Introdução à Simulação de Fluxos em Meios Porosos: Métodos de Elementos Finitos

Maria Cristina de Castro Cunha
Departamento de Matemática Aplicada
Universidade Estadual de Campinas

Petronio Pulino
Departamento de Matemática Aplicada
Universidade Estadual de Campinas

Márcio Rodolfo Fernandes
Departamento de Matemática
Centro de Ciências Físicas e Matemáticas
Universidade Federal de Santa Catarina

Maio de 1999

Prefácio

O objetivo da simulação de reservatórios, petrolíferos ou aquíferos, é prever o comportamento de um reservatório real através de modelos adequados. O modelo pode ser físico, como por exemplo em escalas de laboratório, ou matemático. Entendemos como modelo matemático para um sistema físico, um conjunto de equações diferenciais parciais que, juntamente com condições de contorno, descrevem adequadamente o processo físico que queremos analisar.

As equações diferenciais que modelam o fluxo em meios porosos, quando estratégias de injeção são aplicadas, são obtidas combinando-se a Lei de Darcy e o balanço de massa em cada uma das fases. Forças gravitacionais, viscosas e capilares provocam o movimento.

A Lei de Darcy é obtida pela média volumétrica das equações de Navier-Stokes, que governam o fluxo do ponto de vista microscópico, ou seja, da ordem de $10^{-4} - 10^{-3}$ *metros* (veja (GreenKorn,1983)). Por outro lado, os reservatórios, nos quais as equações de conservação serão aplicadas, têm dimensões bem maiores, da ordem de $10^2 - 10^3$ *metros*. Essa diferença entre escalas é um exemplo das questões delicadas que surgem na modelagem. A heterogeneidade, na maioria da vezes não quantificada, é outra questão delicada. O modelo matemático, como veremos nestas notas, é um conjunto de equações diferenciais parciais não-lineares com termos de transporte por convecção e difusão.

Para usá-lo na previsão do comportamento do reservatório é necessário obter a solução para o sistema de equações usado como modelo matemático. Só em situações muito particulares a solução analítica pode ser obtida pelos métodos clássicos da matemática. O avanço tecnológico dos computadores, ocorrido nas últimas décadas, tem permitido a sofisticação de modelos numéricos, aqui entendidos como programas computacionais que aplicam técnicas numéricas para obter aproximações para a solução do modelo matemático proposto. Mas dependendo dos parâmetros da equação, os métodos numéricos clássicos podem não ser suficientes para a obtenção de uma boa aproximação, caso das equações de difusão-convecção quando o termo convectivo predomina sobre o difusivo.

Nesta etapa do processo de modelagem, algumas técnicas de discretização são aplicadas às equações diferenciais parciais. O resultado é um conjunto de equações algébricas não-lineares.

O Método de Diferenças Finitas tem sido usado nos simuladores que são usados pela indústria petrolífera. Entretanto, o Método de Elementos Finitos pode ser uma alternativa vantajosa desde que as devidas alterações sejam feitas no método clássico de elementos finitos, conhecido como Método de Galerkin, com a finalidade de garantir a estabilidade numérica para as várias possibilidades de escolha dos parâmetros da equação diferencial. Tais métodos são conhecidos com Métodos de Petrov-Galerkin.

As equações algébricas não-lineares são então resolvidas, geralmente através de algum processo de linearização, que converte o problema não-linear em uma seqüência de problemas lineares.

O objetivo desse texto é abordar algumas idéias básicas que estão presentes na modelagem numérica de fluxos em meios porosos usando o Método de Elementos Finitos. Inicialmente, apresentamos alguns princípios básicos usados nos modelos matemáticos. Estes princípios nos permitirão formular quatro modelos matemáticos para processos de interesse prático e que serão explorados nas aproximações numéricas. Após uma breve introdução ao problema de Interpolação Polinomial e aos Espaços de Elementos Finitos, apresentamos os Métodos de Elementos Finitos e mostramos como estes métodos podem ser utilizados em algumas situações práticas da recuperação de petróleo.

Maria Cristina de Castro Cunha

Petronio Pulino

Márcio Rodolfo Fernandes

Nomenclatura e Unidades

A	Área (em geral seção reta)	$[L^2]$
C_i	Concentração da espécie i	[quantidade / volume]
D	Difusividade molecular / fator de tortuosidade	
$f(S)$	Função Fluxo Fracionário	
g	Aceleração da gravidade	$[L/t^2]$
$J(S)$	Função de Leverett	
K	Tensor de dispersão	$[L^2/t]$
K_l	Coeficiente de dispersão longitudinal	$[L^2/t]$
k	Permeabilidade absoluta	$[L^2]$
k_{rj}	Permeabilidade relativa da fase j	$[L^2]$
L	Comprimento	$[L]$
NC	Número total de componentes	
N_i	Fluxo de massa da espécie i	[massa i / $L^2 - t$]
NPe	Número de Peclet	
$\vec{n}$	Vetor unitário da normal externa	
P	Pressão	$[F/L^2]$
q	Taxa volumétrica de fluxo	$[L^3/t]$
S_j	Saturação da fase j	
t	Tempo	$[t]$
u	Velocidade superficial	$[L/t]$
V_p	Volume poroso	$[L^3]$
W_i	Massa da espécie i	[massa da espécie i / L^3]
x, y, z	Posição $[L]$	
α	Dispersividade	$[L]$
μ	Viscosidade	$[(F/L^2)\ t]$
ϕ	Porosidade	
ρ	Densidade	$[L/L^3]$
ω_i	Fração de massa da espécie i	[massa de i / massa total]

Observação : A notação usada nas unidades: L é unidade de comprimento, F de força, m de massa, t de tempo e T de temperatura.

Conteúdo

1 Fluxo Monofásico: Modelos Lineares **1**

1.1 Primeiras Definições e a Lei de Darcy 1
1.2 Balanço de Massa (Equação da Continuidade) 4
1.3 Fluxo Miscível 6
1.4 Solução Analítica num Caso Particular 1D 9
1.4.1 Adimensionalização 9
1.5 Um Modelo para Fluxo Miscível 2D 13

2 Fluxo Bifásico: Modelos Não-Lineares **17**

2.1 Equações gerais 17
2.1.1 Lei de Darcy 18
2.1.2 Equação da Continuidade 18
2.1.3 Pressão Capilar 19
2.2 Fluxo Bifásico Unidimensional 20
2.3 A Equação de Bukley-Leverett 22
2.4 A Equação de Rapoport - Leas 25

3 Interpolação Polinomial **27**

3.1 O Problema de Interpolação Polinomial 27
3.1.1 Método da Matriz 28
3.1.2 Base de Lagrange 30
3.2 Interpolação Polinomial de Lagrange 31
3.3 Análise de Erro da Interpolação Polinomial 31

4 Espaços de Elementos Finitos **33**

4.1 Espaços de Lagrange Polinomial por Partes 33
4.1.1 Espaço das Funções de Lagrange Lineares 35
4.1.2 Espaço das Funções de Lagrange Quadráticas 37
4.2 Espaço das Funções Cúbicas de Hermite 39
4.3 Interpolação Polinomial por Partes 43
4.3.1 Erro da Interpolação Polinomial por Partes 45

5 Métodos de Elementos Finitos **47**
5.1 Introdução 47
5.2 Formulação Variacional 49
5.3 Problema de Minimização 51
5.4 Método de Galerkin 53
5.5 Método de Galerkin - Lagrange Linear 55
5.6 Teorema de Lax-Milgram e Lema de Céa 58
5.6.1 Interpretação Geométrica para Solução de Galerkin 59
5.6.2 Uma Estimativa de Erro para Solução de Galerkin 60

6 Equações de Difusão-Convecção **61**
6.1 Colocação do Problema 61
6.2 Formulação Variacional 62
6.3 Método de Galerkin - Lagrange Linear 63
6.4 Método de Difusão Artificial 65
6.5 Método "Streamline Diffusion" 66
6.6 Método de Galerkin com Funções Bolha 67
6.7 Exemplos Numéricos 69
6.8 Problema de Evolução de Difusão-Convecção 71
6.8.1 Semi-discretização no Tempo 72
6.8.2 Discretização no espaço e no Tempo 73
6.8.3 Método "Streamline Diffusion" 73
6.8.4 Método de Galerkin com Funções Bolha 73
6.8.5 Simulações Numéricas 74

Capítulo 1

Fluxo Monofásico: Modelos Lineares

Nas duas primeiras seções deste capítulo, apresentaremos algumas definições básicas na simulação de fluxos em emios porosos, a lei de darcy e a equação de continuidade. Em seguida, trataremos o caso de fluxo miscível, ou monofásico. As equações são adaptadas e dois modelos matemáticos para este caso são apresentados, juntamente com um caso particular no qual ṕossível encontrar uma solução analítica.

1.1 Primeiras Definições e a Lei de Darcy

A teoria macroscópica para o estudo de fenômenos que ocorrem em meios porosos se aplica a blocos cuja dimensão é grande quando comparada com o tamanho dos poros. Sob estas condições, as leis físicas usadas na formulação das equações diferenciais que modelam os fenômenos são aplicadas supondo o meio contínuo e que os parâmetros que o caracterizam sejam definidos ponto a ponto.
O volume poroso mede a capacidade do meio armazenar óleo, água ou gás; a medida desta capacidade é chamada porosidade. A porosidade média de um bloco é definida pela razão entre o volume de vazios e o volume total deste bloco. Assim,

$$\phi = \text{porosidade} = \frac{\text{volume de poros no bloco}}{\text{volume total do bloco}}.$$

Embora a porosidade possa variar com a posição e com a pressão do meio, é usual trabalhar com valores médios.

Em geral, os fluidos presentes em reservatórios de petróleo contem várias fases, isto é, são denominados multifásicos. Por exemplo, pode ocorrer que o fluido seja uma mistura de gases, óleo e água, o que é denominado trifásico. O fluido pode ser composto de duas fases, água e óleo, ou gás e óleo, neste caso chamado bifásico. Pode ocorrer também que o fluido só contenha uma fase, como é o caso de reservatórios de água, ou ainda quando, em reservatórios de petróleo, duas fases são miscíveis, como ocorre com óleo e gás sob

pressão. Neste caso, dizemos que o fluido é monofásico.

Quando mais de um fluido ocupa o meio poroso indicamos o volume relativo de cada fluido por sua saturação. Por exemplo num sistema bifásico com água e óleo a saturação de água é definida por

$$S_w = \text{saturação de água} = \frac{\text{volume ocupado pela água}}{\text{volume poroso no bloco}}.$$

Desta definição temos que a soma das saturações num sistema multifásico é sempre igual a 1.

A Lei de Darcy para o fluxo horizontal de fluido monofásico nos diz que a taxa de variação de fluido (volume por unidade de tempo) que flui através de uma amostra do meio poroso, de comprimento L e seção reta de área A, é dada por:

$$\dot{Q} = -\frac{kA}{\mu}\frac{\Delta P}{L},$$

onde ΔP é a diferença de pressão aplicada na amostra, μ é a viscosidade do fluido e k é a permeabilidade absoluta do meio poroso. A permeabilidade do meio poroso com relação a um fluido mede o grau de facilidade do fluido penetrar e fluir através deste meio. Ainda neste caso de fluxo numa só direção, a lei de Darcy pode ser escrita na forma diferencial:

$$u = \frac{\dot{Q}}{A} = -\frac{k}{\mu}\frac{\partial P}{\partial x},$$

onde u é a velocidade superficial do fluxo. O sinal negativo desta expressão indica que a pressão diminui na direção do fluxo.

A lei de Darcy pode ser generalizada para sistemas tridimensionais, aplicando-a em cada uma das direções do vetor velocidade $\vec{u} = (u_x, u_y, u_z)$, isto é:

$$u_x = -\frac{k}{\mu}\frac{\partial P}{\partial x}, \quad u_y = -\frac{k}{\mu}\frac{\partial P}{\partial y}, \quad u_z = -\frac{k}{\mu}\frac{\partial P}{\partial z},$$

sendo que as permeabilidades podem ser diferentes em cada uma das direções .

Se os efeitos gravitacionais devem ser levados em conta no modelo matemático, introduzimos o termo gravitacional na direção em que ele atua. Por exemplo, adimitindo que o eixo-z coincide com a direção da aceleração da gravidade, com z crescendo para cima, a lei de Darcy se expressa como:

$$\vec{u} = -\frac{k}{\mu}\left(\nabla P + \rho\,\vec{g}\right).$$

Nesta expressão, ρ representa a densidade do fluido e $\vec{g}$ a aceleração da gravidade.

A lei de Darcy pode também ser generalizada para o caso de fluido bifásico. Suponhamos que dois fluidos imiscíveis, fluido 1 e fluido 2, são injetados numa amostra do meio poroso, como ilustrado na Figura 1.1.

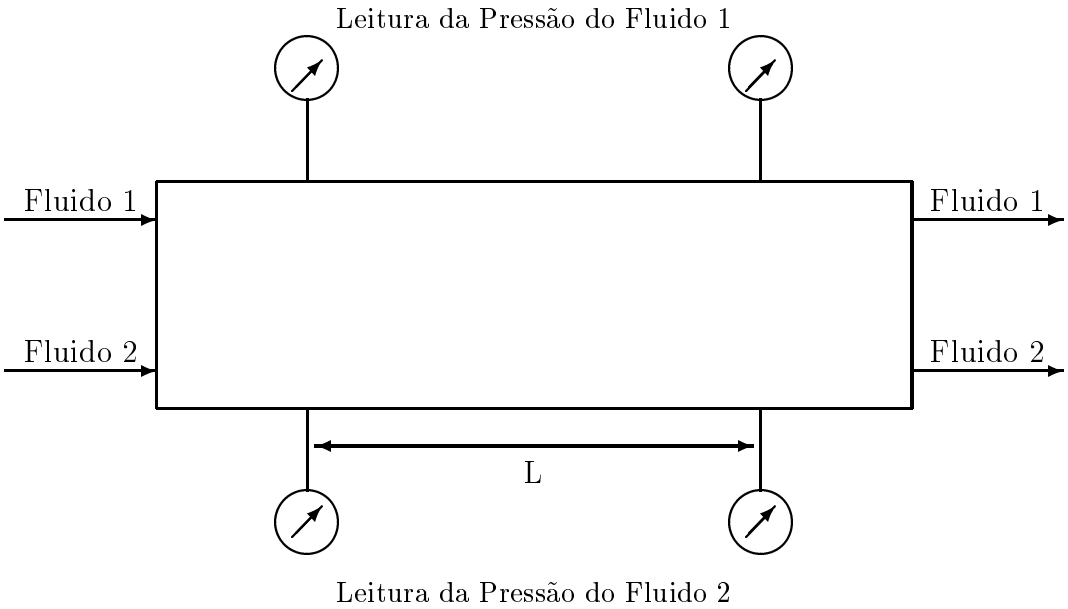

Figura 1.1: Medida da pressão dos fluidos na amostra.

Instalando manômetros nos extremos da amostra, é possível medir a pressão de cada um dos dois fluidos na entrada e na saída da amostra, que estão a uma distância L. Pode-se observar o regime estacionário do fluxo, no qual a saturação de cada uma das fases é constante ao longo da amostra. Alguns autores generalizam a lei de Darcy para cada uma das fases através das expressões:

$$\dot{Q_1} = \frac{k_1 A}{\mu_1}\frac{\Delta P_1}{L} \quad \text{e} \quad \dot{Q_2} = \frac{k_2 A}{\mu_2}\frac{\Delta P_2}{L},$$

isto é, separando as vazões e a diferença de pressões em cada um dos dois fluidos. As permeabilidades efetivas das fases 1 e 2 , k_1 e k_2 respectivamente, dependem da natureza do meio poroso e também da saturação da respectiva fase. Na Engenharia de Petróleo é comum considerar as Permeabilidades Relativas,

$$k_{r_1}(S_1) = \frac{k_1}{k} \quad \text{e} \quad k_{r_2}(S_2) = \frac{k_2}{k}.$$

Com esta definição, separa-se a dependência do meio na permeabilidade absoluta e as permeabilidades relativas dependem apenas das saturações de suas respectivas fases.

1.2 Balanço de Massa (Equação da Continuidade)

Os quatro principais mecanismos que provocam o transporte de espécies químicas em meios permeáveis são as forças viscosas, forças gravitacionais, os efeitos da difusão e as forças capilares. Os agentes que provocam os três primeiros mecanismos são pressão, densidade e variação da concentração. A formação de curvaturas nas fronteiras que separam as fases provoca a pressão capilar entre as fases, origem das forças capilares.

Para estabelecer as equações diferenciais que, combinadas com a lei de Darcy e condições de contorno modelam o fluxo em meios permeáveis, são usados os princípios de conservação de massa e de energia. Nestas notas estaremos interessados em fenômenos isotérmicos e, portanto, estaremos usando apenas o princípio de conservação de massa.

Em vista da complexidade do sistema, em geral não é possível equacionar localmente, a menos de alguns casos com geometria microscópica do meio poroso muito simples. Como alternativa, é usual aplicar as equações de conservação de massa numa escala macroscópica na qual, como já foi dito antes, os poros têm dimensão muito pequena quando comparado ao volume de referência (ou bloco). A seguir, descrevemos como obter a Equação da Continuidade que será usada repetidas vezes para estabelecer os modelos matemáticos com os quais trabalharemos.

Seja V um volume arbitrário, mas fixo, imerso no meio considerado e através do qual fluem as espécies químicas. Por simplicidade, inicialmente não estaremos considerando os poros no meio. Depois de estabelecida e equação da continuidade, a porosidade corrigirá esta hipótese inicial.

A equação de conservação da massa nos diz que

$$\left\{\begin{array}{c}\text{Taxa de Acumulação}\\ \text{do Fluido em V}\end{array}\right\} = \left\{\begin{array}{c}\text{Taxa de Fluido}\\ \text{que entra em V}\end{array}\right\} - \left\{\begin{array}{c}\text{Taxa de Fluido}\\ \text{que sai de V}\end{array}\right\} + \left\{\begin{array}{c}\text{Taxa de Produção}\\ \text{do Fluido em V}\end{array}\right\}.$$

Examinemos o significado matemático de cada um destes termos. O termo de acumulação pode ser calculado através de:

$$\text{Taxa de Acumulação em V} = \frac{\partial}{\partial t}\int \rho(x,y,z,t)dV,$$

onde $\rho(x,y,z,t)$ representa a densidade. Sob condições de suavidade pode-se trocar a ordem dos operadores e temos:

$$\frac{\partial}{\partial t}\int \rho(x,y,z,t)dV = \int_V \frac{\partial \rho(x,y,z)}{\partial t}\, dV. \tag{1.1}$$

O termo do fluxo resultante pode ser contabilizado num ponto situado na superfície de V. Seja $\vec{N}$ um vetor que representa o fluxo de massa do fluido neste ponto. Este vetor pode ser decomposto nas componentes normal e tangencial à superfície, sendo que esta última não penetra em V. A massa transportada através do elemento de área ΔA, resultado do que entra menos o que sai, será:

$$\text{Taxa de Transporte através de } \Delta A = -\vec{n}\ \vec{N}\ \Delta A,$$

onde o sinal negativo se deve a considerarmos o vetor normal externo, que é contrário à direção do fluxo que entra. Sendo assim, a massa transportada no superfície de V será

$$-\int_A \vec{n} \cdot \vec{N}\ dA, \tag{1.2}$$

onde A é o contorno de V.

A produção total é obtida somando as taxas de produção (volume/tempo), que podem variar ponto a ponto

$$\int_V R\ dV. \tag{1.3}$$

Nesta equação , é levado em consideração tanto a produção ($R > 0$) quanto a destruição ($R < 0$). Levando (1.1), (1.2), e (1.3) para a equação de conservação de massa, temos

$$\int_V \frac{\partial \rho}{\partial t}\ dV + \int_A \vec{n} \cdot \vec{N}\ dA = \int_V R\ dV.$$

A integral de superfície pode ser transformada em integral de volume usando o teorema da divergência:

$$\int_A \vec{n} \cdot \vec{N}\ dA = \int_V\ \nabla \cdot \vec{N}\ dV,$$

onde ∇ é o símbolo do operador divergência de um campo vetorial. Com isto, temos a forma integral para a equação de conservação da massa num volume arbitrário V:

$$\int_V \left(\frac{\partial \rho}{\partial t} +\ \nabla \cdot \vec{N} - R \right)\ dV$$

Como V é um volume arbitrário o integrando tem que ser nulo e temos finalmente a equação diferencial que representa matematicamente a conservação da massa

$$\frac{\partial \rho(x,y,z,t)}{\partial t} +\ \nabla \cdot \vec{N}(x,y,z,t) - R(x,y,z,t) = 0. \tag{1.4}$$

Num fluido com mais de um componente, a equação acima pode ser aplicada em cada um dos componentes, isto é:

$$\frac{\partial w_i}{\partial t} + \nabla \cdot \vec{N}_i - R_i = 0, \quad i = 1, 2, \cdots, NC \tag{1.5}$$

onde w_i representa a massa do componente i e NC é o número de componentes do composto.

Como estaremos interessados em trabalhar em meios porosos, o fluxo será calculado apenas no Volume Poroso pela multiplicação da porosidade pelo volume. Sendo assim, no caso de meios porosos o primeiro e o terceiro termos da equação (1.5) devem ser multiplicados pela porosidade ϕ.

1.3 Fluxo Miscível

Como modelo inicial, estaremos considerando o fluxo isotérmico de vários componentes miscíveis que formam um fluido monofásico e multicomponente. Embora exista apenas uma fase, há que se considerar a convecção e a difusão dos diversos componentes da mistura. Esta situação pode ser ilustrada através do fluxo de sal dissolvido na água, ou ainda, o deslocamento de óleo pela adição de solventes no reservatório.

Admitindo que não há adsorção de nenhum dos componentes pela rocha, o primeiro termo da equação (1.5) se reescreve na forma

$$\frac{\partial}{\partial t}\left(\phi\, \rho\, w_i\right), \quad i = 1, 2, \cdots, NC$$

onde ρ é a densidade do fluido e w_i representa a fração de massa da i-ésima componente (massa i dividido pela massa total).

No segundo termo da equação (1.5), o vetor fluxo $\vec{N}_i$ é formado pelo termo convectivo, determinado pela velocidade superficial $\vec{u}$ e o termo dispersivo, caracterizado pelo tensor $\underline{K}$:

$$\vec{N}_i = \rho\, w_i\, \vec{u} - \phi\, \rho\, \underline{K} \cdot \nabla w_i.$$

A dispersão atua da mesma forma que a difusão em meios não porosos como, por exemplo, a difusão na equação do calor. Para valores altos de $\vec{u}$, as componentes de $\underline{K}$ podem ter contribuição muito maior que a difusão molecular (Gray,1975). As componentes do tensor $\underline{K}$, para meios permeáveis homogêneos e isotrópicos, podem ser encontradas em (Bear,1972).

No fluxo unidimensional, o coeficiente de dispersão pode ser calculado por

$$K = D + \alpha \frac{|\vec{u}|}{\phi},$$

onde D representa a difusividade molecular dividida por um fator de tortuosidade e α é chamada dispersividade. No fluxo bidimensional as componentes do tensor de dispersão podem ser calculadas usando as seguintes expressões (Settari,1977):

$$\phi\, K_{xx} = \phi D + \alpha_l \frac{u_x^2}{|u|} + \alpha_t \frac{u_y^2}{|u|},$$

$$\phi\, K_{xy} = \phi\, K_{xy} = (\alpha_l - \alpha_t) \frac{|u_x u_y|}{|u|},$$

$$\phi\, K_{yy} = \phi D + \alpha_l \frac{u_y^2}{|u|} + \alpha_t \frac{u_x^2}{|u|},$$

onde α_l é dispersividade longitudinal e α_t é a dispersividade tranversal.

Juntando as expressões dos termos de acumulação e da massa transportada teremos uma equação diferencial válida para cada um dos componentes do fluxo miscível:

$$\frac{\partial}{\partial t}\,(\phi\, \rho\, w_i) + \nabla \cdot (\ \rho\, w_i\, \vec{u} - \phi\, \rho\, \underline{K} \cdot \nabla w_i) = R_i.$$

É mais comum a formulação da conservação de massa tendo como incógnita a concentração de massa do i-ésimo componente, definida por $C_i = \rho w_i$. Se admitirmos que a porosidade depende apenas da posição, a equação acima se escreva na forma

$$\phi\, \frac{\partial C_i}{\partial t} + \nabla \cdot (\vec{u} C_i) - \nabla \cdot (\ \phi\, \underline{K} \nabla C_i) = R_i. \tag{1.6}$$

As incógnitas da equação (1.6) são as concentrações e a velocidade. Por outro lado, a velocidade está relacionada à pressão através da lei de Darcy, $\vec{u} = -\,\frac{k}{\mu}(\nabla P + \rho\, \vec{g})$. Na hipótese de incompressibilidade, obtemos uma terceira relação :

$$-\nabla \cdot\ \vec{u} = R.$$

Desta maneira, o modelo matemático é formado por estas três equações que relacionam três incógnitas, P e C e a velocidade $\vec{u}$. Como não é possível encontrar uma expressão analítica para a solução , usualmente se utiliza métodos numéricos com discretizações por diferenças finitas, ou elementos finitos, como faz, por exemplo, (Settari,1977), no caso bidimensional.

Em resumo, no sistema de equações diferenciais usado para calcular as concentrações dos componentes do fluido miscível que se desloca num meio poroso, as incógnitas são as funções escalares $C(x,t)$, concentração, $P(x,t)$, pressão, e a função vetorial $\vec{u}(x,t)$, velocidade (entendendo x como um vetor). O sistema é formado pelas seguintes equações:

$$\phi \frac{\partial C_i}{\partial t} + \nabla \cdot (\vec{u} C_i) - \nabla \cdot (\phi \underline{K} \nabla C_i) = R,$$

$$\vec{u} = - \frac{k}{\mu}(\nabla P + \rho \vec{g}), \tag{1.7}$$

$$-\nabla \cdot \vec{u} = R.$$

Juntando as duas últimas equações obtemos uma única equação diferencial na pressão:

$$\nabla \cdot \left[\frac{k}{\mu}(\nabla P + \rho \vec{g}) \right] = R,$$

ou ainda,

$$\nabla \cdot (\frac{k}{\mu} \nabla P) = R - \nabla \cdot \vec{g}.$$

Assim, a pressão é modelada por uma equação do tipo Poisson na qual o termo fonte contempla os efeitos gravitacionais e a produção do componente considerado. Podemos observar que o sistema é desacoplado uma vez que o cálculo da pressão não depende da concentração .

