $(P_H, U_H)$ . Considerando  $\mathcal{P}_H = \text{span}\{\psi_1, \dots, \psi_{N_P}\}$  e  $\mathcal{U}_H = \text{span}\{\phi_1, \dots, \phi_{N_U}\}$ , onde  $N_P$  e  $N_U$  são as dimensões dos espaços de interface, denominamos  $k_U$  e  $k_P$  os graus de liberdade por interface, então a dimensão destes espaços é  $N_P = k_P \times N_I$  e  $N_U = k_U \times N_I$ , sendo  $N_I$  o número de elementos da malha. O caso mais simples corresponde a tomar  $k_P = k_U = 1$  (funções constantes em cada interface  $\Gamma_{ij}$ ) e apenas um elemento por interface entre subdomínios. Agora, vamos escrever os campos de interface como combinações lineares da seguinte forma:

$$P_H = \sum_{k=1}^{N_P} P_k \psi_k, \quad U_H = \sum_{k=1}^{N_U} U_k \phi_k. \quad (3.9)$$

Isso nos leva ao sistema linear de equações que serão satisfeitos pelo vetor das incógnitas de interface  $\underline{X} = (P_1, \dots, P_{N_P}, U_1, \dots, U_{N_U})^T$ . Este sistema é composto por:

$$\underline{A}\underline{X} = \underline{b} \rightarrow \begin{bmatrix} A^{PP} & A^{PU} \\ A^{UP} & A^{UU} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \underline{P} \\ \underline{U} \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} \underline{b}^P \\ \underline{b}^U \end{bmatrix}. \quad (3.10)$$

Mais detalhes sobre o cálculo dos coeficientes da matriz e do lado direito do sistema podem ser consultados em (GUIRALDELLO *et al.*, 2020) e os omitimos aqui por motivos de brevidade. Posteriormente, na seção que explica a implementação na plataforma FEniCS, mostraremos o cálculo das funções de base/a resolução dos problemas locais, a decomposição aditiva, o cálculo dos coeficientes, etc., que acabamos de apresentar.

## 3.2 Formulação variacional MRCM

Antes de introduzir o método multiescala MRCM é conveniente considerar uma formulação variacional do problema baseada na decomposição do domínio computacional em subdomínios a serem acoplados através das condições de Robin para resolver o problema de malha fina. Como realizado por (SOUZA, 2021), será considerado uma decomposição do domínio sem sobreposição  $\Omega = \bigcup_i^m \Omega_i$ . Nas bordas de  $\partial\Omega_i$ , considere a normal única  $\hat{\mathbf{n}}$  definida como igual a normal exterior de  $\partial\Omega$  nas bordas em que  $\partial\Omega_i \cap \partial\Omega \neq \emptyset$  e como a normal exterior do

subdomínio de menor índice em  $\partial\Omega_i \cap \Gamma_{ij}$ , em que,  $\Gamma_{ij} = \partial\Omega_i \cap \partial\Omega_j$ . Considerou também uma partição  $\mathcal{T}_h^i$  em cada  $\Omega_i$  e os espaços  $\mathbf{V}_{h\bar{g}_u}^i \subset H(\text{div}, \Omega_i)$ ,  $Q_h^i \subset L^2(\Omega_i)$ . O problema é dado por: Encontrar o par  $(\mathbf{u}_h^i, p_h^i) \in \mathbf{V}_{h\bar{g}_u}^i \times Q_h^i$ , para  $i = 1, \dots, m$ , e o par  $(U_h, P_h) \in \mathcal{U}_h \times \mathcal{P}_h$  tais que

$$\begin{aligned} (\kappa^{-1} \mathbf{u}_h^i, \mathbf{v})_{\Omega_i} - (p_h^i, \nabla \cdot \mathbf{v})_{\Omega_i} + (P_h - \beta_i U_h \check{\mathbf{n}}^i \cdot \check{\mathbf{n}} + \beta_i \mathbf{u}_h^i \cdot \check{\mathbf{n}}^i, \mathbf{v} \cdot \check{\mathbf{n}}^i)_{\Gamma_i} &= c(\mathbf{v}), \\ (q, \nabla \cdot \mathbf{u}_h^i)_{\Omega_i} &= (f, q)_{\Omega_i}, \\ \sum_{i=1}^m (\mathbf{u}_h^i \cdot \check{\mathbf{n}}^i, M_h)_{\Gamma_i} &= 0, \end{aligned} \quad (3.11)$$

$\forall (\mathbf{v}, q) \in \mathbf{V}_{h0}^i \times Q_h^i$ ,  $i = 1, \dots, m$ ,  $\forall (M_h, V_h) \in \mathcal{P}_h \times \mathcal{U}_h$ . As duas primeiras equações correspondem respectivamente à lei de Darcy e à equação de conservação da massa em cada subdomínio  $\Omega_i$  e as duas últimas equações correspondem respectivamente às condições de continuidade fraca do fluxo e da pressão no esqueleto  $\Gamma$  da decomposição, respectivamente. Os campos auxiliares  $P_h \in \mathcal{P}_h$  e  $U_h \in \mathcal{U}_h$  estão definidos em  $\Gamma$  com a finalidade de acoplar as soluções dos subdomínios. Como sugerido por (GUIRALDELLO *et al.*, 2019), o parâmetro de Robin foi dado através da equação 3.5.

Nota-se que a formulação exibida em 3.11, é o equivalente a resolver o problema global de malha fina em  $\Omega$  via decomposição de domínio, da forma que foi exibido na figura 27. Em (GUIRALDELLO *et al.*, 2018) prova-se que a solução deste problema é a mesma que a do caso não decomposto. Neste caso, seria suficiente introduzir apenas um multiplicador de Lagrange no esqueleto, a pressão  $P_h \in \mathcal{P}_h$  para impor de forma fraca a continuidade do fluxo, isto é equivalente a tomar  $\beta_i = 0$ , para todo  $i$ . A dimensão do espaço  $\mathcal{P}_h$  está relacionada com a discretização induzida no esqueleto pela malha dos subdomínios e da mesma forma acontece em  $\mathcal{U}_h$ . Desta forma, acaba-se com o dobro de incógnitas do que seria necessário para resolver o problema.

Ao considerar a formulação multiescala, a qual surge quando são escolhidos em  $\Gamma$  espaços  $\mathcal{P}_H \subset \mathcal{P}_h$  e  $\mathcal{U}_H \subset \mathcal{U}_h$ , com  $\dim \mathcal{P}_H \ll \dim \mathcal{P}_h$  e  $\dim \mathcal{U}_H \ll \dim \mathcal{U}_h$ , o método proposto fornece uma aproximação do problema de malha fina com um custo computacional reduzido, como pode ser visto em (GUIRALDELLO *et al.*, 2019), (JARAMILLO *et al.*, 2021) e (ROCHA *et al.*, 2021), em diferentes aplicações. No presente trabalho considerou-se espaços polinomiais no esqueleto, tanto para  $\mathcal{U}_H$  como para  $\mathcal{P}_H$ , considerando uma partição do esqueleto  $\mathcal{T}_H(\Gamma)$ , tem-se

$$\mathcal{U}_H = \mathcal{P}_H = \{ \psi, \psi(\mathbf{x})|_e \in P_k(e) \forall e \in \mathcal{T}_H(\Gamma) \} \quad (3.12)$$

A formulação é localmente conservativa, uma vez que os espaços  $H(\text{div})$  são usados nos problemas locais e também é conservativa na escala grossa, pelo fato do espaço  $\mathcal{P}_H$  conter as

funções constantes, o que decorre da terceira equação de 3.11, ou seja, toda a massa que sai de um domínio através de uma interface entra no domínio vizinho. Por fim, vale ressaltar que dependendo do valor adotado para o parâmetro  $\gamma$  na condição de Robin e da escolha para os espaços  $\mathcal{P}_H$  e  $\mathcal{U}_H$ , podem ser recuperados outros métodos disponíveis na literatura, como:

- *Multiscale Mixed Mortar Finite Element Method* (MMMFEM) (ARBOGAST *et al.*, 2007);
- *Multiscale Hybrid Mixed Method* (MHM) (HARDER; PAREDES; VALENTIN, 2013);
- *Multiscale Mixed Method* (MuMM) (FRANCISCO *et al.*, 2014);

Métodos multiescala com formulações de decomposição de domínio, tais como MMMFEM e MHM, possuem como estratégia a criação de duas escalas de discretização, restringindo o espaço do multiplicador de Lagrange na malha fina para um espaço mais grosseiro. Considerando o método MMMFEM, com a formulação 3.11, impondo  $P = \mathcal{P}_h$  e  $\beta_i = 0$  para todo  $i$ , é obtido a solução de malha fina e considerando  $P = \mathcal{P}_H$  se tem a versão multiescala. Da mesma forma, o método MHM é obtido considerando um subespaço grosseiro  $\mathcal{U}_H$  para o multiplicador de Lagrange, além disso ele também é o limite da formulação multiescala, quando  $\beta_i \rightarrow +\infty$ , fazendo com que a incógnita  $P$  desapareça.

Como visto anteriormente, para a implementação do método multiescala realiza-se o cálculo das soluções locais em cada subdomínio, no qual foi utilizado um método de malha fina, na prática, se computam as chamadas funções de base multiescala para reduzir estaticamente os graus de liberdade internos de cada subdomínio. Posteriormente é realizado a resolução de um problema de interface colocado sobre o esqueleto da decomposição, que acopla a solução dos subdomínios. Além disso, lembramos que na resolução do método multiescala, a aplicação de métodos avançados na resolução do problema de malha fina e/ou problemas locais dentro de cada subdomínio, assim como na resolução do problema acoplado considerando o problema de transporte de saturação. Para isso, será explorada no próximo capítulo uma plataforma de elementos finitos, onde serão testadas formulações variacionais mistas de Galerkin descontínuo (DG), e na hora que calcular os diferentes espaços  $H(\text{div})$  discretos, serão utilizados os espaços de Raviart-Thomas e Brezzi-Douglas-Marini (BDM) de diferentes graus, e também o uso de malhas não estruturadas de triângulos em 2D para discretizar os subdomínios, que permitem considerar problemas que incluem refinamentos locais.

### 3.3 Detalhes de implementação do MRCM na plataforma FEniCS

Do apresentado até aqui, se desprende que a implementação do método MRCM pode ser dividida em várias etapas bem diferenciadas. A ideia nesta seção é apresentar os detalhes

de implementação junto com uma versão simplificada do código de cálculo desenvolvido na plataforma de elementos finitos legacy FEniCS. Inicialmente, os passos envolvidos são:

1. Pré-processo dos dados
2. Setting inicial em cada subdomínio
3. Cálculo das funções de base multiescala
4. Montagem do sistema global de interface para acoplar as soluções entre subdomínios
5. Resolução do sistema global
6. Reconstrução da solução na malha fina dos subdomínios

Na sequência, detalhamos cada um destes passos apresentando a implementação na FEniCS. A ideia é relacionar o código com a formulação matemática que acabamos de apresentar. Estes códigos, em alguns casos são autoexplicativos, devido às características de alto nível disponibilizados pela plataforma:

- **Pré-processo:** Nesta primeira etapa o principal objetivo é definir as estruturas de dados necessárias para estabelecer as conectividades entre os subdomínios e as incógnitas de interface. Apesar de que seria possível trabalhar com decomposições de domínio não estruturadas, neste trabalho temos simplificado o tratamento e considerado decomposições cartesianas ortogonais, deixando apenas o tratamento não estruturado para a discretização de malha fina dentro de cada subdomínio. Nesta primeira etapa então definimos estruturas de conectividades, tais como:

```
# Mesh topology and connectivities

nedges    = Ndomx*(Ndomy+1) + Ndomy*(Ndomx+1) # Number of edges
Nsubd     = Ndomx*Ndomy # Number of coarse elements
nedgexel  = 4 # Number of edges per coarse element (quads)

el2edge   = ComputeELtoEDGEconnectivity(Nsubd, nedgexel, dtype=int)
edge2el   = ComputeEDGEToELconnectivity(nedges, dtype=int)
NGamma    = ComputeNumberSkeletonEdges(el2edge)

# Number of interface unknowns
NunkU     = NGamma*ndofsU
NunkP     = NGamma*ndofsP
NunkGamma = NunkU + NunkP

con_Gamma_unks = ComputeGAMMAToGAMMAconnectivity(NunkU, NunkP)
```

• **Setting inicial em cada subdomínio:** Nesta fase, os objetos necessários para formular o problema variacional de elementos finitos em cada subdomínio são definidos, tais como a malha de elementos finitos, os espaços discretos, a restrição do campo de permeabilidades a cada subdomínio e as medidas de integração:

```
.
.
EJ = FiniteElement(Hdivtype, celltype, orderu)
EP = FiniteElement('DG', celltype, orderp)
EM = MixedElement([EJ, EP])
mesh = [] # List of meshes
for iy in range(Ndomy):
    y0 = iy*Hy
    for ix in range(Ndomx):
        x0 = ix*Hx

        isub = ix + iy*Ndomx # Global index of coarse element

        # Domain of coarse element
        domain = Rectangle(Point(x0,y0), Point(x0+Hx,y0+Hy))

        # Finite element mesh of coarse element
        mesh.append(generate_mesh( domain, refinement ))

        # Mixed function space on coarse element
        W.append(FunctionSpace(mesh[isub], EM))

        # Permeability field on coarse element
        kappa = RestrictPERMtoSUBDOMAIN(kappaglob, mesh[isub])

        # Measure for integration over skeleton edges
        ds = Measure("ds", domain=mesh[isub], subdomain_data=
boundaries)
        dGamma.append(ds)
```

• **Computo das funções de base multiescala:** Neste passo, são definidas as formas lineares e bilineares do problema associado ao cálculo das funções de base multiescala, o espaço de interface tal como definido em 3.12 e são resolvidos os problemas locais correspondente para calcular efetivamente as funções de base. Devido ao tamanho dos sistemas, são usados métodos diretos para resolver ditos problemas locais.

```

nu=[Constant((0.0, 1.0)), Constant((1.0, 0.0)), \
     Constant((0.0, 1.0)), Constant((1.0, 0.0))]#Unique normal
# Construction of MSBFs - velocity-pressure pairs (PHI,PSI)
MSCBasisHom, MSCBasisPart = [],[] #List with Multiscale Basis
for iy in range(Ndomy):
    for ix in range(Ndomx):
        isub = ix + iy*Ndomx # Global index of coarse element
        # Variational problem
        TstF, TrlF=TestFunction(W[isub]), TrialFunction(W[isub])
        (v,q), (u,p) = split(TstF), split(TrlF)
        ne = FacetNormal(mesh[isub])
        a = (inner(inv kappa*u,v) - div(v)*p - div(u)*q) * dx

        # Algorithmic parameter for robin BC
        beta = ComputeBETA(alpha, min(Hx,Hy), ikappa[isub])

        for s in list_robin: # Add Robin boundary terms
            a += inner(beta*i*dot(u,ne), dot(v,ne))*ds(s)

        # Set essential BCs on external boundaries if needed
        bcs = ...

        # Homogeneous basis functions (uhat, phat)
        for s in list_robin:
            phij, psij = ComputeEdgeBasis(degreeGamma)
            # Compute flux basis restricted to subdomain
            for idf in range(ndofsU):
                L = inner(beta*phij*dot(nu[s],ne), dot(v,ne))*ds(s)
                solLOC = SolveDarcyLocal(a, L, bcs)
                MSCBasisHom.append(solLOC)
            # Compute pressure basis restricted to subdomain
            for idf in range(ndofsP):
                L = -inner(psij, dot(v,ne))*ds(s)
                solLOC = SolveDarcyLocal(a, L, bcs)
                MSCBasisHom.append(solLOC)

        # Particular solution (ubar, pbar)
        L = -fsource * q * dx
        L += ... # Add boundary terms if needed
        solLOC = SolveDarcyLocal(a, L, bcs)
        MSCBasisPart.append(solLOC)

```

### • Montagem do sistema global de interface

```

A_Gamma = np.zeros(shape=(NunkGamma,NunkGamma), dtype=float)
b_Gamma = np.zeros(NunkGamma, dtype=float)
for l in range(NGamma):
    els = edge2el[ieG[l],:]
    for e in range(2): # Edge is shared by 2 subdomains
        el = els[e]
        ne = FacetNormal(mesh[el])
        si = GetSideIndex(l, el)
        (ub,pb) = MSCBasisPart[el].split(True)

        for idf in range(ndofsU): # Loop over lines: Flux dofs
            iunkG = idf + l*ndofsU
            phii = ComputeEdgeBasis (degreeGamma, idf, si)
            betael = beta(alpha, min(Hx,Hy), ikappa[el])
            # RHS of global system (vector b)
            b_Gamma[iunkG]+=assemble(-inner(betael*dot(ub,ne),phii*
dot(nu[si],ne)) * dGamma[el](si))

            for junkG in con_Gamma_unks[iunkG]: # Loop over columns
                phij = ComputeEdgeBasis (degreeGamma, idf, si)
                iwh = GetGlobalMSCindex(el,junkG)
                if(iwh != -1): # non-zero exists
                    (uh, ph) = MSCBasisHom[iwh].split(True)
                    A_Gamma[iunkG,junkG]+=assemble(inner(betael*(dot(uh
,ne) - phij*dot(nu[si],ne)),phii*dot(nu[si],ne)) * dGamma[el](
si) )

            for idf in range(ndofsP): # Loop over lines: Pressure dofs
                iunkG = NunkU + idf + l*ndofsP
                psii = ComputeEdgeBasis (degreeGamma, idf, si)
                # RHS of global system (vector b)
                b_Gamma[iunkG]+=assemble(-inner( dot(ub,ne),psii)*dGamma
[el](si))

                for junkG in con_Gamma_unks[iunkG]: # Loop over columns
                    iwh = GetGlobalMSCindex(el,junkG)
                    if(iwh != -1): # non-zero exists
                        (uh, ph) = MSCBasisHom[iwh].split(True)
                        A_Gamma[iunkG,junkG]+=assemble(inner(dot(uh,ne),
psii)*dGamma[el](si))

```

• **Resolução do sistema global e reconstrução:** Para este passo também adotamos métodos diretos para resolver o sistema linear associado ao problema global. Após a resolução, são recuperados os coeficientes da solução multiescala e a solução final é reconstruída em cada subdomínio de acordo:

```
# Convert to sparse format
A_G_sp = scipy.sparse.csc_matrix(A_Gamma)

# Find global vector of interface unknowns
X = scipy.sparse.linalg.spsolve(A_G_sp, b_Gamma)

# Reconstruct solution in each subdomain
for e in range(Nsubd):
    (ub, pb) = MSCBasisPart[e].split(True)
    uT, pT = ub, pb
    for ig in range(NunkGamma):
        iwh = GetGlobalMSCindex(e1, ig)
        if(iwh != -1):
            (uh, ph) = MSCBasisHom[iwh].split(True)
            uT += Constant(X[ig])*uh
            pT += Constant(X[ig])*ph

    uT = project(uT, W[e].sub(0).collapse())
    pT = project(pT, W[e].sub(1).collapse())

# Compute some error norms if needed
...
```



---

## ESTUDOS NUMÉRICOS COM O *MULTISCALE ROBIN COUPLED METHOD* (MRCM)

---

---

Este capítulo apresenta os resultados numéricos obtidos neste projeto. O principal objetivo é mostrar uma avaliação numérica exaustiva da implementação realizada para o método multiescala MRCM, na plataforma de elementos finitos FEniCS. Como mencionado anteriormente, esta é a primeira implementação do método empregando malhas não estruturadas de elementos finitos e elementos Hdiv gerais no nível da malha fina dos subdomínios. No entanto, lembremos que a decomposição em subdomínios, tem sido mantida estruturada para facilitar certos aspectos de implementação, que seriam bastante complicados com as funcionalidades correntes da biblioteca FEniCS. Serão apresentados três grupos de resultados:

- Problema com permeabilidade homogênea e solução manufaturada;
- Problema com permeabilidade heterogênea baseado no benchmark SPE10 ([SPE, 2022a](#));
- Problema com geometrias complexas e campo de permeabilidades heterogêneas.

