

Proceeding Series of the Brazilian Society of Computational and Applied Mathematics

Precisão de métodos de volumes finitos para a solução da equação de Buckley-Leverett

Franciane Fracalossi Rocha¹Vitor Alves Pires²Fabricio Simeoni de Sousa³Gustavo Carlos Buscaglia⁴

Instituto de Ciências Matemáticas e de Computação, Universidade de São Paulo (ICMC/USP)

Resumo. Métodos cuja ordem formal de convergência é alta (≥ 2) tem bastante popularidade na solução numérica de leis de conservação hiperbólicas, em particular da equação de Buckley-Leverett que descreve escoamentos bifásicos em meios porosos. Porém, nas aplicações, as hipóteses que permitem provar a convergência de alta ordem são raramente satisfeitas. O objetivo dessa contribuição é mostrar, através de análises empíricas, o efeito da regularidade da solução sobre a ordem de convergência. Em particular, mostrar que (a) a presença de ondas de choque destrói a alta ordem quando a convergência é medida em normas $L^p(\Omega)$, com $p \geq 1$ mas não na norma dual $Lip'(\Omega)$; e que (b) a presença de ondas de rarefação é mais prejudicial, levando os métodos a primeira ordem de convergência inclusive na norma $Lip'(\Omega)$. Essas observações fazem com que a ordem formal do método nunca se realize nos casos de aplicação. A escolha do método precisa então de estudos empíricos de convergência para problemas realistas, que permitam avaliar a precisão efetiva. Um estudo 2D desse tipo, com propriedades altamente heterogêneas, é reportado na segunda parte do trabalho. Nele, é observada ordem de convergência menor que um ($\simeq O(h^{1/2})$) para métodos de ordem formal 1 (Godunov, Rusanov) e ordem $O(h)$ para suas variantes de ordem formal 2, verificando-se uma vantagem de precisão para esses últimos tanto se implementados com limitador *minmod* quanto com limitador *superbee*.

Palavras-chave. Leis de conservação hiperbólicas, Buckley-Leverett, Godunov, Rusanov, Kurganov-Tadmor, Meios porosos

1 Introdução

A equação de Buckley-Leverett é uma lei de conservação hiperbólica que modela escoamentos bifásicos em meios porosos e possui aplicações em mecânica dos solos, purificação de água e extração de petróleo [2, 7], entre outras. Para discretizar esse tipo de equações, a literatura (e.g., [9]) favorece métodos de volumes finitos de “alta ordem” (ordem formal $O(h^2)$ ou superior, sendo h o tamanho da malha espacial, suposto uniforme por simplicidade). Essa escolha é natural, pela sua precisão, em problemas com solução suave, nos

¹fr.franciane@usp.br²vitoralp@icmc.usp.br³fsimeoni@icmc.usp.br⁴gustavo.buscaglia@icmc.usp.br

quais a ordem formal de convergência é atingida. Nas aplicações, porém, as soluções não são regulares e a escolha de métodos precisa se apoiar em análises empíricas com dados representativos 2D ou 3D. Com esse intuito, essa contribuição vem complementar trabalhos anteriores tais como o de Abreu *et al.* [1], que compara dois métodos de ordem formal 2 (i.e., $O(h^2)$, ver também [3,8]). Reportamos uma comparação de vários métodos de ordem formal 1 e 2 medindo o erro com respeito a soluções de referência obtidas em malhas extremamente finas. A precisão observada empiricamente em problemas realistas é de ordem 1 ou menor, o que nos motiva a apresentar previamente estudos simplificados em 1D que conectam a perda de ordem de convergência com a norma utilizada para medir o erro e com o tipo de ondas que se desenvolvem no domínio. Para manter um mínimo de completude, começamos com uma breve revisão dos métodos de volumes finitos considerados e das soluções exatas no problema de injeção, típico da indústria do petróleo.