Admitindo que o termo fonte não varia com o tempo, pode-se adotar a seguinte estratégia para resolver o modelo numericamente:

(a) Calcular a pressão resolvendo a equação de Poisson.

(b) Calcular a velocidade $\vec{u}$ usando a pressão na lei de Darcy.

(c) Usar esta velocidade para calcular o tensor coeficiente de difusão $\underline{K}$.

(d) Calcular a concentração pela equação da continuidade (primeira equação do modelo).

Para formular modelos correspondentes a fluxos miscíveis nas aplicações práticas, juntamos ao sistema de equações acima condições adicionais, condições iniciais e condições de contorno, que tornam o problema bem posto. Neste caso, teremos garantia de existência de uma única solução e também a continuidade desta solução com relação aos dados.

Devemos esta definição de problema bem posto ao matemático francês Jacques Hadamard (1865-1963). A condição de continuidade com relação aos dados do problema, que também recebe a denominação de estabilidade, tem um papel importante na sua resolução numérica posto que aí estaremos trabalhando com aproximações . As condições iniciais e de contorno serão definidas pelo problema prático que nos interessa.

De posse do modelo geral para o fluxo miscível, apresentamos alguns modelos particulares, com suas respectivas condições adicionais.

1.4 Solução Analítica num Caso Particular 1D

Nessa seção, apresentamos um caso especial unidimensional no qual é possível encontrar a solução analítica para o fluxo miscível modelado por (1.7). As soluções analíticas, mesmo em casos particulares, são importantes porque podem simular várias situações práticas e também porque podem ser usadas para validar modelos numéricos propostos para os casos mais gerais. A solução analítica também nos permite observar a sua dependência com relação aos parâmetros que aparecem no modelo.

Neste modelo particular, vamos admitir que a porosidade seja constante, os efeitos composicionais e de pressão sobre a densidade sejam desprezíveis (inconpressibilidade) e que o tensor de dispersão $\underline{K}$ seja constatnte. Sob estas hipóteses, as concentrações de cada componente podem ser calculadas por (1.7) na forma mais simples:

$$\phi \frac{\partial C_i}{\partial t} + u \frac{\partial C}{\partial x} = \phi K_l \frac{\partial^2 C}{\partial x^2}, \tag{1.8}$$

onde K_l, coeficiente da dispersão longitudinal, agora um escalar dado por (Lake,1989, pag 36)

$$K_l = D + \alpha \frac{|\vec{u}|}{\phi},$$

como descrito na seção anterior. De fato, podemos verificar que a equação (1.8) é um caso particular da equação (1.7), uma vez que a hipótese de incompressibilidade, $\nabla \cdot \vec{u} = 0$, no caso unidimensional, significa vazão (velocidade de Darcy $\vec{u}$) constante.

1.4.1 Adimensionalização

Mudança de escala é amplamente utilizada em problemas práticos da mecânica dos fluidos, e em particular na Engenharia de Petróleo. Este exemplo vai nos mostrar que esta técnica é mais que uma simples questão de rotina. Numa mudança de escala adequada, usamos novas variáveis adimensionais que além de aliviar a dependência do sistema de

unidades, assumem novos valores em intervalos padronizados, geralmente $(0, 1)$. Uma vez adimensionalizada, os parâmetros que aparecem na equação podem ser agrupados em grupos de escala que têm papel importante nos modelos físicos em escala de laboratório, e são muito úteis na análise das dificuldades em resolver o modelo. Como exemplo clássico deste grupos de escala, citamos o número de Reynolds, bastante popular em mecânica de fluidos.

As variáveis adimensionais da equação (1.8); são, como é usual na área,

$$x_D = \frac{x}{L} \quad \text{e} \quad t_D = \frac{u\,t}{\phi\,L},$$

onde L representa o comprimento do meio poroso. Calculando as derivadas e agrupando os parâmetros da equação teremos a forma adimensionalizada da equação diferencial:

$$\frac{\partial C}{\partial t_D} + \frac{\partial C}{\partial x_D} = \frac{1}{NPe}\,\frac{\partial^2 C}{\partial x_D^2}, \tag{1.9}$$

onde NPe, o número de Peclet, é um grupo de escala definido por:

$$NPe = \frac{u\,L}{\phi\,K_l}.$$

O número de Peclet representa a razão entre os transportes convectivo e difusivo que caracterizam o fluxo.

Uma condição inicial e duas condições de contorno tornam o problema compatível do ponto de vista matemático garantindo a existência de uma única solução .
A equação (1.9), assim como (1.8), é conhecida como equação Difusão-Convecção numa referência ao termo convectivo, derivada de primeira ordem, e ao termo difusivo, derivada de segunda ordem. Neste caso particular, cujos coeficientes são constantes, é possível encontrar a expressão analítica da solução para alguns tipos de condições iniciais e de contorno. Vamos exemplificar com um caso prático.

Consideremos o deslocamento isotérmico de um componente por um outro completamente miscível, unidimensional, num meio permeável homogêneo. A equação difusão-convecção (1.9) descreve a conservação de massa do componente deslocante, cuja concentração de massa é $C(x, t)$. Neste modelo adimite-se que tanto a rocha quanto o fluido são incompressíveis.

Como condições adicionais para resolver a equação , vamos supor que no início do processo exista o componente deslocante numa concentração C_I e que este fluido seja injetado no meio com concentração C_J. Como condição de contorno adicional, vamos supor que para pontos do meio situados a uma distância muito grande do ponto de injeção a concentração seja a mesma inicial. Esta hipótese é válida para tempos não muito longos,

uma vez que o fluido injetado precisa de tempo para atingir os pontos longe da injeção .

A equação diferencial e as condições de contorno requerem três parâmetros independentes C_I, C_J e NPe . Mas podemos também fazer uma adimensionalização na concentração de modo que as condições dependam apenas do Número de Peclet. Se tomarmos a concentração adimensionalizada

$$C_D = \frac{C - C_I}{C_I - C_J}$$

teremos $C_D(C_I) = 0$ e $C_D(C_J) = 1$.

Com estas condições , o modelo completo consiste em encontrar $C_D(x,t)$ que satisfaça às seguintes condições :

MODELO 1: Fluxo Miscível Unidimensional

$$\frac{\partial C_D}{\partial t_D} + \frac{\partial C_D}{\partial x_D} = \frac{1}{NPe}\frac{\partial^2 C_D}{\partial x_D^2} \quad \text{para} \quad x_D > 0 \text{ e } t_D > 0$$

$$C_D\,(x_D, 0) = 0, \quad x_D > 0$$

$$C_D(x_D \longrightarrow \infty, t_D) = 0, \quad t_D \geq 0$$

$$C_D(0, t_D) = 1, \quad t_D \geq 0$$

É possível resolver analiticamente uma equação do tipo difusão-convecção com coeficientes constantes. Uma das técnicas consiste em, inicialmente, transformá-la numa equação puramente difusiva, a equação do calor. A equação difusiva, que neste caso tem coeficientes constantes, pode ser resolvida pelos procedimentos usuais, como por exemplo, série de Fourier ou Transformada de Laplace. Este procedimento pode ser encontrado em livros para solução de Equações Diferenciais Parciais comoe citamos (Farlow,1982).

No caso de nosso interesse, uma mudança nas variáveis independentes, $x = x_D - t_D$ e $t = t_D$, transforma a equação diferencial do Modelo 1, na equação do calor (sugerimos que o leitor realize as derivadas, reescrevendo a equação nas variáveis (x,t)):

$$\frac{\partial C_D}{\partial t} = \frac{1}{NPe}\frac{\partial^2 C_D}{\partial x^2}.$$

Aplicando a Transformada de Laplace na equação difusiva e usando as condições iniciais e de contorno, pode-se mostrar que a solução do MODELO 1 é (veja (Lake,1989) ou (Marle,1981) se estiver interessado em mais detalhes):

$$C_D(x_D, t_D) = \frac{1}{2}\,\mathrm{erfc}\left(\frac{x_D - t_D}{2\sqrt{\frac{t_D}{NPe}}}\right) + \frac{e^{x_D NPe}}{2}\,\mathrm{erfc}\left(\frac{x_D + t_D}{2\sqrt{\frac{t_D}{NPe}}}\right), \tag{1.10}$$

onde a função erro complementar é definida por $\mathrm{erfc}(x) = \frac{2}{\sqrt{\pi}} \int_x^\infty e^{-t^2}\, dt$.

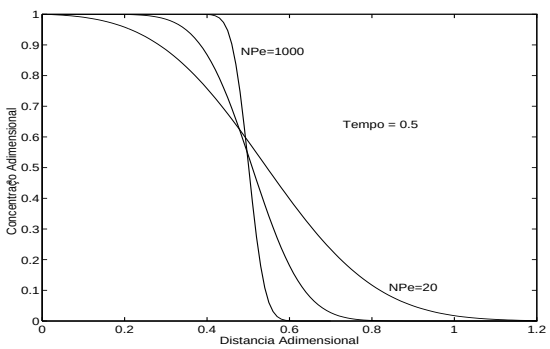

Figura 1.2: Influência do número de Peclet na solução.

A Figura 1.2 ilustra a forte influência do Número de Peclet na forma da solução (1.10). Observamos que para valores pequenos de NPe, que correspondem aos deslocamentos nos quais as forças difusivas predominam, a solução é suave. Quando o Número de Peclet assume valores grandes, o que corresponde aos deslocamentos nos quais o transporte convectivo predomina, a solução apresenta variações bruscas. No limite, Número de Peclet tendendo a infinito, a solução é descontínua. (Questão a se pensar: o que é uma solução descontínua para uma equação diferencial onde se supôs que a função tem duas derivadas??). Voltamos a chamar a atenção para mais uma vantagem da adimensionalização da equação diferencial: deixar visível a influência de apenas um parâmetro, o Número de Peclet.

A Figura 1.3 mostra a evolução da concentração no tempo para o caso particular $NPe = 200$. Nesta figura, pode ser observado que existe uma zona correspondente ao termo difusivo da equação 1.9. Esta zona é transportada pelo termo convectivo da equação diferencial.

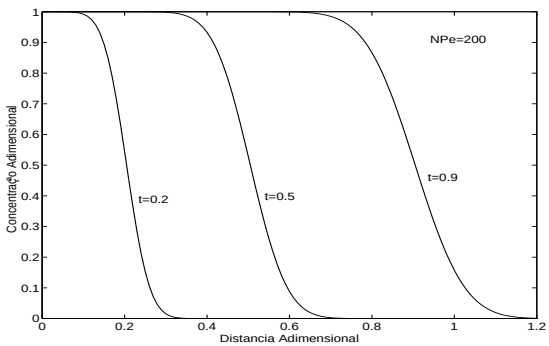

Figura 1.3: Evolução da Concentração para $NPe = 200$.

1.5 Um Modelo para Fluxo Miscível 2D

Nesta seção, voltaremos ao sistema geral (1.7) , definido na seção 1.3, para modelar o fluxo miscível bidimensional.

Na Engenharia do Petróleo, é possível pré-definir a geometria para a localização de poços que serão perfurados num campo de exploração de petróleo. Escolhendo convenientemente esta geometria, pode-se estabelecer condições de contorno de modo que o modelo final seja uma boa representação do processo de recuperação daquele campo. Vamos exemplificar com uma geometria simples que é bastante comum na exploração de reservatórios de petróleo.

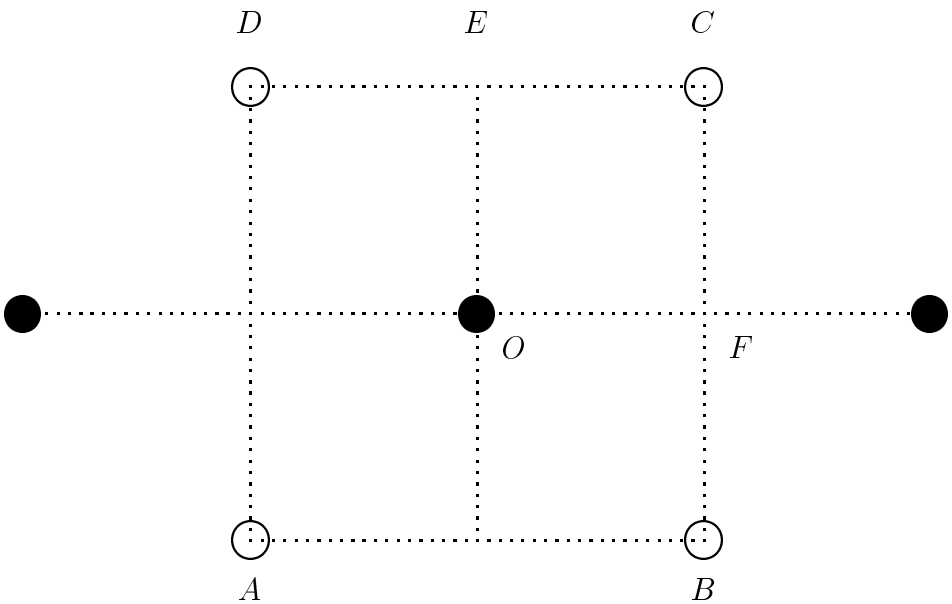

Figura 1.4: Geometria "Five Spot".

Num campo de exploração, existem os poços injetores e produtores. Esta denominação é auto-explicativa: em alguns há injeção (que pode ser, por exemplo, de substâncias que ajudam na retirada dos hidrocarbonetos que estão presos nos poros) e em outros há produção (nos quais é retirado o hidrocarboneto desejado).

Neste exemplo, vamos considerar a geometria que é conhecida como "five spot". Os poços são distribuídos como ilustra a Figura 1.4.
Na Figura 1.4, os círculos negros representam os poços injetores ao passo que os círculos brancos representam os poços nos quais há produção. Nessa distribuição, é possível agrupar os poços em regiões com uma simetria no movimento do fluido, que ocorre dos poços injetores para os produtores.

Consideremos os poços que estão no quadrado ABCD, com centro em O. O fluido injetado em O deve se distribuir igualmente nas direções dos quatro poços que estão localizados em A, B, C, e D. Assim podemos simular o fluxo apenas no quadrante OECF. Ainda mais, devido a simetria, não há fluxo nas arestas OE, EC, FC, e OF.

Para simplificar (o que pode ser obtido pela adimensionalização na direções x e y) , vamos reproduzir o quadrante OECF nos eixos coordenados:

$$\mathcal{R} = \{(x, y) \text{ tais que } \ 0 \leq x \leq 1 \ \text{ e } \ 0 \leq y \leq 1\}\,.$$

Admitindo que não há fluxo nas arestas deste quadrado, podemos escrever matematicamente

$$\frac{\partial C}{\partial x}(x, y, t) = 0 \ \text{ se } \ y = 0 \ \text{ ou } \ y = 1 \ \text{ e } \ \frac{\partial C}{\partial y}(x, y, t) = 0 \ \text{ se } \ x = 0 \ \text{ ou } \ x = 1.$$

Analogamente, ainda usando a simetria do fluxo, podemos adotar as seguintes condições de contorno para a pressão:

$$\frac{\partial P}{\partial x}(x, y, t) = 0 \ \text{ se } \ y = 0 \ \text{ ou } \ y = 1 \ \text{ e } \ \frac{\partial P}{\partial y}(x, y, t) = 0 \ \text{ se } \ x = 0 \ \text{ ou } \ x = 1.$$

A concentração do componente no poço injetor, C_J, assim como a pressão de injeção, P_J, também são condições de contorno conhecidas. Além disto, como a equação da concentração é uma equação de evolução , isto é, inclui uma derivada na variável tempo, torna-se necessário uma condição inicial para a concentração , C_I.

Como foi visto anteriormente, a equação da conservação de massa é

$$\phi\, \frac{\partial \rho}{\partial t} + \nabla \cdot (\rho \vec{u}) = q,$$

onde q representa a fonte de massa. Usando a Lei de Darcy no cálculo de $\vec{u}$, obtemos uma equação que envolve a pressão $P(x,y,t)$ e a densidade $\rho(x,y,t)$:

$$\phi\,\frac{\partial \rho}{\partial t} - \nabla\cdot(\rho\frac{k}{\mu}\nabla P) = q.$$

A definição de compressibilidade relaciona a densidade e a pressão. Para a maioria dos líquidos a relação adotada é

$$c\rho\,\frac{\partial P}{\partial t} = \frac{\partial \rho}{\partial t},$$

onde c é a compressibilidade do fluido. Usando esta relação na equação acima, obtemos a equação da pressão que aparece no Modelo 2 abaixo (Peaceman,1977).

MODELO 2: Fluxo Miscível Bidimensional

(i) Equação da Concentração: (Equação (1.6))

$$\phi\,\frac{\partial C_i}{\partial t} + \frac{\partial}{\partial x}(u_x C) + \frac{\partial}{\partial y}(u_y C) -$$

$$-\phi(\,K_{xx}\,\frac{\partial C}{\partial x} + \,K_{xy}\,\frac{\partial C}{\partial y}) - \phi\,\frac{\partial}{\partial x}(\,K_{xy}\,\frac{\partial C}{\partial x} + \,K_{yy}\,\frac{\partial C}{\partial y}) = R,$$

$$C(0,0,t) = C_J, \quad C(x,y,0) = C_I,$$

$$\frac{\partial C}{\partial x}(x,y,t) = 0 \ \text{ se } \ y = 0 \ \text{ ou } \ y = 1 \ \text{ e } \ \frac{\partial C}{\partial y}(x,y,t) = 0 \ \text{ se } \ x = 0 \ \text{ ou } \ x = 1.$$

(ii) Equação da Pressão:

$$\frac{\partial}{\partial x}\left(\,\frac{k(x,y)}{\mu}\,\frac{\partial P}{\partial x}\right) + \,\frac{\partial}{\partial y}\left(\,\frac{k(x,y)}{\mu}\,\frac{\partial P}{\partial y}\right) = \phi c\,\frac{\partial P}{\partial t} + q,$$

$$\frac{\partial P}{\partial x}(x,y,t) = 0 \ \text{ se } \ y = 0 \ \text{ ou } \ y = 1 \ \text{ e } \ \frac{\partial P}{\partial y}(x,y,t) = 0 \ \text{ se } \ x = 0 \ \text{ ou } \ x = 1,$$

$$P(x,y,0) = P_0(x,y).$$

(ii) Lei de Darcy:

$$u_x = -\frac{k(x,y)}{\mu}\frac{\partial P}{\partial x} \text{ e } u_y = -\frac{k(x,y)}{\mu}\frac{\partial P}{\partial y}.$$

Como foi comentado anteriormente, o tensor $\underline{K}$, uma matriz 2×2 no fluxo bidimensional, responsável pela difusão, também depende de $\vec{u}$, para valores grandes desta velocidade. Esta dependência, no caso bidimensional, pode ser equacionada por (Settari,1977):

$$\phi\, K_{xx} = \phi D + \alpha_l \frac{u_x^2}{|u|} + \alpha_t \frac{u_y^2}{|u|},$$

$$\phi\, K_{xy} = \phi\, K_{xy} = (\alpha_l - \alpha_t)\frac{|u_x u_y|}{|u|},$$

$$\phi\, K_{yy} = \phi D + \alpha_l \frac{u_y^2}{|u|} + \alpha_t \frac{u_x^2}{|u|}.$$

Capítulo 2

Fluxo Bifásico: Modelos Não-Lineares

O principal objetivo da simulação de reservatórios é estudar o deslocamento, no meio poroso, do óleo pela água ou pelo gás. Em geral, estes componentes são miscíveis e temos que considerar o movimento simultâneo das duas fases no meio poroso. Vamos supor nestas notas que não há transferência de massa entre duas fases no meio poroso.

Seguindo um caminho análogo ao usada para modelar o fluxo monofásico, no qual os componentes são miscíveis, o procedimento para estudar o deslocamento macroscópico de fluidos imiscíveis se apoia na lei de Darcy e nas equações de conservação de massa de cada uma das fases.

2.1 Equações gerais

Nesta seção , apresentamos as equações diferenciais básicas para apresentar alguns modelos de interesse prático. Os modelos serão apresentados nas seções seguintes. Para não tornar a notação muito carregada, nestas notas estaremos abordando apenas fluidos bifásicos, isto é, duas fases, como por exemplo água e óleo que não se misturam. Entretanto, as mesmas idéias se aplicam para fluidos com três ou mais fases. O petróleo está armazenado num reservatório com uma geometria supostamente conhecida. Inicialmente, existe uma distribuição de saturação dos dois fluidos, que podem ser por exemplo, água-óleo, ou gás-óleo. Para não particularizar vamos chamar Fluido 1 e Fluido 2, denotando com subíndices 1 e 2 suas respectivas propriedades. A produção do petróleo é gerada por algumas condições de contorno no reservatório, como por exemplo a injeção de água em alguns poços .

Na simulação do processo de produção gostaríamos de conhecer, em cada ponto do reservatório e para cada instante de tempo, os seguintes parâmetros dos fluidos (sob a hipótese de serem desprezíveis os efeitos da temperatura):

(a) Pressão de cada um dos fluidos: P_1 e P_2;

(b) Velocidade de cada um dos fluidos: u_1 e u_2;

(c) Saturação de cada um dos fluidos: S_1 e S_2;

(d) Densidade de cada um dos fluidos: ρ_1 e ρ_2;

(e) Viscosidade de cada um dos fluidos: μ_1 e μ_2.

Sendo assim, numa geometria bidimensional, na qual as velocidades são vetores com duas componentes, temos de encontrar, para cada (x, y, t), doze incógnitas. O equacionamento do problema será descrito a seguir, nas três próximas seções.

2.1.1 Lei de Darcy

Como já comentamos anteriormente, a lei de Darcy pode ser generalizada para fluxos de mais de uma fase, desde que consideremos a relação entre as velocidades de fluxo (vazão) e o gradiente de pressão, para cada uma das fases. Para esta generalização foi utilizado o conceito de permeabilidade relativa da fase, como escrito na seção 1.1. No caso bifásico, bidimensional, considerando efeitos gravitacionais, a lei de Darcy para cada uma das fases será:

$$\vec{u_1} = -\frac{k k_{r_1}}{\mu_1} (\nabla p_1 - \rho_1 \vec{g}) \tag{2.1}$$

$$\vec{u_2} = -\frac{k k_{r_2}}{\mu_2} (\nabla p_2 - \rho_2 \vec{g}), \tag{2.2}$$

nas quais as permeabilidades relativas são denotados por $k_{r_1}(S_1)$ e $k_{r_2}(S_2)$, e os outros parâmetros já foram usados repetidas vezes nestas notas: permeabilidade absoluta, viscosidade, pressão, densidade e aceleração da gravidade.

2.1.2 Equação da Continuidade

Da definição de saturação de cada uma das fases temos

$$S_1 + S_2 = 1. \tag{2.3}$$

Por outro lado, levando em consideração a conservação de massa, o balanço de massa de cada uma das fases nos dá:

$$\nabla \cdot (\rho_1 \vec{u_1}) + \Phi \frac{\partial(\rho_1 S_1)}{\partial t} = 0, \tag{2.4}$$

$$\nabla \cdot (\rho_2 \vec{u_2}) + \Phi \frac{\partial(\rho_2 S_2)}{\partial t} = 0. \tag{2.5}$$

Lembramos que o operador divergente de um campo vetorial $\vec{u} = (u_x, u_y)$ num sistema cartesiano é igual a

$$\nabla \cdot \vec{u} = \frac{\partial u_x}{\partial x} + \frac{\partial u_y}{\partial y}.$$

2.1.3 Pressão Capilar

Numa mistura de dois fluidos imiscíveis a diferença entre as pressões das duas fases é chamada pressão capilar,

$$p_2 - p_1 = p_c(S_1).$$

Em equilíbrio, a diferença entre as pressões das fases é proporcional à curvatura da interface que existe entre os dois fluidos imscíveis. A pressão maior está no fluido que ocupa a região côncava. Podemos visualizar através das bolhas que se formam quando misturamos óleo de cozinha com água. Alguns autores, inspirados por Leverett (1940), propõem uma expressão para a pressão capilar na qual a influência da saturação fica caracterizada por uma função $J(S)$, a função de Leverett. Neste caso a expressão da pressão capilar é:

$$p_c(S_1) = p_2 - p_1 = \sigma cos(\alpha)\frac{\phi}{k}J(S_1), \tag{2.6}$$

onde σ é a tensão superficial, α mede o ângulo de contato entre as fases (veja (Lake,1989) para maiores esclarecimentos) e os outros parâmetros, já definidos anteriormente, são porosidade e permeabilidade. Na simulação do fluxo bifásico, em geral, admite-se que a curva de pressão capilar é conhecida, obtida experimentalmente.

Nesta altura, temos um total de oito equações , quatro provenientes das componentes das equações vetoriais $(2.1) - (2.2)$, e as restantes de $(2.3) - (2.6)$. As quatro equações que faltam para compatibilizar o número de equações com o número de incógnitas são as *equações de estado*. Supondo que o fluxo é isotérmico, as equações de estado nos dizem como as densidades e viscosidades variam com a pressão, isto é, densidades e viscosidades são descritas por funções :

$$\rho_1 = \rho_1(p_1), \quad \rho_2 = \rho_2(p_2),$$

$$\mu_1 = \mu_1(p_1), \quad \mu_2 = \mu_2(p_2).$$

Por simplicidade, vamos supor nestas notas que as densidades e viscosidades são constantes conhecidas, isto é, os fluidos são incompressíveis. Sendo assim o sistema geral é composto por oito equações nas incógnitas pressões, saturações e velocidades.

