

**EFEITOS DA NÃO-ORTOGONALIDADE DA
MALHA NA TAXA DE CONVERGÊNCIA DO
MÉTODO DE NEWTON UTILIZANDO
COORDENADAS GENERALIZADAS**

R.M. Lucianetti, C.R. Maliska, A.F.C. Silva e A. Czesnat
SINMEC - Laboratório de Simulação Numérica em
Mecânica dos Fluidos e Transferência de Calor
Departamento de Engenharia Mecânica
Universidade Federal de Santa Catarina
88040-900 - Florianópolis - SC

SUMÁRIO

Na simulação numérica de reservatórios de petróleo, a maneira usual de linearizar as equações de conservação é através do método de Newton. Utilizando-se coordenadas generalizadas (boundary-fitted coordinates), duas estratégias distintas podem ser empregadas para a obtenção da matriz Jacobiana. Se todos os termos não-ortogonais são tratados implicitamente, tem-se uma matriz Jacobiana com dezenove diagonais. A outra estratégia é tratar apenas os termos relativos ao problema ortogonal implicitamente, avaliando os termos não-ortogonais na iteração anterior. Mesmo não afetando a qualidade do resultado, esta técnica pode afetar a taxa de convergência do método. Neste artigo, o comportamento do método de volumes finitos não-ortogonal é analisado para ambas as estratégias. Resultados para vários graus de não-ortogonalidade são apresentados.

INTRODUÇÃO

A simulação numérica de reservatórios é uma ferramenta de vital importância para o engenheiro de petróleo, uma vez que a simulação completa em laboratório é impossível de ser efetuada. Podendo estimar o escoamento do óleo, água e gás em meios porosos, torna-se uma ferramenta extremamente útil no auxílio a importantes decisões técnicas e econômicas a respeito do reservatório, tais como: produção de óleo estimada, localização de poços injetores, vida de um determinado poço, etc.

Desde a introdução dos métodos numéricos na engenharia de petróleo e ainda hoje, a discretização baseada em coordenadas cartesianas é extensivamente usada devido a sua fácil construção, simplicidade das equações discretizadas e rápida implementação do código computacional. No entanto, a discretização cartesiana apresenta consideráveis desvantagens para modelar satisfatoriamente reservatórios com geometrias complexas, falhas geológicas e/ou configurações complexas de poços.

Visando contornar estes problemas, surgiram modelos mais eficientes no tratamento da geometria de reservatórios. Tanto malhas estruturadas, quanto não-estruturadas, têm sido exploradas. No campo das malhas estruturadas, Hirasaki e O'Dell (1970), Sharp e Anderson (1985), e Sonier e Chaumet (1974) introduziram o uso de malhas curvilíneas ortogonais, promovendo a modelagem de geometrias e configurações de reservatórios um pouco mais complexas. Entretanto, a maioria dos reservatórios reais possuem contornos muito irregulares dificultando a geração de malhas ortogonais, ainda mais quando a geometria exige uma discretização tridimensional. Mais recentemente, Britto *et al.* (1991), Maliska *et al.* (1994, 1997) e Aavatsmark *et al.* (1994), fizeram o uso de sistemas curvilíneos não-ortogonais, ou generalizados, visando abranger o maior número possível de geometrias, disposição de poços e configurações geológicas de reservatórios com malhas estruturadas.

Este tipo de malha requer um esquema numérico envolvendo mais pontos do que os sete necessários para uma discretização

ortogonal tridimensional. Utilizando a formulação totalmente implícita e o método de Newton para a linearização do sistema de equações, isto implica numa matriz Jacobiana com dezenove diagonais.

Com o objetivo de manter a mesma forma da matriz Jacobiana do problema cartesiano, Maliska *et al.* (1997) propuseram calculá-la de forma inexata avaliando os termos provenientes das derivadas cruzadas na iteração anterior. Segundo os autores, apesar deste procedimento não se constituir em erro na aproximação das equações, pode afetar a taxa de convergência. Em virtude disto, justificam o emprego desta técnica para malhas ditas "quasi-ortogonais", onde a distorção dos volumes com relação a configuração ortogonal é pequena. Entretanto, ainda não são conhecidos valores quantitativos para indicar o quanto a distorção da malha influencia na taxa de convergência e também se a resolução da matriz completa realmente acarreta um maior tempo de CPU quando *solvers* de sistema linear robustos são utilizados.