No primeiro caso, o objetivo é calcular o erro na solução numérica, comparando com uma solução manufaturada, a fim de entender os aspectos de discretização envolvidos, como por exemplo, a escolha do tipo de elemento e refinamento no nível da malha fina, a decomposição de domínio (isto é, a malha grossa) e os espaços de interface para acoplar as soluções dos subdomínios que impactam na precisão do método. No segundo e terceiro caso, a ideia é ilustrar o comportamento do método em malhas não regulares e assim mostrar a versatilidade da implementação para lidar com geometrias mais complexas, o que não tem sido abordado em estudos prévios ([GUIRALDELLO \*et al.\*, 2018](#))

## 4.1 Caso Homogêneo: solução manufaturada

No primeiro experimento vamos resolver o problema de Darcy considerando a solução manufaturada:

$$p(x, y) = \cos(2\pi x) \cos(2\pi y) \quad (4.1)$$

e um campo de permeabilidades homogêneo valendo  $\kappa(x, y) = 1$ ,  $\forall (x, y) \in \Omega$ , sendo  $\Omega$  o domínio computacional  $[0, 1] \times [0, 1]$ . A velocidade de Darcy correspondente é dada por

$$\mathbf{u} = [2\pi \sin(2\pi x) \cos(2\pi y), 2\pi \cos(2\pi x) \sin(2\pi y)]^T. \quad (4.2)$$

Portanto, o termo forçante no lado direito da equação de Darcy é

$$f = 8\pi^2 \cos(2\pi x) \cos(2\pi y)$$

Os resultados serão apresentados em termos do erro com respeito à solução exata do problema, no nível da malha fina em norma  $L^2(\Omega)$ , tanto para a pressão como para a velocidade, ou seja,

$$e_p = \|p - p_h\|_{L^2(\Omega)} = \left( \int_{\Omega} (p - p_h)^2 d\Omega \right)^{\frac{1}{2}} \quad (4.3)$$

e para a velocidade, similarmente,

$$e_u = \|\mathbf{u} - \mathbf{u}_h\|_{L^2(\Omega)} = \left( \int_{\Omega} (\mathbf{u} - \mathbf{u}_h) \cdot (\mathbf{u} - \mathbf{u}_h) d\Omega \right)^{\frac{1}{2}} \quad (4.4)$$

Neste estudo optou-se por mostrar erros absolutos. Se o leitor preferir, o erro relativo pode ser calculado conhecendo a norma da solução manufaturada que após integração resultam:

$$\|p\|_{L^2(\Omega)} = \frac{1}{2}, \quad \|\mathbf{u}\|_{L^2(\Omega)} = \sqrt{2} \pi.$$

Para analisar a precisão do método multiescala, foi realizado um estudo de refinamento em duas etapas:

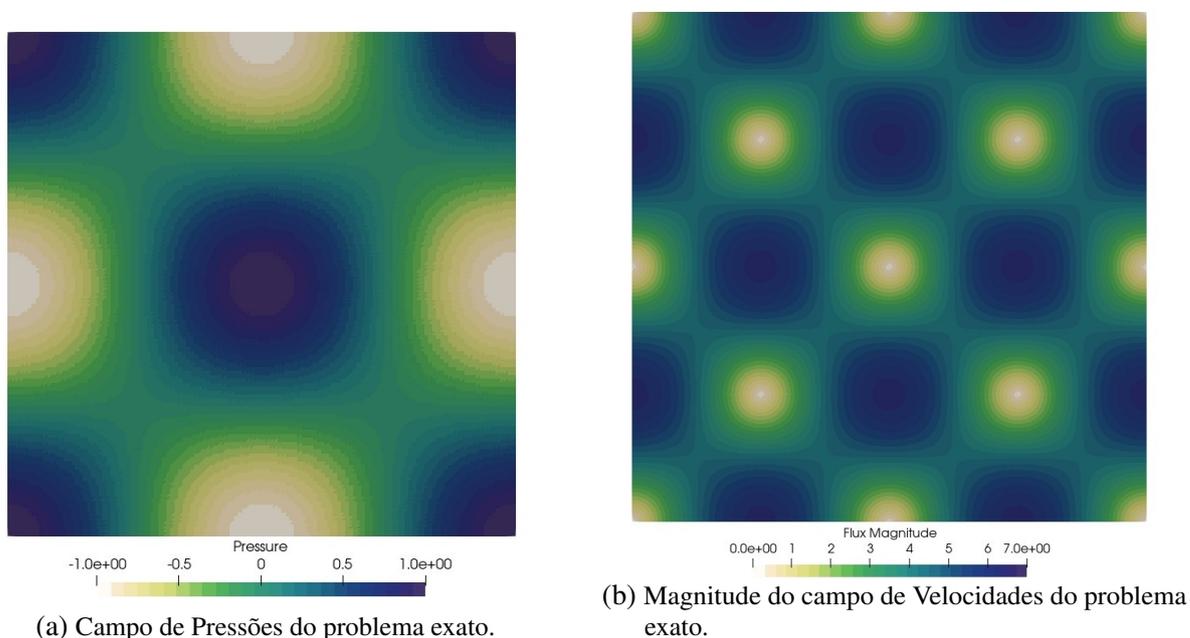
- **Experimento 1:** a decomposição de domínio  $N_x \times N_y$  é mantida fixa e varia-se o número global de incógnitas da malha fina  $N_{globx} \times N_{globy}$ . Desta forma poderemos estudar como converge o método com respeito à precisão dos resolutores locais.
- **Experimento 2:** a decomposição de domínio  $N_x \times N_y$  é variada e deixa-se o número de incógnitas da malha fina fixa em cada subdomínio, isto é, se denotarmos por  $H$  e  $h$  o refinamento de malha grossa e malha fina, respectivamente,  $H/h$  será mantido constante.

Estes estudos são similares aos apresentados em (GUIRALDELLO *et al.*, 2018), onde a mesma solução manufaturada e as mesmas estratégias de refinamento são empregadas. Para fixar alguns parâmetros da discretização, serão consideradas as seguintes opções:

- Parâmetro de Robin no MRCM:  $\alpha = 1$ ;
- Elementos polinomiais  $P_k(\Gamma)$  com  $k = 1, 2$ , no esqueleto da decomposição, para ambos campos de incógnita na interface  $U_H$  e  $P_H$ ;
- Elemento  $Hdiv$  de *Brezzi-Douglas-Marini*,  $BDM_k$ , com  $k = 1, 2$ , no nível da malha fina<sup>1</sup>.
- Finalmente, lembrar que para ter uma formulação estável, o espaço discreto de pressões precisa ser escolhido como  $P_{k-1}^{disc}$ . Para poder usar espaços conformes seria necessário acrescentar termos de estabilização na formulação variacional(??).

Antes de passar aos resultados e a avaliação do erro numérico da formulação multiescala, para futuras comparações, na Figura 28 podemos ver os campos de pressão e velocidade correspondentes ao problema exato 4.1 - 4.2, isto, numa malha bastante refinada. Pode-se observar que as variações no campo de pressões  $p$  tem uma frequência espacial que corresponde a metade da frequência para a variável de fluxo  $\mathbf{u}$ , o que surge de maneira óbvia, pela forma adotada para a solução manufaturada.

Figura 28 – Campos de pressão e velocidade da solução exata no caso homogêneo.



Fonte: Elaborada pela autora.

<sup>1</sup> Uma pergunta natural é, porque não usar os clássicos espaços de Raviart-Thomas  $RT_k$ . Com base na experimentação, verifica-se que as conclusões não mudam significativamente usando-os, porém, para fins de ilustração, estes serão empregados posteriormente, no estudo dos casos com permeabilidade heterogênea.

### 4.1.1 Análise dos resultados para o Experimento 1

Lembrando que neste primeiro experimento, a decomposição de domínio  $N_x \times N_y$  é mantida fixa e varia-se o número global de incógnitas da malha fina  $N_{globx} \times N_{globy}$ . Nota-se que, desta forma, a discretização em cada subdomínio será variável. Neste experimento serão consideradas as seguintes discretizações:

- $N_x \times N_y = 4 \times 4$  e  $8 \times 8$ ;
- $N_{globx} \times N_{globy} = 20 \times 20, 40 \times 40, 80 \times 80, 160 \times 160$  e  $320 \times 320$ ;

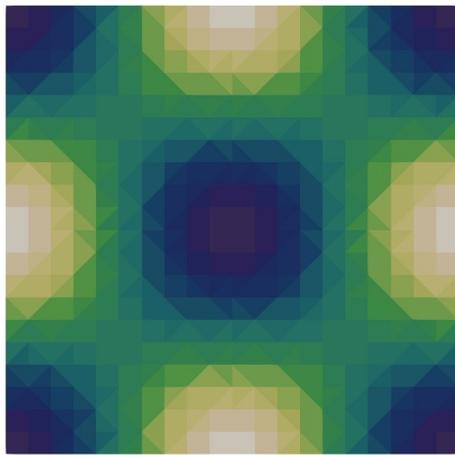
Como ilustração, inicialmente, as [Figura 29](#) e [Figura 30](#) mostram o resultado calculado pelo método MRCM para as discretizações de  $20 \times 20$  e  $320 \times 320$ , utilizando os espaços  $BDM_1$  e  $BDM_2$ , respectivamente. Em ambos os casos, no lado esquerdo mostra-se o resultado correspondente a utilizar o espaço de interface  $P_1(\Gamma)$  e no lado direito, o espaço  $P_2(\Gamma)$ . Note que, para o elemento  $BDM_1$ , o espaço de pressões, corresponde a funções constante por elemento ( $P_0^{disc}$ ), isto se observa nitidamente para o caso de malha mais grossa, porém, não é fácil de perceber na malha mais refinada. Já, para o elemento  $BDM_2$ , o espaço de pressões corresponde a funções lineares por partes  $P_1^{disc}$  (ver [figura 30](#)). Em ambos os casos, a semelhança com a solução exata é notória, apesar de estar usando uma decomposição de domínio bastante grosseira ( $4 \times 4$ ). Nas [figuras 31](#) e [32](#) mostram-se os campos de velocidade em cada caso. Comparando com a [figura 28](#), vemos que um bom resultado foi obtido apenas para o elemento  $BDM_2$  e polinômios quadráticos em  $\Gamma$ . Observa-se que, neste caso as malhas de triângulos tem uma orientação preferencial para direita, e é interessante observar que aparecem, como consequência, os chamados efeitos de "malha" no campo de velocidades, especialmente para discretizações grossas. Isto não é observado em geral em malhas cartesianas ortogonais de quadriláteros.

Posteriormente foi realizada uma comparação quantitativa dos resultados. A [Tabela 1](#) exhibe os erros de pressão da solução numérica do método multiescala, utilizando diversos refinamentos de malha com polinômios de grau 1 e 2, para os espaços  $BDM_1$  e  $BDM_2$ . A análise destes resultados não é simples, pois aparece uma interação entre os erros de discretização no nível da malha fina nos subdomínios e a decomposição de domínio. Por exemplo, para o elemento  $BDM_1$ , o erro de malha fina pode ser controlado até certo ponto ao incrementar o refinamento (ver colunas 2 e 4 da tabela), porém, passar de elementos lineares  $P_1$  a elementos quadráticos  $P_2$  na interface  $\Gamma$ , praticamente não tem efeito no erro. Por outro lado, para o elemento  $BDM_2$ , ocorre um fenômeno diferente. Primeiro, no caso do elemento  $P_1(\Gamma)$  (Coluna 3), refinar a malha fina não tem efeito nenhum. Isto mostra que o que domina o comportamento, é o erro no problema de interface e não os resolutores locais. Para o caso  $P_2(\Gamma)$  (coluna 5), acontece algo similar, mas só a partir de malha de  $80 \times 80$ , mostrando que nas malhas de  $20 \times 20$  e  $40 \times 40$  o erro dos resolutores locais ainda é grande quando comparado ao erro do problema de interface, mas rapidamente este diminui e começa a ser dominado pelo problema de interface. Neste último caso, o nível do erro para  $BDM_1$  comparado ao  $BDM_2$ , é praticamente entre 5 e 10 vezes menor.

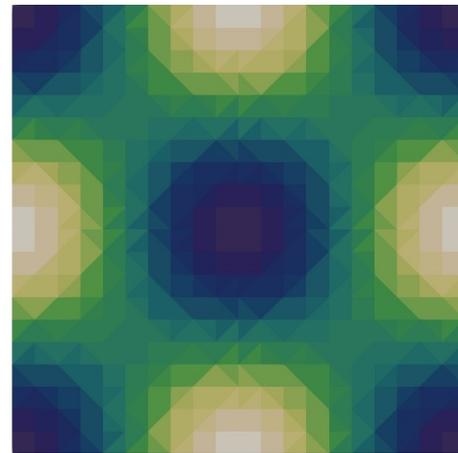
Tabela 1 – Erro de discretização da pressão  $\|p - p_h\|_{L^2(\Omega)}$  do método multiescala para um problema com solução manufaturada. Decomposição de domínio fixa:  $N_x \times N_y = 4 \times 4$ .

$N_{globx} \times N_{globy}$	$P_1(\Gamma)$		$P_2(\Gamma)$	
	$BDM_1$	$BDM_2$	$BDM_1$	$BDM_2$
$20 \times 20$	0.05273	0.00653	0.05239	0.00321
$40 \times 40$	0.02681	0.00577	0.02618	0.00093
$80 \times 80$	0.01429	0.00572	0.01309	0.00052
$160 \times 160$	0.00869	0.00572	0.00656	0.00048
$320 \times 320$	0.00659	0.00572	0.00330	0.00048

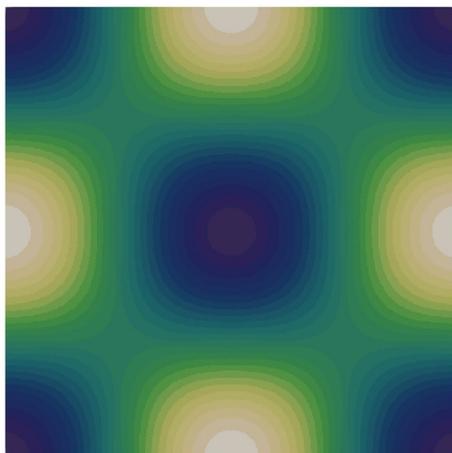
Figura 29 – Campos de pressões do método multiescala com decomposição de domínio  $4 \times 4$  e utilizando o elemento  $BDM_1$ .