2.2 Fluxo Bifásico Unidimensional

No caso unidimensional as velocidades são funções escalares das variáveis espaço e tempo. Sendo assim o sistema de equações descrito na seção anterior toma a seguinte forma (na qual o eixo-x aponta para baixo):

$$u_1 = -\frac{kk_{r_1}}{\mu_1}\left(\frac{\partial p_1}{\partial x} - \rho_1 g\right), \tag{2.7}$$

$$u_2 = -\frac{kk_{r_2}}{\mu_2}\left(\frac{\partial p_2}{\partial x} - \rho_2 g\right). \tag{2.8}$$

$$S_1 + S_2 = 1, \tag{2.9}$$

$$\frac{\partial u_1}{\partial x} + \phi\,\frac{\partial S_1}{\partial t} = 0, \tag{2.10}$$

$$\frac{\partial u_2}{\partial x} + \phi\,\frac{\partial S_2}{\partial t} = 0, \tag{2.11}$$

$$p_2 - p_1 = p_c(S_1). \tag{2.12}$$

Como mais uma simplificação , vamos admitir que os efeitos gravitacionais sejam desprezíveis. Esta hipótese se aplica, por exemplo, a reservatórios petrolíferos nos quais uma dimensão no plano horizontal é muito maior que as outras duas dimensões no espaço .

Para apresentar uma versão mais compacta do modelo vamos realizar algumas manipulações matemáticas nas equações $(2.7) - (2.12)$. Inicialmente, vamos introduzir as seguintes variáveis

$u = u_1 + u_2$	Velocidade Total
$F_1 = \frac{u_1}{u}$	Fluxo Fracionário da Fase 1
$F_2 = 1 - F_1 = \frac{u_2}{u}$	Fluxo Fracionário da Fase 2.

Explicitando os termos da pressão capilar nas leis de Darcy $(2.7) - (2.8)$ e substituindo as velocidades das fases por sua parcelas na velocidade total, obtidas pelos fluxos fracionários, temos

$$\frac{\partial p_1}{\partial x} = -\frac{\mu_1 F_1 u}{kk_{r_1}},$$

$$\frac{\partial p_2}{\partial x} = -\frac{\mu_2(1 - F_1)u}{kk_{r_2}}.$$

Para simplificar, eliminaremos, de agora em diante, o subíndice de S_1, isto é, denotaremos $S(x,t) = S_1(x,t)$.

Subtraindo a primeira equação da segunda membro a membro, usando a definição da pressão capilar (2.12), e explicitando o fluxo fracionário F_1 na expressão final teremos:

$$F_1 = f_1 + g_1 \frac{\partial S}{\partial x}, \tag{2.13}$$

onde

$$f_1(S) = \frac{k_{r_1}}{k_{r_1} + \frac{u_1}{u_2} k_{r_2}} \quad \text{e} \quad g_1(S) = \frac{k k_{r_2}}{\mu_2} \cdot \frac{f_1}{u} \frac{\partial P_c}{\partial S}.$$

Somando as equações que expressam a conservação de massa das duas fases, (2.10) − (2.11), e lembrando que a soma das saturações é igual a 1, obtemos

$$\frac{\partial u}{\partial x} = 0,$$

que nos diz que a velocidade total de fluxo não depende da posição, o que caracteriza incompressibilidade do fluido.

Finalmente substituindo u_1 por uf_1 em (2.10) teremos apenas uma equação que sintetiza o sistema inicial e as hipóteses adotadas:

$$\frac{u}{\phi} \frac{\partial F_1}{\partial x} + \frac{\partial S}{\partial t} = 0. \tag{2.14}$$

Para obter a forma adimensional desta equação faremos a seguinte mudança nas variáveis independentes:

$$x_D = \frac{x}{L} \quad \text{e} \quad t_D = \int_0^t \frac{u}{\phi L} dt,$$

onde L é o comprimento do meio poroso. Na adimensionalização do tempo usamos a integral porque, em geral, a velocidade total pode depender do tempo. Calculando as derivadas nestas novas variáveis e usando a expressão da pressão capilar definida em (2.6) obtemos a forma adimensional da equação (2.14), na qual substituímos a expressão de F_1, dada em (2.13) :

$$\frac{\partial S}{\partial t_D} + \frac{\partial}{\partial x_D} f_1(S) + \frac{1}{N_{RL}} \frac{\partial}{\partial x_D} \left(g(S) \frac{\partial S}{\partial x_D} \right) = 0, \tag{2.15}$$

onde

$$N_{RL} = \frac{u \mu_2 L}{\sigma cos\alpha \sqrt{\phi k}} \quad \text{e}$$

$$g(S) = - k_{r_2}(S) \cdot f_1(S) \cdot J^{'}(S).$$

N_{RL} é chamado número de Rapoport-Leas e tem como significado físico a relação entre as forças viscosas e as forças capilares, macroscopicamente. O número de Rapoport-Leas faz o papel do número de Peclet usado no fluxo monofásico, equação (1.9). O segundo termo em (2.15), no qual a saturação aparece sob derivada de primeira ordem, é responsável pelo transporte do fluido. É usual denominá-lo como termo advectivo, ou convectivo. Por outro lado, no último termo desta equação a saturação aparece sob uma derivada de segunda ordem, sendo portanto o termo responsável pela difusão; ele é, em geral denominado termo difusivo, ou ainda dispersivo.

Nas duas próximas seções detalharemos dois casos de interesse prático. No primeiro caso o efeito difusivo pode ser desprezado frente a influência do termo de transporte. O resultado é uma equação conhecida como Buckley-Leverett. Por outro lado, a equação com os dois termos, que será comentada na Seção 2.4, é conhecida como Rapoport-Leas.

2.3 A Equação de Bukley-Leverett

Os valores do comprimento do meio poroso, L, são da ordem de $10^2 m - 10^3 m$ na escala dos reservatórios de petróleo. Desta maneira N_{RL}, definido em (2.15), assume valores entre $10^{-2} - 10^{-3}$ o que faz com que o transporte de massa devido à derivada das forças capilares seja desprezível quando comparado com o transporte convectivo. Nestas condições, (2.15) se reduz a:

$$\frac{\partial S}{\partial t} + \frac{\partial f_1(S)}{\partial x} = 0, \tag{2.16}$$

onde

$$f_1(S) = \frac{k_{r_1}(S)}{k_{r_1}(S) + M\ k_{r_2}(S)}.$$

Na equação acima, denotamos por M a razão entre as viscosidades das fases 2 e 1. Esta equação foi apresentada por Buckley-Leverett (1942), recebendo posteriormente o nome de seus autores, sendo bem popular na Engenharia do Petróleo por sua aplicação na simulação da recuperação de óleo pela injeção de água, processo bastante usado na indústria do petróleo.

Embora não exista uma expressão para as permeabilidades relativas, várias funções empíricas são propostas para as curvas de permeabilidades relativas água-óleo, a aplicação mais comum desta teoria (veja, por exemplo (Honarpour,1982)). Quando são necessárias expressões analíticas, as seguintes formas exponenciais são empregadas:

$$k_{r_1}(S) = k^0_{r_1} S^{n_1}, \tag{2.17}$$

$$k_{r_2}(S) = k^0_{r_2}(1-S)^{n_2}.$$

Estas equações ajustam a maioria dos dados experimentais e separam as curvaturas, através dos expoentes n_1 e n_2, e os pontos finais das curvas, através de $k^0_{r_1}$ e $k^0_{r_2}$. O ajuste das curvas é feito nestes quatro parâmetros, dois para cada curva. Observe que, aplicando o logarítmo, passamos para um simples ajuste linear, talvez por isto estas expressões são tão populares. Nas equações acima usamos S na sua forma normalizada, conhecida como saturação reduzida porque o efeito das saturações residuais é eliminado. Assim, S varia entre 0 e 1. Com as expressões exponenciais acima podemos também obter uma expressão analítica para a curva fluxo fracionário. Duas formas comuns, principalmente em trabalhos da matemática, são apresentadas em (Young,1984):

$$f_1(S) = \frac{S^2}{S^2 + M(1-S)^2}, \tag{2.18}$$

$$f_1(S) = \frac{S^3}{S^3 + M(1-S)^3},$$

onde M, que representa a razão entre as viscosidades da água e do óleo, tem influência no formato da curva. Nas Figuras $2.1 - 2.3$ ilustramos formas típicas das permeabilidades relativas e funções de fluxo fracionário cúbico e quadrático para $M = 0.5$, respectivamente.

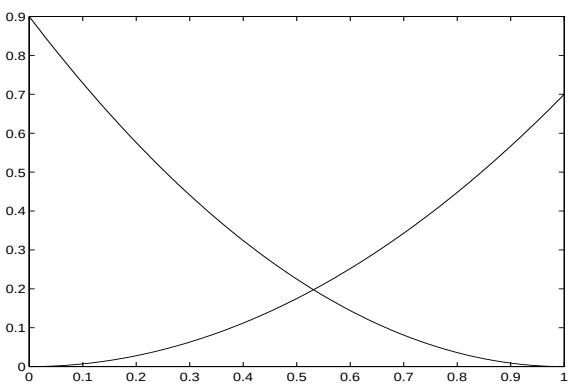

Figura 2.1: Permeabilidades relativas.

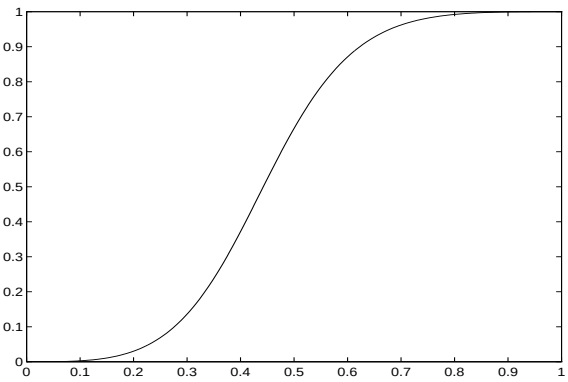

Figura 2.2: Fluxo fracionário cúbico.

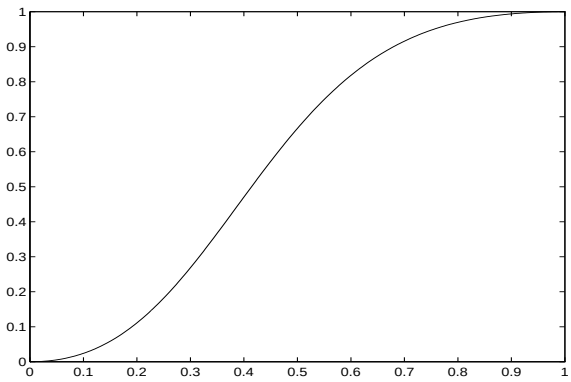

Figura 2.3: Fluxo fracionário quadrático.

Como a equação diferencial (2.16) contém derivadas de primeira ordem no tempo e no espaço, as condições adicionais necessárias para definir uma solução única são : uma condição inicial e uma condição de contorno. Resumimos a seguir o que foi estabelecido como terceiro modelo usado nestas notas. A incógnita neste modelo é a saturação da fase 1, $S(x,t) = S_1(x,t)$.

MODELO 3: Fluxo Bifásico Unidimensional, com Difusão Desprezível

$$\frac{\partial S}{\partial t} + \frac{\partial f_1(S)}{\partial x} = 0, \quad x > 0 \quad \text{e} \quad t > 0, \tag{2.19}$$

$$S(x,0) = S_I, \quad x \geq 0, \tag{2.20}$$

$$S(0,t) = S_J, \quad t \geq 0. \tag{2.21}$$

Uma equação diferencial do tipo apresentada no Modelo 3 é classificada na matemática como Lei de Conservação Escalar não Linear. É possível mostrar que, mesmo que as condições iniciais e de contorno sejam suaves, a solução apresentará descontinuidades a partir de algum valor do tempo (Lax,1972).

Soluções descontínuas não podem satisfazer equações diferencias no sentido clássico, uma vez que não existe derivada em pontos de descontinuidade. A formulação fraca da equação diferencial permite a definição de solução fraca para o problema. A contrapartida é a perda da unicidade. Outras condições têm de ser impostas, neste caso a condição de entropia, para definir qual é a solução fisicamente correta. Aspectos matemáticos, teóricos e práticos, das leis de conservação não lineares podem ser encontrados, além do já citado trabalho de Lax, em, por exemplo, (Smoller,1983) e (LeVeque,1990).

A título de ilustração , apresentamos na Figura 2.4 o gráfico das soluções semi-analíticas do Modelo 3, no tempo $t = 0.5$ e para $M = 0.4$ e $M = 0.7$. Entendemos como solução semi-analítica aquela que é calculada com base nos resultados da teoria, aplicando o método das características, mas na qual foram necessárias aproximações usando métodos numéricos para se obter efetivamente a solução . Este procedimento de solução é diferente das técnicas de solução numérica, nas quais a derivada é discretizada, como nos métodos de diferenças finitas e elementos finitos.

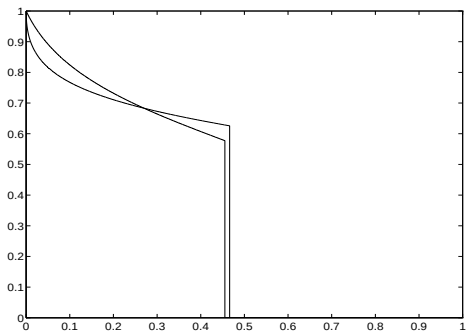

Figura 2.4: Solução de Buckley-Leverett.

2.4 A Equação de Rapoport - Leas

Se o número Rapoport-Leas, definido em (2.15), não for suficientemente grande para podermos desprezar os efeitos difusivos, a equação modelo para o fluxo bifásico, citada anteriormente em (2.15), é:

$$\frac{\partial S}{\partial t_D} + \frac{\partial}{\partial x_D} f_1(S) + \frac{1}{N_{RL}} \frac{\partial}{\partial x_D} \left(g(S) \frac{\partial S}{\partial x_D} \right) = 0, \tag{2.22}$$

$$N_{RL} = \frac{u \mu_2 L}{\sigma cos\alpha \sqrt{\phi k}} \quad \text{e} \tag{2.23}$$

$$g(S) = - \, k_{r_2}(S) \cdot f_1(S) \cdot J^{'}(S). \tag{2.24}$$

Esta equação é usada, por exemplo, na simulação de experimentos de deslocamento de uma fase por outra, em laboratório. Neste caso, o comprimento do meio poroso, L, não é grande. Amostras curtas tem comprimentos entre $5cm - 7cm$, e mesmo as amostras longas dificilmente passam de 1 *metro*. Em alguns casos, pode-se contrabalançar esta restrição em L com vazões, $\vec{u}$, maiores de modo que o numerador de N_{RL} seja suficientemente grande para permitir o uso da Equação de Buckley-Leverett na simulação. Nem sempre esta simplificação é bem sucedida devido às instabilidades do deslocamento que dão origem aos "fingers".

Do ponto de vista matemático, (2.22) é uma equação diferencial parcial parabólica, não -linear, de segunda ordem.

Em problemas de deslocamento da fase 2, o óleo, pela fase 1, a água, por exemplo, precisamos especificar condições de contorno na entrada do meio poroso, $x = 0$, e na saída do meio poroso, $x = L$, além da condição inicial.

Na seção de entrada podemos especificar a razão entre as velocidades das fases, ou das saturações, ou ainda uma combinação destas. Em (Barenblat,1990) o assunto é detalhado e adotamos estes argumentos como condições de contorno no Modelo 4. A condição na entrada corresponde à velocidade nula da fase 2 nesta face. Por outro lado, na face de saída a condição corresponde à continuidade na presssão.

MODELO 4: Fluxo Bifásico Unidimensional

$$\frac{\partial S}{\partial t_D} + \frac{\partial}{\partial x_D} f_1(S) + \frac{1}{N_{RL}} \frac{\partial}{\partial x_D} \left(g(S) \frac{\partial S}{\partial x_D} \right) = 0, \quad 0 \leq x \leq 1, \;\; t \geq 0, \tag{2.25}$$

$$S(x, 0) = S_I, \quad 0 \leq x \leq 1, \tag{2.26}$$

$$S(0, t) = S_J, \quad t \geq 0, \tag{2.27}$$

$$S(1, t) = S_I, \quad t \geq 0. \tag{2.28}$$

Uma expressão comum para $g(S)$ é:

$$g(S) = -\frac{1}{N_{RL}} \frac{(1-S)^2}{1.5S^2 + (1-S)^2},$$

cujo gráfico vemos a seguir:

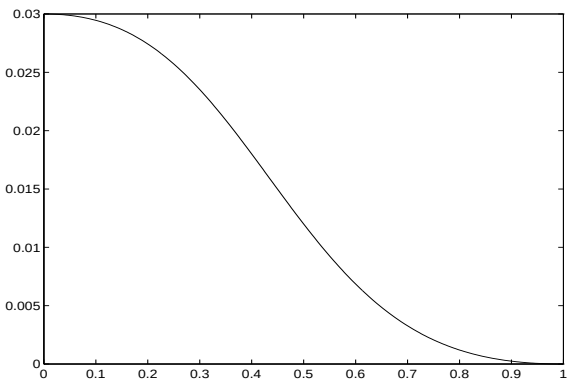

Figura 2.5: Gráfico de $g(S)$ para $\frac{1}{N_{RL}} = 0.03$.

Capítulo 3

Interpolação Polinomial

Neste capítulo vamos fazer uma breve introdução ao problema de interpolação polinomial, apresentando dois métodos de construção do polinômio interpolador e a análise de erro da interpolação polinomial. Os conceitos e os resultados das próximas seções serão funtamentais para o estudo dos Métodos de Elementos Finitos que iremos estudar nos capítulos que seguem. Podemos indicar as referências (Conte, 1980) e (Rappaz, 1998) para um estudo mais detalhado sobre interpolação polinomial.

3.1 O Problema de Interpolação Polinomial

Seja $f : [a, b] \longrightarrow I\!R$ uma função contínua e Π uma partição qualquer de $[a, b]$, isto é, $\Pi : a = x_0 < x_1 < \cdots < x_n = b$. Queremos construir um polinômio de grau $\leq n$ que satisfaça as condições de interpolação pura, isto é,

$$p(x_i) = f(x_i) \quad ; \quad i = 0,\ 1,\ \cdots, n \ . \tag{3.1}$$

O polinômio p construido com as condições acima é denominado de polinômio interpolador da função f nos pontos da partição Π. A seguir mostraremos a **Unicidade do Polinômio Interpolador**

Vamos considerar que existam dois polinômios de grau $\leq n$, p e q, que interpolam a função f nos pontos da partição Π, isto é,

$$p(x_i) = f(x_i) \quad ; \quad i = 0,\ 1,\ \cdots, n \ , \tag{3.2}$$

$$q(x_i) = f(x_i) \quad ; \quad i = 0,\ 1,\ \cdots, n \ . \tag{3.3}$$

Desse modo, temos que o polinômio $r = p - q$ que é de grau $\leq n$ possui $n + 1$ raízes distintas, que são os pontos de interpolação $x_0,\ \cdots,\ x_n$. De fato

$$r(x_i) \;=\; p(x_i) \;-\; q(x_i) \;=\; 0 \quad ; \quad i \;=\; 0,\; 1,\; \cdots, n \;\; . \tag{3.4}$$

Portanto, temos que o polinômio r é identicamente nulo, e podemos concluir que $p \;=\; q$. Provamos desse maneira a unicidade do polinômio interpolador.

Podemos observar que o Problema de Interpolação Polinomial consiste em encontrar um polinômio $p \;\in\; \mathcal{P}_n([a,b])$ satisfazendo as condições (3.1) , onde $\mathcal{P}_n([a,b])$ é o espaço vetorial real dos polinômios de grau $\leq n$ definidos em $[a,b]$.

A seguir, vamos apresentar alguns métodos para a **construção do polinômio interpolador** que são baseados simplesmente na escolha da base para o espaço vetorial $\mathcal{P}_n([a,b])$. Sabemos que dada uma partição Π de $[a,b]$ o polinômio interpolador é único, independendo do método pelo qual foi construído.

3.1.1 Método da Matriz

Consideremos o espaço vetorial $\mathcal{P}_n([a,b])$ com a base canônica, isto é,

$$\beta \;=\; \{\; 1,\; x,\; x^2,\; \cdots, x^n \;\} \;\; ,$$

desse modo temos que $\forall \;\; p \;\in\; \mathcal{P}_n([a,b])$ é escrito da seguinte forma:

$$p(x) \;=\; c_0 \;+\; c_1 x \;+\; \cdots \;+\; c_n x^n \;\; , \tag{3.5}$$

onde

$$\vec{c} \;=\; \begin{bmatrix} c_0 \\ c_1 \\ \vdots \\ c_n \end{bmatrix} \qquad \in \; I\!R^{n+1}$$

é o vetor de coordenadas de p com relação à base canônica β .

Queremos encontrar um polinômio $p \in \; \mathcal{P}_n([a,b])$ satisfazendo as condições de interpolação pura (3.1) . Considerando que o polinômio p está escrito na forma (3.5) , temos as seguintes equações dadas pelos condições (3.1) :

$$p(x_i) \;=\; c_0 \;+\; c_1 x_i \;+\; \cdots \;+\; c_n x_i^n \;=\; f(x_i) \qquad , \qquad i \;=\; 0,\; 1,\; \cdots,\; n \;\; . \tag{3.6}$$

Desse modo, para cada ponto $x_i \;\in\; \Pi$ para $i \;=\; 0,\; 1,\; \cdots,\; n$ as equações (3.6) formam um sistema linear com $n \;+\; 1$ equações a $n \;+\; 1$ incognitas $c_0,\; \cdots,\; c_n$.

Vamos escrever as equações (3.6) na forma matricial. Assim a matriz do sistema linear fica dada por :

$$A = \begin{bmatrix} 1 & x_0 & \cdots & x_0^n \\ 1 & x_1 & \cdots & x_1^n \\ \vdots & \vdots & & \vdots \\ 1 & x_i & \cdots & x_i^n \\ \vdots & \vdots & & \vdots \\ 1 & x_n & \cdots & x_n^n \end{bmatrix} \tag{3.7}$$

que é denominada **Matriz de Vandermonde** associada aos pontos $x_0,\ x_1,\ \cdots,\ x_n$. O vetor do lado direito do sistema linear fica dado por :

$$\vec{b} = \begin{bmatrix} f(x_0) \\ f(x_1) \\ \vdots \\ f(x_n) \end{bmatrix} \qquad \in \mathbb{R}^{n+1}$$

Assim o sistema linear definido em (3.6) pode ser reescrito da seguinte forma :

$$A.\vec{c} = \vec{b} \ . \tag{3.8}$$

Portanto, o problema de Interpolação Polinomial se resume na resolução de um sistema linear de ordem $n + 1$, cuja solução é o vetor de coordenadas do polinômio interpolador, da função f nos pontos da partição Π , com relação à base canônica para $\mathcal{P}_n([a,b])$. Como o polinômio interpolador é único, e fica bem determinado pelo vetor de coordenadas, podemos concluir que o sistema linear dado pela matriz de Vandermonde possui solução única.

Sabemos que o custo computacional para obtermos a solução numérica do sistema linear (3.8) pelo Método de Decomposição LU , ou pelo Método de Eliminação Gaussiana, é da ordem de $(\ n + 1\ )^3/3$. Podemos dizer que todo custo computacional para a obtenção do polinômio interpolador pelo Método da Matriz está na resolução do sistema linear, pois a avaliação do polinômio pode ser feita de maneira eficiente e barata pela regra de Horner.

Sabemos que a estabilidade do sistema linear definido pela matriz de Vandermonde está relacionada com a escolha dos pontos de interpolação, bem como com a ordem da matriz. A seguir vamos apresentar um método mais elegante de construção do polinômio interpolador que não necessita da resolução de um sistema linear. Portanto, não temos

que nos preocupar com a estabilidade da solução numérica e nem com o fato de termos que armazenar uma matriz cheia, como é o caso da matriz de Vandermonde.

3.1.2 Base de Lagrange

Dada uma partição qualquer de $[a,b]$, isto é, $\Pi : a = x_0 < x_1 < \cdots < x_n = b$, queremos construir polinômios $\mathcal{L}_i$ para $i = 0, 1, \cdots, n$, de grau n que satisfazem as seguintes condições

$$\mathcal{L}_i(x_j) = \begin{cases} 1 & \text{se } i = j \\ 0 & \text{se } i \neq j \, . \end{cases}$$

Como $\mathcal{L}_i$ é um polinômio de grau n com n raízes distintas nos pontos $x_0, x_1, \cdots, x_{i-1}, x_{i+1}, \cdots, x_n$, podemos escrevê-lo da seguinte forma:

$$\mathcal{L}_i(x) = c_i(x - x_0)(x - x_1)\cdots(x - x_{i-1})(x - x_{i+1})\cdots(x - x_n)$$

e impondo a condição de que $\mathcal{L}_i(x_i) = 1$ obtemos o valor para a constante c_i :

$$c_i = \frac{1}{(x_i - x_0)(x_i - x_1)\cdots(x_i - x_{i-1})(x_i - x_{i+1})\cdots(x_i - x_n)} \, .$$

Podemos mostrar que o conjunto $\Gamma = \{ \mathcal{L}_0, \cdots, \mathcal{L}_n \}$ é linearmente independente no espaço vetorial $\mathcal{P}_n([a,b])$ que tem dimensão $n + 1$, portanto pode ser considerado como uma base para $\mathcal{P}_n([a,b])$. Neste caso, dizemos que os polinômios $\mathcal{L}_0, \cdots, \mathcal{L}_n$ formam a **base de Lagrange** para $\mathcal{P}_n([a,b])$ associada aos pontos $x_0, x_1, \cdots, x_n$.