2 Volumes finitos para leis de conservação hiperbólicas

Afim de fixar notação recorda-se a discretização em volumes finitos para uma lei de conservação hiperbólica [9], cuja forma unidimensional é

$$\frac{\partial}{\partial t}u + \frac{\partial}{\partial x}f(u) = 0, \tag{1}$$

em que $f(u)$ é conhecida como função fluxo. A semi-discretização espacial é dada por

$$\frac{dU_i}{dt} = -\frac{1}{h}(F_{i+1/2} - F_{i-1/2}), \tag{2}$$

onde $U_i(t) = U(x_i, t)$ aproxima o valor médio de u sobre o i -ésimo intervalo espacial no tempo t . Diferentes esquemas de volumes finitos correspondem a diferentes definições dos fluxos discretos $F_{i-1/2}$ nas respectivas interfaces $x_{i-1/2}$. Os fluxos discretos se definem a partir da *reconstrução espacial* da solução discreta dada por

$$U(x, t) = U_i(t) + \sigma_i(x - x_i), \text{ para } x_{i-1/2} \leq x < x_{i+1/2}, \tag{3}$$

onde σ_i é zero para métodos de ordem formal 1, e para os de ordem formal 2 é uma aproximação da derivada de U em x_i , por exemplo dada por funções limitadoras como *minmod* ou *superbee*.

Método de Godunov: Para o método de Godunov [5, 9] define-se o fluxo $F_{i-1/2} = f(U_{i-1/2}^\downarrow)$, onde $U_{i-1/2}^\downarrow$ é o valor na interface da solução do problema de Riemann com estados $U_{i-1}^+ = U_{i-1} + \sigma_{i-1}h/2$ e $U_i^- = U_i - \sigma_i h/2$.

Métodos centrados: Os métodos centrados são mais simples que o de Godunov. Os considerados aqui tem o fluxo discreto dado por

$$F_{i-1/2} = \frac{f(U_i^-) + f(U_{i-1}^+)}{2} - \frac{a_{i-1/2}}{2} (U_i^- - U_{i-1}^+), \tag{4}$$

sendo $a_{i-1/2}$ uma estimativa para a velocidade local de propagação na interface,

$$a_{i-1/2} = \max \left\{ \rho \left(\frac{df}{du}(U_{i-1}^+) \right), \rho \left(\frac{df}{du}(U_i^-) \right) \right\}, \tag{5}$$

onde ρ é o raio espectral da matriz jacobiana $df(u)/du$. Quando utiliza-se a reconstrução constante por partes ($\sigma_i = 0, \forall i$) o método é conhecido como método de Rusanov [9]. No caso de reconstrução linear tem-se o método de Kurganov-Tadmor (KT) [3, 8].

3 A equação de Buckley-Leverett

A equação de Buckley-Leverett (BL) [2, 9] é

$$\frac{\partial s}{\partial t} + \nabla \cdot (\varphi(s)\vec{v}) = 0, \tag{6}$$

sendo s a saturação da água e $\vec{v} \in \mathbb{R}^d$ a velocidade do escoamento, que leva em conta a heterogeneidade do meio poroso. A função fluxo é

$$f(s) = \varphi(s)\vec{v} \quad \text{com} \quad \varphi(s) = \frac{Ms^2}{Ms^2 + (1-s)^2}, \tag{7}$$

onde $M = \mu_o/\mu_w$ sendo μ_o e μ_w as viscosidades do óleo e da água respectivamente.

Nos interessam condições típicas dos problemas chamados de injeção, nos quais o domínio de interesse se encontra inicialmente com $s(x, t = 0) = s_r$ (próximo de 0) e ingressa nele um fluxo com saturação s_l maior que s_r . No caso unidimensional com velocidade $v = 1$, essa situação corresponde ao problema de Riemann definido pela condição inicial $s(x, 0) = s_l$ se $x < 0$ e $s(x, 0) = s_r$ se $x > 0$. É importante lembrarmos da solução exata desse problema, não só porque ela é necessária para completar a definição dos fluxos de Godunov, senão também porque será utilizada na interpretação dos resultados numéricos.