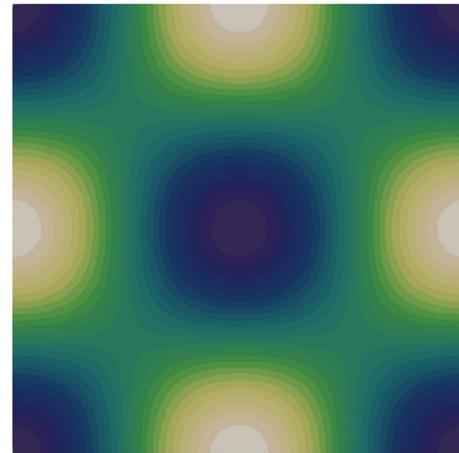
(a)  $P_1(\Gamma)_{20 \times 20}$



(b)  $P_2(\Gamma)_{20 \times 20}$



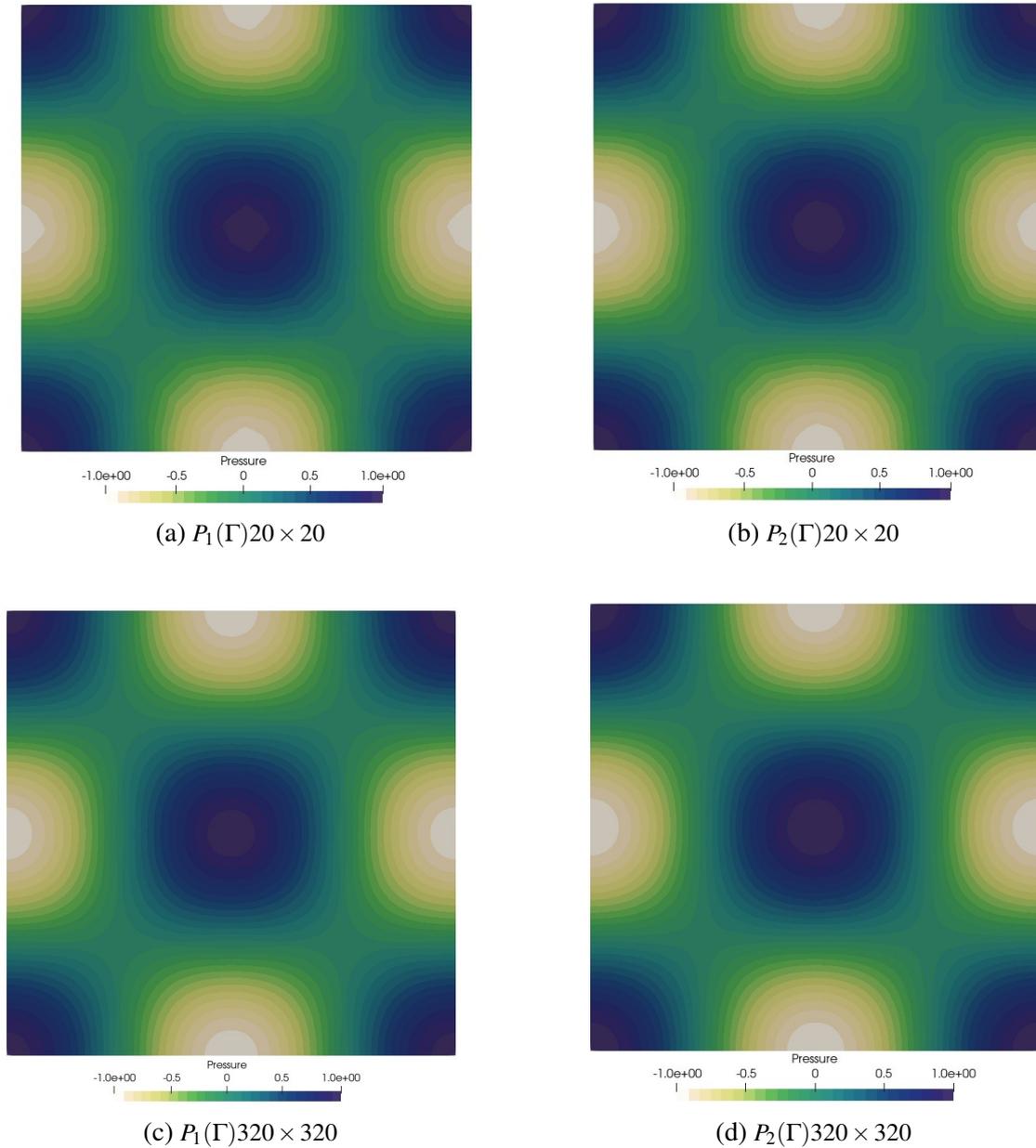
(c)  $P_1(\Gamma)_{320 \times 320}$



(d)  $P_2(\Gamma)_{320 \times 320}$

Fonte: Elaborada pela autora.

Figura 30 – Campos de pressões do método multiescala com decomposição de domínio  $4 \times 4$  e utilizando o elemento  $BDM_2$ .

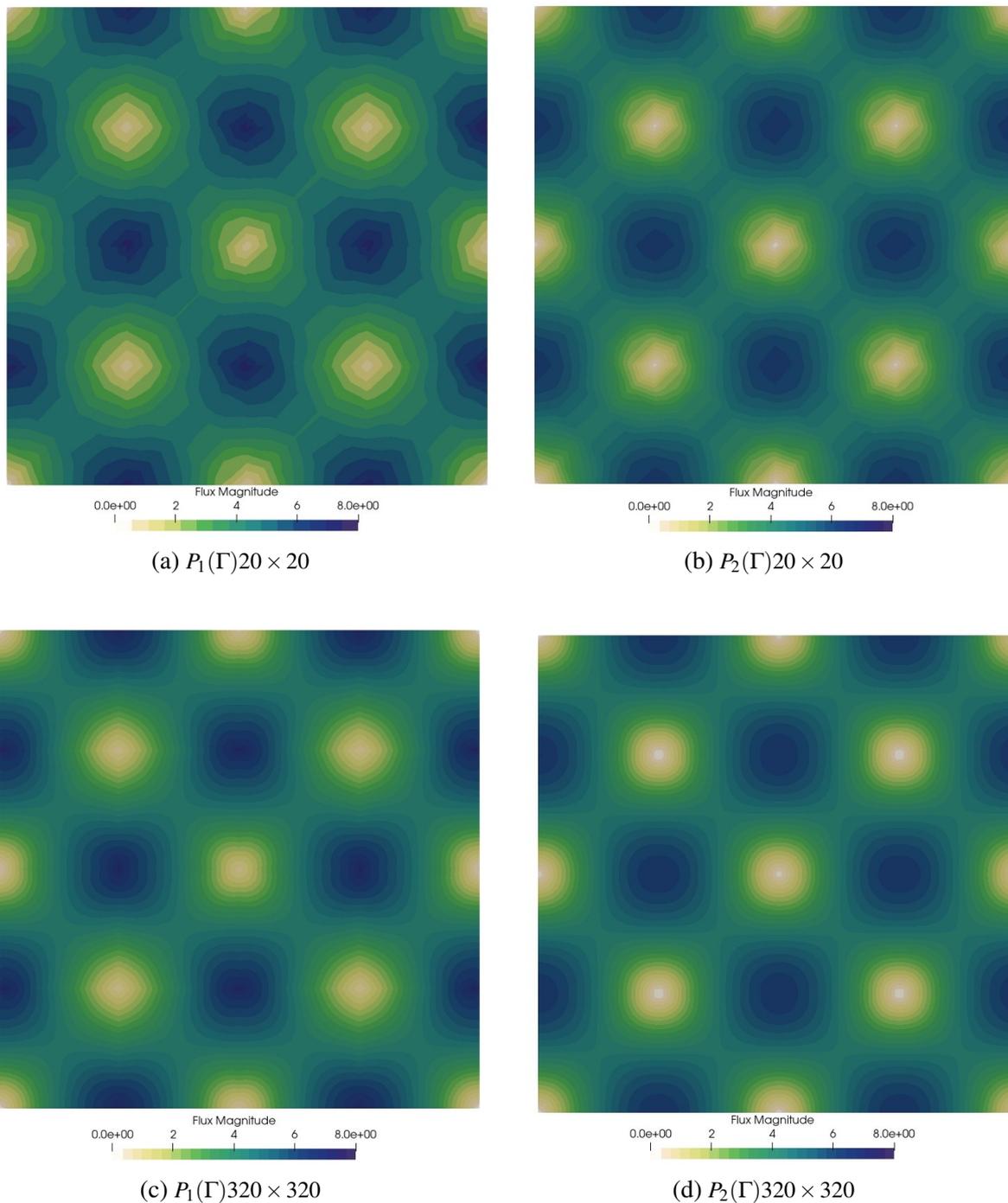


Fonte: Elaborada pela autora.

Tabela 2 – Erros de discretização da velocidade  $\|\mathbf{u} - \mathbf{u}_h\|_{L^2(\Omega)}$  do método multiescala para um problema com solução manufaturada. Decomposição de domínio fixa:  $N_x \times N_y = 4 \times 4$ .

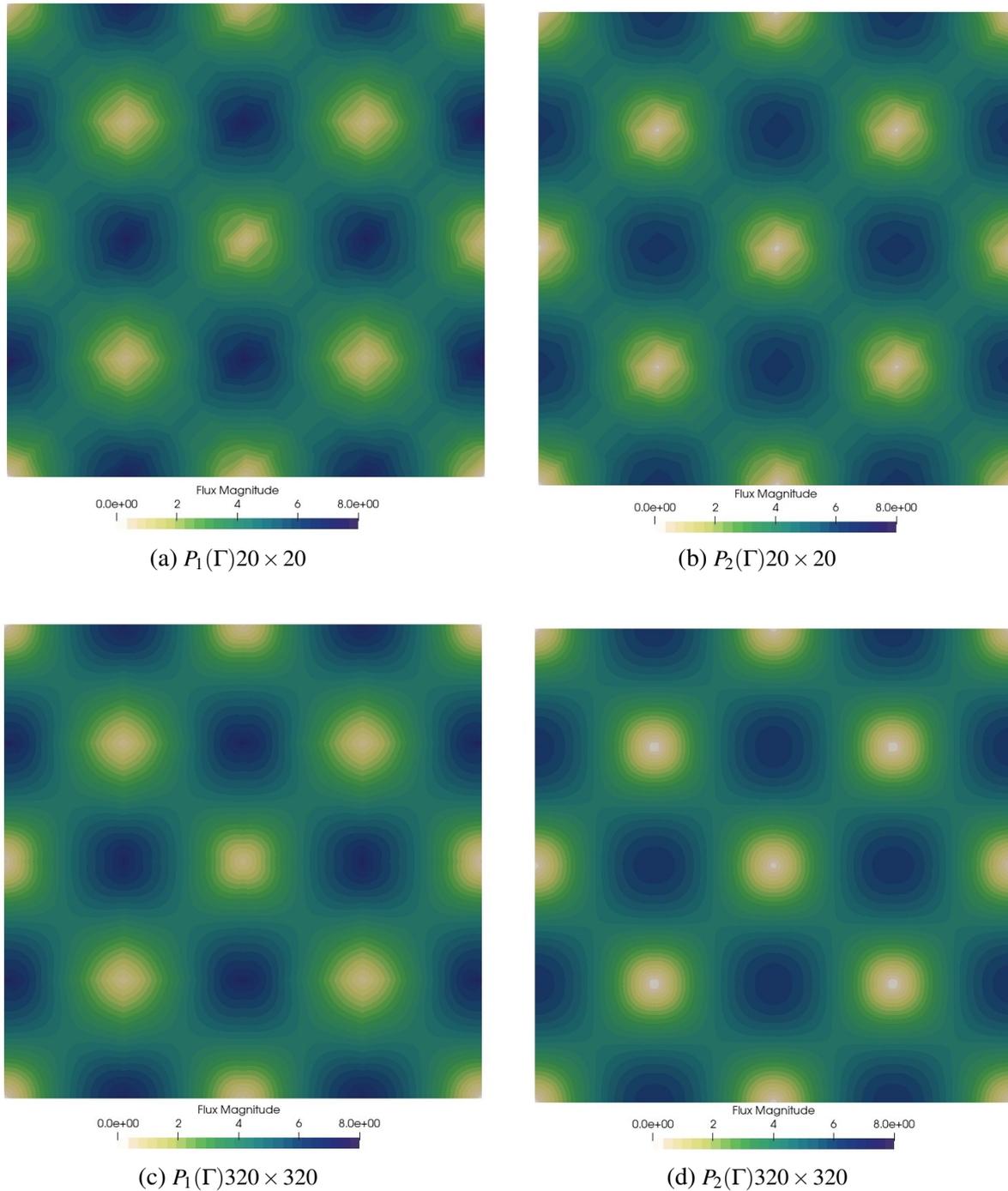
$N_{globx} \times N_{globy}$	$P_1(\Gamma)$		$P_2(\Gamma)$	
	$BDM_1$	$BDM_2$	$BDM_1$	$BDM_2$
$20 \times 20$	0.21332	0.19882	0.06169	0.02472
$40 \times 40$	0.20025	0.19808	0.02851	0.02460
$80 \times 80$	0.19835	0.19793	0.02489	0.02458
$160 \times 160$	0.19799	0.19790	0.02461	0.02458
$320 \times 320$	0.19791	0.19789	0.02458	0.02458

Figura 31 – Solução para os campos de velocidade do método multiescala com decomposição de domínio  $4 \times 4$  utilizando espaço  $BDM_1$ .



Fonte: Elaborada pela autora.

Figura 32 – Solução para os campos de velocidade do método multiescala com decomposição de domínio  $4 \times 4$  utilizando espaço  $BDM_2$ .



Fonte: Elaborada pela autora.

É interessante analisar o que acontece quando a decomposição de domínio é refinada, para isto tomamos  $8 \times 8$  subdomínios e os testes foram refeitos. Passamos diretamente à comparação dos erros numéricos. Os resultados aparecem na [Tabela 3](#) e na [Tabela 4](#) para os erros de pressão e velocidade, respectivamente. Primeiramente, tomando o erro da pressão, vemos um efeito claro de convergência ao refinar a malha fina, o que significa que adotar elementos lineares em  $\Gamma$  é

suficiente, se usado os elemento  $BDM_1$  e que o erro está dominado pelo resolutor local adotado (coluna 2). Passar a elementos quadráticos em  $\Gamma$  não tem efeito na convergência nem no nível do erro, pois ainda domina o erro de discretização na malha fina. Quando usado o elemento  $BDM_2$ , acontece o contrário (coluna 3), mostrando que o erro começa ser dominado pela discretização do problema de interface, o que melhora significativamente quando são adotados os elementos quadráticos em  $\Gamma$ .

Analisando os erros no campo de velocidades, na [Tabela 4](#) vemos que o comportamento é similar ao do caso com decomposição de  $4 \times 4$ , porém com níveis de erro muito menores, praticamente 5 vezes menor para todas as combinações de polinômio no espaço de interface e na malha fina, e portanto, as conclusões obtidas se repetem.

Tabela 3 – Erros de discretização da pressão  $\|p - p_h\|_{L^2(\Omega)}$  do método multiescala para um problema com solução manufaturada. Decomposição de domínio fixa:  $N_x \times N_y = 8 \times 8$ .

$N_{globx} \times N_{globy}$	$P_1(\Gamma)$		$P_2(\Gamma)$	
	$BDM_1$	$BDM_2$	$BDM_1$	$BDM_2$
$40 \times 40$	0.02622	0.00137	0.02618	0.00079
$80 \times 80$	0.01314	0.00114	0.01309	0.00020
$160 \times 160$	0.00664	0.00112	0.00654	$6.8304 \times 10^{-5}$
$320 \times 320$	0.00346	0.00112	0.00327	$4.8410 \times 10^{-5}$

Tabela 4 – Erro de discretização da velocidade  $\|\mathbf{u} - \mathbf{u}_h\|_{L^2(\Omega)}$  do método multiescala para um problema com solução manufaturada. Decomposição de domínio fixa:  $N_x \times N_y = 8 \times 8$ .

$N_{globx} \times N_{globy}$	$P_1(\Gamma)$		$P_2(\Gamma)$	
	$BDM_1$	$BDM_2$	$BDM_1$	$BDM_2$
$40 \times 40$	0.07532	0.07148	0.01472	0.00432
$80 \times 80$	0.07179	0.07134	0.00550	0.00431
$160 \times 160$	0.07140	0.07131	0.00440	0.00431
$320 \times 320$	0.07133	0.07131	0.00431	0.00431

### 4.1.2 Análise de resultados para o Experimento 2

No segundo conjunto de testes realizado para avaliar a convergência do método num problema com solução analítica, lembremos, a ideia é variar o tamanho dos subdomínios deixando o número de incógnitas de malha fina fixo em cada subdomínio. Isto será feito da seguinte forma:

- $N_{locx} \times N_{locy} = 40 \times 40$  e  $160 \times 160$  elementos em cada subdomínio;
- $N_x \times N_y = 4 \times 4, 8 \times 8, 10 \times 10$  e  $20 \times 20$  subdomínios.

Nas tabelas que mostram o erro, assim como no experimento anterior, para cada caso correspondente a uma discretização  $N_x \times N_y$ , o primeiro e segundo grupo de colunas correspondem aos erros de  $P_1(\Gamma)$  e  $P_2(\Gamma)$  e as sub-colunas a  $BDM_1$  e  $BDM_2$ , respectivamente. Nota que neste experimento, ao manter  $H/h$  constante, o número de incógnitas de malha fina que intervêm no acomplamento entre dois subdomínio vizinhos é constante. Começando com as tabelas 5 e 6, correspondendo a discretização  $N_{locx} \times N_{locy} = 40 \times 40$ , vemos um comportamento distinto para a pressão e a velocidade. No primeiro caso, vemos que o erro está dominado pela discretização de malha fina, pois passar de  $BDM_1$  a  $BDM_2$  melhora o erro e a taxa de convergência com respeito a  $H$  até certo ponto. Isto resulta claro também, notando que, trocar  $P_1(\Gamma)$  por  $P_2(\Gamma)$  não traz um ganho significativo. No caso da velocidade, temos uma convergência clara ao aumentar o número de subdomínios para o elemento  $BDM_1$ . Utilizar um elemento de maior ordem ( $BDM_2$ ) não traz ganho em nenhum dos níveis de decomposição, indicando que o uso do elementos  $P_1(\Gamma)$  domina o cálculo do erro. Isto melhora ao usar elementos  $P_2(\Gamma)$ , invertendo o raciocínio. Para finalizar, passando aos resultados correspondentes à discretização de malha fina de  $160 \times 160$ , nas tabelas 7 e 8 observamos primeiramente que os níveis de erro são muito menores, como é de se esperar com uma discretização fina 4 vezes melhor, porém, o comportamento do erro para a pressão acaba sendo similar no que diz a respeito à convergência, quando comparado com o caso anterior.

Tabela 5 – Erro de discretização da pressão  $\|p - p_h\|_{L^2(\Omega)}$  do método multiescala para um problema com solução manufaturada. Malha fina fixa ( $N_{locx} \times N_{locy} = 40 \times 40$ ).

$N_x \times N_y$	$P_1(\Gamma)$		$P_2(\Gamma)$	
	$BDM_1$	$BDM_2$	$BDM_1$	$BDM_2$
$4 \times 4$	0.02681	0.00577	0.02618	0.00093
$8 \times 8$	0.02622	0.00137	0.02618	0.00079
$10 \times 10$	0.02620	0.00106	0.02618	0.00079
$20 \times 20$	0.02618	0.00081	0.02618	0.00079

Tabela 6 – Erro de discretização da velocidade  $\|\mathbf{u} - \mathbf{u}_h\|_{L^2(\Omega)}$  do método multiescala para um problema com solução manufaturada. Malha fina fixa ( $N_{locx} \times N_{locy} = 40 \times 40$ ).