Desse modo, temos que $\forall \; p \in \mathcal{P}_n([a,b])$ é escrito da seguinte forma:

$$p(x) = \alpha_0\mathcal{L}_0(x) + \alpha_1\mathcal{L}_1(x) + \cdots + \alpha_n\mathcal{L}_n(x) \, , \tag{3.9}$$

onde

$$\vec{\alpha} = \begin{bmatrix} \alpha_0 \\ \alpha_1 \\ \vdots \\ \alpha_n \end{bmatrix} \in \mathbb{R}^{n+1}$$

é o vetor de coordenadas de p com relação à base Γ.

3.2 Interpolação Polinomial de Lagrange

Seja $f : [a,b] \longrightarrow I\!R$ uma função contínua e Π uma partição qualquer de $[a,b]$, isto é, $\Pi : a = x_0 < x_1 < \cdots < x_n = b$. Queremos construir um polinômio $p \in \mathcal{P}_n([a,b])$, considerando o espaço vetorial $\mathcal{P}_n([a,b])$ com a base de Lagrange associada aos pontos de interpolação e que satisfaça as condições de interpolação pura (3.1), isto é,

$$p(x_i) = f(x_i) \quad ; \quad i = 0,\ 1,\ \cdots, n \ .$$

O polinômio p construído com as condições acima é denominado polinômio interpolador de Lagrange da função f nos pontos da partição Π. Considerando que o polinômio p é representado como em (3.9) e impondo as condições de interpolação pura, tem-se que :

$$\sum_{j=0}^{n} \alpha_j \, \mathcal{L}_j(x_i) = f(x_i) \qquad ; \qquad i = 0,\ 1,\ \cdots,\ n \ . \tag{3.10}$$

Como $\mathcal{L}_j(x_i) = \delta_{ij}$ temos que as coordenadas do polinômio interpolador de Lagrange são dadas por:

$$\alpha_i = f(x_i) \qquad ; \qquad i = 0,\ 1,\ \cdots,\ n \ .$$

Desse modo, o polinômio interpolador fica escrito da seguinte forma:

$$p(x) = \sum_{j=0}^{n} f(x_j)\, \mathcal{L}_j(x) \qquad ; \qquad \forall \ x \in [a,b] \ . \tag{3.11}$$

Podemos observar que as coordenadas do polinômio interpolador de Lagrange são obtidas sem nenhum custo computacional. Entretanto todo custo operacional está na construção dos polinômios de Lagrange, $\mathcal{L}_i$ para $i = 0,\ 1,\ \cdots,\ n$, associados aos pontos de interpolação . Neste caso, como não temos que resolver um sistema linear evitamos a instabilidade numérica na construção do polinômio interpolador.

3.3 Análise de Erro da Interpolação Polinomial

Teorema 3.1 : Seja $f \in \mathcal{C}^{(n+1)}([a,b])$ e $p_n \in \mathcal{P}_n([a,b])$ o polinômio interpolador da função f nos pontos da partição $\Pi : a = x_0 < x_1 < \ldots < x_n = b$. Então, para todo $x \in [a,b]$, existe pelo menos um ponto $\xi = \xi(x) \in (a,b)$ tal que

$$e(x) = f(x) - p_n(x) = \frac{W(x)}{(n+1)!}\, f^{(n+1)}(\xi) \ , \tag{3.12}$$

onde $W(x) = (x - x_0)(x - x_1) \cdots (x - x_n)$.

Considerando uma partição regular de $[a, b]$, isto é, $h = x_{k+1} - x_k$ para todo $k = 0, 1, \cdots, (n-1)$, podemos mostrar que a função W satisfaz a desigualdade:

$$| W(x) | \leq \frac{h^{n+1}}{4} \; n! \quad ; \quad \forall \; x \in [a, b] \; . \tag{3.13}$$

Assim, temos a seguinte **Estimativa para o Erro da Interpolação Polinomial** :

$$| e(x) | \leq \frac{h^{n+1}}{4(n+1)} \; \max\{ \; \left| f^{(n+1)}(x) \right| \quad ; \quad a \leq x \leq b \; \} \; . \tag{3.14}$$

A estimativa dada por (3.14) tem uma utilização prática maior do que a expressão para o erro (3.12) , como veremos mais adiante.

Para a demonstração do Teorema 3.1 vamos precisar dos seguintes teoremas:

Teorema 3.2 : (Teorema de Rolle) Seja $\varphi : [a, b] \longrightarrow I\!R$ uma função contínua e diferenciável em (a, b) . Se $\varphi(a) = \varphi(b)$, então existe pelo menos um ponto $\xi \in (a, b)$ tal que $\varphi'(\xi) = 0$.

Teorema 3.3 : (Extensão do Teorema de Rolle) Seja $\varphi : [a, b] \longrightarrow I\!R$ uma função de classe $\mathcal{C}^{(n+1)}([a, b])$. Se a função φ possui $(n + 2)$ zeros em $[a, b]$, então existe pelo menos um ponto $\xi \in (a, b)$ tal que $\varphi^{(n+1)}(\xi) = 0$.

Demonstração do Teorema 3.1 : considere um ponto $\overline{x} \in (a, b) \; ; \; \overline{x} \notin \Pi$, fixo porém arbitrário. Vamos construir uma função auxiliar da seguinte forma :

$$\varphi(x) = [\, f(x) - p_n(x) \,] - \frac{W(x)}{W(\overline{x})} \, [\, f(\overline{x}) - p_n(\overline{x}) \,] \quad ; \quad x \in [a, b] \; . \tag{3.15}$$

Agora, basta verificar que a função φ satisfaz as hipóteses da Extensão do Teorema de Rolle. Do mesmo, modo podemos verificar que a função φ é uma função de classe $\mathcal{C}^{(n+1)}([a, b])$ e que possui $(n + 2)$ zeros em $[a, b]$. Em seguida, aplicamos sucessivamente o Teorema de Rolle às funções φ , φ' , $\cdots$, $\varphi^{(n+1)}$.

Capítulo 4

Espaços de Elementos Finitos

Neste capítulo vamos abordar o problema da interpolação polinomial por partes. Construiremos as bases de Lagrange para os espaços das Funções de Lagrenge Polinomiais por Partes e para as Funções Cúbicas de Hermite, bem como faremos uma análise de erro para cada uma das interpolações . Esses espaços são utilizados no Método de Galerkin que iremos estudar nos capítulos 5 e 6. Para um estudo mais profundo sobre interpolação polinomial por partes e suas aplicações nos Métodos de Elementos finitos podemos citar (Axelsson, 1984) e (Rappaz, 1998).

4.1 Espaços de Lagrange Polinomial por Partes

Podemos observar que a estimativa do erro da Interpolação Polinomial, dada por (3.14) , depende fortemente do comportamento de f^{n+1} . Assim, quando estamos interpolando uma função , em pontos eqüidistantes, por um polinômio de grau muito elevado o erro vai depender se as derivadas de ordem $(n+1)$ da função f ficam limitadas ou não . Temos um exemplo muito interessante de um problema de interpolação polinomial onde a função é infinitamente continuamente diferenciável, mas suas derivadas crescem muito rapidamente fazendo com que o polinômio interpolador fique cada vez mais afastado da função conforme vamos aumentando o seu grau.

Exemplo 4.1 : Considere a função $f(t) = 1 \,/\, (\, 1 + 25t^2 \,)$ para $t \in [-1, 1]$. A função f possui derivada contínua de qualquer ordem no intervalo $[-1, 1]$, entretanto tem-se que $\left| f^{(n+1)}(0) \right|$ cresce muito rápido quando n cresce. A Figura 4.1 mostra este fenômeno, que é denominado de **fenômeno de Runge**, para polinômios interpoladores $p_n \in \mathcal{P}_n([-1, 1])$, em pontos equidistantes, nos casos em que $n = 5$ e $n = 10$.

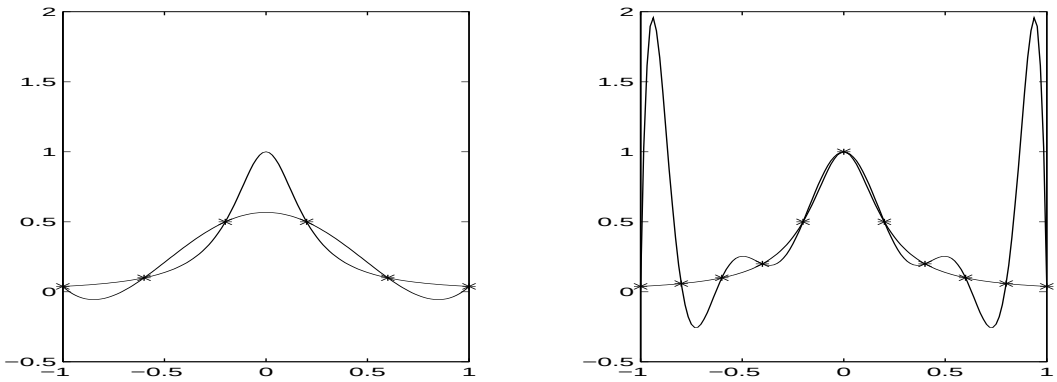

Figura 4.1 : Fenômeno de Runge: Interpolantes de grau 5 e 10.

Temos duas maneiras muito eficientes para evitar o fenômeno de Runge. A primeira é na escolha dos pontos de interpolação . A escolha é feita observando que o erro da Interpolação Polinomial, dado por (3.13) , depende dos pontos de interpolação através da função W . Assim, vamos escolher os pontos de interpolação de modo que tenhamos

$$min\ \{\ max\ \{\ |\ W(x)\ |\quad ;\quad x \in [a,b]\ \}\quad ;\quad \Pi\ \}\ . \tag{4.1}$$

A escolha adequada dos pontos de interpolação para o problema apresentado no exemplo 4.1 são os zeros do polinômio de Chebyshev T_{n+1} , denominados **Pontos de Interpolação de Chebyshev**, que são dados por:

$$t_j\ =\ -\cos(\ \frac{2j+1}{2n+2}\ \pi\ )\qquad ;\qquad j\ =\ 0,\ 1,\ \cdots,\ n\ . \tag{4.2}$$

No caso em que estamos trabalhando no intervalo $[a,b]$, basta fazer uma mudança de variável para obtermos os pontos de interpolção adequados :

$$x_j\ =\ \frac{(b+a)}{2}\ +\ \frac{(b-a)}{2}t_j\qquad ;\qquad j\ =\ 0,\ 1,\ \cdots,\ n\ . \tag{4.3}$$

Vamos deixar como exercício para o leitor refazer o exemplo 4.1 utilizando os zeros de T_{n+1} como pontos de interpolação para obter o polinômio interpolador p_n da função f .

A segunda maneira para evitar o fenômeno de Runge está na escolha do espaço de funções no qual vamos buscar a função interpolante. Vamos fazer a interpolação não em $\mathcal{P}_n([a,b])$, mas em determinados espaços de funções onde seus elementos são polinômios por partes, definidos em uma partição qualquer de $[a,b]$. Esses espaços de funções são denominados **Espaços de Elementos Finitos**, que passaremos a definir a seguir. Os espaços de Elementos Finitos são muito utilizados não somente em problemas de interpolação , mas também em problemas de quadrados mínimos e na obtenção de uma solução aproximada para problemas de valores de contorno por métodos variacionais. Os métodos variacionais serão abordados em um capítulo especial.

Digamos que o fenômeno de Runge seria uma motivação para o estudo dos espaços de elementos finitos, bem como dos métodos variacionais, dentre os quais podemos mencionar o método dos quadrados mínimos e o método de Galerkin. Entretanto, uma outra motivação está baseada no fato que, em geral, os métodos de aproximação de funções requerem a resolução de um sistema linear. Quando utilizamos os espaços de elementos finitos, a matriz do sistema linear resultante do método de aproximação tem sempre uma estrutura especial de esparsidade , o que facilita o seu armazenamento no que se refere à economia de memória. A combinação de espaços de elementos finitos e métodos variacionais resulta em sistemas lineares com boas propriedades de estabilidade numérica, o que é uma nova motivação para o estudos desses tópicos.

Definiremos a seguir os **Espaços de Funções de Lagrange Polinomial por Partes**. Dada uma partição qualquer de $[a,b]$, isto é, $\Pi : a = x_0 < x_1 < \cdots < x_n = b$, seja $L_d(\Pi)$ o conjunto das funções definidas no intervalo $[a,b]$ com as propriedades :

$\forall\, s \in L_d(\Pi)$, tem-se que

$$s(x) = p(x) \in \mathcal{P}_d(K) \quad ; \quad x \in K = [x_{k-1}, x_k] \tag{4.4}$$

$$s \in \mathcal{C}([a,b]) \,, \tag{4.5}$$

isto é, s é um polinômio de grau menor ou igual a d em cada subintervalo $K = [x_{k-1}, x_k]$ e uma função contínua no intervalo $[a,b]$. Podemos mostrar que $L_d(\Pi)$ é um subespaço vetorial de $\mathcal{C}([a,b])$ com $dim(\ L_d(\Pi)\ ) = nd + 1$. É importante observar que nos espaços $L_d(\Pi)$ o grau do polinômio em cada subintervalo K é sempre o mesmo, independendo do número de subintervalos da partição Π. Assim, evitamos o fenômeno de Runge nos problemas de interpolação .

4.1.1 Espaço das Funções de Lagrange Lineares

De acordo com a definição do espaço $L_d(\Pi)$ temos as propriedades das funções no espaço $L_1(\Pi)$ que é denominado de **Espaço das Funções de Lagrange Lineares por Partes**. Assim temos que, $\forall\, s \in L_1(\Pi)$

$$s(x) = p(x) \in \mathcal{P}_1(K) \quad ; \quad x \in K = [x_{k-1}, x_k] \tag{4.6}$$

$$s \in \mathcal{C}([a,b]) \,. \tag{4.7}$$

A seguir, vamos construir as funções em $L_1(\Pi)$ e mostrar que este é um subespaço vetorial de $\mathcal{C}([a,b])$ com $dim(\ L_1(\Pi)\ ) = n + 1$. Neste caso, temos que a restrição de uma função que pertence a $L_1(\Pi)$ é sempre um polinômio de grau menor ou igual

a 1 em cada subintervalo, isto é , $s|_K = p \in \mathcal{P}_1(K)$. O espaço $L_1(\Pi)$ também é denominado **Espaço das Funções Splines Lineares**.

Vamos considerar a base de Lagrange para o espaço vetorial $\mathcal{P}_1(K)$ associada aos pontos x_{k-1} e x_k , com o objetivo de utilizá-la na representação da restrição da função s aos subintervalos $K = [x_{k-1}, x_k]$.

Denotando por $\lambda_1^{(k)}$ e $\lambda_2^{(k)}$ as funções da base de Lagrange para $\mathcal{P}_1(K)$, tem-se que:

$$\lambda_1^{(k)}(x) = (x_k - x) / h_k \tag{4.8}$$

$$\lambda_2^{(k)}(x) = (x - x_{k-1}) / h_k , \tag{4.9}$$

onde $h_k = x_k - x_{k-1}$ é o comprimento do k-ésimo subintervalo. Desse modo, temos que $\forall\, s \in L_1(\Pi)$ pode ser escrita da seguinte forma:

$$s(x) = \alpha_1^k \, \lambda_1^{(k)}(x) + \alpha_2^k \, \lambda_2^{(k)}(x) \quad ; \quad x \in K \ . \tag{4.10}$$

As funções $\lambda_1^{(k)}$ e $\lambda_2^{(k)}$ são chamadas de **Funções de Base Local**, no k-ésimo subintervalo, do espaço $L_1(\Pi)$.

À partir da definição de base local, vamos construir as funções que são denominadas **Funções de Base Global** do espaço $L_1(\Pi)$ associadas aos pontos x_j da partição Π . Denotando por φ_0 , φ_1 , $\cdots$, φ_j , $\cdots$, φ_n as funções da base global e considerando as equações $(4.8) - (4.10)$, temos que:

$$\varphi_0(x) = \begin{cases} (x_1 - x) / h_1 & ; \quad \text{se } x \in [x_0, x_1] \\ 0 & ; \quad \text{caso contrário.} \end{cases} \tag{4.11}$$

$$\varphi_j(x) = \begin{cases} (x - x_{j-1}) / h_j & ; \quad \text{se } x \in [x_{j-1}, x_j] \\ (x_{j+1} - x) / h_{j+1} & ; \quad \text{se } x \in [x_j, x_{j+1}] \\ 0 & ; \quad \text{caso contrário.} \end{cases} \tag{4.12}$$

$$\varphi_n(x) = \begin{cases} (x - x_{n-1}) / h_n & ; \quad \text{se } x \in [x_{n-1}, x_n] \\ 0 & ; \quad \text{caso contrário.} \end{cases} \tag{4.13}$$

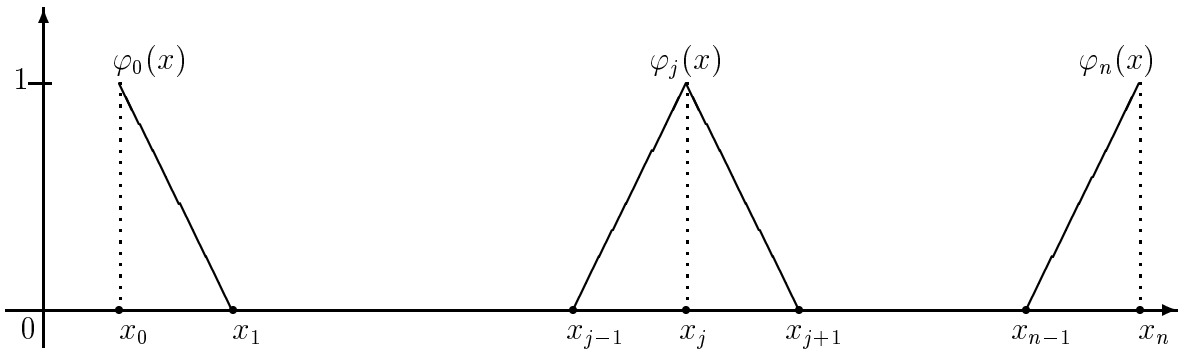

Figura 4.2: Funções de base para o subespaço $L_1(\Pi)$.

Podemos mostrar que as funções φ_0 , φ_1 , $\cdots$, φ_j , $\cdots$, φ_n , ilustradas na Figura 4.2, são linearmente independentes e formam uma base para o espaço $L_1(\Pi)$. Observamos também que as funções φ_j possuem a seguinte propriedade

$$\varphi_j(x_i) \;=\; \delta_{ij} \qquad ; \qquad 0 \;\leq\; i\,,\; j \;\leq\; n\,, \tag{4.14}$$

fazendo com que essas funções sejam denominadas funções de base nodais. O espaço $L_1(\Pi)$ será muito utilizado nos Métodos de Elementos Finitos que vamos estudar nos próximos capítulos. Portanto, temos que toda função $s \in L_1(\Pi)$ pode ser escrita de modo único da seguinte forma :

$$s(x) \;=\; \sum_{j=0}^{n} \alpha_j \;\varphi_j(x)\;. \tag{4.15}$$

4.1.2 Espaço das Funções de Lagrange Quadráticas

Os elementos do espaço $L_2(\Pi)$, que é denominado **Espaço das Funções de Lagrange Quadráticas por Partes**, têm as seguintes propriedades : para toda $s \in L_2(\Pi)$

$$s(x) \quad = \quad p(x) \in \mathcal{P}_2(K) \qquad ; \qquad x \in K \;=\; [x_{k-1}, x_k] \tag{4.16}$$

$$s \quad \in \quad \mathcal{C}([a,b])\;. \tag{4.17}$$

A seguir, vamos construir as funções em $L_2(\Pi)$ e mostrar que $L_2(\Pi)$ é um subespaço vetorial de $\mathcal{C}([a,b])$ com $dim(\; L_2(\Pi)\;) \;=\; 2n \;+\; 1$. Neste caso, temos que a restrição de uma função que pertence a $L_2(\Pi)$ é sempre um polinômio de grau menor

ou igual à 2 em cada subintervalo, isto é , $s|_K = p \in \mathcal{P}_2(K)$.

Vamos considerar a base de Lagrange para o espaço vetorial $\mathcal{P}_2(K)$ associada aos pontos x_{k-1} , $\overline{x}_k$ e x_k , onde $\overline{x}_k$ é o ponto médio do k-ésimo subintervalo $K = [x_{k-1}, x_k]$.

Denotamos por $\beta_1^{(k)}$, $\beta_2^{(k)}$ e $\beta_3^{(k)}$ as funções da base de Lagrange para $\mathcal{P}_2(K)$, que podem ser construídas em função da base de Lagrange para $\mathcal{P}_1(K)$ da seguinte forma:

$$\beta_1^{(k)}(x) = \lambda_1^{(k)}(x) \, (\, 2 \, \lambda_1^{(k)}(x) \, - \, 1 \,) \tag{4.18}$$

$$\beta_2^{(k)}(x) = 4 \, \lambda_1^{(k)}(x) \, \lambda_2^{(k)}(x) \tag{4.19}$$

$$\beta_3^{(k)}(x) = \lambda_2^{(k)}(x) \, (\, 2 \, \lambda_2^{(k)}(x) \, - \, 1 \,). \tag{4.20}$$

Desse modo, temos que toda função $s \in L_2(\Pi)$ pode ser escrita da seguinte forma:

$$s(x) = \alpha_1^k \, \beta_1^{(k)}(x) + \alpha_2^k \, \beta_2^{(k)}(x) + \alpha_3^k \, \beta_3^{(k)}(x) \quad ; \quad x \in K = [x_{k-1}, x_k] \ . \tag{4.21}$$

As funções $\beta_1^{(k)}$, β_2^k e $\beta_3^{(k)}$ são chamadas **Funções de Base Local**, no k-ésimo subintervalo, do espaço $L_2(\Pi)$. À partir da definição de base local, vamos construir as funções que são denominadas **Funções de Base Global** do espaço $L_2(\Pi)$ associadas aos pontos $x_0, \, x_1, \, \cdots, \, x_j, \, \cdots, \, x_n$ da partição Π e também aos pontos médios de cada subintervalo $\overline{x}_1 \in [x_0, x_1], \, \cdots, \, \overline{x}_k \in [x_{k-1}, x_k], \, \cdots, \, \overline{x}_n \in [x_{n-1}, x_n]$. Desse modo, teremos $2n + 1$ funções de base nodais para o espaço $L_2(\Pi)$.

Denotamos por β_0 , β_1 , $\cdots$, β_{2k-1} , β_{2k} , $\cdots$, β_{2n-1} , β_{2n} as funções da base global. Por convenção , as funções com enumeração par estão associadas aos pontos da partição Π e as funções com enumeração ímpar estão associadas aos pontos médios dos subintervalos. Considerando as equações $(4.18) - (4.20)$, temos que:

a função β_0 associada ao ponto x_0 é dada por

$$\beta_0(x) = \begin{cases} \beta_1^{(1)}(x) & ; \quad \text{se } x \in [x_0, x_1] \\ 0 & ; \quad \text{caso contrário.} \end{cases} \tag{4.22}$$

As funções β_{2k} associadas aos pontos $x_k \in \Pi$ para $k = 1, \cdots, (n-1)$, são dadas por

$$\beta_{2k}(x) = \begin{cases} \beta_3^{(k)} & ; \quad \text{se } x \in [x_{k-1}, x_k] \\ \beta_1^{(k+1)} & ; \quad \text{se } x \in [x_k, x_{k+1}] \\ 0 & ; \quad \text{caso contrário.} \end{cases} \tag{4.23}$$

As funções β_{2k-1} associadas aos pontos médios $\overline{x}_k \in K$ para $k = 1, \cdots, n$, são dadas por

$$\beta_{2k-1}(x) = \begin{cases} \beta_2^{(k)} & ; \quad \text{se } x \in [x_{k-1}, x_k] \\ 0 & ; \quad \text{caso contrário.} \end{cases} \tag{4.24}$$

A função β_{2n} associada ao ponto x_n é dada por

$$\beta_{2n}(x) = \begin{cases} \beta_3^{(n)}(x) & ; \quad \text{se } x \in [x_{n-1}, x_n] \\ 0 & ; \quad \text{caso contrário.} \end{cases} \tag{4.25}$$

Portanto, temos que $\forall\ s \in L_2(\Pi)$ pode ser escrita de modo único da seguinte forma:

$$s(x) = \sum_{j=0}^{2n} \alpha_j\ \beta_j(x)\ . \tag{4.26}$$

4.2 Espaço das Funções Cúbicas de Hermite

Os espaços $L_1(\Pi)$ e $L_2(\Pi)$ são subespaços vetoriais de $\mathcal{C}([a,b])$, cujas funções são contínuas em $[a,b]$ mas com derivada descontínua nos pontos da partição Π. Vamos agora estudar um espaço de funções polinomiais por partes, definidas sobre uma partição $\Pi : a = x_0 < x_1 < \cdots < x_n = b$, cujas funções são contínuas com derivada também contínua no intervalo $[a,b]$.

Vamos definir o espaço $H_3(\Pi)$ denominado **Espaço das Funções Cúbicas de Hermite**, no qual seus elementos têm as seguintes propriedades : $\forall\ s \in H_3(\Pi)$

$$s(x) \;=\; p(x) \in \mathcal{P}_3(K) \qquad ; \qquad x \in K \;=\; [x_{k-1}, x_k] \tag{4.27}$$

$$s \;\in\; \mathcal{C}^{(1)}([a,b]) \; . \tag{4.28}$$

A seguir, vamos construir as funções em $H_3(\Pi)$ e mostrar que este é um subespaço de $\mathcal{C}^{(1)}([a,b])$ com $dim(\; H_3(\Pi)\;) \;=\; 2n+2$. Neste caso, temos que a restrição de uma função que pertence a $H_3(\Pi)$ é sempre um polinômio de grau menor ou igual a 3 em cada subintervalo, isto é, $s|_K \;=\; p \in \mathcal{P}_3(K)$.

Inicialmente definimos a **Base de Hermite** para o espaço vetorial $\mathcal{P}_3(K)$ associada aos pontos x_{k-1} e x_k , com o objetivo de utilizá-la na representação da restrição da função s aos subintervalos $K \;=\; [x_{k-1}, x_k]$.