Dependendo dos valores de s_l e s_r , a solução $s(x, t)$ pode ser uma onda de choque ou uma combinação choque/rarefação. Nos choques s satisfaz a condição de entropia de Oleńnik [9, 10], que geometricamente representa uma condição de convexidade, ilustrada na Figura 1(a). Denotando por f_c o envelope convexo acima do gráfico de f para $s \geq s_r$, os valores de s permitidos devem satisfazer $f(s) = f_c(s)$. Por ser a função de fluxo de BL não convexa, aparece para cada valor de s_r um valor \tilde{s} tal que a transição entre os valores \tilde{s} (ou s_l , se $s_l < \tilde{s}$) e s_r deve ser descontínua, surgindo assim uma onda de choque que se desloca a velocidade $c = f'(\tilde{s})$ (ou $c = (f(s_l) - f(s_r))/(s_l - s_r)$ se $s_l < \tilde{s}$). Se $s_l > \tilde{s}$, a onda de choque é acompanhada à esquerda por uma onda de rarefação que une os valores s_l e \tilde{s} . A solução, no caso $s_l < \tilde{s}$ é ilustrada na Figura 1(b), e na Figura 1(c) mostra-se o caso $s_l > \tilde{s}$. O ponto \tilde{s} cumpre $f'(\tilde{s}) = (f(\tilde{s}) - f(s_r))/(\tilde{s} - s_r)$.

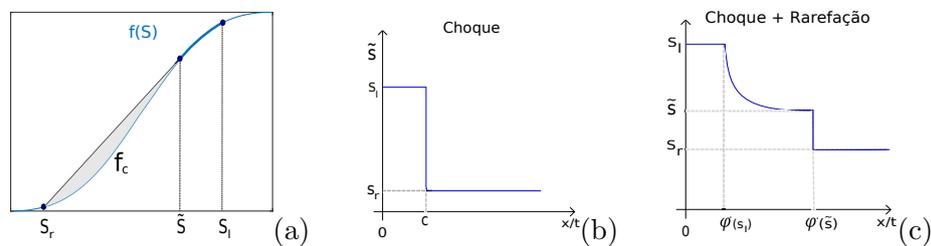


Figura 1: (a) Função fluxo e seu fecho convexo acima, (b) solução exata no caso $s_l < \tilde{s}$, (c) caso $s_l > \tilde{s}$.

Para nossos objetivos, o importante é notar que $s^\downarrow = s(0, t > 0) = s_l$ sempre que $v > 0$ e $s^\downarrow = s_r$ sempre que $v < 0$. Dessa forma, o fluxo de Godunov corresponde a “full upwind”. Também utilizaremos o valor de \tilde{s} correspondente a $s_r = 0$, isto é, $\tilde{s} = 1/\sqrt{M + 1}$.

4 Experimentos numéricos

Nesta seção apresentam-se experimentos numéricos cuja aproximação temporal é obtida pelo método Runge-Kutta TVD de segunda ordem [6]. Para o passo temporal utiliza-se a restrição CFL: $\Delta t = \Delta t_{\text{CFL}}/4$, com $\Delta t_{\text{CFL}} = h/(\max\{f'\} \max\{|\bar{v}|\})$, [9]. São utilizadas as normas de $L^1(\Omega)$ e $\text{Lip}'(\Omega)$, sendo esta última

$$\|w\|_{\text{Lip}'} = \sup\left\{\int_{\Omega} w \phi \, d\Omega \mid \phi \in C^1(\Omega), \|\nabla\phi(x)\| \leq 1, x \in \Omega\right\}. \quad (8)$$

4.1 Problema 1D com condição inicial suave

Em problemas com solução suave os métodos alcançam sua ordem formal de convergência. Aqui apresentamos um problema cuja solução é inicialmente suave mas desenvolve uma onda de choque que aparece em $t \simeq 0.035$. Considera-se o domínio $\Omega = (0, 1)$, com campo de velocidade constante $v = 1$, $M = 10$, condição inicial $S(x, 0) = 0.45\text{sen}(2\pi x) + 0.5$ e condição de contorno periódica.