$N_x \times N_y$	$P_1(\Gamma)$		$P_2(\Gamma)$	
	$BDM_1$	$BDM_2$	$BDM_1$	$BDM_2$
$4 \times 4$	0.20025	0.19808	0.02851	0.02460
$8 \times 8$	0.07453	0.07148	0.01472	0.00432
$10 \times 10$	0.05856	0.05529	0.01418	0.00256
$20 \times 20$	0.03093	0.02726	0.01400	0.00065

Tabela 7 – Erro de discretização da pressão  $\|p - p_h\|_{L^2(\Omega)}$  do método multiescala para um problema com solução manufaturada. Malha fina fixa ( $N_{locx} \times N_{locy} = 160 \times 160$ ).

$N_x \times N_y$	$P_1(\Gamma)$		$P_2(\Gamma)$	
	$BDM_1$	$BDM_2$	$BDM_1$	$BDM_2$
$4 \times 4$	0.00869	0.0057	0.00656	0.00048
$8 \times 8$	0.00664	0.00112	0.00654	$6.8904 \times 10^{-5}$
$10 \times 10$	0.00658	0.00071	0.00654	$5.4686 \times 10^{-5}$
$20 \times 20$	0.00654	0.00018	0.00654	$4.9837 \times 10^{-5}$

Tabela 8 – Erro de discretização da velocidade  $\|\mathbf{u} - \mathbf{u}_h\|_{L^2(\Omega)}$  do método multiescala para um problema com solução manufaturada. Malha fina fixa ( $N_{locx} \times N_{locy} = 160 \times 160$ ).

$N_x \times N_y$	$P_1(\Gamma)$		$P_2(\Gamma)$	
	$BDM_1$	$BDM_2$	$BDM_1$	$BDM_2$
$4 \times 4$	0.19799	0.19790	0.02461	0.02458
$8 \times 8$	0.07140	0.07132	0.00440	0.00431
$10 \times 10$	0.05521	0.05513	0.00269	0.00254
$20 \times 20$	0.02705	0.02698	0.00103	0.00055

### 4.1.3 Comentários finais sobre o estudo da convergência no problema com solução manufaturada

Além das conclusões específicas já mencionadas em cada um dos experimentos analisados até agora, podemos finalizar esta parte do trabalho fazendo alguns comentários gerais sobre o comportamento do erro de discretização com a implementação do MRCM proposta:

- O erro resulta de um balanço entre a precisão adotada para as variáveis de acoplamento no esqueleto da decomposição, isto é, a ordem polinomial dos espaços de interface, e a decomposição de domínio propriamente (tamanho  $H$  dos elementos da malha grossa) e da precisão adotada na malha fina, ou seja, a ordem dos polinômios para velocidade e pressão e o refinamento  $h$ ;
- Os experimentos mostram que é possível obter resultados convergentes para o erro, tanto da velocidade quanto da pressão, quando refinadas as malhas dos subdomínios e a decomposição. Porém, isto acontecerá se o erro numérico não estiver dominado por alguma das escolhas da discretização, que torne o método insensível ao refinamento.
- Os níveis de erro obtidos e os comportamentos tem sido similares com os encontrados em (GUIRALDELLO *et al.*, 2018), que empregou a mesma solução manufaturada e experimentos similares para avaliar a convergência do MRCM.

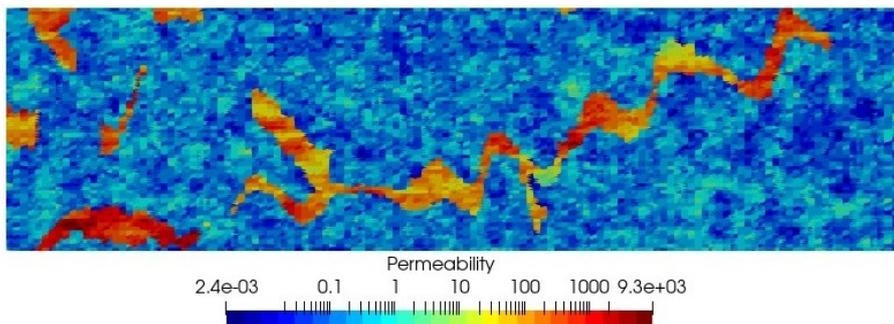
- O erro na pressão  $e_p$  pode exibir comportamentos distintos do erro na velocidade  $e_u$  dependendo da escolha específica para o parâmetros da discretização,. Isto está de acordo com os resultados apresentados em (GUIRALDELLO *et al.*, 2018);
- Os estudos inéditos aqui apresentados, servem como uma verificação e validação da implementação realizada do método multiescala MRCM na plataforma de elementos finitos FEniCS, a qual opera em malhas de triângulos e com espaços Hdiv gerais.

## 4.2 Estudos de precisão no caso de permeabilidade heterogênea

Para esta seção, como citado anteriormente, será exibido o estudo do comportamento do método MRCM em um problema com campo de permeabilidade heterogênea, considerando as camadas do *benchmark* SPE10, disponibilizado pela Sociedade de Engenheiros de Petróleo (Society of Petroleum Engineers-SPE) (SPE, 2022b) que vem sendo muito utilizado nos últimos anos em simulações de reservatórios de petróleo.

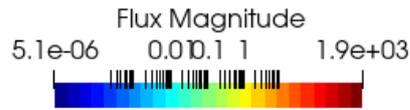
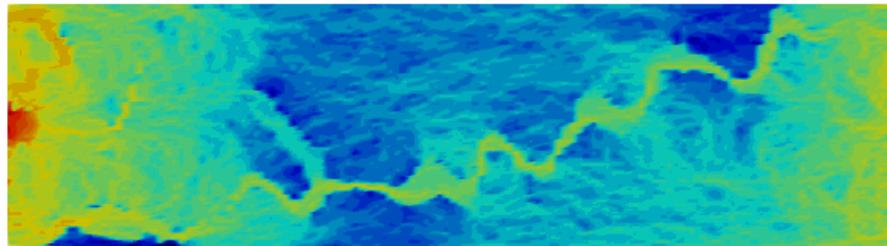
Para este estudo, utilizou-se o domínio  $\Omega = [0, \frac{11}{3}] \times [0, 1]$  com discretização de malha fina  $N_{glox} \times N_{globy} = 220 \times 60$  células, de forma que coincidam com a discretização das camadas 1 e 36 do campo original. Em particular, a camada 36 apresenta um grande canal de alta permeabilidade, como vemos na Figura 33. As condições de contorno consideradas foram: gradiente de pressão imposto da esquerda para a direita e fluxo nulo nas demais paredes. Para ilustrar, a Figura 34, exibe o campo de velocidades obtido através da solução do problema de Darcy na malha fina (sem multiescala), permitindo notar que o campo possui altas velocidades no canal de alta permeabilidade, como era de se esperar. Também foi obtido o campo de pressão representado pela Figura 35, o qual servirá também para realizar as análises e estudos comparativos com os campos de pressões obtidos através do método multiescala MRCM.

Figura 33 – Permeabilidade da camada 36 do SPE10 na escala log.



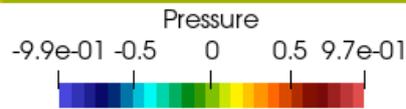
Fonte: Elaborada pela autora.

Figura 34 – Campo de velocidades para o problema na camada 36 do SPE10 na escala log.



Fonte: Elaborada pela autora.

Figura 35 – Campo de pressões da solução de malha fina.



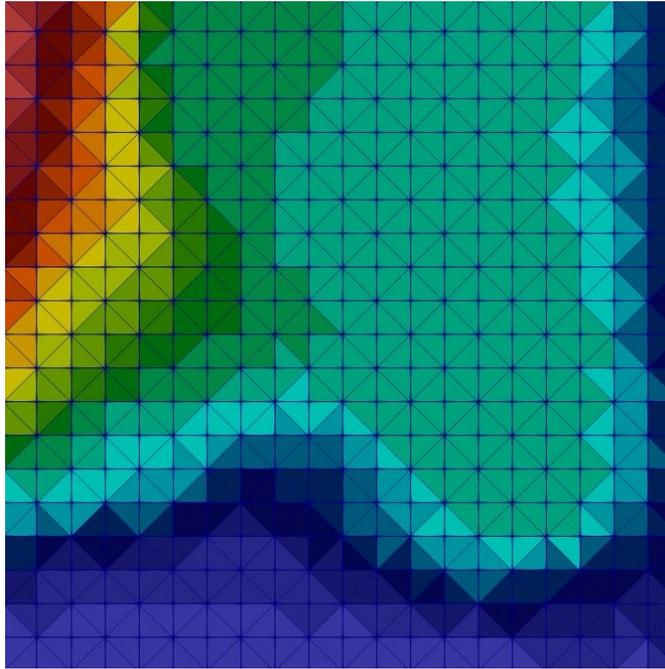
Fonte: Elaborada pela autora.

Para resolução do método e obtenção dos resultados, foi utilizado o espaço de *Brezzi-Douglas-Marini* de ordem 1, e a malha com elementos triangulares, como ilustrado na [Figura 36](#). Além disso, foi estudada a precisão do método como função do parâmetro  $\alpha$  de Robin método MRCM, com três diferentes elementos polinomiais ( $P_0(\Gamma)$ ,  $P_1(\Gamma)$  e  $P_2(\Gamma)$ ), no esqueleto da decomposição. Foi realizado um número abrangente de testes com o objetivo de ilustrar a precisão e a robustez da formulação do método MRCM.

Os resultados representados na [Figura 38](#) nos mostra os diferentes comportamentos dos campos de pressões, quando utilizado três valores distintos para  $\alpha$ , sendo eles, um valor dito pequeno  $\alpha = 0.01$ , um valor intermediário  $\alpha = 1.0$  e um valor considerado como grande  $\alpha = 100$ , nas quais analisamos visualmente a influência desta incógnita quando aplicado o método multiescala juntamente com o polinômio  $P_1(\Gamma)$ . Analisando a [Figura 38](#) quando comparado com a [Figura 35](#) pode-se observar que ao utilizar  $\alpha = 1.0$ , a solução aproximou-se da solução de malha fina.

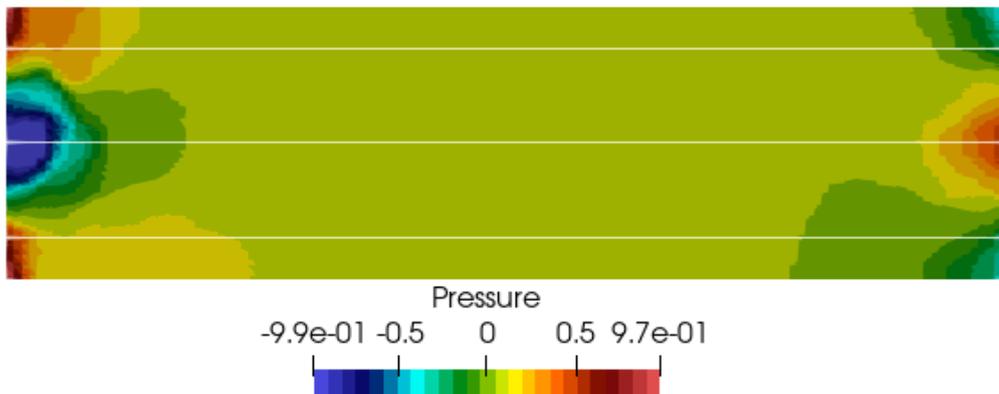
Com o intuito de obter os resultados comparativos para o campo de pressões, o domínio foi subdividido em três partes, as quais cada faixa horizontal representa 1/3 do domínio total,

Figura 36 – Corte do subdomínio 22, representação da malha de elementos finitos triangular.



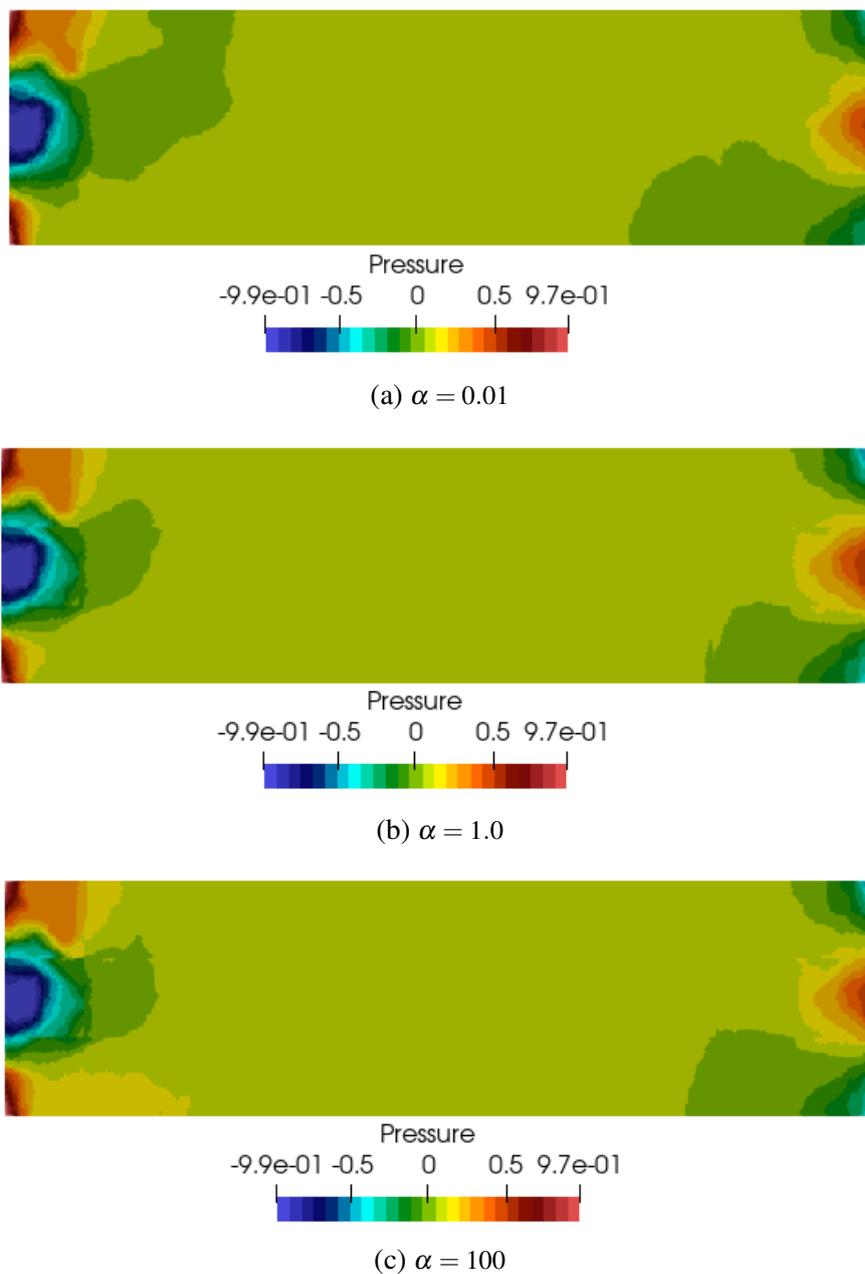
Fonte: Elaborada pela autora.

e estes subdomínios foram novamente divididos a fim de obter os resultados ao longo das três faixas. O corte horizontal inferior foi dado na altura 0.15, o corte central foi executado em 0.5, e por fim o corte superior foi realizado em 0.85, como podemos ver na [Figura 37](#). No eixo  $x$  subdividimos o domínio em 11 partes iguais, a fim de estudar o comportamento do método multiescala em cada um destes subdomínios.

Figura 37 – Campo de pressões da solução de malha fina com os três cortes horizontais,  $y=0.15$ ,  $y=0.5$ ,  $y=0.85$ 

Fonte: Elaborada pela autora.

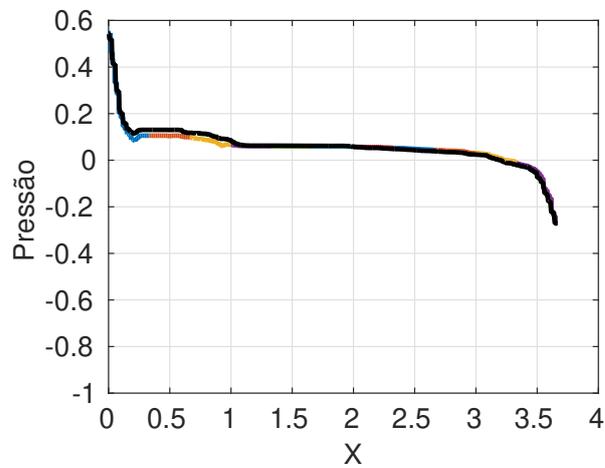
Figura 38 – Campo de pressões da solução do método multiescala quando utilizado polinômios do tipo  $P_1(\Gamma)$  com  $\alpha = 0.01$ ,  $\alpha = 1.0$  e  $\alpha = 100$ , com discretização  $220 \times 60$ , para  $BDM_1$ .



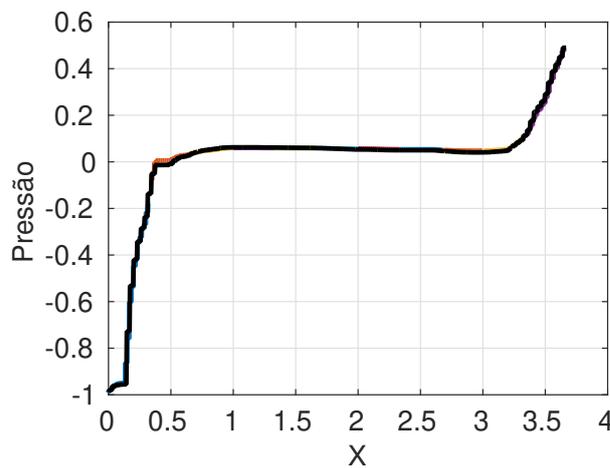
Fonte: Elaborada pela autora.