Este artigo apresenta uma comparação entre as estratégias numéricas acima descritas, uma utilizando a matriz Jacobiana com suas 19 diagonais e outra com apenas as 7 correspondentes ao problema ortogonal. Os testes foram feitos em malhas tridimensionais com diferentes graus de não-ortogonalidade.

FORMULAÇÃO

Neste trabalho utilizou-se o modelo *black-oil* padrão, que consiste no escoamento isotérmico trifásico (água, óleo e gás) a três componentes (água, óleo e gás), sendo que a única solubilidade possível é a do componente gás na fase óleo. Este modelo tem vasta aplicação na indústria do petróleo e usualmente é indicado para a simulação de óleos pesados e de baixa volatilidade.

Do balanço de massa para cada componente, desprezando-se o termo difusivo (Lei de Fick) e empregando a Lei de Darcy para

a velocidade em um meio poroso, obtém-se o seguinte sistema de equações governantes

$$\frac{\partial}{\partial t} [\phi \rho^m Z^w] = \nabla \cdot [\lambda^w \nabla \Phi^w] - m^w \quad (1)$$

$$\frac{\partial}{\partial t} [\phi \rho^m Z^o] = \nabla \cdot [\lambda^{oo} \nabla \Phi^o] - X^{oo} m^o \quad (2)$$

$$\frac{\partial}{\partial t} [\phi \rho^m] = \nabla \cdot [\lambda^w \nabla \Phi^w + \lambda^o \nabla \Phi^o + \lambda^g \nabla \Phi^g] - m^w - m^o - m^g \quad (3)$$

onde ϕ , λ^p , X^{oo} , Z^c , Φ^p , ρ^m e m^p são a porosidade, mobilidade da fase p , fração mássica do componente óleo na fase óleo, fração mássica global do componente c , potencial da fase p , densidade média da mistura e fluxo de massa de produção/injeção da fase p , respectivamente. Os super-índices w , o e g correspondem, respectivamente, às fases ou aos componentes água, óleo e gás.

A Eq. (1) expressa a conservação da massa do componente água, a Eq. (2), a conservação da massa do componente óleo e a Eq. (3) é a conservação da massa global e é obtida pela soma das duas primeiras mais a equação de conservação do componente gás. Desta forma, pode-se observar que as variáveis presentes são as frações mássicas globais da água e do óleo e os potenciais das fases, sendo que a fração mássica global do gás é obtida através da equação de restrição

$$Z^g = 1 - Z^w - Z^o \quad (4)$$

Os potenciais das fases podem ainda ser relacionados com a pressão do óleo e as pressões capilares através das relações abaixo

$$\Phi^w = P^o - P^{ow} + \gamma^w z \quad (5)$$

$$\Phi^o = P^o + \gamma^o z \quad (6)$$

$$\Phi^g = P^o + P^{og} + \gamma^g z \quad (7)$$

Desta forma as variáveis primitivas passam a ser as frações mássicas globais e a pressão do óleo, P^o .

É importante salientar que este tipo de formulação com base nas frações mássicas, ao invés da formulação usual que utiliza as saturações como variáveis primitivas, foi empregado por facilitar a construção do código computacional devido a não ocorrência de desaparecimento da fase gás em condições de óleo subsaturado. Esta técnica é descrita em detalhes por Prais e Campagnolo (1991) e Maliska *et al.* (1997).

Nas Eqs. (1), (2) e (3) a mobilidade da fase p é dada por

$$\lambda^p = \frac{k k^{rp} \rho^p}{\mu^p} \quad (8)$$

onde, k , k^{rp} , ρ^p e μ^p , são a permeabilidade absoluta, permeabilidade relativa à fase p , densidade da fase p e viscosidade da fase p , respectivamente.

Transformação e Equações Aproximadas. Visando obter as equações na sua forma discreta, empregou-se o método dos volumes finitos em coordenadas generalizadas. Desta forma, as equações são transformadas do sistema cartesiano (x, y, z) para o sistema coordenado curvilíneo (ξ, η, γ) , levando o problema do domínio físico para o computacional como esquematizado na Fig. 1.

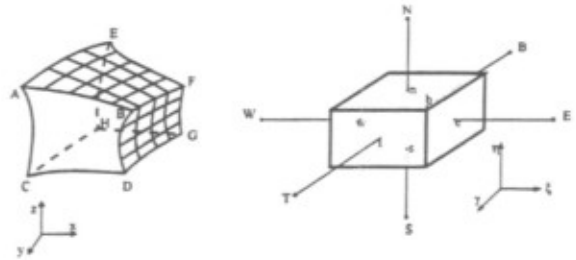


Figura 1 - Domínio físico e volume discreto no plano computacional.