Esse problema foi simulado com malhas de 25, 50, ... células e a ordem empírica de convergência para cada tempo t foi calculada ajustando uma lei de potência αh^p aos erros medidos com respeito a uma solução de referência (malha de 10000 células). Na Tabela 1 tem-se os resultados para os métodos de Rusanov e KT (limitador *minmod*) nas normas L^1 e Lip' . Até o tempo 0.03 eles apresentam convergência empírica $O(h)$ e $O(h^2)$ em ambas normas, cada um de acordo com sua ordem formal. Em torno da aparição do choque em $t = 0.035$, a ordem empírica do KT na norma L^1 cai para primeira ordem, a mesma do Rusanov. A “maior ordem” do KT sobre o Rusanov, no entanto, não é totalmente destruída pela aparição de um choque. Ela permanece quando a convergência é medida na norma Lip' [4]. Resultados análogos são obtidos para métodos de Godunov de ordem 1 e 2, e para o limitador *superbee*.

Método \ tempo	0.01	0.015	0.02	0.025	0.03	0.035	0.04	0.045	0.05
Rusanov- $L^1(\Omega)$	1.00	1.00	1.00	0.98	0.97	0.93	0.89	0.88	0.91
Rusanov- $\text{Lip}'(\Omega)$	1.05	1.07	1.09	1.10	1.05	0.92	1.02	1.04	1.04
KT- $L^1(\Omega)$	1.99	1.97	1.93	1.86	1.74	1.54	1.18	1.07	1.08
KT- $\text{Lip}'(\Omega)$	2.03	2.02	2.01	2.01	2.27	1.50	1.85	1.90	1.91

Tabela 1: Ordens de convergência em diferentes tempos para os métodos de Rusanov e KT.

4.2 Problema de Riemann

Como discutido na seção 3, se $s_r = 0$ pode-se observar a transição de um problema de puro choque, quando $0 < s_l < \tilde{s}$, a outro com uma combinação choque/rarefação para

$s_l > \tilde{s}$. Consideramos $M = 10$, e portanto $\tilde{s} = 0.3015$. Assim, foram realizadas simulações do problema para diversos valores de s_l entre 0.1 e 1 como mostrado na tabela 2 e para várias malhas, como no exemplo anterior. As ordens de convergência medidas para o método KT (limitador *minmod*) são consistentes com os resultados anteriores até $s_l = 0.3$, mostrando $O(h)$ na norma L^1 e $O(h^2)$ na norma Lip' . Para $s_l > 0.3015$, isto é, quando a solução exata contém uma onda de rarefação, a ordem empírica cai na norma Lip' , observando-se $O(h)$ em *ambas* normas. Assim, a presença de rarefações reduz a “maior ordem” do KT, e o mesmo acontece com o Godunov de segunda ordem, independentemente do limitador utilizado. Sendo as ordens iguais, a precisão pode ser comparada observando os valores da norma do erro. Essa comparação pode se vista na Figura 2 para o caso $s_l = 1$. Nota-se que os métodos Godunov *minmod* e KT *minmod* aproximam melhor a solução em ambas normas, e que essa melhora ocorre principalmente na região onde ocorre o choque como pode ser observado no detalhe.

Norma \ s_l	0.1	0.2	0.3	0.4	0.5	0.6	0.7	0.8	0.9	1.0
$L^1(\Omega)$	1.05	1.03	0.95	0.89	0.89	0.89	0.89	0.89	0.90	0.91
$Lip'(\Omega)$	2.00	2.01	1.71	1.10	1.07	1.06	1.05	1.05	1.05	1.05

Tabela 2: Ordens de convergência do método KT para diferentes escolhas de s_l .

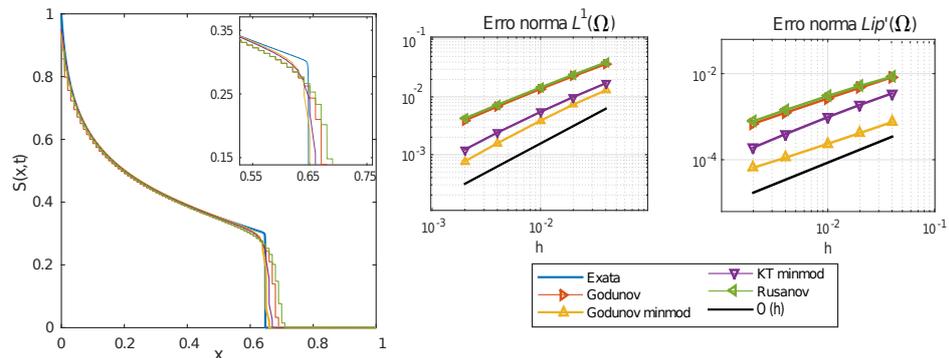


Figura 2: Aproximação da solução de BL 1D com os métodos Godunov, Godunov *minmod*, KT *minmod* e Rusanov, e respectivo estudo de convergência nas normas $L^1(\Omega)$ e $Lip'(\Omega)$.