Na Figura 39 é exibido os 3 cortes horizontais feitos no domínio (inferior, central e superior) do campo de pressão, no qual expõe os resultados extraídos das soluções para  $\alpha = 1.0$  utilizando polinômios de interface  $P_1(\Gamma)$ , no espaço  $BDM_1$  onde foi feita a comparação da solução da malha fina, representada pela curva preta, com a solução do método multiescala, exibido através da curva colorida. Com os resultados obtidos na Figura 39, nota-se que as três soluções obtidas com a utilização do método multiescala quando aplicado os parâmetros escolhidos, apresentam-se satisfatórias uma vez comparadas com a solução de malha fina.

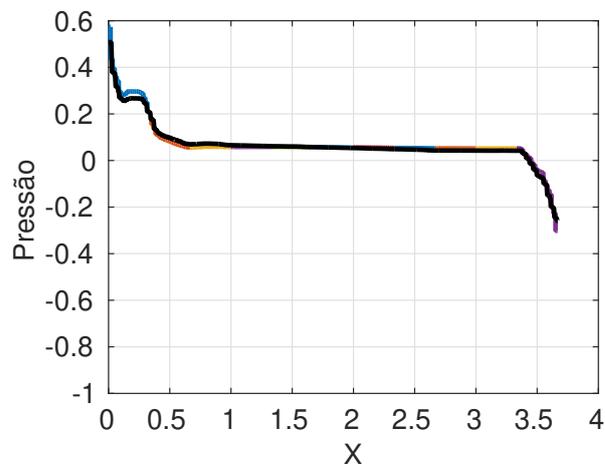
Figura 39 – Solução do campo de pressão ao longo das linhas horizontais da comparação da solução da malha fina com o método multiescala para  $\alpha = 1.0$ , com polinômio  $P_1(\Gamma)$  e espaço  $BDM_1$ .



(a) Corte horizontal inferior em 0.15



(b) Corte horizontal central em 0.5



(c) Corte horizontal superior em 0.85

Fonte: Elaborada pela autora.

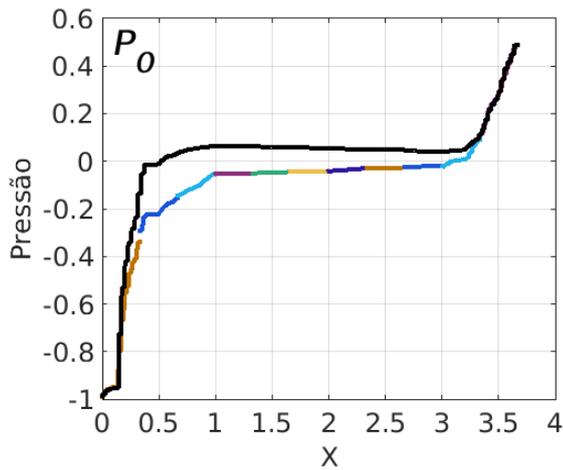
Para obtenção dos resultados exibidos a partir deste momento, foram utilizados os valores extraídos da solução do corte da linha central do campo de pressões analisado, com o campo de permeabilidades relativo à camada 36 do SPE10.

Na [Figura 40](#) foi abordado o caso com espaço  $BDM_1$ , utilizando três valores distintos de  $\alpha$ ,  $\alpha = 0.01$ ,  $\alpha = 1.0$  e  $\alpha = 100$ , com polinômios  $P_0(\Gamma)$  e  $P_1(\Gamma)$ , como podemos ver. Os resultados mostram uma melhora na solução quando aplicado o método multiescala conforme aumenta-se o valor de  $\alpha$  quando observado os polinômios  $P_0(\Gamma)$ . Já quando analisado os diferentes  $\alpha$  para polinômios  $P_1(\Gamma)$  o método multiescala tem um bom comportamento, sendo semelhante nos três casos, e bem avaliado quando comparado a solução de malha fina.

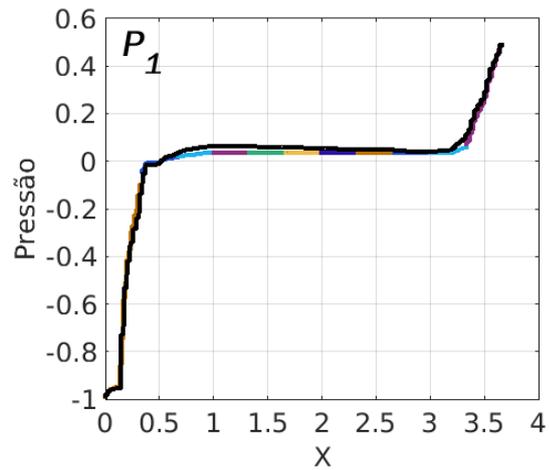
Observou-se que o comportamento utilizando  $\alpha = 0.01$  tanto para  $P_1(\Gamma)$  ([Figura 40](#)) quanto para  $P_2(\Gamma)$  ([Figura 41](#)) comparando a solução de malha fina com a solução do método multiescala se aproximam significativamente ao longo da simulação mais do que para  $P_0(\Gamma)$  ([Figura 40](#)). Já para os casos ainda no espaço  $BDM_1$  com  $\alpha = 1.0$ , notou-se uma boa aproximação das soluções em todos graus de polinômios de interface utilizados.

Por fim, os experimentos utilizando polinômios quadráticos para todos os valores  $\alpha$  utilizado nesta seção e espaço de  $BDM_1$ , como vemos na [Figura 41](#) apresenta um bom comportamento do método, quando analisado com a solução de malha fina.

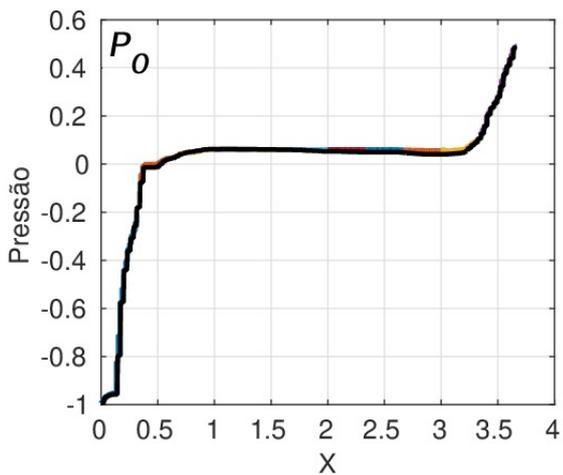
Figura 40 – Comparação da solução da malha fina com o método multiescala para  $\alpha = 0.01$ ,  $\alpha = 1.0$  e  $\alpha = 100$  com  $P_0(\Gamma)$  e  $P_1(\Gamma)$ .



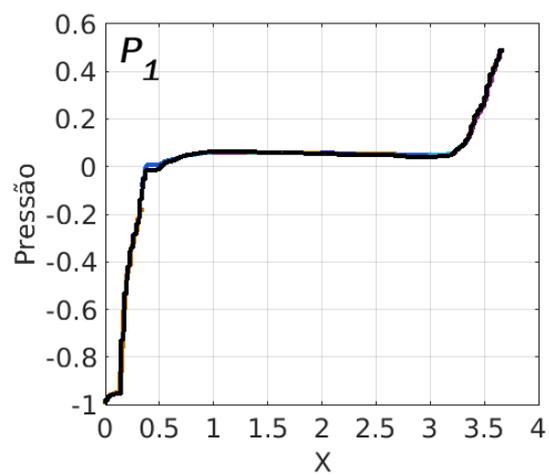
(a)  $\alpha = 0.01/BDM_1$



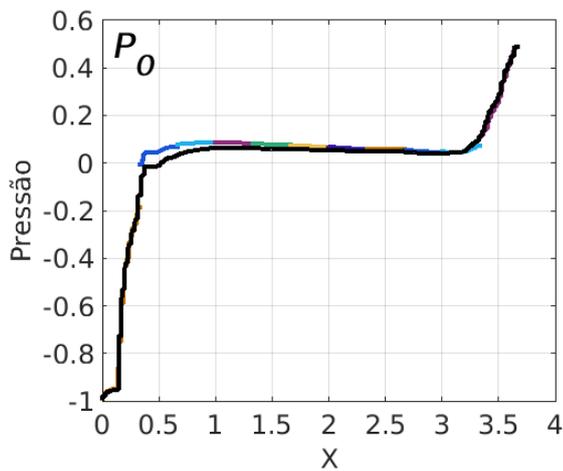
(b)  $\alpha = 0.01/BDM_1$



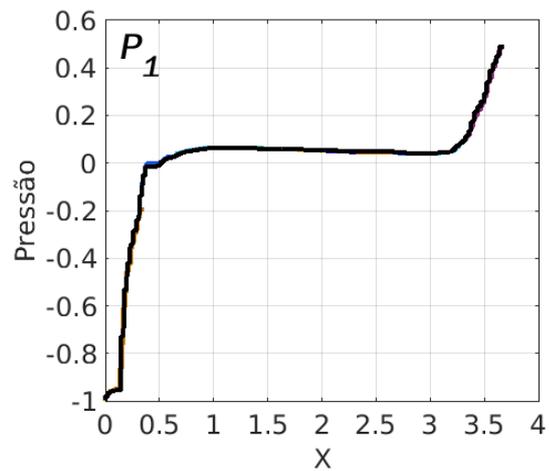
(c)  $\alpha = 1.0/BDM_1$



(d)  $\alpha = 1.0/BDM_1$



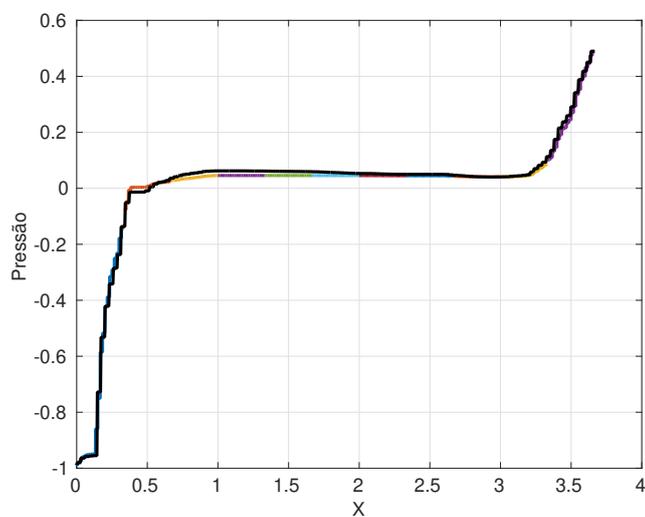
(e)  $\alpha = 100/BDM_1$



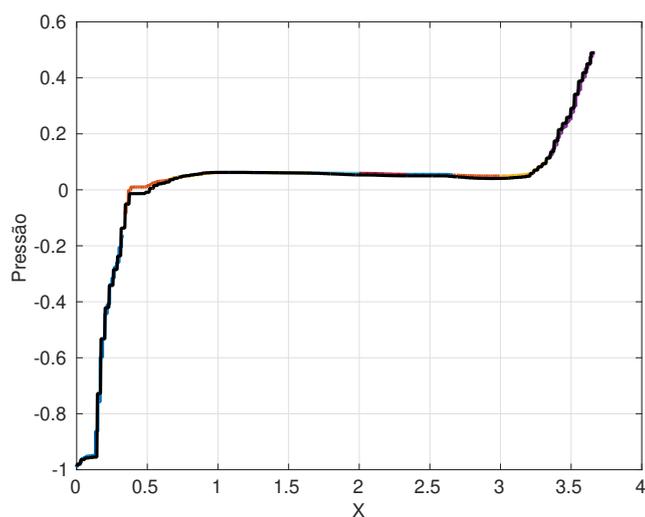
(f)  $\alpha = 100/BDM_1$

Fonte: Elaborada pela autora.

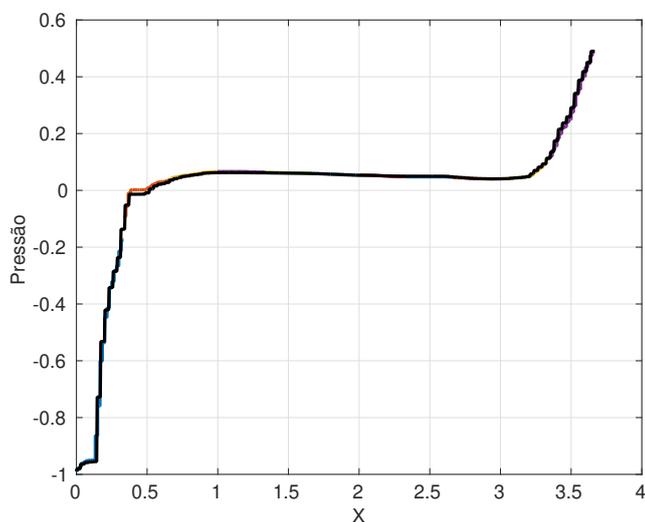
Figura 41 – Comparação da solução da malha fina com o método multiescala para  $\alpha = 0.01$ ,  $\alpha = 1.0$  e  $\alpha = 100$  para  $P_2(\Gamma)$  com  $BDM_1$ .



$\alpha = 0.01$



$\alpha = 1.0$

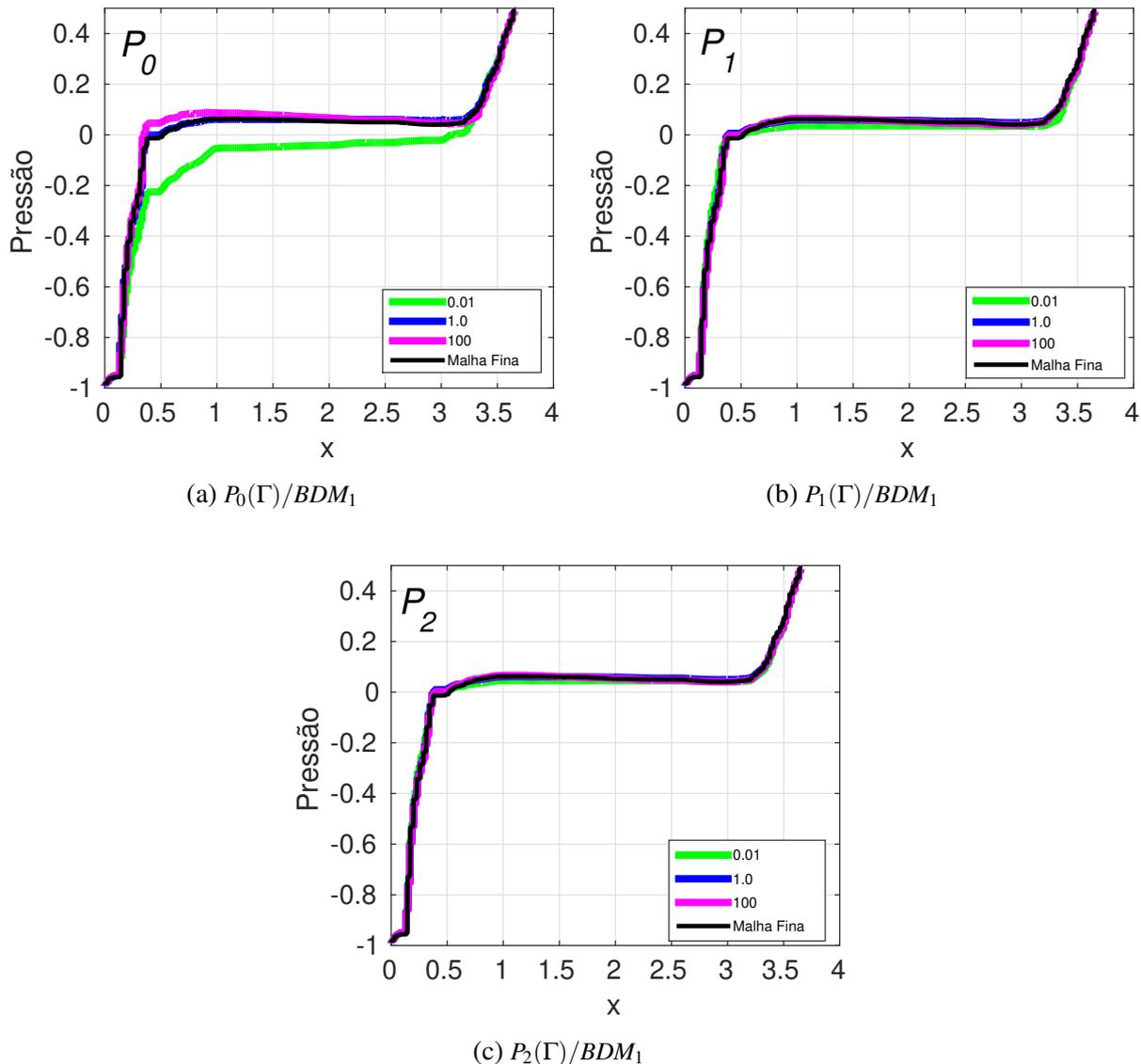


$\alpha = 100$

Fonte: Elaborada pela autora.

A Figura 42 mostra graficamente os três resultados do campo de pressão, quando utilizado cada valor de  $\alpha$ , em cada um dos graus de polinômios. Pode-se observar que na Figura 42b e Figura 42c, os resultados para o método mostram-se mais precisos com o da solução de malha fina, uma vez que, obteve-se uma boa escolha na imposição da condição de contorno de Robin, como visto por (GUIRALDELLO *et al.*, 2019)

Figura 42 – Comparação da solução de malha fina com a solução multiescala, considerando valores distintos para  $\alpha$  e utilizando os espaços  $P_0(\Gamma)$ ,  $P_1(\Gamma)$  e  $P_2(\Gamma)$ .



Fonte: Elaborada pela autora.