Por simplicidade, daqui em diante, será mostrado apenas o processo de discretização para a equação de conservação do componente água, ou equação da água, sendo, os passos, similares para as demais equações. Desta forma, a equação transformada da água assume a forma

$$\begin{aligned} \frac{1}{J} \frac{\partial}{\partial t} [\phi \rho^m Z^w] + \frac{m^w}{J} &= \frac{\partial}{\partial \xi} \left[D_{11}^w \frac{\partial \Phi^w}{\partial \xi} + D_{12}^w \frac{\partial \Phi^w}{\partial \eta} + D_{13}^w \frac{\partial \Phi^w}{\partial \gamma} \right] \\ &+ \frac{\partial}{\partial \eta} \left[D_{21}^w \frac{\partial \Phi^w}{\partial \xi} + D_{22}^w \frac{\partial \Phi^w}{\partial \eta} + D_{23}^w \frac{\partial \Phi^w}{\partial \gamma} \right] \\ &+ \frac{\partial}{\partial \gamma} \left[D_{31}^w \frac{\partial \Phi^w}{\partial \xi} + D_{32}^w \frac{\partial \Phi^w}{\partial \eta} + D_{33}^w \frac{\partial \Phi^w}{\partial \gamma} \right] \end{aligned} \quad (9)$$

onde,

$$D_{ij}^w = \frac{\lambda^w}{J} \left[\frac{\partial x^i}{\partial \xi} \frac{\partial x^j}{\partial \xi} + \frac{\partial x^i}{\partial \eta} \frac{\partial x^j}{\partial \eta} + \frac{\partial x^i}{\partial \gamma} \frac{\partial x^j}{\partial \gamma} \right] \quad (10)$$

e $x^{i,j}$, com $i, j = 1, 2$ e 3 , correspondem a ξ, η e γ , respectivamente.

Neste ponto é interessante notar que, devido as derivadas cruzadas oriundas da não-ortogonalidade da malha, tem-se nove termos possíveis de derivada dos potenciais. Este fato também pode ser evidenciado pelo aparecimento das nove componentes do tensor métrico através dos D_{ij}^w . Para sistemas ortogonais, ter-se-ia apenas três termos: $D_{11}^w \partial \Phi^w / \partial \xi$, $D_{22}^w \partial \Phi^w / \partial \eta$ e $D_{33}^w \partial \Phi^w / \partial \gamma$.

De posse das equações transformadas, o método dos volumes finitos, que consiste na integração das equações na sua forma conservativa, é utilizado para se obter as equações aproximadas. Integrando a Eq. (9) no tempo e no volume de controle do plano transformado da Fig. 1, obtém-se

$$\begin{aligned} \frac{1}{J} \left[(\phi \rho^m Z^w)_P - (\phi \rho^m Z^w)_P^0 \right] \Delta V + \frac{m^w}{J} \Delta V \Delta t &= \\ \left[D_{11}^w \frac{\partial \Phi^w}{\partial \xi} + D_{12}^w \frac{\partial \Phi^w}{\partial \eta} + D_{13}^w \frac{\partial \Phi^w}{\partial \gamma} \right]_e \Delta \eta \Delta \gamma \Delta t &- \\ \left[D_{11}^w \frac{\partial \Phi^w}{\partial \xi} + D_{12}^w \frac{\partial \Phi^w}{\partial \eta} + D_{13}^w \frac{\partial \Phi^w}{\partial \gamma} \right]_w \Delta \eta \Delta \gamma \Delta t &+ \\ \left[D_{21}^w \frac{\partial \Phi^w}{\partial \xi} + D_{22}^w \frac{\partial \Phi^w}{\partial \eta} + D_{23}^w \frac{\partial \Phi^w}{\partial \gamma} \right]_n \Delta \xi \Delta \gamma \Delta t &- \\ \left[D_{21}^w \frac{\partial \Phi^w}{\partial \xi} + D_{22}^w \frac{\partial \Phi^w}{\partial \eta} + D_{23}^w \frac{\partial \Phi^w}{\partial \gamma} \right]_s \Delta \xi \Delta \gamma \Delta t &+ \end{aligned}$$

$$\begin{bmatrix} D_{31}^w \frac{\partial \Phi^w}{\partial \xi} + D_{32}^w \frac{\partial \Phi^w}{\partial \eta} + D_{33}^w \frac{\partial \Phi^w}{\partial \gamma} \\ D_{31}^w \frac{\partial \Phi^w}{\partial \xi} + D_{32}^w \frac{\partial \Phi^w}{\partial \eta} + D_{33}^w \frac{\partial \Phi^w}{\partial \gamma} \end{bmatrix} \Delta \xi \Delta \eta \Delta \gamma \quad (12)$$