Denotando por $\psi_1^{(k)}$, $\psi_2^{(k)}$, $\psi_3^{(k)}$ e $\psi_4^{(k)}$ as funções da base de Hermite para $\mathcal{P}_3(K)$ que possuem as seguinte propriedades:

$$\begin{cases} \psi_1^{(k)}(x_{k-1}) \;=\; 1 & , \qquad \psi_1^{(k)}(x_k) \;=\; 0 \\ (\psi_1^{(k)})'(x_{k-1}) \;=\; 0 & , \qquad (\psi_1^{(k)})'(x_k) \;=\; 0 \end{cases} \tag{4.29}$$

$$\begin{cases} \psi_3^{(k)}(x_{k-1}) \;=\; 0 & , \qquad \psi_3^{(k)}(x_k) \;=\; 1 \\ (\psi_3^{(k)})'(x_{k-1}) \;=\; 0 & , \qquad (\psi_3^{(k)})'(x_k) \;=\; 0 \end{cases} \tag{4.30}$$

$$\begin{cases} (\psi_2^{(k)})'(x_{k-1}) \;=\; 1 & , \qquad (\psi_2^{(k)})'(x_k) \;=\; 0 \\ \psi_2^{(k)}(x_{k-1}) \;=\; 0 & , \qquad \psi_2^{(k)}(x_k) \;=\; 0 \end{cases} \tag{4.31}$$

$$\begin{cases} (\psi_4^{(k)})'(x_{k-1}) \;=\; 0 & , \qquad (\psi_4^{(k)})'(x_k) \;=\; 1 \\ \psi_4^{(k)}(x_{k-1}) \;=\; 0 & , \qquad \psi_4^{(k)}(x_k) \;=\; 0 \; . \end{cases} \tag{4.32}$$

Como as funções da base de Hermite são polinômios de grau 3, podemos escrevê-las da seguinte forma:

$$\psi_j^{(k)}(x) \;=\; a_0^k \;+\; a_1^k\, x \;+\; a_2^k\, x^2 \;+\; a_3^k\, x^3 \quad ; \quad k = 1,\, \cdots,\, n \;\; e \;\; j = 1, 2, 3, 4\,.$$

Impondo as condições (4.29) temos que resolver um sistema linear com 4 equações a 4 incognitas a_0^k , a_1^k , a_2^k , a_3^k e a_4^k para obtermos a primeira função da base:

$$\psi_1^{(k)}(x) \;=\; (\; x - x_k \;)^2 \;(\; 2x + x_k - 3x_{k-1} \;)\; / h_k^3\,. \tag{4.33}$$

Impondo as condições (4.30) temos que resolver um sistema linear com 4 equações a 4 incognitas a_0^k , a_1^k , a_2^k , a_3^k e a_4^k para obtermos a terceira função da base:

$$\psi_3^{(k)}(x) \;=\; -(\; x - x_{k-1} \;)^2 \;(\; 2x + x_{k-1} - 3x_k \;)\; / h_k^3\,. \tag{4.34}$$

Impondo as condições (4.31) temos que resolver um sistema linear com 4 equações a 4 incognitas a_0^k , a_1^k , a_2^k , a_3^k e a_4^k para obtermos a segunda função da base:

$$\psi_2^{(k)}(x) \;=\; (\; x - x_k \;)^2 \;(\; x - x_{k-1} \;)\; / h_k^2\,. \tag{4.35}$$

Impondo as condições (4.32) temos que resolver um sistema linear com 4 equações a 4 incognitas a_0^k , a_1^k , a_2^k , a_3^k e a_4^k para obtermos a quarta função da base:

$$\psi_4^{(k)}(x) \;=\; (\; x - x_{k-1} \;)^2 \;(\; x - x_k \;)\; / h_k^2\,. \tag{4.36}$$

Podemos mostrar que as funções $\psi_1^{(k)}$, $\psi_2^{(k)}$, $\psi_3^{(k)}$ e $\psi_4^{(k)}$ são linearmente independentes em $\mathcal{P}_3(K)$, portanto, formam uma base para este espaço .

Desse modo, temos que $\forall\; s \in H_3(\Pi)$ pode ser escrita da seguite forma:

$$s(x) \;=\; \alpha_1^k\, \psi_1^{(k)}(x) \;+\; \alpha_2^k\, \psi_2^{(k)}(x) \;+\; \alpha_3^k\, \psi_3^{(k)}(x) \;+\; \alpha_4^k\, \psi_4^{(k)}(x) \qquad ; \qquad x \in K\,. \tag{4.37}$$

As funções $\psi_1^{(k)}$, ψ_2^k , ψ_3^k e $\psi_4^{(k)}$ são chamadas de **Funções de Base Local**, no k-ésimo subintervalo, do espaço $H_3(\Pi)$.

Denotaremos por ψ_0 , ψ_1 , $\cdots$, ψ_{2k} , ψ_{2k+1} , $\cdots$, ψ_{2n} , ψ_{2n+1} as funções da base global para o espaço $H_3(\Pi)$. As funções com enumeração par estão associadas aos pontos da partição Π com informações sobre a interpolação do valor da função e as

funções com enumeração ímpar estão associadas aos pontos da partição Π com informações sobre a interpolação do valor da derivada.

As funções ψ_0 e ψ_1 associadas ao ponto x_0 são dadas por

$$\psi_0(x) = \begin{cases} \psi_1^{(1)}(x) & ; \quad \text{se } x \in [x_0, x_1] \\ 0 & ; \quad \text{caso contrário} \end{cases} \tag{4.38}$$

$$\psi_1(x) = \begin{cases} \psi_2^{(1)}(x) & ; \quad \text{se } x \in [x_0, x_1] \\ 0 & ; \quad \text{caso contrário.} \end{cases} \tag{4.39}$$

As funções ψ_{2k} associadas aos pontos $x_k \in \Pi$ para $k = 1, \cdots, (n-1)$, são dadas por

$$\psi_{2k}(x) = \begin{cases} \psi_3^{(k)} & ; \quad \text{se } x \in [x_{k-1}, x_k] \\ \psi_1^{(k+1)} & ; \quad \text{se } x \in [x_k, x_{k+1}] \\ 0 & ; \quad \text{caso contrário.} \end{cases} \tag{4.40}$$

As funções ψ_{2k+1} associadas aos pontos $x_k \in \Pi$ para $k = 1, \cdots, (n-1)$, são dadas por

$$\psi_{2k+1}(x) = \begin{cases} \psi_4^{(k)} & ; \quad \text{se } x \in [x_{k-1}, x_k] \\ \psi_2^{(k+1)} & ; \quad \text{se } x \in [x_k, x_{k+1}] \\ 0 & ; \quad \text{caso contrário.} \end{cases} \tag{4.41}$$

As funções ψ_{2n} e ψ_{2n+1} associadas ao ponto x_n, são dadas por

$$\psi_{2n}(x) = \begin{cases} \psi_3^{(n)}(x) & ; \quad \text{se } x \in [x_{n-1}, x_n] \\ 0 & ; \quad \text{caso contrário} \end{cases} \tag{4.42}$$

$$\psi_{2n+1}(x) \;=\; \begin{cases} \psi_4^{(n)}(x) & ; \quad \text{se} \;\; x \in [x_{n-1}, x_n] \\ \\ 0 & ; \quad \text{caso contrário.} \end{cases} \tag{4.43}$$

Podemos mostrar que as funções ψ_0 , ψ_1 , $\cdots$, ψ_{2k} , ψ_{2k+1} , $\cdots$, ψ_{2n} , ψ_{2n+1} são linearmente independentes e formam uma base para o espaço $H_3(\Pi)$. Observamos também que as funções da base global possuem as seguintes propriedades

$$\begin{cases} \psi_{2j}(x_i) \;=\; \delta_{ij} & ; \quad 0 \;\leq\; i \,,\; j \;\leq\; n \\ \\ \psi'_{2j}(x_i) \;=\; 0 & ; \quad 0 \;\leq\; i \,,\; j \;\leq\; n \end{cases} \tag{4.44}$$

$$\begin{cases} \psi'_{2j+1}(x_i) \;=\; \delta_{ij} & ; \quad 0 \;\leq\; i \,,\; j \;\leq\; n \\ \\ \psi_{2j+1}(x_i) \;=\; 0 & ; \quad 0 \;\leq\; i \,,\; j \;\leq\; n \,. \end{cases} \tag{4.45}$$

Portanto, temos que $\forall \;\; s \in \; H_3(\Pi)$ pode ser escrita de modo único da seguinte forma:

$$s(x) \;=\; \sum_{j=0}^{2n+1} \alpha_j \; \psi_j(x) \,. \tag{4.46}$$

4.3 Interpolação Polinomial por Partes

Seja $f : [a, b] \longrightarrow I\!R$ uma função contínua e Π uma partição qualquer de $[a, b]$, isto é, $\Pi \;:\; a \;=\; x_0 < x_1 < \cdots < x_n \;=\; b$. Queremos encontrar uma função $s_1 \in \; L_1(\Pi)$ satisfazendo as condições de interpolação pura, isto é,

$$s_1(x_i) \;=\; f(x_i) \quad ; \quad i \;=\; 0,\; 1,\; \cdots, n \;\; . \tag{4.47}$$

A função s_1 construída com as condições acima é denominada função spline linear interpolante da função f nos pontos da partição Π . Utilizando as funções de base do espaço $L_1(\Pi)$ temos que

$$s_1(x_i) \;=\; \sum_{j=0}^{n} \alpha_j \; \varphi_j(x_i) \;=\; f(x_i) \qquad ; \qquad 0 \;\leq\; i \;\leq\; n \,. \tag{4.48}$$

Como $\varphi_j(x_i) \;=\; \delta_{ij}$ obtemos que $\alpha_i \;=\; f(x_i)$ para $i \;=\; 0,\; 1,\; \cdots,\; n$. Podemos observar que na interpolação por partes em $L_1(\Pi)$, como as funções de base são nodais, os coeficientes da função interpolante são obtidos sem a necessidade da resolução de um

sistema linear.

De modo ánalogo, podemos encontrar uma função $s_2 \in L_2(\Pi)$ satisfazendo as condições de interpolação pura, isto é,

$$s_2(x_i) = f(x_i) \quad ; \quad i = 0,\ 1,\ \cdots, n \tag{4.49}$$

$$s_2(\overline{x}_i) = f(\overline{x}_i) \quad ; \quad i = 1,\ 2,\ \cdots, n\ . \tag{4.50}$$

A função s_2 construída com as condições acima é denominada função de Lagrange Quadrática interpolante da função f nos pontos da partição Π e nos pontos médios de cada subintervalo. Utilizando as funções de base do espaço $L_2(\Pi)$ temos que

$$s_2(x_i) = \sum_{j=0}^{n} \alpha_j\ \beta_j(x_i) = f(x_i) \quad ; \quad 0 \leq i \leq n \tag{4.51}$$

$$s_2(\overline{x}_i) = \sum_{j=0}^{n} \alpha_j\ \beta_j(\overline{x}_i) = f(\overline{x}_i) \quad ; \quad 1 \leq i \leq n\ . \tag{4.52}$$

Como as funções de base do espaço $L_2(\Pi)$ são nodais, obtemos que $\alpha_{2i} = f(x_i)$ para $i = 0,\ 1,\ \cdots,\ n$ e obtemos $\alpha_{2i-1} = f(\overline{x}_i)$ para $i = 1,\ 2,\ \cdots,\ n$, sem a necessidade da resolução de um sistema linear.

Finalmente veremos como usar as funções cúbicas de Hermite em problemas de interpolação. Seja $f : [a,b] \longrightarrow I\!R$ uma função de classe $\mathcal{C}^{(1)}([a,b])$ e Π uma partição qualquer de $[a,b]$, isto é, $\Pi : a = x_0 < x_1 < \cdots < x_n = b$. Queremos encontrar uma função $s \in H_3(\Pi)$ satisfazendo as condições mistas de interpolação e suavidade, isto é,

$$s(x_i) = f(x_i) \quad ; \quad i = 0,\ 1,\ \cdots, n \tag{4.53}$$

$$s'(x_i) = f'(x_i) \quad ; \quad i = 0,\ 1,\ \cdots, n\ . \tag{4.54}$$

A função s construída com as condições acima é denominada função cúbica de Hermite interpolante das funções f e f' nos pontos da partição Π . Utilizando as funções de base do espaço $H_3(\Pi)$ temos que

$$s(x_i) = \sum_{j=0}^{2n+1} \alpha_j\ \psi_j(x_i) = f(x_i) \quad ; \quad 0 \leq i \leq n\ . \tag{4.55}$$

Como as funções de base do espaço $H_3(\Pi)$ possuem as propriedades $(4.44) - (4.45)$, obtemos que $\alpha_{2i} = f(x_i)$ para $i = 0,\ 1,\ \cdots,\ n$ e obtemos $\alpha_{2i+1} = f'(x_i)$ para $i = 0,\ 1,\ \cdots,\ n$, sem a necessidade da resolução de um sistema linear.

4.3.1 Erro da Interpolação Polinomial por Partes

À partir do Teorema 3.1 e das desigualdades (3.13) e (3.14) obtemos os seguinte resultados para o erro da interpolação polinomial por partes.

Teorema 4.1 : Seja $f \in \mathcal{C}^{(2)}([a,b])$ e $s_1 \in L_1(\Pi)$ a função spline linear que interpola a função f nos pontos da partição $\Pi : a = x_0 < x_1 < \ldots < x_n = b$. Então, para todo $x \in [x_{k-1}, x_k]$, existe pelo menos um ponto $\xi_k = \xi(x) \in (x_{k-1}, x_k)$ tal que

$$e^{(k)}(x) = f(x) - s_1(x) = \frac{W^{(k)}(x)}{2!}\, f^{(2)}(\xi_k)\,, \tag{4.56}$$

onde $W^{(k)}(x) = (\, x - x_{k-1}\,)(\, x - x_k\,)$.

É fácil mostrar que a função $W^{(k)}$ satisfaz

$$\left|\, W^{(k)}(\overline{x}_k)\,\right| = \max\{\ \left|\, W^{(k)}(x)\,\right| \quad ; \quad x_{k-1} \le x \le x_k\ \} = \frac{h_k^2}{4}\,. \tag{4.57}$$

Assim, temos uma **Estimativa para o Erro da Interpolação** em $L_1(\Pi)$:

$$\left|\, e^{(k)}(x)\,\right| \le \frac{h_k^2}{8}\ \max\{\ \left|\, f^{(2)}(x)\,\right| \ ;\ x_{k-1} \le x \le x_k\ \}. \tag{4.58}$$

Teorema 4.2 : Seja $f \in \mathcal{C}^{(3)}([a,b])$ e $s_2 \in L_2(\Pi)$ a função de Lagrange Quadrática que interpola a função f nos pontos da partição $\Pi : a = x_0 < x_1 < \ldots < x_n = b$. Então, para todo $x \in [x_{k-1}, x_k]$, existe pelo menos um ponto $\xi_k = \xi(x) \in (x_{k-1}, x_k)$ tal que

$$e^{(k)}(x) = f(x) - s_2(x) = \frac{W^{(k)}(x)}{3!}\, f^{(3)}(\xi_k)\,, \tag{4.59}$$

onde $W^{(k)}(x) = (\, x - x_{k-1}\,)(\, x - \overline{x}_k\,)(\, x - x_k\,)$.

Utilizando a desigualdade (3.13) pode-se mostrar que a função $W^{(k)}$ satisfaz

$$| W(x) | \ \leq \ \frac{h_k^3}{16} \quad ; \quad \forall \ x \in [x_{k-1}, x_k] \ . \tag{4.60}$$

Assim, temos uma **Estimativa para o Erro da Interpolação** em $L_2(\Pi)$:

$$\left| e^{(k)}(x) \right| \ \leq \ \frac{h_k^3}{96} \ \max\{ \ \left| f^{(3)}(x) \right| \ ; \ x_{k-1} \ \leq \ x \ \leq \ x_k \ \} \ . \tag{4.61}$$

Teorema 4.3 : Seja $f \in \mathcal{C}^{(4)}([a,b])$ e $s \in H_3(\Pi)$ a função cúbica de Hermite que interpola as funções f e f' nos pontos da partição $\Pi : a = x_0 < x_1 < \ldots < x_n = b$. Então, para todo $x \in [x_{k-1}, x_k]$, existe pelo menos um ponto $\xi_k = \xi(x) \in (x_{k-1}, x_k)$ tal que

$$e^{(k)}(x) \ = \ f(x) \ - \ s(x) \ = \ \frac{W^{(k)}(x)}{4!} \ f^{(4)}(\xi_k) \ , \tag{4.62}$$

onde $W^{(k)}(x) \ = \ (\ x \ - \ x_{k-1} \ )^2 (\ x \ - \ x_k \ )^2$.

Utilizando a relação (4.57) temos a seguinte **Estimativa para o Erro da Interpolação** em $H_3(\Pi)$:

$$\left| e^{(k)}(x) \right| \ \leq \ \frac{h_k^4}{384} \ \max\{ \ \left| f^{(4)}(x) \right| \ ; \ x_{k-1} \ \leq \ x \ \leq \ x_k \ \} \ . \tag{4.63}$$

Demonstração do Teorema 4.3 : considere um ponto $\overline{x} \in (x_{k-1}, x_k)$, fixo porém arbitrário. Vamos construir uma função auxiliar da seguinte forma:

$$\varphi(x) \ = \ [\ f(x) \ - \ s(x) \ ] \ - \ \frac{W^{(k)}(x)}{W^{(k)}(\overline{x})} \ [\ f(\overline{x}) \ - \ s(\overline{x}) \ ] \quad ; \quad x \in [x_{k-1}, x_k] \ . \tag{4.64}$$

De modo analogo à demonstração do Teorema 3.1, basta verificar que a função φ é uma função de classe $\mathcal{C}^{(4)}([x_{k-1}, x_k])$ e que se anula nos pontos x_{k-1} , x_k , $\overline{x}$.
Observe a multiplicidade dos zeros, em seguida aplique sucessivamente o Teorema de Rolle às funções φ , φ' , $\cdots$, $\varphi^{(4)}$.

Capítulo 5

Métodos de Elementos Finitos

Finalmente, neste capítulos vamos introduzir o Método de Elementos Finitos, apresentando vários resultados sobre exitência, unicidade e uma interpretação geométrica da solução de Galerkin. Para este estudo consideramos um problema de valor de contorno típico que representa uma classe de problemas com interpretações físicas bem interessantes. Os resultados aqui apresentados serão amplamente utilizados no capítulo 6, onde trataremos de problemas de difusão convecção linear, com uma breve aplicação em simulação de fluxos em meios porosos modelado por uma equação de difusão convecção não linear. A teoria de Elementos Finitos é extremamente rica tanto do ponto de vista matemático quanto das aplicações . Para um estudo mais profundo sobre os temas abordados vamos sugerir as referências (Axelsson, 1984), (Johnson, 1987) e (Rappaz, 1998).

5.1 Introdução

Consideremos inicialmente o seguinte Problema de Valores de Contorno Unidimensional: Encontrar uma função $u^* \in \mathcal{C}^{(2)}([0,1])$ solução da equação diferencial

$$-(\ \alpha(x)\ u'(x)\ )'\ +\ \sigma(x)\ u(x)\ =\ f(x) \quad ; \quad x \in (0,1) \tag{5.1}$$

sujeita às condições de contorno

$$u(0)\ =\ u(1)\ =\ 0\ . \tag{5.2}$$

Admitimos que as funções σ , f sejam contínuas no intervalo $[0,1]$ e α continuamente diferenciável. Consideremos que as funções α e σ são estritamente positivas, para que possamos dar uma interpretação física ao problema. Com as hipóteses acima, temos que o problema $(5.1)-(5.2)$ possui uma única solução em $\mathcal{C}_0^{(2)}([0,1])$, que é um subespaço de $\mathcal{C}^{(2)}([0,1])$ cujas funções se anulam nos extremos do intervalo. Para uma análise da existência e unicidade da solução do problema citamos (Boyce, 1998).

Com o objetivo de simplificar a notação vamos escrever o problema $(5.1) - (5.2)$ da seguinte forma:

$(\mathcal{D})$ encontrar uma função $u^* \in \mathcal{C}_0^{(2)}([0,1])$ solução da equação

$$-(\,\alpha(x)\,u'(x)\,)' + \sigma(x)\,u(x) = f(x) \quad ; \quad x \in (0,1)\,. \tag{5.3}$$

Nosso intuito é mostrar que a solução u^* do problema (5.3) é também solução de um problema de minimização e de um problema variacional, que vamos definir a seguir. Para isto, introduziremos o seguinte conjunto de funções :

$$V = \{\, v : [0,1] \longrightarrow I\!R \;/\; v \text{ contínua, } v' \text{ contínua por partes e limitada } \}\,. \tag{5.4}$$

É fácil mostrar que V é um espaço vetorial real. Vamos precisar também do seguinte subespaço vetorial de V :

$$V_0 = \{\, v \in V \;/\; v(0) = 0 \quad \text{e} \quad v(1) = 0 \,\}\,. \tag{5.5}$$

Podemos definir os seguintes **produtos internos** no espaço vetorial V :

1. $\langle\, \cdot\,,\, \cdot\,\rangle : V \times V \longrightarrow I\!R$ dado por:

$$\langle\, u\,,\, v\,\rangle = \int_0^1 u(x)\,v(x)\,dx \qquad ; \qquad \forall\, u\,,\, v \in V\,, \tag{5.6}$$

2. $\langle\, \cdot\,,\, \cdot\,\rangle_V : V \times V \longrightarrow I\!R$ dado por:

$$\langle\, u\,,\, v\,\rangle_V = \int_0^1 u'(x)\,v'(x)\,dx + \int_0^1 u(x)\,v(x)\,dx \qquad ; \qquad \forall\, u\,,\, v \in V\,, \tag{5.7}$$

e as seguintes **normas** em V provenientes dos produtos internos dados acima:

1. $\| \cdot \| : V \longrightarrow I\!R_+$ proveniente do produto interno $\langle \cdot , \cdot \rangle$

$$\|u\| \;=\; \sqrt{\langle u \,,\, u \rangle} \qquad ; \qquad \forall\, u \;\in\; V \;, \tag{5.8}$$

2. $\| \cdot \|_V : V \longrightarrow I\!R_+$ proveniente do produto interno $\langle \cdot , \cdot \rangle_V$

$$\|u\|_V \;=\; \sqrt{\langle u \,,\, u \rangle_V} \qquad ; \qquad \forall\, u \;\in\; V \;. \tag{5.9}$$

Com os conceitos acima, estamos preparados para iniciar a formulação variacional do problema de valores de contorno $(5.1) - (5.2)$.

5.2 Formulação Variacional

À partir da formulação variacional do problema de valores de contorno é que vamos introduzir os métodos de elementos finitos. Inicialmente, multiplicamos a equação (5.1) por uma função $v \in \mathcal{C}^{(1)}([0,1])$ e em seguida integramos sobre o intervalo $[0,1]$. Assim obtemos

$$-\int_0^1 \left(\alpha(x)\, u'(x) \right)' v(x)\, dx \;+\; \int_0^1 \sigma(x)\, u(x)\, v(x)\, dx \;=\; \int_0^1 f(x)\, v(x)\, dx \;. \tag{5.10}$$

Fazendo uma integração por partes no primeiro termo de (5.10) , tem-se que

$$-\int_0^1 \left(\alpha(x)\, u'(x) \right)' v(x)\, dx \quad =$$

$$-\,\alpha(1)\, u'(1)\, v(1) \;+\; \alpha(0)\, u'(0)\, v(0) \quad + \quad \int_0^1 \alpha(x)\, u'(x)\, v'(x)\, dx \;. \tag{5.11}$$

Impondo à função v a condição de que se anule nos extremos do intervalo $[0,1]$, obtemos de $(5.10) - (5.11)$ a seguinte igualdade :

$$\int_0^1 \alpha(x)\, u'(x)\, v'(x)\, dx \;+\; \int_0^1 \sigma(x)\, u(x)\, v(x)\, dx \;=\; \int_0^1 f(x)\, v(x)\, dx \;. \tag{5.12}$$

Finalmente, podemos apresentar a **Formulação Variacional** do problema de valores de contorno $(5.1) - (5.2)$:

$(\mathcal{V})$ encontrar $u^* \in V_0$ solução da equação

$$\int_0^1 \alpha(x)\, u'(x)\, v'(x)\, dx \;+\; \int_0^1 \sigma(x)\, u(x)\, v(x)\, dx \;=\; \int_0^1 f(x)\, v(x)\, dx \quad \forall \;\; v \in V_0 \;\; . \tag{5.13}$$

A priori, a solução do problema Variacional $(\mathcal{V})$ é menos regular que a solução do problema diferencial $(\mathcal{D})$. De fato, o problema $(\mathcal{V})$ contém informações até a primeira derivada da solução , enquanto que o problema $(\mathcal{D})$ contém informações da segunda derivada da solução também. Podemos mostrar sob certas condições que os problemas $(\mathcal{D})$ e $(\mathcal{V})$ são equivalentes. Com o objetivo de simplificar as notações e utilizar um formalismo matemático mais elegante, vamos introduzir os seguintes conceitos :

Seja $a(\,\cdot\,,\,\cdot\,) : V \times V \longrightarrow I\!R$ uma **forma bilinear** definida por:

$$a(u,v) \;=\; \int_0^1 \alpha(x)\, u'(x)\, v'(x)\, dx \;+\; \int_0^1 \sigma(x)\, u(x)\, v(x)\, dx \tag{5.14}$$

e $b : V \longrightarrow I\!R$ uma **forma linear** dada por:

$$b(v) \;=\; \int_0^1 f(x)\, v(x)\, dx \;\; . \tag{5.15}$$

Utilizando as notações acima, podemos reescrever o problema variacional (5.13) como:

$(\mathcal{V})$ encontrar $u^* \in V_0$ solução da equação

$$a(u,v) \;=\; b(v) \qquad ; \qquad \forall\, v \in V_0 \;\; .$$

Considerando o espaço vetorial V munido do produto interno $\langle\,\cdot\,,\,\cdot\,\rangle_V$ definido em (5.7) , vamos apresentar algumas propriedades das formas $a(\,\cdot\,,\,\cdot\,)$ e $b(\,\cdot\,)$ que serão muito úteis para o desenvolvimento da teoria dos métodos de elementos finitos. Temos que $a(\,\cdot\,,\,\cdot\,)$ definida em (5.14) é uma **forma bilinear contínua**, isto é , existe uma constante $c_1 > 0$ tal que

$$| \; a(\; u \; , \; v \;) \; | \;\; \leq \;\; c_1 \; \|u\|_V \; \|v\|_V \qquad ; \qquad \forall \; u \; , \; v \in V \;\; , \tag{5.16}$$

e podemos também mostrar que $a(\; \cdot \; , \; \cdot \;)$ é uma **forma bilinear coerciva**, isto é , existe uma constante $c_2 \; > \; 0$ tal que

$$a(\; u \; , \; u \;) \;\; \geq \;\; c_2 \; \|u\|_V^2 \qquad ; \qquad \forall \; u \; \in V \;\; . \tag{5.17}$$

Temos também que $b(\; \cdot \;)$ é uma **forma linear contínua**, isto é , existe uma constante $c_3 \; > \; 0$ tal que

$$| \; b(v) \; | \;\; \leq \;\; c_3 \; \|v\|_V \qquad ; \qquad \forall \; v \in V \;\; . \tag{5.18}$$

É fácil mostrar que $a(\; \cdot \; , \; \cdot \;)$ é uma **forma bililear simétrica**, isto é ,

$$a(\; u \; , \; v \;) \;\; = \;\; a(\; v \; , \; u \;) \qquad ; \qquad \forall \; u \; , \; v \in V \;\; ,$$

e temos uma **forma quadrática positiva** $q(\; \cdot \;)$ associada à forma bilinear, isto é ,

$$q(u) \; = \; a(\; u \; , \; u \;) \; \geq \; 0 \quad ; \quad \forall u \in V \qquad \text{com} \qquad a(\; u \; , \; u \;) \; = \; 0 \iff u \; = \; 0 \;\; .$$

As propridades de simetria da forma bilinear e positividade da forma quadrática, serão utilizadas na demonstração da equivalência entre o problema variacional e o problema de minimização .