Além da exposição qualitativa dos resultados de forma gráfica, também foram calculados os erros na pressão com os três diferentes valores de  $\alpha$  estudado até o presente momento, considerando distintos graus do polinômio para as variáveis de interface, *i.e.*,  $P_0(\Gamma)$ ,  $P_1(\Gamma)$  e  $P_2(\Gamma)$ . Os resultados são exibidos na tabela Tabela 9. Neste ponto é importante fazer o seguinte

comentário, já que neste caso, o erro da solução multiescala  $(\mathbf{u}_H, p_H)$  só pode ser calculado com respeito à solução na malha fina  $(\mathbf{u}_h, p_h)$ , por simplicidade, ao invés de considerar o erro  $L^2(\Omega)$ , como havíamos feito nos resultados da seção anterior, será calculado o erro ao longo de linhas de  $y$  constante, o qual denotaremos  $L^2(R)$ . Isto é principalmente devido a algumas limitações da plataforma de elementos finitos e ao fato de que as malhas são não estruturadas, requerendo operações de interpolação entre malhas, as quais também introduziriam perturbações no cálculo do erro. Concretamente, será calculado o erro da seguinte forma:

$$e_{L^2(R)} = \|p_h - p_H\|_{L^2(R)} = \sqrt{\int_R (p_h - p_H)^2 dx} \quad (4.5)$$

em que  $R$  representa o intervalo em que as soluções estão sendo comparadas. Nos resultados apresentados na sequência tomamos  $y = L_y/2$  e  $R = [0, L_x]$ , sendo  $[L_x, L_y]$  o domínio computacional em que está sendo resolvido o problema. Apesar de entendermos que esta medida de erro não caracteriza completamente de forma quantitativa a precisão do método e a sua implementação, serve como indicação da qualidade dos resultados.

Tabela 9 – Resultados do erro da pressão em norma  $L_2(R)$  comparando a solução da malha fina e a solução multiescala, com polinômios distintos e diferentes valores de  $\alpha$  na condição de Robin e espaço  $BDM_1$ .

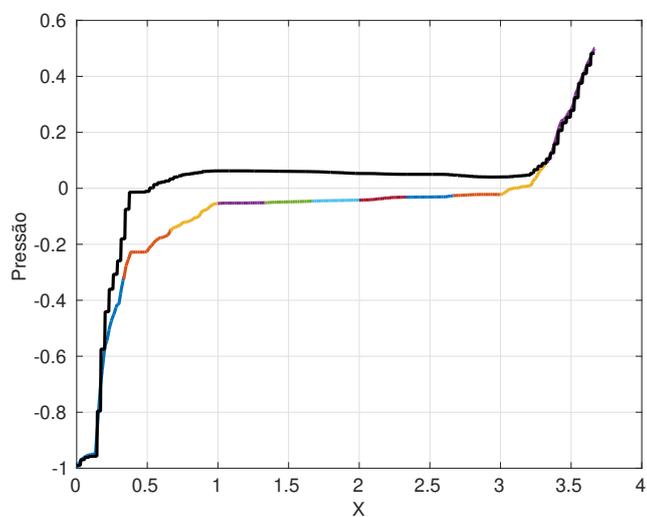
	$P_0(\Gamma)$	$P_1(\Gamma)$	$P_2(\Gamma)$
$\alpha$	$\ p_h - p_H\ _{L^2(R)}$	$\ p_h - p_H\ _{L^2(R)}$	$\ p_h - p_H\ _{L^2(R)}$
0.01	0.20973	0.047387	0.033199
1	0.035009	0.027250	0.02751
100	0.050204	0.02732	0.02614

Analisando os resultados mostrados na Tabela 9, embora já tenhamos concluído com os gráficos, podemos dizer que o método quando utilizado um  $\alpha$  pequeno, ou seja, 0.01 no espaço de interface  $P_0(\Gamma)$  dizemos que é um erro grosseiro quando comparado o mesmo método tanto com  $\alpha = 1.0$  quanto  $\alpha = 100$ , ainda para  $P_0(\Gamma)$  os erros possuem uma ordem de convergência  $O(H^2)$ . Além disso, quando utilizado  $\alpha = 1$  e  $\alpha = 100$  tanto para  $P_1(\Gamma)$  quanto  $P_2(\Gamma)$  também obteve-se erros de ordem  $O(H^2)$  com valores não tão distintos, então neste caso podemos concluir por questão de gasto computacional, que de fato ao aplicarmos o método *MRCM*, a melhor escolha seria utilizar polinômios  $P_1(\Gamma)$ .

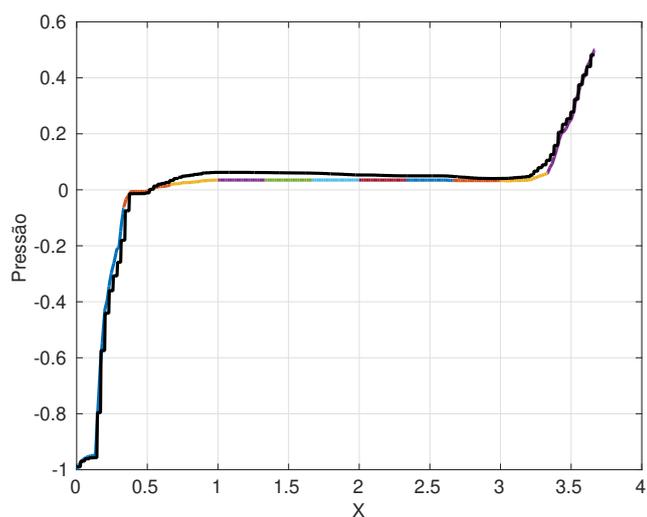
Embora nesta seção todos os resultados tenham sido obtidos utilizando espaço  $BDM_1$ , na Figura 43 foi trabalhado o espaço  $BDM$  de ordem 2, com  $\alpha = 0.01$  para os três diferentes polinômios estudados. De forma visual não encontra-se tanta disparidade quando comparada a solução do método multiescala com a solução de malha fina (linha preta), apenas para  $P_0(\Gamma)$  que nota-se um afastamento maior entre as soluções. Também foi calculado numericamente o erro para cada um dos casos, para  $P_0(\Gamma)$  resultou em 0.20680, se comparado ao mesmo erro na Tabela 9, obtém-se um valor menor, mas quando comparado o polinômio linear e quadrático, onde tem-se 0.05225 e 0.03647 respectivamente, e são erros maiores que os dados pelo espaço

$BDM_1$ . Logo, a fim de reduzir gastos computacionais e obter a mesma qualidade quando utilizado o método MRCM, verifica-se que o espaço  $BDM_1$  satisfaz todas as condições necessárias de forma eficiente, mais barata e mais rápida.

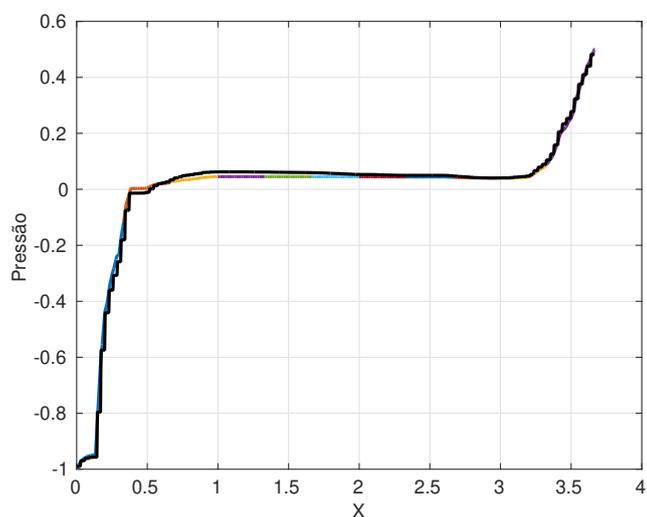
Figura 43 – Comparação ao longo da linha central, da solução da malha fina (curva preta) com a solução multiescala (curva colorida) para  $\alpha = 0.01$ , utilizando espaço  $BDM_2$ .



$$P_0(\Gamma)/\text{erro} = 0.20680$$



$$P_1(\Gamma)/\text{erro} = 0.05225$$



$$P_2(\Gamma)/\text{erro} = 0.03647$$

Fonte: Elaborada pela autora.

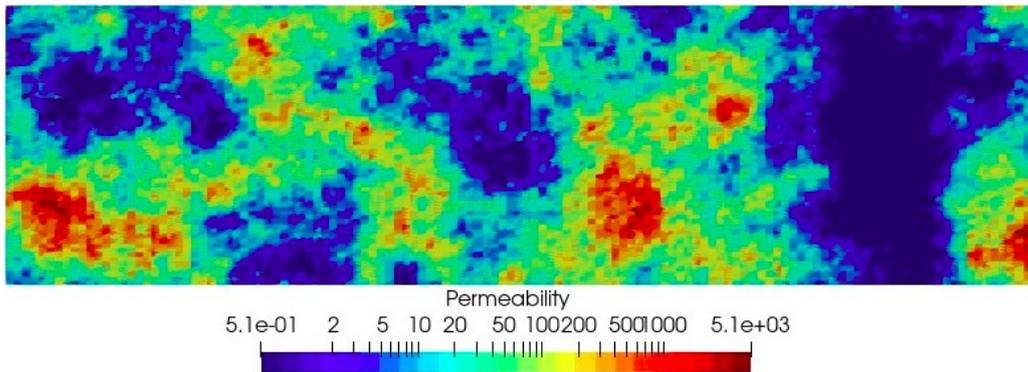
Com intuito de compreender e analisar o comportamento da imposição na condição de contorno de Robin, na Tabela 10 foi exposto o erro da pressão em norma  $L^2(R)$  para outros diversos valores de  $\alpha$ , desde muito pequenos até valores grandes, no espaço  $BDM_1$ , com  $P_0(\Gamma)$ . Nota-se que de  $\alpha = 0.1$  à  $\alpha = 0.5$  o erro decaía, e de  $\alpha = 1.0$  até  $\alpha = 50$  o erro aumenta.

Tabela 10 – Erro na pressão entre a solução da malha fina e a solução multiescal, na norma  $L^2(R)$ , para diferentes valores de  $\alpha$ , usando o espaço  $P_0(\Gamma)$ .

$\alpha$	0.1	0.2	0.3	0.4	0.5	1.0	10	50
$\ p_h - PH\ _{L^2(R)}$	0.10652	0.06910	0.05073	0.04095	0.03594	0.035009	0.05601	0.05771

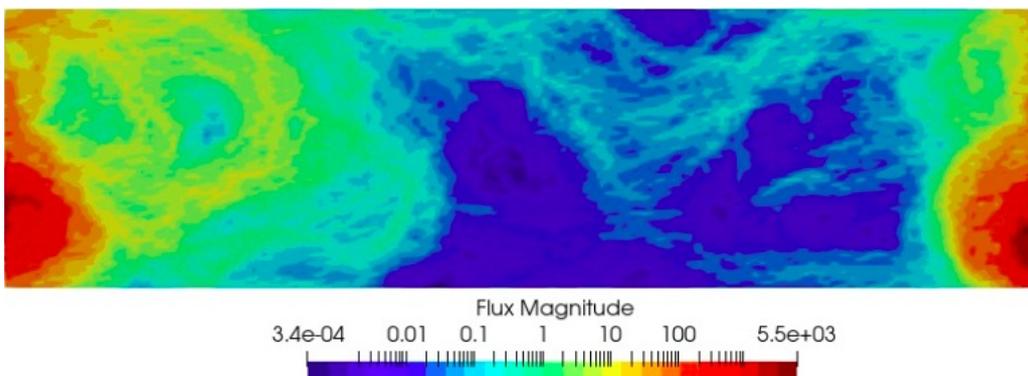
Foi também realizado um estudo do método multiescala, considerando novamente o domínio  $[0, \frac{11}{3}] \times [0, 1]$ , com a malha fina  $220 \times 60$ , mas com o campo de permeabilidade referente a camada 1 (inferior) do SPE10, como podemos ver na Figura 44, o qual também pode-se observar que também possui um alto contraste. O campo de velocidades representado pela Figura 45 foi produzido na malha fina, assim como o campo de pressões, dado na Figura 46.

Figura 44 – Permeabilidade da camada 1 do SPE1 na escala log.



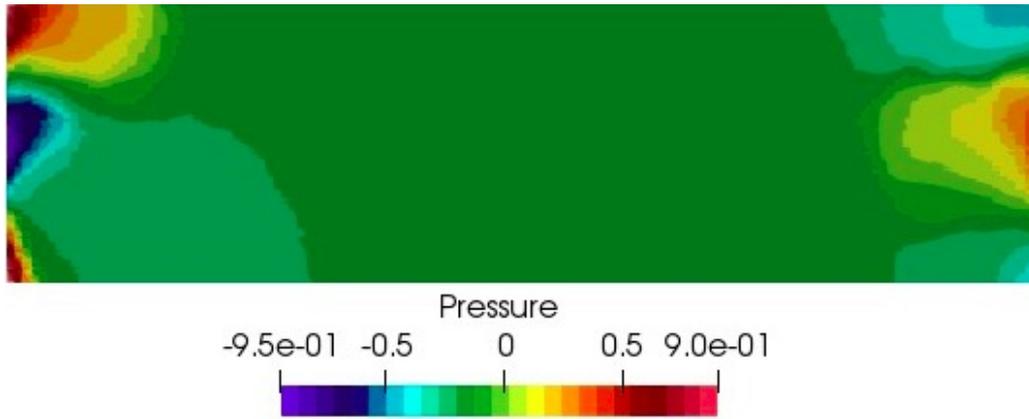
Fonte: Elaborada pela autora.

Figura 45 – Campo de velocidades para o problema na camada 1 do SPE10 em escala log.



Fonte: Elaborada pela autora.

Figura 46 – Campo de pressões da solução de malha fina aplicado ao método.



Fonte: Elaborada pela autora.

Para a realização dos experimentos na camada inferior, também foram realizados três cortes horizontais no domínio, mas neste caso foi exibido também apenas os cortes na camada central do domínio. Neste estudo utilizou-se dois valores distintos de  $\alpha$ , sendo  $\alpha = 0.01$  e  $\alpha = 1.0$ , com três espaços polinomiais,  $P_0(\Gamma)$ ,  $P_1(\Gamma)$  e  $P_2(\Gamma)$ , tanto para o espaço *Brezzi-Douglas-Marini*<sub>1</sub> quanto *Brezzi-Douglas-Marini*<sub>2</sub>.

Foi feita análise da diferença entre o erro numérico da pressão da solução de malha fina e a pressão da solução do método multiescala, ou seja,  $\|p - p_h\|_{L^2(R)}$  assim como realizado na camada 36 anteriormente. Para esta análise foi utilizado a região da camada central do domínio, no qual o cálculo se deu pela equação (x). Os resultados obtidos são expostos na [Tabela 11](#).

Tabela 11 – Cálculo do erro na pressão, entre a solução de malha fina e a do método multiescala ( $\|p_h - p_H\|_{L^2(R)}$ ), para diferentes valores de  $\alpha$  e graus polinômiais, na camada 36 do SPE10.

$\alpha$	<i>BDM</i> <sub>1</sub>			<i>BDM</i> <sub>2</sub>		
	$P_0(\Gamma)$	$P_1(\Gamma)$	$P_2(\Gamma)$	$P_0(\Gamma)$	$P_1(\Gamma)$	$P_2(\Gamma)$
0.01	0.03485	0.04560	0.03485	0.17605	0.04782	0.02317
1.0	0.03630	0.04588	0.04387	0.11092	0.04329	0.04122