As derivadas dos potenciais, que aparecem no interior dos colchetes na equação acima, são avaliadas usando diferenças centrais. Isto, para uma malha não-ortogonal, envolvendo as derivadas cruzadas, implica no aparecimento de dezoito vizinhos ao volume P, seis diretos (E, W, N, S, T, B) e doze "diagonais" (BS, BW, BE, BN, SW, SE, NW, NE, TS, TW, TN, TE) como é mostrado na Fig. 2. Este tipo de configuração, como será detalhado mais adiante, leva a uma matriz de blocos contendo dezenove diagonais, onde cada componente da matriz é outra matriz 3x3.

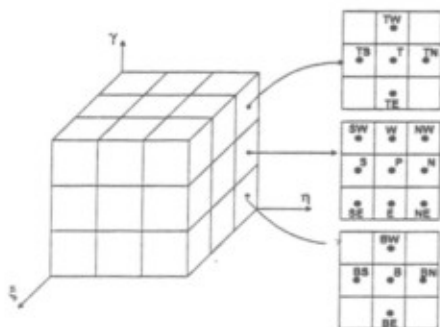


Figura 2 - Volumes presentes no esquema numérico.

Linearização. As equações do modelo *black-oil* são não-lineares. A origem desta não-linearidade está na forte dependência que as propriedades dos fluidos (mobilidades, frações mássicas dos componentes, pressões capilares, etc) têm das variáveis primitivas (pressão e frações mássicas globais). Para linearizá-las, no contexto da formulação totalmente implícita, é empregado o método de Newton, onde utiliza-se a expansão em série de Taylor das equações na sua forma residual. Desta forma, obtém-se

$$(F_p^i)^{k+1} = (F_p^i)^k + \sum_{v \in X} \left(\frac{\partial F_p^i}{\partial X^v} \right)^k \Delta X^v = 0 \quad (15)$$

onde, $i = P, w, o$ e $X = P, Z^w, Z^o$, avaliados no volume P e em todos os seus vizinhos tratados implicitamente.

Aplicando esta equação para a função resíduo da água, tem-se

$$\begin{aligned} & \left(\frac{\partial F_p^w}{\partial P_p} \right) \Delta P_p + \left(\frac{\partial F_p^w}{\partial Z_p^w} \right) \Delta Z_p^w + \left(\frac{\partial F_p^w}{\partial Z_p^o} \right) \Delta Z_p^o + \\ & \sum_{NB} \left[\left(\frac{\partial F_p^w}{\partial P_{NB}} \right) \Delta P_{NB} + \left(\frac{\partial F_p^w}{\partial Z_{NB}^w} \right) \Delta Z_{NB}^w + \left(\frac{\partial F_p^w}{\partial Z_{NB}^o} \right) \Delta Z_{NB}^o \right] = -F_p^w \end{aligned} \quad (16)$$

onde, NB representa os pontos vizinhos do volume P.

Repetindo este procedimento para as equações de resíduo do óleo e da pressão e calculando todas as derivadas, obtém-se o sistema linear a ser resolvido

$$A \Delta X = -F \quad (17)$$

onde,

$$A_y = \begin{bmatrix} \frac{\partial F_p^o}{\partial P_p} & \frac{\partial F_p^o}{\partial Z_p^w} & \frac{\partial F_p^o}{\partial Z_p^o} \\ \frac{\partial F_p^w}{\partial P_p} & \frac{\partial F_p^w}{\partial Z_p^w} & \frac{\partial F_p^w}{\partial Z_p^o} \\ \frac{\partial F_p^w}{\partial P_p} & \frac{\partial F_p^w}{\partial Z_p^w} & \frac{\partial F_p^w}{\partial Z_p^o} \end{bmatrix} \quad \Delta X_i = \begin{bmatrix} P_i^{k+1} - P_i^k \\ Z_i^{k+1} - Z_i^k \\ Z_i^{k+1} - Z_i^k \end{bmatrix} \quad F_i = \begin{bmatrix} F_i^o \\ F_i^w \\ F_i^o \end{bmatrix} \quad (18)$$

Neste ponto pode-se escolher diferentes formas para o tratamento dos termos cruzados. Se todos os termos forem considerados no mesmo nível iterativo, ou seja, forem incógnitas nas equações de resíduo, será obtido uma matriz Jacobiana de dezenove bandas, como esquematizado na Fig. 3. Por outro lado, se apenas os vizinhos diretos forem avaliados no mesmo nível iterativo, deixando os termos referentes as derivadas cruzadas serem avaliados explicitamente no termo fonte, será obtido uma matriz de apenas sete diagonais (ver Fig. 4). Isto, apesar de aparentemente muito atrativo, pode trazer uma sensível queda na taxa de convergência do método de Newton quando a malha for muito distorcida, visto que os termos cruzados terão um peso maior.