Finalmente, vamos apresentar o problema de minimização associado ao problema variacional. Com as propriedades acima e com o formalismo matemático introduzido, podemos facilmente mostrar a equivalência entre eles, bem como um resultado de existência e unicidade da solução. Dependendo do problema de valores de contorno a formulação variacional obtida pode não ser dada por uma forma bilinear simétrica, fato que não impede a utilização dos métodos de elementos finitos. Neste caso, não teremos um problema de minimização associado, mas fica valendo o mesmo resultado de existência e unicidade da solução do problema variacional.

5.3 Problema de Minimização

Vamos agora definir o **Problema de Minimização** associado ao **Problema Variacional** (5.13) . Isto pode ser feito desde que a forma bilinear seja simétrica. Para isso, necessitamos do seguinte funcional:

$$J(u) \;=\; \frac{1}{2}\, a(\, u\, ,\, u\,) \;-\; b(u) \quad ; \quad \forall\; u \;\in V \;\;, \tag{5.19}$$

e consideramos o seguinte Problema de Minimização:

$(\mathcal{M})$ encontrar $u^* \in V_0$ tal que

$$J(u^*) \;=\; min\{\, J(u) \quad ; \quad u \in V_0 \,\} \tag{5.20}$$

Mostraremos a seguir a equivalência entre os problemas $(\mathcal{V})$ e $(\mathcal{M})$.

Inicialmente, vamos considerar que $u^* \in V_0$ é uma solução do problema variacional $(\mathcal{V})$. Seja $w \in V_0$ definimos $v \;=\; u^* \;+\; w$. Desse modo tem-se que

$$J(v) \;=\; J(u^*) \;+\; [\; a(u^*, w) \;-\; b(w)\;] \;+\; \frac{1}{2}\, a(w,w) \;\;\geq\;\; J(u^*) \;\; ; \;\; \forall\, v \in V_0 \;\;, \tag{5.21}$$

desde que, u^* é solução do problema variacional $(\mathcal{V})$ e $a(w,w) \;\geq\; 0$ pois temos uma forma bilinear positiva. Portanto u^* é solução do problema de minimização $(\mathcal{M})$.

Por outro lado, consideremos $u^* \in V_0$ solução do problema de minimização $(\mathcal{M})$. Dessa forma, temos que para todo $v \in V_0$ e $\epsilon \in I\!R$

$$J(u^*) \;\;\leq\;\; J(u^* \;+\; \epsilon\; v)\,. \tag{5.22}$$

Definimos agora uma função $g : I\!R \;\longrightarrow\; I\!R$, que é diferenciável, da seguinte forma:

$$g(\epsilon) \;\;=\;\; J(u^* \;+\; \epsilon\; v) \tag{5.23}$$

$$g(\epsilon) \;\;=\;\; J(u^*) \;+\; \epsilon\; a(u^*, v) \;-\; \epsilon\; b(v) \;+\; \frac{\epsilon^2}{2}\, a(v,v) \;\;. \tag{5.24}$$

Sabemos que g possui um ponto de mínimo em $\epsilon \;=\; 0$, assim temos que $g'(0) \;=\; 0$. Desse modo, obtemos

$$g'(\epsilon) \;\;=\;\; a(u^*, v) \;-\; b(v) \;+\; \epsilon\; a(v,v) \tag{5.25}$$

$$g'(0) \;\;=\;\; a(u^*, v) \;-\; b(v) \;=\; 0 \qquad ; \qquad \forall\, v \in V_0 \;\;. \tag{5.26}$$

Portanto mostramos que u^* é solução do problema variacional $(\mathcal{V})$. Assim acabamos de mostrar a equivalência entre o problema variacional $(\mathcal{V})$ e o problema de minimização $(\mathcal{M})$. Falta mostrar que se u^* é solução do problema variacional $(\mathcal{V})$, então é solução do problema diferencial $(\mathcal{D})$. Desse modo, mostramos até agora que

$$(\mathcal{D}) \qquad \Longrightarrow \qquad (\mathcal{V}) \qquad \Longleftrightarrow \qquad (\mathcal{M}) \; .$$

5.4 Método de Galerkin

Temos neste momento a ferramenta necessária para apresentarmos o **Método de Galerkin**, que é baseado na formulação variacional (5.13) , ponto de partida para os métodos de elementos finitos e para os métodos espectrais.

Vamos considerar um subespaço de dimensão finita V_h^0 do espaço de aproximação V_0 . Seja $\{ \varphi_1 , \cdots , \varphi_n \}$ uma base para o subespaço V_h^0 , isto é , toda função $v \in V_h^0$ é escrita da seguinte forma :

$$v(x) \;=\; \sum_{j=1}^{n} \alpha_j \; \varphi_j(x) \qquad \text{com} \qquad v(0) \;=\; 0 \quad \text{e} \quad v(1) \;=\; 0 \;\; . \tag{5.27}$$

Portanto, fica natural uma **Discretização para o Problema Variacional** (5.13) , usualmente denominada de **Método de Galerkin**, que pode ser formalizado da seguinte maneira:

$(\mathcal{V}_h)$ encontrar uma função $u_h \in V_h^0$ solução da equação

$$\int_0^1 \alpha(x) \; u_h'(x) \; v'(x) \; dx \;+\; \int_0^1 \sigma(x) \; u_h(x) \; v(x) \; dx \;=\; \int_0^1 f(x) \; v(x) \; dx \quad \forall \;\; v \in V_h^0 \; .$$

Como a função $u_h \in V_h^0$, podemos escrevê-la da seguinte forma:

$$u_h(x) \;=\; \sum_{j=1}^{n} \alpha_j \; \varphi_j(x) \;\; . \tag{5.28}$$

Para simplificar a notação , vamos reescrever o problema acima como:

$(\mathcal{V}_h)$ encontrar uma função $u_h \in V_h^0$ solução da equação

$$a(u_h, v) \;=\; b(v) \qquad ; \qquad \forall \; v \in V_h^0 \;\; . \tag{5.29}$$

Como (5.29) é válida para toda função em V_h^0 , em particular será válida para as funções de base. Desse modo, utilizando as funções de base e substituindo (5.28) em (5.29) tem-se que :

$$\sum_{j=1}^{n} \alpha_j \, a(\varphi_j, \varphi_i) \;=\; b(\varphi_i) \qquad ; \qquad i \;=\; 1, \, \cdots, \, n \;\; . \tag{5.30}$$

É fácil ver que (5.30) é um sistema linear com n equações e n incógnitas $\alpha_1, \, \cdots, \, \alpha_n$, que são as coordenadas de u_h com relação à base do espaço V_h^0 . Fazendo uma representação matricial do sistema acima, temos que os elementos da matriz do sistema $C \;=\; [\, c_{ij} \,]$ são dados por:

$$c_{ij} \;=\; a(\varphi_j, \varphi_i) \;=\; \tag{5.31}$$

$$\int_0^1 \alpha(x) \, \varphi_j'(x) \, \varphi_i'(x) \, dx \;+\; \int_0^1 \sigma(x) \, \varphi_j(x) \, \varphi_i(x) \, dx \;\; ; \;\; i, \, j \;=\; 1, \, \cdots, \, n \;.$$

Geralmente, a matriz C é escrita como a soma de duas matrizes; $M \;=\; [\, m_{ij} \,]$ denominada de **matriz de massa** e $K \;=\; [\, k_{ij} \,]$ a **matriz de rigidez**, que são definidas por:

$$m_{ij} \;=\; \int_0^1 \sigma(x) \, \varphi_j(x) \, \varphi_i(x) \, dx \qquad ; \qquad i, \, j \;=\; 1, \, \cdots, \, n \;, \tag{5.32}$$

$$k_{ij} \;=\; \int_0^1 \alpha(x) \, \varphi_j'(x) \, \varphi_i'(x) \, dx \qquad ; \qquad i, \, j \;=\; 1, \, \cdots, \, n \;. \tag{5.33}$$

Tendo em vista a simetria da forma bilinear $a(\, \cdot \, , \, \cdot \,)$, temos que a matriz C é simétrica. E pela postividade da forma bilinear tem-se que C é uma matriz positiva-definida. Estas duas propriedades indicam que o Método de Decomposição de Cholesky, que possui uma boa estabilidade numérica, é o mais apropriado para resolver o sistema linear proveniente do método de Galerkin. As componentes do vetor do lado direito do sistema linear $b \;=\; [\, b_i \,]$, denominado de **vetor de carga**, são dadas por:

$$b_i \;=\; \int_0^1 f(x) \, \varphi_i(x) \, dx \qquad ; \qquad i \;=\; 1, \, \cdots, \, n \;. \tag{5.34}$$

Portanto, temos que a resolução do problema variacional discreto fica convertido na resolução de um sistema linear, cuja solução é um vetor com os coeficientes da aproximação

de Galerkin $u_h \in V_h^0$ com relação à base escolhida. A estrutura da matriz do sistema linear proveniente do método de Galerkin depende da escolha da base para o subespaço de aproximação V_h^0 , como veremos mais adiante. Os espaços de aproximação mais adequados são os **Espaços de Elementos Finitos**. Assim, o método de Galerkin é usualmente denominado de **Método de Elementos Finitos**.

Podemos também definir uma Aproximação para o Problema de Minimização (5.20) , usualmente denominado de **Método de Ritz**, da seguinte forma :

$(\mathcal{M}_h)$ encontrar uma função $u_h \in V_h^0$ tal que

$$J(u_h) \;=\; min\{\, J(v) \quad ; \quad v \in V_h^0 \,\}. \tag{5.35}$$

De maneira análoga ao procedimento anterior, podemos mostrar que os problemas $\mathcal{M}_h$ e $\mathcal{V}_h$ são equivalentes.

5.5 Método de Galerkin - Lagrange Linear

Vamos obter uma solução do problema variacional discreto $(\mathcal{V}_h)$ definido em (5.29) , isto é, obter a solução de Galerkin para o problema diferencial $(\mathcal{D})$, utilizando como espaço de aproximação o Espaço das Funções de Lagrange Lineares por Partes.

Dada uma partição qualquer de $[0,1]$, $\Pi \;:\; 0 \;=\; x_0 < x_1 < \cdots < x_n < x_{n+1} \;=\; 1$, seja $L_1(\Pi)$ associado à partição Π . Pode-se verificar que $L_1(\Pi)$ é um subespaço vetorial do espaço V definido em (5.4) . Vamos considerar o seguinte subespaço de $L_1(\Pi)$:

$$L_1^0(\Pi) \;=\; \{\, v \in\; L_1(\Pi) \;\;/\;\; v(0) \;=\; v(1) \;=\; 0 \,\}. \tag{5.36}$$

Note que $L_1^0(\Pi)$ é um subespaço de V_0 .

Como vimos no capítulo anterior, as funções de base para o subespaço $L_1^0(\Pi)$ são dadas por:

$$\varphi_j(x) \;=\; \begin{cases} (\, x \;-\; x_{j-1} \,) \;/\; h_j & ; \quad \text{se } \; x \in [x_{j-1}, x_j] \\ (\, x_{j+1} \;-\; x \,) \;/\; h_{j+1} & ; \quad \text{se } \; x \in [x_j, x_{j+1}] \\ 0 & ; \quad \text{caso contrário,} \end{cases} \tag{5.37}$$

para $j = 1, 2, \cdots, n$. O gráfico da função φ_i está representado na Figura 5.1. Podemos observar que as funções de base φ_0 e φ_{n+1}, associadas aos nós $x_0 = 0$ e $x_{n+1} = 1$, foram retiradas da base, pois para toda fução $v \in L_1^0(\Pi)$ tem-se que $v(0) = v(1) = 0$.

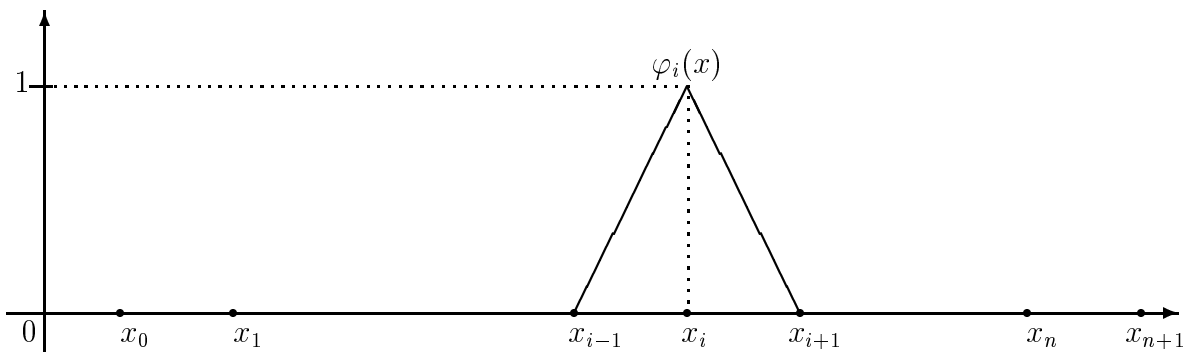

Figura 5.1: Funções de base para o subespaço $L_1^0(\Pi)$.

Desse modo, temos que $dim(\ L_1^0(\Pi)\ ) = n$. Vamos agora construir o sistema linear proveniente do metodo de Galerkin. Inicialmente, construiremos o vetor de carga $\vec{b} = [\, b_i \,]$ cujas componentes estão definidas em (5.34) e utilizando (5.37) :

$$b_i = \int_0^1 f(x)\, \varphi_i(x)\, dx = \int_{x_{i-1}}^{x_{i+1}} f(x)\, \varphi_i(x)\, dx \quad ; \quad i = 1, \cdots, n\,. \tag{5.38}$$

Podemos reescrever (5.38) de uma maneira mais conveniente para os cálculos computacionais utilizando as funções de base local definidas em $(4.8) - (4.9)$:

$$b_i = \int_{x_{i-1}}^{x_i} f(x)\, \lambda_2^{(i)}(x)\, dx + \int_{x_i}^{x_{i+1}} f(x)\, \lambda_1^{(i+1)}(x)\, dx \quad ; \quad i = 1, \cdots, n\,. \tag{5.39}$$

Antes de construir a matriz de massa $M = [\, m_{ij} \,]$ e a matriz de rigidez $K = [\, k_{ij} \,]$ dadas por $(5.32) - (5.33)$, vamos fazer uma observação sobre as suas estruturas que estão relacionadas com as funções de base para o espaço $L_1^0(\Pi)$. Observemos que

a função de base φ_i está definida somente no intervalo $[x_{i-1}, x_{i+1}]$ e a função φ_j está definida somente no intervalo $[x_{j-1}, x_{j+1}]$, bem como as suas derivadas. Desse modo temos que $m_{ij} = k_{ij} = 0$ para $| i - j | \geq 2$ e portanto, as matrizes são tridiagonais. Vamos agora construir a matriz de massa, iniciando pela diagonal principal:

$$m_{ii} = \int_0^1 \sigma(x) \, (\, \varphi_i(x) \,)^2 \, dx = \int_{x_{i-1}}^{x_{i+1}} \sigma(x) \, (\, \varphi_i(x) \,)^2 \, dx \quad ; \quad i = 1, \cdots, n \, . \tag{5.40}$$

Podemos reescrever (5.40) de uma maneira mais conveniente para os cálculos computacionais utilizando as funções de base local definidas em $(4.8) - (4.9)$:

$$m_{ii} = \int_{x_{i-1}}^{x_i} \sigma(x) \, (\, \lambda_2^{(i)}(x) \,)^2 \, dx + \int_{x_i}^{x_{i+1}} \sigma(x) \, (\, \lambda_1^{(i+1)}(x) \,)^2 \, dx \, , \tag{5.41}$$

para $i = 1, \cdots, n$. Temos também que a matriz de massa é simétrica, assim precisamos construir somente a diagonal supeior :

$$m_{i,(i+1)} = \int_0^1 \sigma(x) \, \varphi_{i+1}(x) \, \varphi_i(x) \, dx = \int_{x_i}^{x_{i+1}} \sigma(x) \, \varphi_{i+1}(x) \, \varphi_i(x) \, dx \, , \tag{5.42}$$

para $i = 1, \cdots, (n-1)$. Podemos reescrever (5.42) de uma maneira mais conveniente para os cálculos computacionais utilizando as funções de base local definidas em $(4.8) - (4.9)$:

$$m_{i,(i+1)} = \int_{x_i}^{x_{i+1}} \sigma(x) \, \lambda_1^{(i+1)}(x) \, \lambda_2^{(i+1)}(x) \, dx \quad ; \quad i = 1, \cdots, (n-1) \, . \tag{5.43}$$

De maneira análoga, construímos a matriz de rigidez. Temos que a solução de Galerkin $u_h \in L_1^0(\Pi)$ é escrita da seguinte forma:

$$u_h(x) = \sum_{j=1}^{n} u_j \, \varphi_j(x) \, , \tag{5.44}$$

onde o vetor de coordenadas $\vec{u} = (\, u_1 \, , \, \cdots \, , \, u_n \,)$ é a solução do sistema linear

$$C\vec{u} = \vec{b} \, ,$$

com $C = M + K$ e $\vec{b}$ é o vetor de carga. Sabemos que a matriz do sistema linear neste caso é tridiagonal, simétrica e definida-positiva. Assim, o sistema linear proveniente do método de Galerkin deve ser resolvido pelo método de Decomposição de Cholesky, utilizando-se um algoritmo especial para matrizes tridiagonais. Temos também que as funções de base para o Espaço das Funções de Lagrange Lineares por Partes são funções nodais, isto é, $\varphi_i(x_j) = \delta_{ij}$, assim obtemos que $u_h(x_j) = u_j$ para $j = 1 \, \cdots \, , \, n$.

5.6 Teorema de Lax-Milgram e Lema de Céa

Consideremos o espaço vetorial V munido do produto interno $\langle \cdot , \cdot \rangle_V$ definido em (5.7) e com a norma $\| \cdot \|_V$ proveniente do produto interno. Vamos apresentar os resultados de existência e unicidade, bem como uma estimativa de estabilidade, para a solução dos problemas variacionais $(\mathcal{V})$ e $(\mathcal{V}_h)$, e uma estimativa do erro da aproximação de Galerkin para o problema variacional discreto $(\mathcal{V}_h)$.

Teorema 5.1 (Teorema de Lax-Milgram) :

Sejam $a(\cdot , \cdot)$ uma forma bilinear contínua e coerciva e $b(\cdot)$ uma forma linear contínua. Então, existe um único elemento $u^* \in V_0$ solução da equação

$$a(u, v) \;=\; b(v) \qquad ; \qquad \forall\, v \in V_0 \;\; ,$$

valendo a seguinte estimativa de estabilidade

$$\| u^* \|_V \;\leq\; \frac{c_3}{c_2} \;\; , \tag{5.45}$$

com c_3 a constante de continuidade da forma linear e c_2 a constante de coercividade da forma bilinear. Além disso, se $a(\cdot , \cdot)$ for uma forma bilinear simétrica temos que u^* é a única solução do problema de minimização $(\mathcal{M})$.

Podemos aplicar o Teorema de Lax-Milgram ao problema variacional discreto $(\mathcal{V}_h)$ e ao problema de minimização $(\mathcal{M}_h)$ no caso em que a forma bilinear for simétrica. O resultado a seguir fornece uma estimativa do erro para a solução de Galerkin.

Teorema 5.2 (Teorema de Céa) :

Considerando as hipóteses do Teorema de Lax-Milgram, sejam u^* a solução do problema $(\mathcal{V})$ e u_h a solução do problema variacional discreto $(\mathcal{V}_h)$. Então, temos a seguinte estimativa de erro para a solução de Galerkin

$$\| u^* \,-\, u_h \|_V \;\leq\; \frac{c_1}{c_2}\, min\{ \| u^* \,-\, v \|_V \quad ; \quad \forall\, v \in V_h^0 \} \;\; , \tag{5.46}$$

com c_1 a constante de continuidade e c_2 a constante de coercividade da forma bilinear $a(\cdot , \cdot)$ em V.

5.6.1 Interpretação Geométrica para Solução de Galerkin

Vamos apresentar uma interpretação geométrica para a solução de Garlerkin do problema variacional $(\mathcal{V}_h)$. Com esse objetivo definimos o **produto interno energia** no espaço vetorial V , da seguinte forma :

$$\begin{aligned} \langle \cdot , \cdot \rangle_E : \quad V \times V \quad &\longrightarrow I\!R \\ (u, v) \quad &\longrightarrow \langle u , v \rangle_E = a(u, v) . \end{aligned} \tag{5.47}$$

De fato, (5.47) define um novo produto interno no espaço V devido às propriedades da forma bilinear $a(\cdot , \cdot)$ definida em (5.14) . Assim, temos também uma **norma energia** associada ao produto interno $\langle \cdot , \cdot \rangle_E$, que vamos denotar por $\| \cdot \|_E$.

Considerando que $u^* \in V_0$ é a solução do problema variacional $(\mathcal{V})$ e que $u_h \in V_h^0 \subset V_0$ é a solução do problema variacional discreto (5.29) , temos que

$$a(u^*, v) = b(v) \quad ; \quad \forall\, v \in V_h^0 \tag{5.48}$$

$$a(u_h, v) = b(v) \quad ; \quad \forall\, v \in V_h^0 \ . \tag{5.49}$$

Desse modo, subtraindo (5.49) de (5.48) e utilizando (5.47) , obtemos

$$a((u^* - u_h) , v) = \langle (u^* - u_h) , v \rangle_E = 0 \quad ; \quad \forall\, v \in V_h^0 \ . \tag{5.50}$$

O que equivale a dizer que o erro da solução de Galerkin $e_h = u^* - u_h$ é ortogonal ao subespaco de aproximação V_h^0 com relação ao produto interno energia, isto é , u_h é a **projeção ortogonal** de u^* no espaço de aproximação V_h^0 .

Portanto, temos que a solução de Galerkin $u_h \in V_h^0 \subset V_0$ é a **Melhor Aproximação** de $u^* \in V_0$ com relação à norma energia e podemos enunciar o seguinte resultado:

Teorema 5.3 Considerando que $u^* \in V_0$ seja a solução do problema variacional $(\mathcal{V})$ e que $u_h \in V_h^0 \subset V_0$ seja a solução do problema variacional discreto (5.29) , temos que

$$\| u^* - u_h \|_E \leq \| u^* - v \|_E \quad ; \quad \forall\ v \in V_h^0 \ .$$

O teorema acima e o Lema de Céa serão muito utilizados para obtermos estimativas de erro para a solução de Galerkin, como veremos a seguir.

5.6.2 Uma Estimativa de Erro para Solução de Galerkin

Nesta seção apresentaremos uma estimativa de erro para a solução de Galerkin do problema variacional discreto $(\mathcal{V}_h)$ utilizando o espaço de aproximação das Funções de Lagrange Lineares por Partes. Para isso, vamos considerar o espaço vetorial V munido do produto interno $\langle \cdot\,,\,\cdot \rangle_V$ definido em (5.7) e com a norma $\| \cdot \|_V$ proveniente deste produto interno.