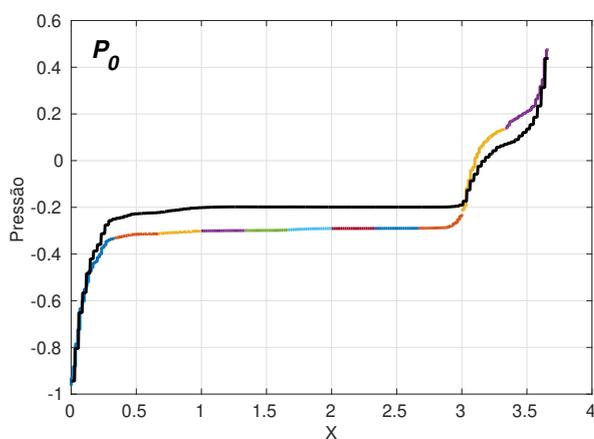
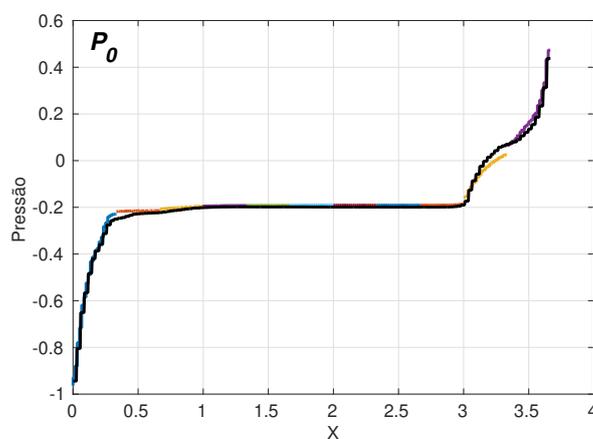
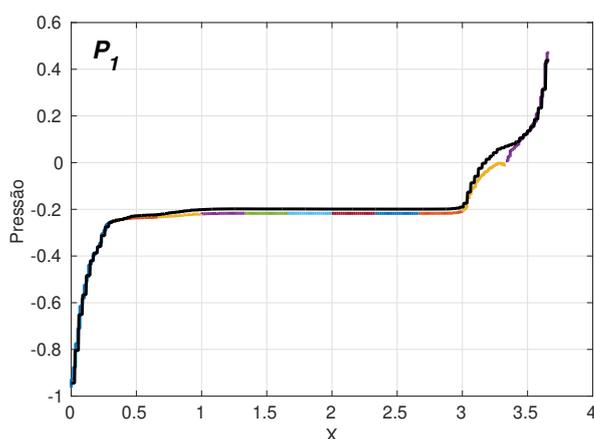
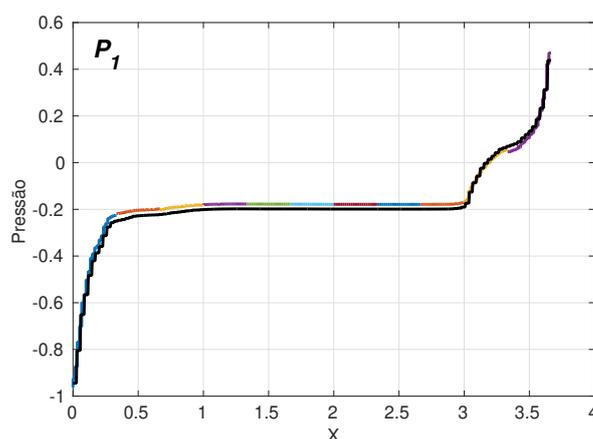
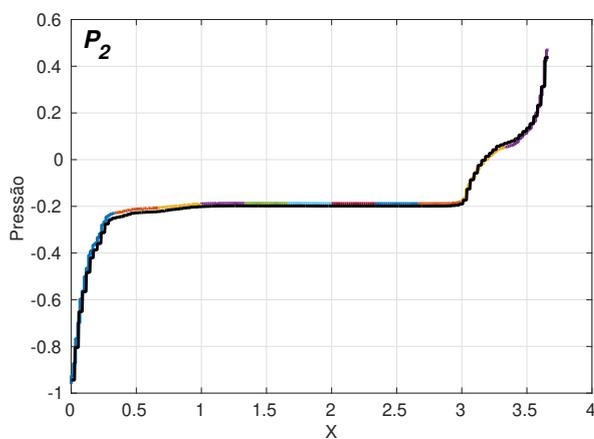
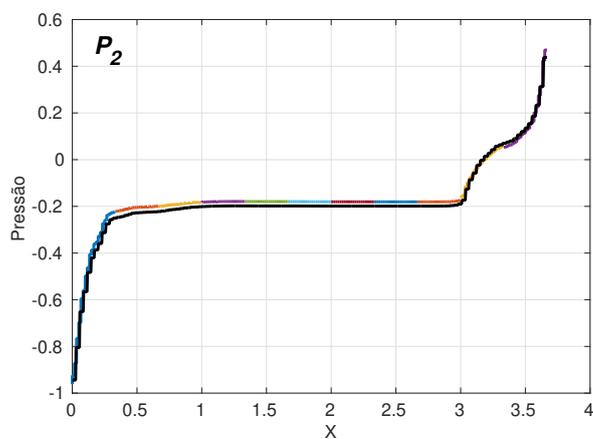
A partir dos resultados da [Tabela 11](#), nota-se que os erros obtidos no espaço *BDM*<sub>1</sub> para os três graus de polinômio são da mesma ordem, ou seja, ( $O(H^2)$ ), ao contrário do que acontece em *BDM*<sub>2</sub> para  $P_0(\Gamma)$  onde os erros são de ordem  $O(H)$ . Quando observado  $P_1(\Gamma)$  e  $P_2(\Gamma)$  existem variações nos comportamentos conforme altera-se o espaço aplicado, mas de uma forma geral, concluí-se que o método MRCM quando aplicado ao espaço de ordem 1 possui resultados já eficientes, não necessitando assim de um gasto computacional maior para aumentar a ordem do espaço.

Na [Figura 47](#) foi realizado o estudo gráfico da solução no campo de pressão quando utilizado espaço *BDM* de ordem 1, com todas variáveis aqui proposta. Quando comparada com

as soluções obtidas na camada 36, nota-se que  $\alpha$  pequeno com  $P_0(\Gamma)$  possui uma discrepância maior na solução do método multiescala comparada com a solução de malha fina, o mesmo acontece com o mesmo  $\alpha$  mas utilizando polinômio linear. No restante pode-se observar que a solução do método multiescala possui comportamento semelhante a solução de malha fina.

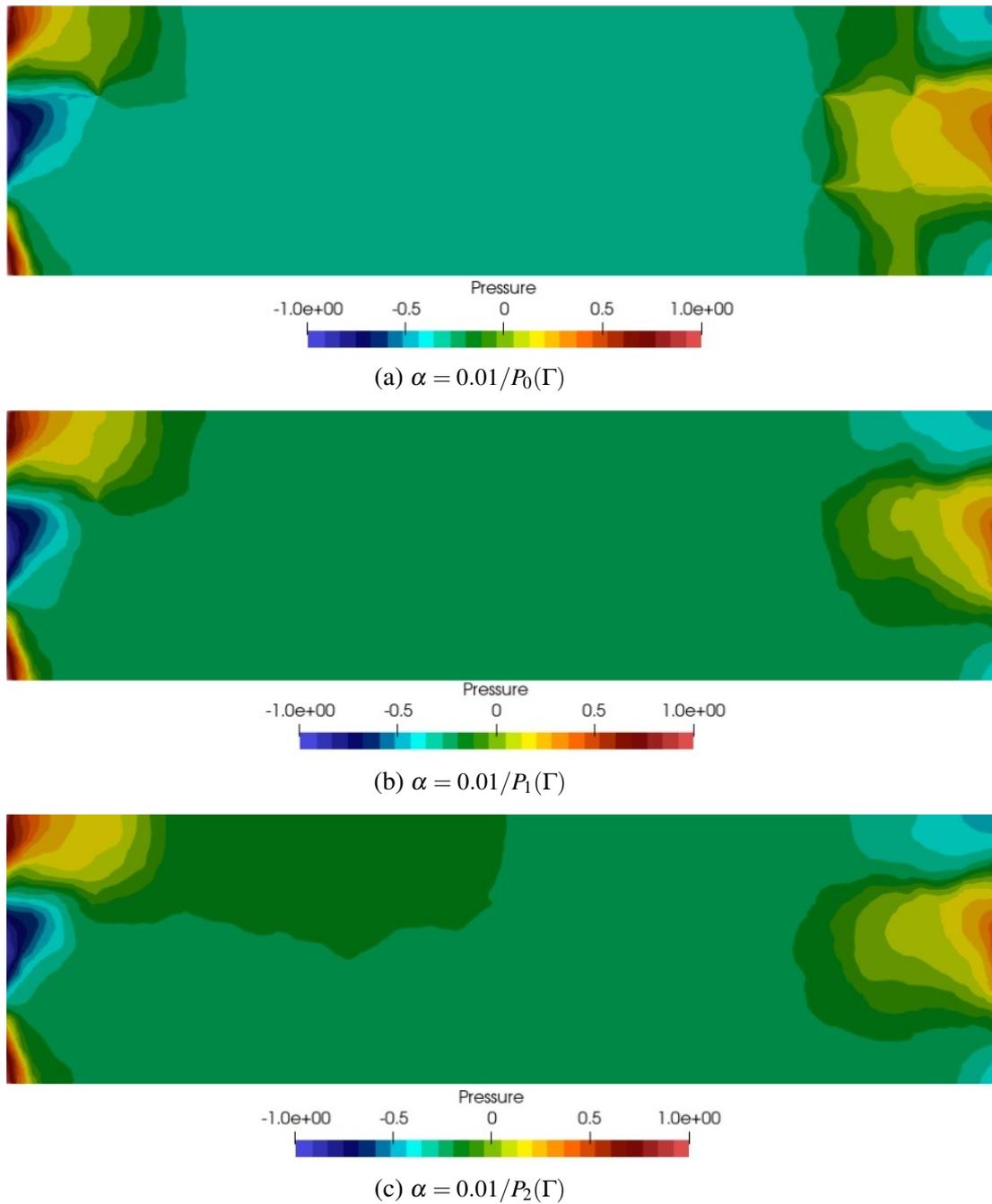
A [Figura 48](#) ilustra a solução dos campos de pressões quando aplicado o método multiescala utilizando espaço *Brezzi-Douglas-Marini* de ordem 2, para as três ordens do espaço de interface, quando aplicado  $\alpha = 0.01$ . Com os resultados nota-se que o  $\alpha$  pequeno para um polinômio de grau 0, não possui um bom comportamento quando comparado com o campo da malha fina, pode-se analisar que a pressão neste campo é baixa quando comparada com os demais campos presentes na [Figura 48](#).

Por fim, a [Figura 49](#) representa os campos de velocidade ao aplicar o método multiescala, como realizado anteriormente usando o espaço *BDM* de ordem 2, para as três ordens do espaço de interface, quando aplicado  $\alpha = 0.01$  na condição de Robin. A partir das imagens, é possível notar que para um polinômio de grau 0 o método multiescala possui um erro maior do que comparado aos graus maiores. Inclusive pode-se perceber claramente a decomposição de domínio sendo utilizada e a descontinuidade da velocidade nas interfaces entre subdomínios, o que melhora notoriamente ao incrementar a ordem do espaço de interface. podendo analisar que  $P_1(\Gamma)$  e  $P_2(\Gamma)$  são similares quando comparado ao campo de velocidades obtido pela malha fina ([Figura 45](#)).

Figura 47 – Solução ao longo da linha central entre a solução da malha fina e o método multiescala para  $\alpha = 0.01$  e  $\alpha = 1.0$  com  $P_0(\Gamma)$ ,  $P_1(\Gamma)$  e  $P_2(\Gamma)$ , utilizando espaço  $BDM_1$ .(a)  $\alpha = 0.01/P_0(\Gamma)/BDM_1$ (b)  $\alpha = 1.0/P_0(\Gamma)/BDM_1$ (c)  $\alpha = 0.01/P_1(\Gamma)/BDM_1$ (d)  $\alpha = 1.0/P_1(\Gamma)/BDM_1$ (e)  $\alpha = 0.01/P_2(\Gamma)/BDM_1$ (f)  $\alpha = 1.0/P_2(\Gamma)/BDM_1$ 

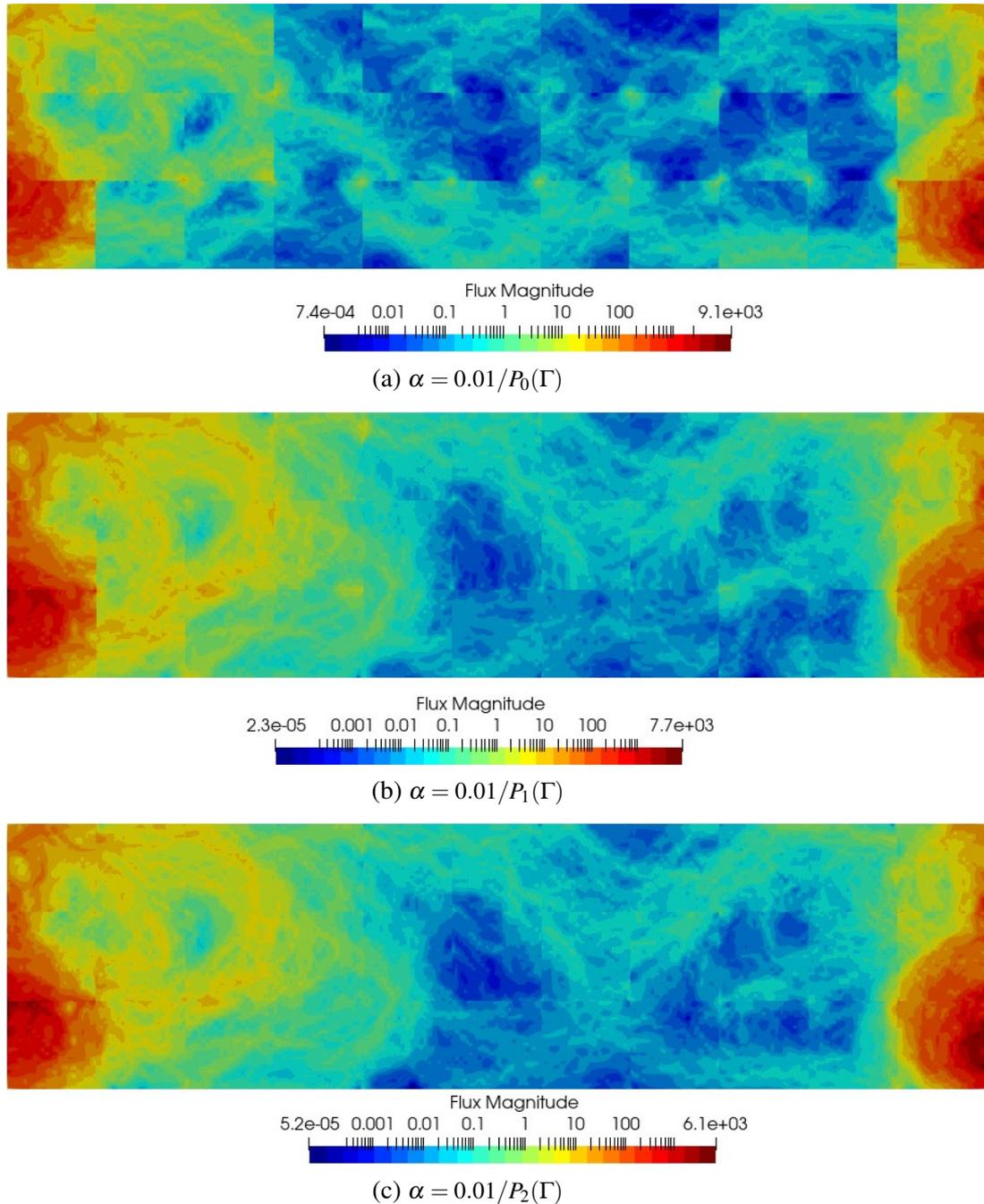
Fonte: Elaborada pela autora.

Figura 48 – Campos de pressões da solução do método multiescala quando utilizado o espaço  $BDM_2$ , com  $\alpha = 0.01$  para os polinômios do tipo  $P_0(\Gamma)$ ,  $P_1(\Gamma)$ ,  $P_2(\Gamma)$ .



Fonte: Elaborada pela autora.

Figura 49 – Campos de velocidades da solução do método multiescala quando utilizado o espaço  $BDM_2$ , com  $\alpha = 0.01$  para os polinômios do tipo  $P_0(\Gamma)$ ,  $P_1(\Gamma)$ ,  $P_2(\Gamma)$ .



Fonte: Elaborada pela autora.

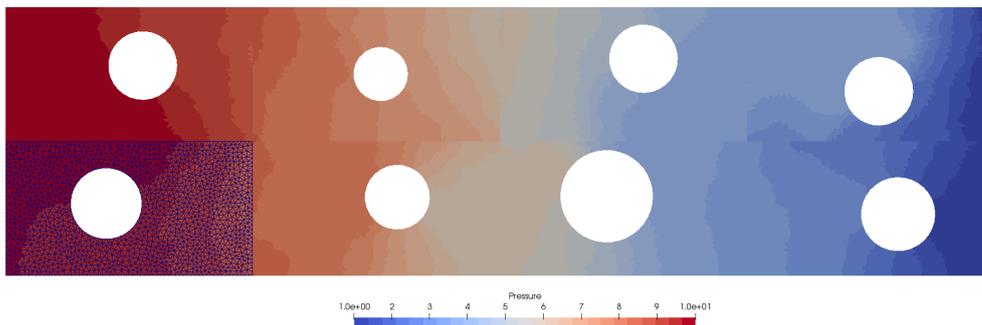
### 4.3 Estudo em geometrias complexas

Para estudar o comportamento do método num caso mais desafiante, foi feita uma análise do método no caso de formações altamente heterogêneas, onde o campo de permeabilidades é heterogêneo. Neste caso considerou-se a camada 36 do *benchmark* SPE10. Este estudo já foi previamente realizado por (SOUZA, 2021). Neste estudo, foi considerado em cada subdomínio

uma cavidade circular, a fim de incorporar uma irregularidade geométrica no problema. As cavidades podem ser pensadas como *vugs* ou cavernas que estão presentes em muitos reservatórios carstificados. Na Figura 52 é mostrado o campo de permeabilidades em escala logarítmica, o qual é definido como constante por elemento e a partição em  $4 \times 2$  subdomínios adotada, além disso mostra-se também a solução da pressão e velocidade obtida pelo método de malha fina. O problema de malha fina possui aproximadamente 21K elementos, o que leva a 224K graus de liberdade para o espaço  $BDM_2$ . Apesar de a comparação apresentada ser qualitativa, os resultados mostram o potencial da implementação proposta para resolver problemas de interesse para a indústria em geometrias não regulares.

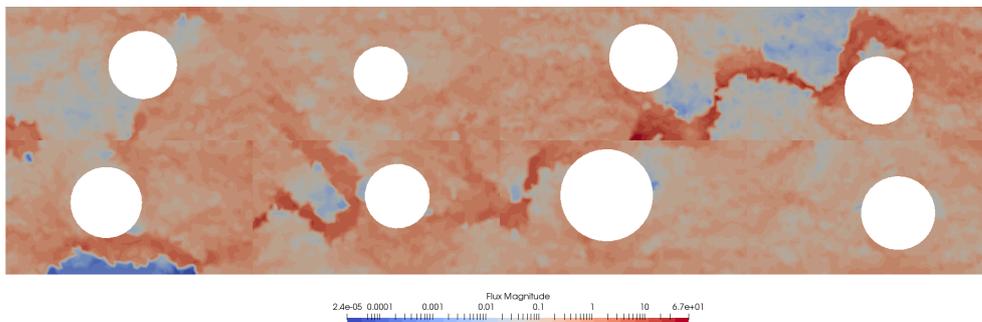
Para explorar outras possibilidades, foi utilizado nesta seção o espaço de *Raviart-Thomas* de mais baixa ordem, que requer um custo computacional menor, nos estudos realizados anteriormente foi utilizado principalmente o espaço  $BDM$ . Os campos de pressão e velocidade são dados pela Figura 50 e Figura 51, respectivamente. Além disso, no campo de pressão foi exibido um detalhe da malha de triângulos não estruturada para o subdomínio 0. O número de elementos em cada subdomínio oscila entre 2400 e 2700 triângulos, dependendo de cada caso.

Figura 50 – Campo de pressões para o benchmark SPE10, utilizando  $RT_0$ .