4.3 Problema 2D heterogêneo

Finalmente é discutido um problema bidimensional $\Omega = (0, 1) \times (0, 1)$ com um campo de velocidade resultante de um campo de permeabilidade heterogêneo de alto contraste (ilustrados na Figura 3). A condição de contorno considera injeção de água constante em toda a borda esquerda. A Figura 4 (direita) ilustra a saturação numérica S calculada no tempo $t = 0.15$. O estudo empírico de convergência utiliza uma solução de referência calculada em uma malha com 640×640 células. Observa-se na Figura 4 que os métodos com reconstrução constante (Godunov e Rusanov) apresentam ordem empírica próxima de $O(h^{1/2})$, enquanto que os métodos com reconstrução linear (Godunov *minmod*/*superbee* e

KT *minmod/superbee*) apresentam ordem compatível com $O(h)$, com erros significativamente inferiores. Os resultados mostram que a solução numérica se mantém entre 0 e 1, sem valores espúrios fora dos limites físicos do problema, para todos os métodos estudados.

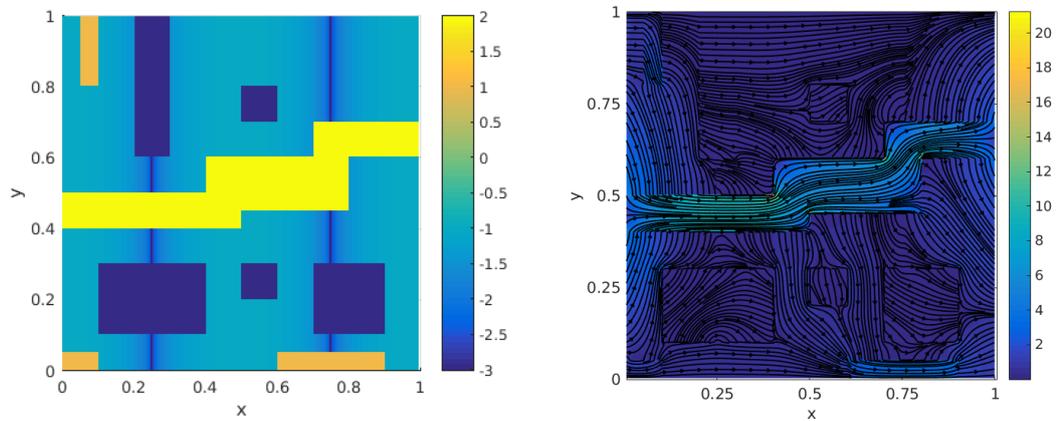


Figura 3: Campo de permeabilidade em escala logarítmica (esquerda) e linhas de corrente do campo de velocidade correspondente (direita, notar que as cores referem-se à magnitude da velocidade).