Seja $u^* \in V_0$ a solução do problema variacional $(\mathcal{V})$ e $u_h \in L_1^0(\Pi) \subset V_0$ a solução de Galerkin. Então, queremos obter uma estimativa para o erro

$$e_h \;=\; u^* \,-\, u_h \;\;,$$

com relação à norma $\| \cdot \|_V$. Seja $\tilde{u}_h \in L_1^0(\Pi)$ a função spline linear interpolante de u^* nos pontos da partição Π . Utilizando o Lema de Céa e a função interpoladora, temos que

$$\| u^* \,-\, u_h \|_V \;\leq\; \frac{c_1}{c_2} \| u^* \,-\, \tilde{u}_h \|_V \;\;. \tag{5.51}$$

Podemos obter uma estimativa do erro da interpolação em $L_1(\Pi)$ com relação a norma $\| \cdot \|_V$ da seguinte forma:

$$\| u^* \,-\, \tilde{u}_h \|_V \;\leq\; C\, h \left(\int_0^1 \left(\frac{du^*(x)}{dx} \right)^2 dx \right)^{1/2} \;\;, \tag{5.52}$$

onde C é uma constante independente de h. Substituindo a estimativa (5.52) em (5.51) obtemos a seguinte estimativa do erro para a solução de Galerkin

$$\| u^* \,-\, u_h \|_V \;\leq\; \frac{c_1}{c_2}\, C\, h \left(\int_0^1 \left(\frac{du^*(x)}{dx} \right)^2 dx \right)^{1/2} \;\;. \tag{5.53}$$

A demonstração da estimativa (5.53) está fora dos objetivos deste texto. Para encontrar mais detalhes veja a referência (Johnson, 1987).

Capítulo 6

Equações de Difusão-Convecção

Nos capítulos 1 e 2 apresentamos alguns modelos matemáticos, para o fluxo em meios porosos, que são fenmênos de transporte. Equações diferenciais associadas a este tipo de fenômenos têm grande importância prática na modelagem de um vasto número de problemas. Estas podem ser de difícil análise, tanto do ponto de vista teórico quanto numérico, nos casos em que ocorram predominância do termo convectivo sobre o termo difusivo. Isto se explica pela possibilidade da presença de ondas de choque, que correspondem a regiões de descontinuidade da solução, ou então de regiões de transição muito rápida.

6.1 Colocação do Problema

Inicialmente, vamos nos ater ao caso unidimensional da equação de difusão-convecção estacionária:

$$-(\alpha(x)u'(x))' \ + \ \beta(x)u'(x) \ + \ \sigma(x)u(x) \ = \ f(x), \quad ; \quad x \in (0,1) \tag{6.1}$$

com as condições de contorno de Dirichlet

$$u(0) = 0, \quad u(1) = 0. \tag{6.2}$$

A função $\alpha(x)$ é conhecida como coeficiente de difusão, $\beta(x)$ é o coeficiente de convecção - responsável pelo transporte da solução - e $\sigma(x)$ é o coeficiente de absorção. Todas elas, $\alpha(x)$, $\beta(x)$ e $\sigma(x)$ devem ser estritamente positivas em $[0,1]$.

Vamos analisar o comportamento da solução do problema $(6.1)-(6.2)$ com coeficientes constantes $\alpha(x) = \alpha_0$, $\beta(x) = \beta_0$, $\sigma(x) = 0$ e $f(x) = f_0$. Este é um caso particular de

equação diferencial linear a coeficientes constantes cuja solução pode ser encontrada em (Rappaz, 1998), sendo dada por:

$$u(x) = \frac{f_0}{\beta_0}\left(x - \frac{1-\exp(\frac{\beta_0}{\alpha_0}x)}{1-\exp(\frac{\beta_0}{\alpha_0})}\right) \qquad \forall x \in [0,1]. \tag{6.3}$$

Se β_0 é positivo e (β_0/α_0) é grande, isto é, se $\beta_0 >> \alpha_0$, então $u(x)$ se comporta como $(f_0 x/\beta_0)$, exceto em uma vizinhança de ordem (α_0/β_0) do ponto $x = 1$ na qual a solução u apresenta uma camada limite. Na Figura 6.1, apresentamos o gráfico de $u(x)$ no caso $\alpha_0 = 5.0 \times 10^{-2}$, $\beta_0 = 1.0$, $\sigma(x) = 0$ e $f_0 = 1.0$.

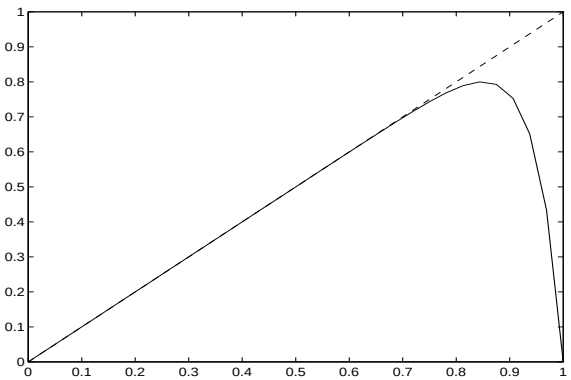

Figura 6.1: Solução $u(x)$ para $\beta_0 >> \alpha_0$.

Na seção 6.8 analisaremos o problema de evolução de difusão-convecção.

6.2 Formulação Variacional

Vamos escrever o problema $(6.1) - (6.2)$ da seguinte forma, também chamado de Problema Diferencial:

$(\mathcal{D})$ encontrar uma função $u^* \in \mathcal{C}_0^{(2)}([0,1])$ solução da equação

$$-(\alpha(x)u'(x))' + \beta(x)u'(x) + \sigma(x)u(x) = f(x) \quad ; \quad x \in (0,1). \tag{6.4}$$

Usando os mesmos passos do capítulo 5, podemos apresentar a Formulação Variacional do problema de valores de contorno $(6.1) - (6.2)$:

$(\mathcal{V})$ encontrar $u^* \in V_0$ solução da equação

$$\int_0^1 \alpha(x)u'(x)v'(x)dx + \int_0^1 \beta(x)u'(x)v(x)dx + \int_0^1 \sigma(x)u(x)v(x)dx = \tag{6.5}$$

$$= \int_0^1 f(x)v(x)dx, \quad \forall \ v \in V_0,$$

onde

$$V \ = \ \{ \ v : [0,1] \longrightarrow I\!R \ / \ v \text{ contínua, } v' \text{ contínua por partes e limitada } \},$$

e

$$V_0 \ = \ \{ \ v \in V \ / \ v(0) \ = \ 0 \quad \text{e} \quad v(1) \ = \ 0 \ \}.$$

De forma mais simples, o problema variacional (6.5) pode ser reescrito como:

$(\mathcal{V})$ encontrar $u^* \in V_0$ solução da equação

$$a(u,v) \ = \ b(v) \qquad ; \qquad \forall \ v \in V_0,$$

onde

$$a(u,v) = \int_0^1 (\alpha(x)u'(x)v'(x) + \beta(x)u'(x)v(x) + \sigma(x)u(x)v(x))dx$$

e

$$b(v) \equiv \langle f, v \rangle = \int_0^1 f(x)v(x)dx,$$

com $\langle \cdot, \cdot \rangle$ sendo o produto interno usual do espaço V.

6.3 Método de Galerkin - Lagrange Linear

Vamos considerar um subespaço de dimensão finita V_h^0 do espaço de aproximação V_0 para escrever a Aproximação para o Problema Variacional (6.5), usualmente denominado de Método de Galerkin:

$(\mathcal{V}_h)$ encontrar uma função $u_h \in V_h^0$ tal que

$$a(u_h,v) \ = \ b(v) \qquad ; \qquad \forall \ v \in V_h^0. \tag{6.6}$$

Para obter uma solução para o problema variacional discreto $(\mathcal{V}_h)$ definido em (6.6), isto é , obter a solução de Galerkin para o problema diferencial $(\mathcal{D})$, utilizamos como

espaço de aproximação $V_h^0 = L_1^0(\Pi)$ dado por:

$$L_1^0(\Pi) = \{ v \in L_1(\Pi) / v(0) = v(1) = 0 \}. \tag{6.7}$$

A definição de $L_1(\Pi)$ pode ser encontrada na seção 4.1.1 e Π é uma partição qualquer de $[0,1]$, isto é, $\Pi : 0 = x_0 < x_1 < \cdots < x_n < x_{n+1} = 1$.

Lembrando que $h_k = x_k - x_{k-1}$, podemos definir

$$h = \max\{ h_k, \quad k = 1, \cdots, n+1\}.$$

A seguir, vamos obter uma estimativa da estabilidade do método de Galerkin. Para isto, tomamos $v = u_h$ em (6.6) obtemos

$$\langle \alpha u_h^{'}, u_h^{'} \rangle + \langle \beta u_h^{'}, u_h \rangle + \langle \sigma u_h, u_h \rangle = \langle f, u_h \rangle. \tag{6.8}$$

Assumindo que o campo de velocidades β corresponda a um fluxo incompressível, isto é $\beta^{'}(x) = 0$, e levando em consideração as condições de fronteira do nosso problema, podemos integrar $\langle \beta u_h^{'}, u_h \rangle$ por partes e concluir que este termo se anula identicamente.

Desta forma, (6.8) se reduz a

$$\langle \alpha u_h^{'}, u_h^{'} \rangle + \langle \sigma u_h, u_h \rangle = \langle f, u_h \rangle. \tag{6.9}$$

Considerando a desigualdade

$$2ab \leq a^2\epsilon + \frac{b^2}{\epsilon}, \quad \forall a, b \in I\!R \; e \; \epsilon \in I\!R_+^*, \tag{6.10}$$

podemos reescrever (6.9) como

$$\langle \alpha u_h^{'}, u_h^{'} \rangle + \langle \sigma u_h, u_h \rangle \leq \frac{\epsilon}{2}\langle f, f \rangle + \frac{1}{2\epsilon}\langle u_h, u_h \rangle,$$

que implica em

$$\langle \alpha u_h^{'}, u_h^{'} \rangle + \langle (\sigma - \frac{1}{2\epsilon}) u_h, u_h \rangle \leq \frac{\epsilon}{2}\langle f, f \rangle,$$

ou

$$\|\alpha^{\frac{1}{2}} u_h^{'}\|^2 + \|(\sigma - \frac{1}{2\epsilon})^{\frac{1}{2}} u_h\|^2 \leq \frac{\epsilon}{2}\|f\|^2. \tag{6.11}$$

Observação 1: Na estimativa (6.11) podemos notar que se f for limitada na norma $\mathcal{L}_2(0,1)$, definida em (5.8), obteremos um controle no comportamento das soluções aproximadas u_h, bem como em sua derivada de primeira ordem, desde que a função $\alpha(x)$ não seja pequena. Se $\alpha(x)$ se aproxima de zero em $[0,1]$, então o controle sobre o tamanho de $u_h^{'}$ se perde.

6.4 Método de Difusão Artificial

A forma mais simples de evitar o aparecimento das oscilações citadas na observação 1 é adicionar um termo difusivo artificial $-\delta u^{''}$ à equação (6.1). De forma mais precisa, queremos encontrar $u_h \in L_1^0(\Pi)$ tal que

$$C\langle u_h^{'}, v^{'}\rangle + \langle \beta u_h^{'}, v\rangle + \langle \sigma u_h, v\rangle = \langle f, v\rangle, \quad \forall v \in L_1^0(\Pi).$$

De maneira análoga a seção anterior, temos a estimativa de estabilidade na norma $\mathcal{L}_2(0,1)$:

$$\|C^{\frac{1}{2}} u_h^{'}\|^2 + \|(\sigma - \frac{1}{2\epsilon})^{\frac{1}{2}} u_h\|^2 \leq \frac{\epsilon}{2}\|f\|^2. \tag{6.12}$$

A constante C depende da escolha do parâmetro δ. De acordo com esta escolha temos três métodos diferentes (veja (Fernandes, 1998)):

Método	δ	C
Difusão Artificial Clássico	$h - \alpha$	h
Difusão Artificial Modificado	$\beta^2(h - \alpha)$	$h + \alpha(1 - \beta^2)$
"Classical Upwind"	h	$h + \alpha$

Estes métodos produzem soluções numéricas sem oscilações, mas introduzem uma perturbação na equação original que não permite que a precisão do método seja melhor que $O(h)$, mesmo quando usamos, em cada elemento, aproximação polinomial de ordem maior que 1.

6.5 Método "Streamline Diffusion"

Se alterarmos o espaço das funções teste tornando-o diferente do espaço de aproximação, estaremos nos referindo a uma família de métodos conhecidos como métodos de Petrov-Galerkin. O método "Streamline Diffusion" é um membro desta família. Para estabelecê-lo, multiplicamos a equação (6.1) por uma função teste do tipo $v + \delta\beta v^{'}$, com $v \in V_0$, e integramos sobre o intervalo $[0,1]$ para obter:

$$\langle \alpha u^{'}, v^{'} \rangle - \delta \langle (\alpha u^{'})^{'}, \beta v^{'} \rangle + \langle \beta u^{'}, v \rangle + \delta \langle \beta u^{'}, \beta v^{'} \rangle +$$

$$+ \langle \sigma u, v \rangle + \delta \langle \sigma u, \beta v^{'} \rangle = \langle f, v + \delta \beta v^{'} \rangle, \tag{6.13}$$

onde δ é um parâmetro que definiremos posteriormente.

O problema variacional discreto associado a (6.13) é:

$(\mathcal{V}_h)$ encontrar uma função $u_h \in V_h^0$ tal que

$$\langle \alpha u_h^{'}, v^{'} \rangle - \delta \langle (\alpha u_h^{'})^{'}, \beta v^{'} \rangle + \langle \beta u_h^{'}, v \rangle + \delta \langle \beta u_h^{'}, \beta v^{'} \rangle +$$

$$+ \langle \sigma u_h, v \rangle + \delta \langle \sigma u_h, \beta v^{'} \rangle = \langle f, v + \delta \beta v^{'} \rangle, \quad \forall v \in V_h^0. \tag{6.14}$$

Para a escolha de δ, vamos definir o Número de Peclet da Discretização para o elemento $K = [x_{k-1}, x_k]$ dado por

$$\gamma_k(x) = \mid \beta(x) \mid \frac{h_k}{\alpha(x)}.$$

De acordo com [*Rappaz*], podemos tomar em cada elemento K

$$\delta_k(x) = \frac{\gamma_k(x) h_k}{12 \mid \beta(x) \mid} \quad se\ \gamma_k(x) < 6,$$

$$\delta_k(x) = \frac{h_k}{2 \mid \beta(x) \mid} \quad se\ \gamma_k(x) \geq 6.$$

Entretanto, sendo Π uma partição regular, isto é, com todos os elementos finitos de mesmo tamanho, torna-se suficiente tomarmos $\delta = \hat{C}h$ se $h > (2\alpha/\beta)$ com $\hat{C} > 0$ e $\delta = 0$ se $h \leq (2\alpha/\beta)$.

Se considerarmos α, β e σ constantes e $V_h^0 = L_1^0(\Pi)$, então, podemos obter a seguinte estimativa de estabilidade cuja demonstração pode ser encontrada em (Fernandes, 1998):

$$(\alpha + \delta\beta^2 - \frac{\delta\beta}{2\epsilon_2})\|u_h^{'}\|^2 + (\sigma - \frac{1}{2\epsilon_1})\|u_h\|^2 \leq (\frac{\epsilon_1 + \delta\beta\epsilon_2}{2})\|f\|^2, \tag{6.15}$$

onde $\epsilon_1, \epsilon_2 \in I\!R_+^*$.

Observação 2: Comparando (6.15) com a respectiva estimativa (6.11) do método de Galerkin, vemos que se $f \in \mathcal{L}_2(0,1)$ conseguimos um controle melhor do comportamento de $u_h^{'}$, mesmo quando α se aproxima de zero.

6.6 Método de Galerkin com Funções Bolha

A idéia principal deste método é escolher o espaço de aproximação adequadamente, de modo a aumentar a estabilidade do método de Galerkin. Isto pode ser conseguido pela adição de uma função bolha a cada elemento.

Uma função bolha φ tem suporte contido em um único elemento, se anula em sua fronteira e é positiva em seu interior. Em nosso caso, vamos tomar a função $\beta_2^{(k)}(x)$ da base local de $L_2(\Pi)$, definida em $(4.18) - (4.20)$, como função bolha.

Vamos considerar o seguinte subespaço

$$V_h^b = L_1^0(\Pi) \oplus B(\Pi),$$

onde $B(\Pi)$ denota o espaço das funções bolha definido sobre a partição Π.

Se em (6.6) tomarmos $V_h^0 = V_h^b$ estaremos construindo uma variação do método de Galerkin, enriquecida com funções bolha, mais estável que o método em sua forma usual no caso de equações do tipo difusão-convecção, como pode ser visto em (Franca, 1995). Este método pode ser descrito pelo problema:

Encontrar $u_h \in V_h^b$ tal que

$$\langle \alpha u_h^{'}, v^{'} \rangle + \langle \beta u_h^{'}, v \rangle + \langle \sigma u_h, v \rangle = \langle f, v \rangle, \quad \forall v \in V_h^b. \tag{6.16}$$

Se em (6.16) tomarmos $v = \varphi(x)$ para $x \in K$ e $v = 0$ caso contrário, obtemos

$$\langle \alpha u_h^{'}, \varphi^{'} \rangle_K + \langle \beta u_h^{'}, \varphi \rangle_K + \langle \sigma u_h, \varphi \rangle_K = \langle f, \varphi \rangle_K,$$

onde o subescrito K indica integração no elemento K.

Podemos decompor a solução u_h em sua parte linear $u_1 \in L_1^0(\Pi)$ e sua parte gerada pelas bolhas, isto é,

$$u_h = u_1 + \sum_K u_b^K \varphi, \tag{6.17}$$

onde u_b^K é o coeficiente da função bolha no elemento K.

Substituindo (6.17) em (6.16) temos

$$\langle \alpha u_1^{'}, \varphi^{'} \rangle_K + u_b^K \langle \alpha \varphi^{'}, \varphi^{'} \rangle_K + \langle \beta u_1^{'}, \varphi \rangle_K + u_b^K \langle \beta \varphi^{'}, \varphi \rangle_K +$$

$$+ \langle \sigma u_1, \varphi \rangle_K + u_b^K \langle \sigma \varphi, \varphi \rangle_K = \langle f, \varphi \rangle_K.$$

Porém, para $\forall w \in L_1^0(\Pi)$ e α constante temos, integrando por partes, que $\langle \alpha w^{'}, \varphi^{'} \rangle_K = 0$. Lembrando que, para β constante, $\langle \beta \varphi^{'}, \varphi \rangle_K = 0$, temos que

$$u_b^K [\alpha \| \varphi^{'} \|_K^2 + \| \sigma^{\frac{1}{2}} \varphi \|_K^2] = \langle f - \beta u_1^{'} - \sigma u_1, \varphi \rangle_K.$$

Isto é, o coeficiente da função bolha pode ser eliminado, em cada elemento, por

$$u_b^K = \frac{\langle f - \beta u_1^{'} - \sigma u_1, \varphi \rangle_K}{\alpha \| \varphi^{'} \|_K^2 + \| \sigma^{\frac{1}{2}} \varphi \|_K^2}. \tag{6.18}$$

Este procedimento pode ser repetido para cada elemento $K = [x_{k-1}, x_k] \in \Pi$. Se em (6.16) tomarmos $v = v_1 \in L_1^0(\Pi)$ e usarmos (6.17) , temos que

$$\langle \alpha u_1^{'}, v_1^{'} \rangle + \sum_K u_b^K \langle \alpha \varphi^{'}, v_1^{'} \rangle_K + \langle \beta u_1^{'}, v_1 \rangle + \sum_K u_b^K \langle \beta \varphi^{'}, v_1 \rangle_K +$$

$$+ \langle \sigma u_1, v_1 \rangle + \sum_K u_b^K \langle \sigma \varphi, v_1 \rangle_K = \langle f, v_1 \rangle. \tag{6.19}$$

Então, o problema variacional resultante (6.19) é equivalente a usar o método de Galerkin com $V_h = L_1^0(\Pi)$ mais um termo que em vista de (6.18) pode ser reescrito:

$$\sum_K u_b^K \langle \beta \varphi^{'} + \sigma \varphi, v_1 \rangle_K = \sum_K \frac{\langle f - \beta u_1^{'} - \sigma u_1, \varphi \rangle_K}{\alpha \| \varphi^{'} \|_K^2 + \| \sigma^{\frac{1}{2}} \varphi \|_K^2} \langle \varphi, \sigma v_1 - \beta v_1^{'} \rangle_K \; =$$

$$= \sum_K \frac{\langle f - \beta u_1^{'} - \sigma u_1, \sigma v_1 - \beta v_1^{'} \rangle_K}{\alpha \| \varphi^{'} \|_K^2 + \| \sigma^{\frac{1}{2}} \varphi \|_K^2} \overline{C} \| \varphi \|_K^2, \tag{6.20}$$

onde $\overline{C}$ é uma constante.

Isto sugere uma alteração do espaço das funções teste, ou seja, a inclusão de funções bolha funciona como um método tipo Petrov-Galerkin para estabilizar o problema variacional. Em (Fernandes, 1998) podemos encontrar uma estimativa de estabilidade para o problema (6.16).

6.7 Exemplos Numéricos

Inicialmente, fizemos simulações numéricas do método de Galerkin para o problema $(6.1) - (6.2)$ com coeficientes $\alpha(x) = 5.0 \times 10^{-3}$, $\sigma(x) = 0.0$, $\beta(x) = 1.0$, $f(x) = 1.0$. Se $h > (2\alpha/\beta)$, podemos ver na Figura 6.2 que o método de Galerkin apresenta solução com oscilações nas proximidades da fronteira $x = 1$. Neste caso, h é muito grande para acomodar a camada limite neste ponto. Se $h < (2\alpha/\beta)$, então a solução de Galerkin é uma boa aproximação da solução do problema $(6.1) - (6.2)$, como pode ser visto na Figura 6.3.

Nem sempre é possível refinar a malha de forma que h fique suficientemente pequeno. Isto pode aumentar muito a dimensão do sistema linear resultante da discretização, tornando impraticável a sua resolução. Por isso, foram criados os métodos alternativos apresentados nas seções $6.4 - 6.6$ que não necessitam de refinamento da malha para produzirem boas soluções numéricas do nosso problema difusão-convecção.

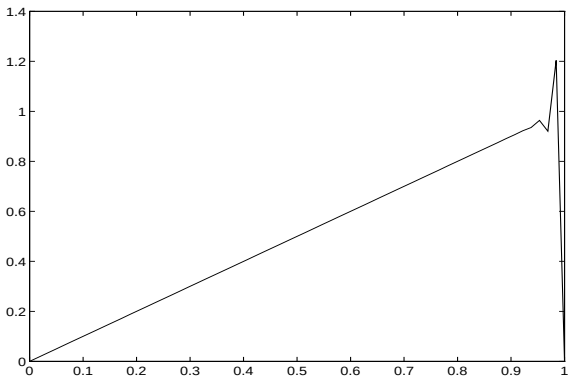

Figura 6.2: Método de Galerkin - $h > (2\alpha/\beta)$.

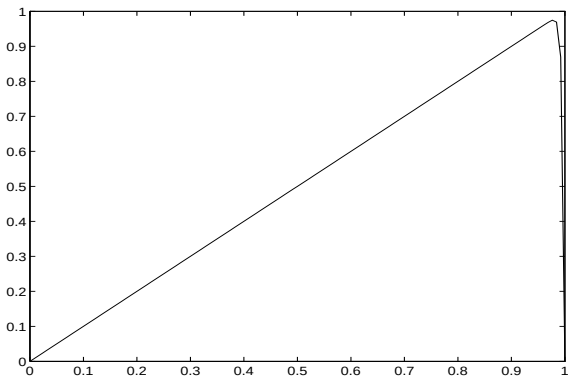

Figura 6.3: Método de Galerkin - $h < (2\alpha/\beta)$.

Quanto menor a relação (α/β), menor o tamanho da vizinhança do ponto $x = 1$ em que aparece a camada limite. Portanto, mais rápido será o decaimento da solução para acomodar a condição de contorno de Dirichlet nula. Desta forma, h deve ser suficientemente pequeno para capturar esta região de transição rápida.

A seguir, apresentamos os gráficos das simulações numéricas do problema $(6.1)-(6.2)$ com os métodos das seções $6.4-6.6$. Para isto, tomamos os coeficientes da equação dados por $\alpha(x) = 1.0 \times 10^{-3}$, $\sigma(x) = 1.0, \beta(x) = 1.0, f(x) = e^{-x}$, e $h = 1/64$.

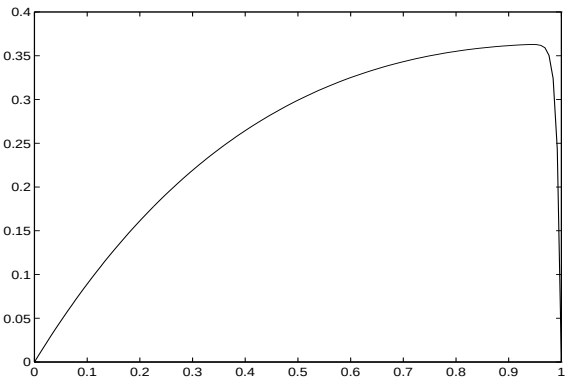

Figura 6.4: Difusão Artificial Modificado.

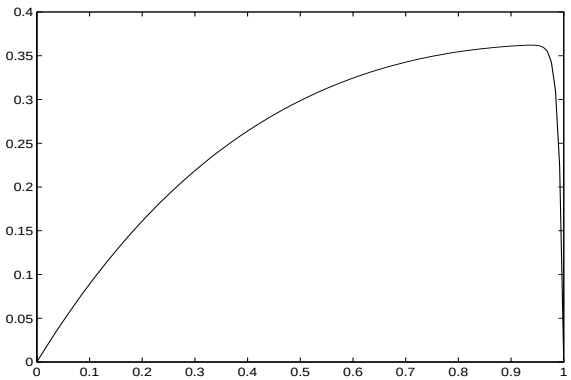

Figura 6.5: Método "Classical Upwind".

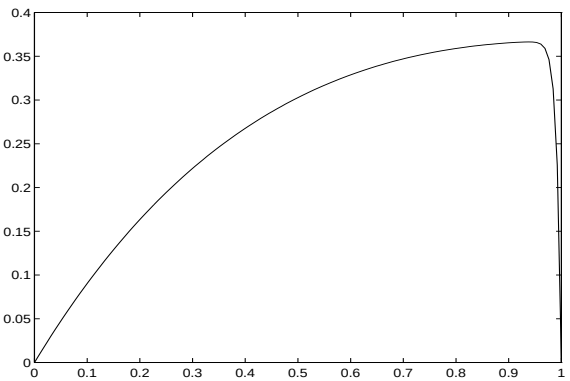

Figura 6.6: Método "Streamline Diffusion".