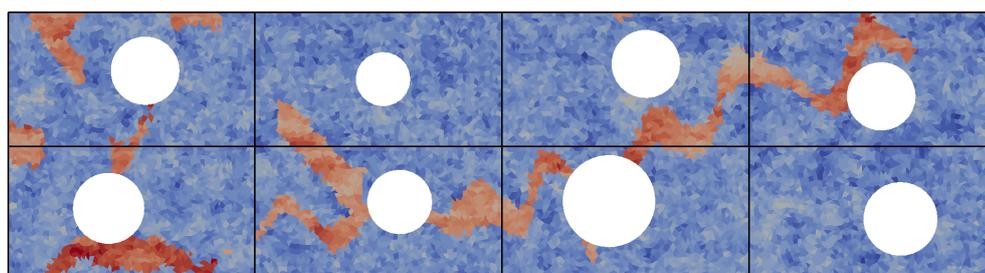
Fonte: Elaborada pela autora.

Figura 51 – Campo de velocidades para o benchmark SPE10, utilizando  $RT_0$ .

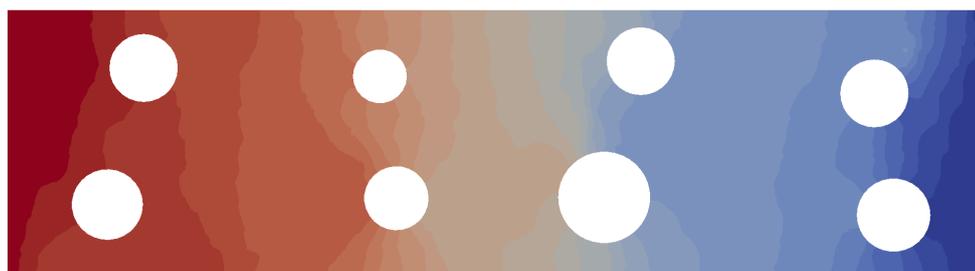


Fonte: Elaborada pela autora.

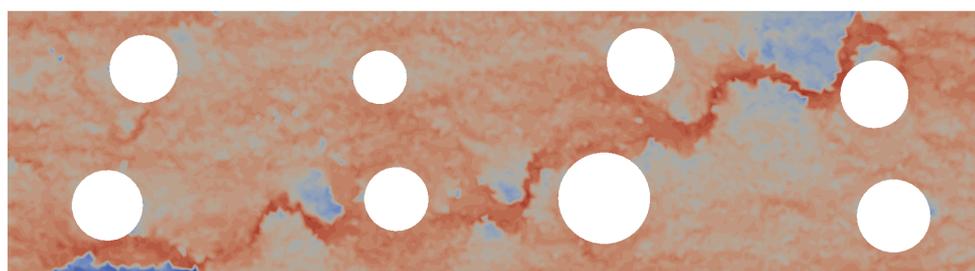
Figura 52 – Permeabilidade do benchmark SPE10, pressão e velocidade obtidos pelo método de malha fina (não decomposto) usando  $BDM_2$ .



(a) Campo de permeabilidade



(b) Campo de pressão



(c) Campo de velocidade

Fonte: Elaborada pela autora.



---

## COMENTÁRIOS FINAIS E TRABALHOS FUTUROS

---

Nesta dissertação, foi estudada uma implementação do método multiescala *MRCM*, (*Multiscale Robin Coupled Method*), para resolver o problema de Darcy do escoamento em meios porosos, na plataforma de elementos finitos de código aberto FEniCS. O método é baseado em decomposição de domínio sem *overlapping* e na imposição de condições de acoplamento de tipo Robin.

O objetivo principal deste projeto foi apresentar a primeira implementação do método com resolutores locais  $H(\text{div})$  em malhas de elementos finitos não estruturadas, uma vez que, até o presente momento o método havia sido estudado apenas com discretizações locais baseadas em métodos de volumes finitos de baixa ordem em malhas cartesianas ortogonais. Este objetivo foi atingido amplamente, o que foi demonstrado nos capítulos 2, 3 e 4.

No capítulo 2, foi apresentada a formulação mista do problema de Darcy na malha fina e espaços  $H(\text{div})$ , bem como a sua implementação na plataforma FEniCS, considerando malhas de triângulos não estruturadas, e discretizações baseadas nos espaços de Raviart-Thomas e Brezzi-Douglas-Marini. Como validação do resolutor implementado, foi avaliado o erro de discretização espacial e verificada as ordens de convergência esperadas em problemas com solução conhecida. Também foi aplicado à resolução de um problema transiente de transporte bifásico baseado no modelo de Buckley-Leverett, em geometrias complexas. Já no capítulo 3, foi apresentada a formulação numérica do método *MRCM*, juntamente com vários detalhes de implementação na plataforma FEniCS. Finalmente, no capítulo 4, foi apresentado um estudo numérico exaustivo para avaliar a precisão do *MRCM* em diversas situações, incluindo o refinamento em malha e polinomial dos problemas locais, o enriquecimento polinomial dos espaços de interface e a influência do parâmetro algorítmico na condição de acoplamento dos problemas locais.

As ferramentas desenvolvidas ao longo do projeto, abrem várias possibilidades de estudos

que poderiam ser realizados em trabalhos futuros, incluindo:

- Implementação do método em decomposições de domínio não estruturadas: Apesar de ter considerado decomposições de domínio estruturadas, principalmente por questões de simplicidade, o tratamento de casos mais gerais é certamente possível na plataforma e não deveria apresentar grandes dificuldades.
- Acoplamento do resolutor multiescala *MRCM* com o transporte de um escalar, para resolver o problema de escoamento bifásico. Neste trabalho temos apenas considerada a resolução multiescala do problema de Darcy. Para resolver o problema completo, será necessária a implementação de um esquema de post-processo ou *downscaling*, a fim de tornar o campo de velocidades contínuo no nível da malha fina.
- *Upgrade* para a nova versão da plataforma, FEniCSx. Neste trabalho foi usada a versão legacy FEniCS, já que os trabalhos de implementação foram iniciados antes da nova versão ter sido disponibilizada.
- Uso do método como preconditionador do problema global de malha fina. Isto é particularmente interessante, para implementações baseadas em formulações mista, em que a estrutura do sistema de equações é do tipo *saddle-point*, que encontram-se muito mal condicionados.

## REFERÊNCIAS

---

---

- ARBOGAST, T.; CORREA, M. R. Two families of  $h$  (div) mixed finite elements on quadrilaterals of minimal dimension. **SIAM Journal on Numerical Analysis**, v. 54, p. 3332–3356, 2016. Citado na página [34](#).
- ARBOGAST, T.; PENCHEVA, G.; WHEELER, M. F.; YOTOV, I. A multiscale mortar mixed finite element method. **Multiscale Modeling & Simulation**, Society for Industrial & Applied Mathematics (SIAM), v. 6, n. 1, p. 319–346, 2007. Citado nas páginas [31](#) e [74](#).
- ARNOLD, D.; BOFFI, D.; FALK, R. S. Quadrilateral  $h$  (div) finite elements. **SIAM Journal on Numerical Analysis**, v. 42, p. 2429–2451, 2005. Citado na página [34](#).
- BALIGA, B.; PATANKAR, S. A new finite-element formulation for convection-diffusion problems. **Numerical Heat Transfer**, Taylor & Francis, v. 3, n. 4, p. 393–409, 1980. Citado na página [59](#).
- BEAR, J. **Dynamics of fluids in porous media**. [S.l.]: New York:Dover, 1972. Citado na página [29](#).
- BERRYMAN, J. G.; WANG, H. F. Elastic wave propagation and attenuation in a double-porosity dual-permeability medium.international. **Journal of Rock Mechanics and Mining Sciences**, v. 37, p. 63–78, 2000. Citado na página [38](#).
- BOFFI, D.; DURÁN, F. B. and Leszek F. Demkowicz amd R. G.; FALK, R. S.; FORTIN, M. **Mixed Finite Elements, Compatibility Conditions, and Applications**. [S.l.]: Springer, 2006. v. 1939. (Lecture Notes in Mathematics, v. 1939). Citado nas páginas [49](#) e [51](#).
- BREZZI F., H. T. J. R. M. L. D. M. A. Mixed discontinuous galerkin methods for darcy flow. **Journal of Scientific Computing**, v. 1, n. 3, p. 119–145, 2005. Citado nas páginas [34](#) e [46](#).
- CARVALHO, D. K. **Uma formulação do método dos volumes finitos com estrutura de dados por aresta para a simulação de escoamentos em meios porosos**. Tese (Doutorado) — Tese (Doutorado em Engenharia Civil)-UFPE, Recife, 2005. Citado na página [29](#).
- CHEN, Z.; HOU, T. A mixed multiscale finite element method for elliptic problems with oscillating coefficients. **Mathematics of Computation**, v. 72, n. 242, p. 541–576, 2003. Citado na página [30](#).
- CHEN, Z.; HUAN, G.; MA, Y. Computational methods for multiphase flows in porous media. v. 2, 2006. Citado na página [29](#).
- CHUNG, E.; EFENDIEV, Y.; HOU, T. Y. Adaptive multiscale model reduction with generalized multiscale finite element methods. **Journal of Computational Physics**, v. 320, p. 69–95, 2016. Citado na página [34](#).
- COATS, K.; DEMPSEY, J.; HENDERSON, J. The use of vertical equilibrium in two-dimensional simulation of three-dimensional reservoir performance. **Society of Petroleum Engineers Journal**, SPE, v. 11, n. 01, p. 63–71, 1971. Citado na página [30](#).

- COATS, K. H. A note on impes and some impes-based simulation models. **SPE Journal**, OnePetro, v. 5, n. 03, p. 245–251, 2000. Citado na página 57.
- COCKBURN, B.; SHU, C.-W. Tvb runge-kutta local projection discontinuous galerkin finite element method for conservation laws. ii. general framework. **Mathematics of computation**, v. 52, n. 186, p. 411–435, 1989. Citado na página 58.
- COCKBURN, B.; SHU, C.-W.; JOHNSON, C.; TADMOR, E.; TADMOR, E. **Approximate solutions of nonlinear conservation laws**. [S.l.]: Springer, 1998. Citado na página 58.
- CORREA, M. R.; LOULA, A. Stabilized velocity post-processings for darcy flow in heterogenous porous media. **Communications in Numerical Methods in Engineering**, v. 23, p. 461–489, 2007. Citado na página 34.
- CORTIS, A.; GALLO, C.; SCHER, H.; BERKOWITZ, B. Numerical simulation of non-fickian transport in geological formations with multiple-scale heterogeneities. **Water Resources Research**, Wiley Online Library, v. 40, n. 4, 2004. Citado na página 30.
- DAGAN, G. **Flow and transport in porous formations**. [S.l.]: Springer Science & Business Media, 2012. Citado na página 30.
- DARCY, H. **Les fontaines publiques de la ville de Dijon**. [S.l.]: Dalmont, 1856. Citado na página 40.
- DURAN, R. G. **Mixed Finite Element Methods**. [S.l.]: Departamento de Matemática, Facultad de Ciencias Exactas, Universidad de Buenos Aires, 2008. Citado nas páginas 46 e 47.
- EWING, R. E. **The mathematics of reservoir simulation**. [S.l.]: SIAM, 1983. Citado nas páginas 39 e 42.
- FRANCISCO, A.; GINTING, V.; PEREIRA, F.; RIGELO, J. Design and implementation of a multiscale mixed method based on a nonoverlapping domain decomposition procedure. **Math. Comput. Simul.**, v. 99, p. 125–138, 2014. Citado na página 74.
- GOTTLIEB, S. On high order strong stability preserving runge-kutta and multi step time discretizations. **Journal of scientific computing**, Springer, v. 25, n. 1, p. 105–128, 2005. Citado na página 58.
- GUIRALDELLO, R. T.; AUSAS, R. F.; SOUSA, F. S.; PEREIRA, F.; BUSCAGLIA, G. C. The multiscale robin coupled method for flows in porous media. **Journal of Computational Physics**, Elsevier, v. 355, p. 1–21, 2018. Citado nas páginas 31, 70, 73, 81, 82, 91 e 92.
- \_\_\_\_\_. Interface spaces for the multiscale robin coupled method in reservoir simulation. **Mathematics and Computers in Simulation**, v. 164, p. 103 – 119, 2019. ISSN 0378-4754. The 7th International Conference on Approximation Methods and Numerical Modelling in Environment and Natural Resources, held in Oujda, Morocco, May 17-20, 2017. Disponível em: <<http://www.sciencedirect.com/science/article/pii/S0378475418302842>>. Citado nas páginas 31, 71, 73 e 100.
- \_\_\_\_\_. Velocity postprocessing schemes for multiscale mixed methods applied to contaminant transport in subsurface flows. **Computational Geosciences**, Springer Science and Business Media LLC, v. 24, p. 1141–1161, 2020. Disponível em: <<https://doi.org/10.1007/s10596-019-09930-8>>. Citado nas páginas 31, 32, 69 e 72.

HARDER, C.; PAREDES, D.; VALENTIN, F. A family of multiscale hybrid-mixed finite element methods for the darcy equation with rough coefficients. **Journal of Computational Physics**, Elsevier, v. 245, p. 107–130, 2013. Citado nas páginas 31 e 74.

HASLE, G.; LIE, K.-A.; QUAK, E. **Geometric modelling, numerical simulation, and optimization**. [S.l.]: Springer, 2007. Citado na página 38.

HOU, T. Y.; WU, X.-H. A multiscale finite element method for elliptic problems in composite materials and porous media. **Journal of computational physics**, Elsevier, v. 134, n. 1, p. 169–189, 1997. Citado na página 30.

JARAMILLO, A.; GUIRALDELLO, R. T.; PAZ, S.; AUSAS, R. F.; SOUSA, F. S.; PEREIRA, F.; BUSCAGLIA, G. C. Towards hpc simulations of billion-cell reservoirs by multiscale mixed methods. **arXiv:2103.08513**, 2021. Citado na página 73.

\_\_\_\_\_. Towards hpc simulations of billion-cell reservoirs by multiscale mixed methods. **Computational Geosciences**, Springer, v. 26, n. 3, p. 481–501, 2022. Citado nas páginas 31 e 32.

JENNY, P.; LEE, S.; TCHELEPI, H. A. Multi-scale finite-volume method for elliptic problems in subsurface flow simulation. **Journal of computational physics**, Elsevier, v. 187, n. 1, p. 47–67, 2003. Citado na página 31.

LOGG, A.; MARDAL, K.-A.; WELLS, G. N. *et al.* **Automated Solution of Differential Equations by the Finite Element Method**. [S.l.]: Springer, 2012. ISBN 978-3-642-23098-1. Citado na página 34.

LUNA, B. G. B. **Modelagem Automática de Escoamentos em Meios Porosos via Método dos Elementos Finitos**. 2012. Citado na página 38.

PEACEMAN, D. **Numerical Solution of Parabolic Problems in One Dependent Variable. Fundamentals of Numerical Reservoir Simulation**. [S.l.]: Elsevier, 1977. Citado na página 29.

PIC-C. **Projects Publications Codes Courses Blog**. 2023. <<https://www.particleincell.com/2015/fem-pic/>>. [Online; accessed 02-January-2023]. Citado na página 33.

RAVIART, P. A.; THOMAS, J. A mixed finite element method for 2-nd order elliptic problems in: Mathematical aspects of finite element methods. **In: Mathematical aspects of finite element methods**. Springer, p. 292–315, 1977. Citado nas páginas 34 e 46.

ROCHA, F. F.; SOUSA, F. S.; AUSAS, R. F.; BUSCAGLIA, G. C.; PEREIRA, F. Multiscale mixed methods for two-phase flows in high-contrast porous media. **Journal of Computational Physics**, Elsevier, v. 409, p. 109316, 2020. Citado nas páginas 31, 32, 33 e 62.

ROCHA, F. F.; SOUSA, F. S.; AUSAS, R. F.; PEREIRA, F.; BUSCAGLIA, G. C. Interface spaces based on physics for multiscale mixed methods applied to flows in fractured-like porous media. **Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering**, Elsevier BV, v. 385, p. 114035, Nov 2021. ISSN 0045-7825. Disponível em: <<http://dx.doi.org/10.1016/j.cma.2021.114035>>. Citado nas páginas 31, 33 e 73.

ROSA, A. J.; CARVALHO, R. S.; XAVIER, J. A. D. **Engenharia de reservatórios de petróleo**. [S.l.]: Interciência, 2006. Citado nas páginas 38 e 41.

SILVA, R. S. **Simulação de Escoamento Bifásico Oléo-Água em Reservatórios de Petróleo Usando Computadores Paralelos de Memória Distribuída**. 2008. Citado na página 29.

SOUZA, M. V. Implementação do método multiescala mrcm com resolutores locais hdiv para o problema de darcy. **Journal of Computational Physics**, Elsevier, v. 355, p. 1–21, 2021. Citado nas páginas 70, 72 e 109.

SPE. **Society of Petroleum Engineers**. 2022. <<https://www.spe.org/web/csp/index.html>>, Last accessed on 02/11/2022. Citado nas páginas 62 e 81.

\_\_\_\_\_. **Society of Petroleum Engineers**. 2022. <<https://www.spe.org/en/>>, Last accessed on 02/11/2022. Citado na página 92.

SPIRIDONOV, D.; VASILYEVA, M.; CHUNG, E. T. Generalized multiscale finite element method for multicontinua unsaturated flow problems in fractured porous media. **Journal of Computational and Applied Mathematics**, v. 370, p. 112594, 2020. Citado na página 34.

STEWART, J.; ROMO, J. H. **Cálculo**. [S.l.]: Cengage Learning, 1999. Citado na página 41.

TEIXEIRA, G. **Métodos numéricos para a solução de escoamentos bifásicos de fluidos incompressíveis em meios porosos**. Tese (Doutorado) — Dissertação de mestrado, Modelagem Computacional, UFJF, 2011. Citado na página 59.

The DefElement contributors. **DefElement: an encyclopedia of finite element definitions**. 2023. <<https://defelement.com>>. [Online; accessed 02-January-2023]. Citado nas páginas 49, 50, 51, 52 e 53.

WANG, Z. J. Two families of mixed finite elements for second order elliptic problems. **Journal of computational physics**, Numer.Math, v. 47, p. 217–235, 1985. Citado na página 34.

ZHOU, H. **Algebraic Multiscale Finite-Volume for Reservoir Simulation**. 2010. Citado na página 30.