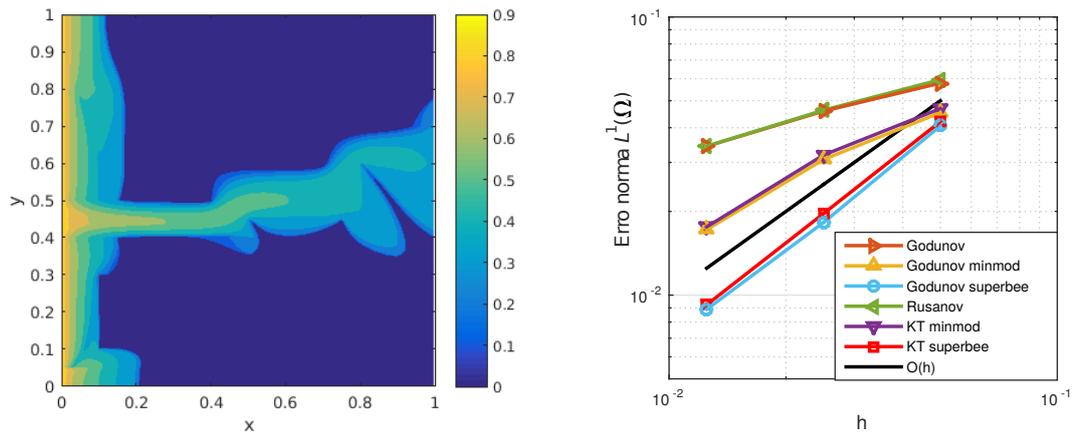


Figura 4: Solução numérica de saturação no tempo $t = 0.15$ (esquerda), e erros como função de h para diversos métodos (direita).

5 Conclusões

O presente trabalho apresenta um estudo empírico da convergência de métodos de volumes finitos para o transporte bifásico em meios porosos. Métodos do tipo Godunov e centrados foram implementados em variantes de primeira e segunda ordem formal, e testados em situações simples 1D e realistas 2D. Os experimentos orientaram-se a mostrar que a ordem empírica depende da regularidade da solução, sendo que na norma L^1 a presença de choques destrói a ordem $O(h^2)$, mas ela é preservada na norma Lip' . Mais prejudicial é a presença de ondas de rarefação, que faz com que todos os métodos apresentem

ordem empírica de convergência $O(h)$ em ambas normas. Quando aplicados em um caso bidimensional com um campo de permeabilidades de alto contraste, os resultados mostram convergência superior (aproximadamente $O(h)$) para os métodos com reconstrução linear, quando comparados aos métodos de primeira ordem (cuja ordem é aproximadamente $O(h^{1/2})$). Este estudo fornece embasamento para a escolha de métodos adequados para problemas de escoamentos bifásicos em meios porosos, que podem ser utilizados para modelos acoplados com a lei de Darcy.

Agradecimentos

O presente trabalho foi realizado com o apoio financeiro das agências CAPES, FAPESP e ANP/Petrobras. Agradecemos aos revisores as excelentes contribuições.

Referências

- [1] E. Abreu, F. Pereira, and S. Ribeiro. Central schemes for porous media flows. *Computational & Applied Mathematics*, 28(1):87–110, 2009.
- [2] S. E. Buckley and M. C. Leverett. Mechanism of fluid displacement in sands. *Transactions of the AIME*, 146(01):107–116, 1942.
- [3] S. M. Damián, N. M. Nigro, and G. C. Buscaglia. A central scheme for advecting scalars by velocity fields obtained from finite volume multiphase incompressible solvers. *Applied Mathematical Modelling*, 40(15):6934–6955, 2016.
- [4] U. S. Fjordholm and S. Solem. Second-order convergence of monotone schemes for conservation laws. *SIAM Journal on Numerical Analysis*, 54(3):1920–1945, 2016.
- [5] S. K. Godunov. A difference method for numerical calculation of discontinuous solutions of the equations of hydrodynamics. *Matematicheskii Sbornik*, 89(3):271–306, 1959.
- [6] S. Gottlieb and C.-W. Shu. Total variation diminishing Runge-Kutta schemes. *Mathematics of computation of the American Mathematical Society*, 67(221):73–85, 1998.
- [7] R. Juanes and T. W. Patzek. Three-phase displacement theory: an improved description of relative permeabilities. In *SPE Annual Technical Conference and Exhibition*. Society of Petroleum Engineers, 2004.
- [8] A. Kurganov and E. Tadmor. New high-resolution central schemes for nonlinear conservation laws and convection–diffusion equations. *Journal of Computational Physics*, 160(1):241–282, 2000.
- [9] R. J. LeVeque. *Finite volume methods for hyperbolic problems*, volume 31. Cambridge university press, 2002.
- [10] O. A. Oleĭnik. Discontinuous solutions of non-linear differential equations. *Uspekhi Matematicheskikh Nauk*, 12(3):3–73, 1957.