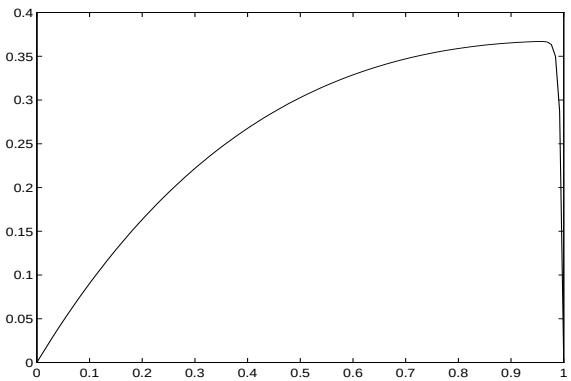

Figura 6.7: Galerkin com Funções Bolha.

Note que as Figuras $6.4-6.7$ são idênticas, mostrando que os métodos apresentaram comportamento parecido para este conjunto de dados de entrada.

Nas Figuras $6.8-6.9$ comparamos os métodos de Galerkin e "Streamline Diffusion" para $\alpha(x) = 1.0 \times 10^{-3}$, $\sigma(x) = 0.0, \beta(x) = 1.0, f(x) = 1.0$ e $h = 1/64$.

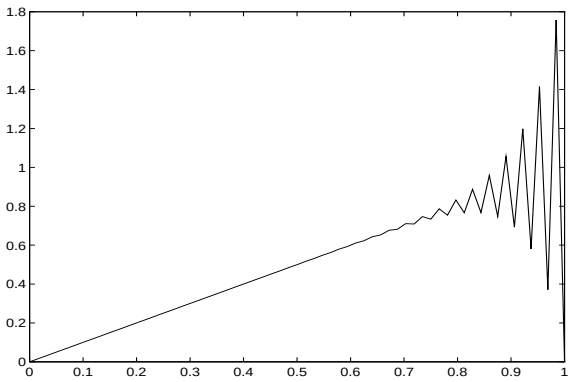

Figura 6.8: Galerkin - Lagrange Linear.

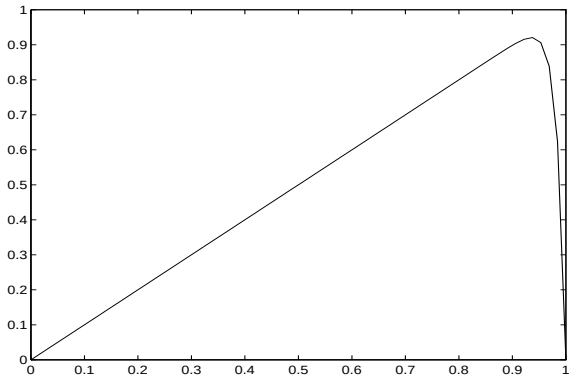

Figura 6.9: Método "Streamline Diffusion".

Nas Figuras $6.10 - 6.11$ comparamos as soluções de Galerkin e Galerkin com funções bolha para $\alpha(x) = 1.0 \times 10^{-3}$, $\sigma(x) = 1.0, \beta(x) = 1.0, f(x) = 1.0$ e $h = 1/64$.

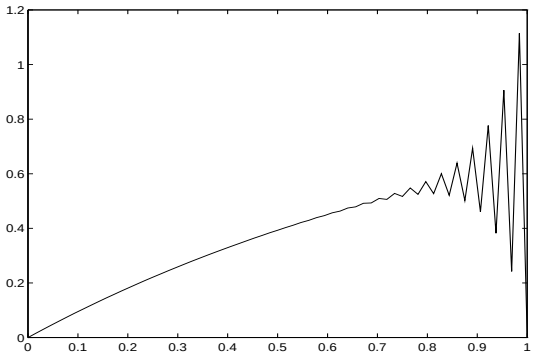

Figura 6.10: Galerkin - Lagrange Linear.

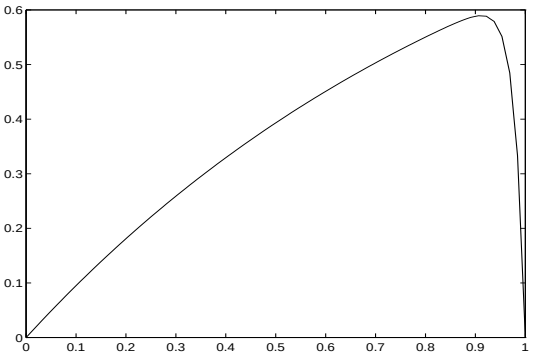

Figura 6.11: Galerkin com Funções Bolha.

6.8 Problema de Evolução de Difusão-Convecção

Nesta seção, vamos analisar o seguinte problema:

$$\frac{\partial u(x,t)}{\partial t} - \frac{\partial}{\partial x}\left(\alpha(x)\frac{\partial u(x,t)}{\partial x}\right) + \beta(x)\frac{\partial u(x,t)}{\partial x} = f(x), \quad ; \ \Omega \times I, \tag{6.21}$$

$$u(0,t) = 0, \quad u(1,t) = 0, \ \ t \in I \tag{6.22}$$

$$u(x,0) = u_0(x), \ x \in \Omega. \tag{6.23}$$

Aqui, $\Omega = [0,1] \subset I\!R$, $I = [0,T] \subset I\!R$, β é um dado campo de velocidades e $\alpha \geq 0$ é o coeficiente de difusão.

6.8.1 Semi-discretização no Tempo

Seja $\Delta : \quad 0 = t_0 < t_1 < \cdots < t_N = T$ uma partição qualquer de $I = [0, T]$ com $I_n = (t_{n-1}, t_n)$ e $k_n = t_n - t_{n-1}$ o passo local no tempo.

Vamos utilizar o método de Euler Regressivo para discretizar a derivada no tempo da equação (6.21). Procuramos $u^n(x)$, aproximação de $u(x, t_n)$, $n = 1, 2, \cdots, N$, $x \in \Omega$, satisfazendo

$$\frac{u^n - u^{n-1}}{k_n} \; - \; \frac{\partial}{\partial x}\left(\alpha(x)\frac{\partial u^n}{\partial x}\right) \; + \; \beta(x)\frac{\partial u^n}{\partial x} \; = \; f(x), \tag{6.24}$$

e a condição inicial

$$u(x, 0) = u_0(x). \tag{6.25}$$

A formulação variacional do problema $(6.24) - (6.25)$ com as condições de contorno (6.22) será descrita a seguir.

Multiplicando (6.24) por $v \in V_0$, para um dado nível de tempo n, e integrando sobre $[0, 1]$, tem-se que

$$\langle u^n, v\rangle + k_n a(u^n, v) = b(v), \;\; \forall\, v \in V_0, \tag{6.26}$$

onde

$$a(u^n, v) = \int_0^1 \alpha(x)\frac{\partial u^n(x)}{\partial x}\frac{\partial v(x)}{\partial x}dx \; + \; \int_0^1 \beta(x)\frac{\partial u^n(x)}{\partial x}v(x)dx \; ,$$

$$b(v) = \langle k_n f + u^{n-1}, v\rangle = \int_0^1 k_n f(x)v(x)dx + \int_0^1 u^{n-1}(x)v(x)dx,$$

$$\langle u^n, v\rangle = \int_0^1 u^n(x)v(x)dx.$$

Buscando a solução num conjunto cujas funções satisfaçam as condições de contorno dadas em (6.22), podemos enunciar o seguinte problema variacional:

$(\mathcal{V})$ encontrar $u^n \in V_0$, $n = 1, 2, \cdots, N$, tal que

$$\langle u^n, v\rangle \; + \; k_n a(u^n, v) \; = \; b(v) \qquad ; \qquad \forall\, v \in V_0,$$

satisfazendo a condição inicial

$$u^0(x) = u_0(x).$$

6.8.2 Discretização no espaço e no Tempo

Vamos considerar o espaço de aproximação $V_h^0 = L_1^0(\Pi)$ para escrever o problema variacional discreto, ou aproximação de Galerkin:

$(\mathcal{V}_h)$ encontrar $u_h^n \in V_h^0$, $n = 1, 2, \cdots, N$, tal que

$$\langle u_h^n, v\rangle + k_n a(u_h^n, v) = b(v) \quad ; \quad \forall\, v \in V_h^0, \tag{6.27}$$

$$\langle u_h^0, v\rangle = \langle u_0, v\rangle \quad ; \quad \forall\, v \in V_h^0. \tag{6.28}$$

6.8.3 Método "Streamline Diffusion"

A idéia principal deste método é tomar funções-teste do tipo $v+\delta\beta\frac{\partial v}{\partial x}$, com $v \in V_0$ e sendo δ um parâmetro. Desta forma, o problema variacional discreto do método "Streamline Diffusion" pode ser escrito como

$(\mathcal{V}_h)$ encontrar $u_h^n \in V_h^0$, $n = 1, 2, \cdots, N$, tal que

$$\langle u_h^n, v + \delta\beta\frac{\partial v}{\partial x}\rangle + k_n a(u_h^n, v + \delta\beta\frac{\partial v}{\partial x}) = b(v + \delta\beta\frac{\partial v}{\partial x}) \quad ; \quad \forall\, v \in V_h^0, \tag{6.29}$$

$$\langle u_h^0, v + \delta\beta\frac{\partial v}{\partial x}\rangle = \langle u_0, v + \delta\beta\frac{\partial v}{\partial x}\rangle \quad ; \quad \forall\, v \in V_h^0, \tag{6.30}$$

onde $\delta = \hat{C}h$ se $h > (2\alpha/\beta)$ com $\hat{C} > 0$ e $\delta = 0$ se $h \leq (2\alpha/\beta)$, desde que a partição Π seja regular.

6.8.4 Método de Galerkin com Funções Bolha

Se em (6.27) tomarmos $V_h^0 = V_h^b$ estaremos construindo uma variação do método de Galerkin, enriquecida com funções bolha, mais estável que o método em sua forma usual no caso de equações do tipo difusão-convecção. Este método pode ser descrito pelo problema:

$(\mathcal{V}_h)$ encontrar $u_h^n \in V_h^b$, $n = 1, 2, \cdots, N$, tal que

$$\langle u_h^n, v\rangle + k_n a(u_h^n, v) = b(v) \quad ; \quad \forall\, v \in \mathcal{V}_h^b. \tag{6.31}$$

Seguindo os passos da seção 6.6, podemos mostrar que a inclusão de uma função bolha em cada elemento $K = [x_{k-1}, x_k]$ funciona como um método tipo Petrov-Galerkin e acrescenta estabilidade ao problema variacional.

6.8.5 Simulações Numéricas

A seguir, apresentamos os resultados das simulações numéricas do problema (6.21) – (6.23) com os métodos dessa seção.

Em cada uma das Figuras a seguir, podemos observar os gráficos das soluções para os tempos $t = 0.2,\ 0.4,\ 0.6,\ 0.8,\ e\ 1.0$. Para as soluções das Figuras 6.12–6.13, tomamos os coeficientes da equação dados por $\alpha(x) = 1.0 \times 10^{-3}$, $\beta(x) = 1.0$, $f(x) = 0.0$, condição inicial $u_0(x) = e^{-32(x-0.4)^2}$ e $h = 1/128$. O intervalo $I = [0, T]$, com $T = 1.0$, foi dividido em 10 subintervalos de mesmo tamanho, isto é, $k_n = 1/10$, para $n = 1, 2, \cdots, 10$. Para a Figura 6.14 tomamos os mesmos dados com exceção da condição inicial dada por $u_0(x) = e^{-64(x-0.4)^2}$.

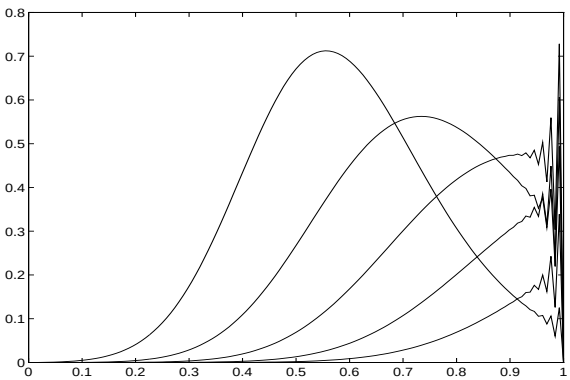

Figura 6.12: Galerkin - Lagrange Linear.

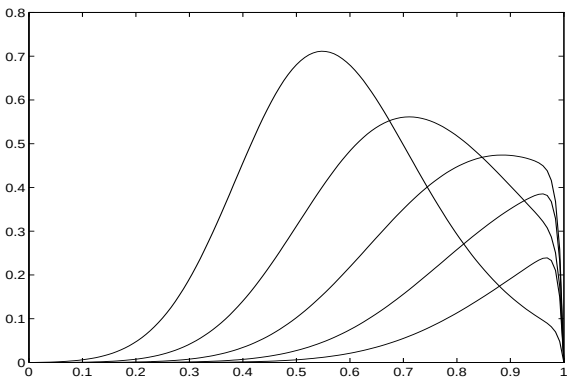

Figura 6.13: Método "Streamline Diffusion".

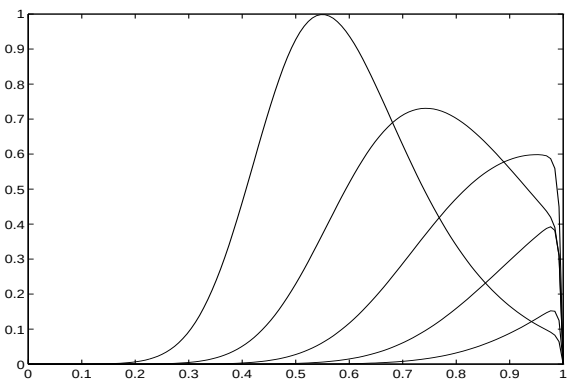

Figura 6.14: Método de Galerkin com Funções Bolha.

Observe na Figura 6.12 que $h = 1/128$ não é suficientemente pequeno para que o método de Galerkin possa reproduzir a camada limite presente nas proximidades do ponto $x = 1$. Entretanto, com a mesma malha, os métodos "Streamline Diffusion" e Galerkin com funções bolha funcionam adequadamente.

A seguir, apresentamos simulações com o Modelo Monofásico de Fluxo Miscível Unidimensional (modelo 1, capítulo 1). Para isso, no problema $(6.21) - (6.23)$ tomamos $\beta(x) = 1.0$, $f(x) = 0.0$, condição inicial $u_0(x) = 0.0$, condições de contorno $u(0,t) = 1.0$, $u(1,t) = 0.0$, para $t \in I$ e $h = 1/128$. Escolhemos os passos no tempo dados por $k_n = 5.0 \times 10^{-3}$ e $k_n = 2.0 \times 10^{-3}$, para $n = 1, 2, \cdots, 100$, respectivamente nas Figuras 6.15 e 6.16. O coeficiente de difusão foi escolhido de acordo com $[Lake]$. Assim, na Figura 6.15 $\alpha(x) = 3.0 \times 10^{-2}$ e $\alpha(x) = 1.0 \times 10^{-1}$, na Figura 6.16. Em cada uma das Figuras a seguir, podemos observar os gráficos das soluções para 20, 40, 60, 80, *e* 100 passos no tempo.

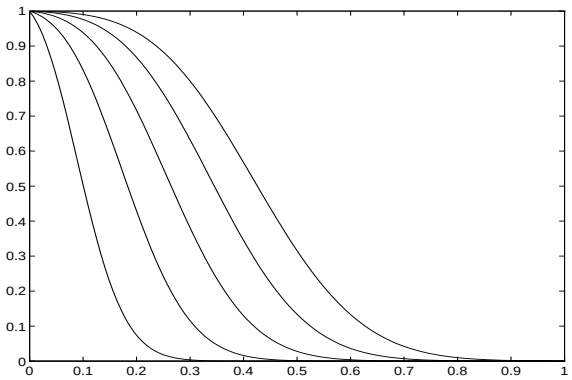

Figura 6.15: Galerkin - Lagrange Linear.

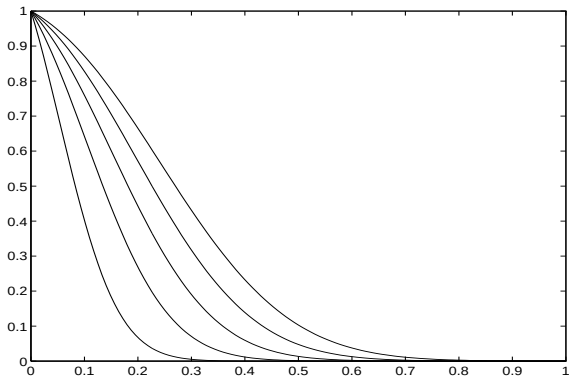

Figura 6.16: Galerkin - Lagrange Linear.

Continuando as simulações, consideraremos agora a Equação de Rapoport - Leas (2.16) que modela um Fluxo Bifásico Unidimensional e que pode ser colocada na forma do problema $(6.21) - (6.23)$ se escolhermos os coeficientes de difusão e convecção dados por $\alpha(u) = -g(u)$ e $\beta(u) = f_1(u)$. Por se tratarem de coeficientes dependentes da função u, algumas alterações foram necessárias de forma a permitir tais simulações. A principal delas foi a utilização desses coeficientes atrasados no tempo, ou seja, as soluções são computadas em cada tempo utilizando-se os coeficientes de difusão e convecção calculados no tempo anterior da simulação, e portanto, conhecidos.

Assim, sendo $u^n(x)$ uma aproximação de $u(x, t_n)$, $n = 1, 2, \cdots, N$, $x \in \Omega$, o termo de difusão da equação será tratado como

$$\frac{1}{N_{RL}}\frac{\partial}{\partial x}\left(g(u^{n-1}(x))\frac{\partial u^n(x)}{\partial x}\right).$$

No termo de convecção, para não sermos obrigados a calcular a primeira derivada de $f_1(u)$, faremos uso de integração por partes na formulação variacional do problema de modo a jogar esta derivada para as funções-teste:

$$\langle\frac{\partial}{\partial x}f_1(u^{n-1}), v\rangle = -\langle f_1(u^{n-1}), \frac{\partial v}{\partial x}\rangle.$$

Nas Figuras $6.17 - 6.20$, tomamos $f(x) = 0.0$, condição inicial $u_0(x) = 0.0$, condições de contorno $u(0,t) = 1.0$, $u(1,t) = 1.0$, para $t \in I$, $h = 1/128$ e passo no tempo dado por $k_n = 4.0 \times 10^{-3}$, para $n = 1, 2, \cdots, 100$. Em todas elas, podemos observar as soluções para $1,\ 20,\ 40,\ 60,\ 80,\ e\ 100$ passos no tempo.
A Figura 6.17, se refere aos cálculos correspondentes às funções:

$$g(u) = 0.03\frac{(1-u)^2}{1.5u^2 + (1-u)^2},$$

$$f_1(u) = \frac{u^2}{u^2 + 0.5(1-u)^2}.$$

Na Figura 6.18 foram usadas as funções:

$$g(u) = 0.1\frac{(1-u)^2}{1.5u^2 + (1-u)^2},$$

$$f_1(u) = \frac{u^2}{u^2 + \frac{2}{3}(1-u)^2}.$$

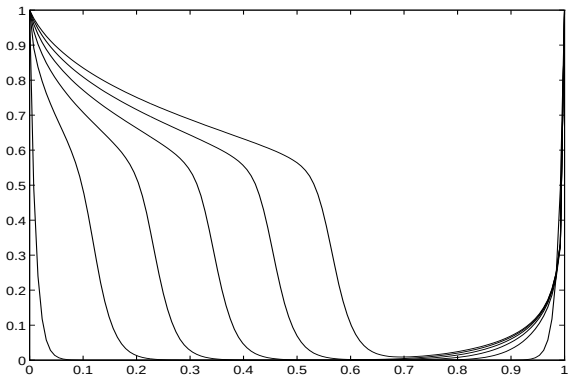

Figura 6.17: Galerkin com Funções Bolha.

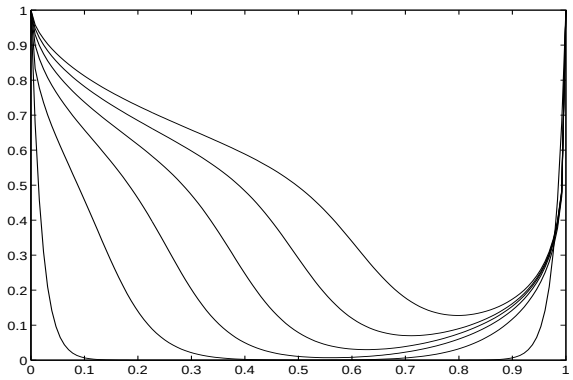

Figura 6.18: Galerkin com Funções Bolha.

Na Figura 6.19,

$$g(u) \;=\; 0.03\frac{(1-u)^3}{1.5u^3+(1-u)^3}, \qquad f_1(u) = \frac{u^3}{u^3+0.5(1-u)^3}.$$

Na Figura 6.20,

$$g(u) \;=\; 0.1\frac{(1-u)^3}{1.5u^3+(1-u)^3},$$

$$f_1(u) = \frac{u^3}{u^3+\frac{2}{3}(1-u)^3}.$$

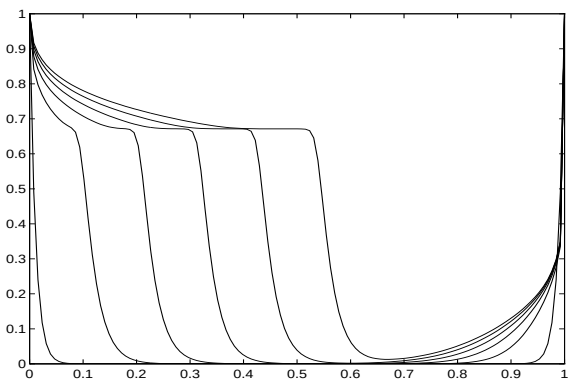

Figura 6.19: Galerkin com Funções Bolha.

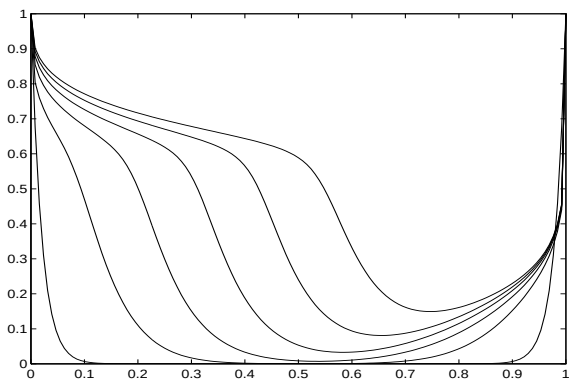

Figura 6.20: Galerkin com Funções Bolha.

Bibliografia

[1] Axelsson, O. & Barker, V. A., *Finite element solution of boundary value problems*, Academic Press, 1984.

[2] Barenblatt, G. I., Entov V. M. & Ryzhik, V. M., *Theory of Fluid Flows Through Natural Rocks*, Kluwer Academic Publishers, 1990.

[3] Bear, J., *Dynamic of fluids in porous media*, Elsevier, 1972.

[4] Boyce, W. E. & DiPrima, R. C., *Equações Diferenciais Elementares e Problemas de Valores de Contorno*, Editora Guanabara Dois, 1998.

[5] Conte, S. D. & Carl de Boor, *Elementary Numerical Analysis*, MacGraw-Hill, 1980.

[6] Farlow S. J., *Partial Differential Equations for Scientists and Engineers*, John Wiley, 1982.

[7] Fernandes, M. R. & Pulino, P., *"Métodos estabilizados de elementos finitos"*, Relatório de Pesquisa 39/98, IMECC/UNICAMP, 1998.

[8] Franca, L.P. & Farhat, C., *"Bubble functions prompt unusual stabilized finite element methods"*, Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering, No. 123, pag. 299-380, 1995.

[9] Gray, W., *"A derivation of the equations for multi-phase transport"*, Chemical Engeneering Science, No. 30, 1975.

[10] Greenkorn, R. A., *Flow Phenomena in Porous Media: Fundamentals and Applications in Petroleum, Water and Food Production*, Dekker, N.Y., 1983.

[11] Hornapour, M., Koederitz, L. F. & Harvey, H. A. , *"Empirical equations for estimating two-phase relative permeability in consolidated rock"*, Journal of Petroleum Technology, No. 34, pag. 2905-2908, 1982.

[12] Johnson, C. , *Numerical solution of partial differential equations by the finite element method*, Cambridge University Press, 1987.

[13] Lake, C. M., *Enhanced oil recovery*, Prentice Hall, 1989.

[14] Lax, P. D., *"Hyperbolic Systems of Conservation Laws and Mathematical Theory of Shock Waves"*, SIAM Regional Conference Series in Applied Mathematics, No. 11, 1972.

[15] LeVeque R. J., *Numerical Methods for Conservation Laws*, Birkhäuser Verlag, 1990.

[16] Marle, C. M., *Multiphase flow in porous media*, Gulf Publishin, 1981.

[17] Peaceman, D. W., *Fundamentals of numerical reservoir simulation*, Elsevier, 1977.

[18] Rappaz, J. & Picasso, M., *Introduction à l'analyse numérique*, Presses polytechniques et universitaires romandes, 1998.

[19] Settari, A., Price, H. S. & Dupont, T., *"Development and application of variational methods for simulation of miscible displacement in porous media"*, Society of Petroleum Engineers Journal, pag. 228-246, 1977.

[20] Smoller, J., *Shock Waves and Reaction-Diffusion Equations*, Springer, 1983.

[21] Young, L. C., *"A study of spatial approximatons for simulating fluid displacements in petroleum reservoir"*, Comp. Meth. Appl. Mec. Eng., No. 47, pag. 3-46, 1984.