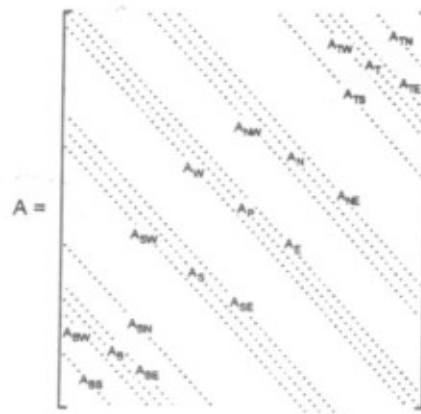


Figura 3 - Matriz Jacobiana de dezenove diagonais. Todos os termos são avaliados no mesmo nível iterativo.

É importante ressaltar que esta técnica não implica na introdução de erros, sendo apenas uma forma de avançar as variáveis no processo iterativo. Outro ponto a ser esclarecido é que o termo "avaliado explicitamente", usado para os termos não-ortogonais nesse contexto, não quer dizer que esta técnica introduz alguma característica explícita à formulação totalmente implícita, pois estes continuam sendo avaliados no mesmo nível de tempo. Esta expressão foi usada apenas para indicar que estes termos são avaliados no nível iterativo anterior.

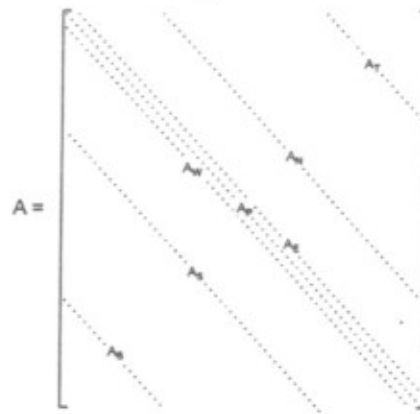


Figura 4 - Matriz Jacobiana de sete diagonais. Termos não-ortogonais são avaliados em um nível iterativo anterior.

Maliska *et al.* (1997) e Cunha (1996) utilizaram a matriz Jacobiana com sete diagonais. Esta técnica não deve apresentar problemas para malhas quase ortogonais, visto que as componentes da matriz nas diagonais correspondentes aos termos não-ortogonais são valores muito pequenos (Maliska *et al.*, 1997).

Alguns teste, que são analisados ao final deste trabalho, foram realizados visando esclarecer até que ponto é possível distorcer a malha sem prejudicar excessivamente a taxa de convergência do método de Newton, quando se utiliza a matriz Jacobiana aproximada apenas pela diagonal principal e as seis correspondentes aos seus vizinhos diretos.

COMPARAÇÃO ENTRE AS ESTRATÉGIAS NUMÉRICAS

Validação do Método Utilizado. Todos os detalhes a respeito da metodologia numérica empregada, que foi resumidamente descrita acima, bem como alguns testes realizados e comparações com resultados descritos na literatura podem ser encontrados em Maliska *et al.* (1997).

Problema Teste. A Fig. 5 mostra a geometria e a malha utilizada nos testes. O reservatório consiste em um paralelepípedo deformado, de maneira que o ângulo entre os eixos coordenados curvilíneos ξ e η é θ e, entre o eixo γ e o plano ξ - η , é $\pi - \theta$. Note-se que o plano ξ - η coincide com o plano x-y. O comprimento da aresta na direção γ é de 200 m e o comprimento nas direções ξ e η é de 1.000 m. A malha empregada foi de 15x15x5 volumes. A origem dos eixos coordenados é no volume (0, 0, 0).

Visando avaliar a influência da não-ortogonalidade de forma gradativa, o mesmo problema foi resolvido, para ambas as estratégias numéricas, com ângulos θ de 20°, 30°, 45°, 60°, 80° e 90°.

O problema consiste em um escoamento bifásico imiscível envolvendo água e óleo. Conforme é ilustrado na Fig. 5, a injeção e a produção são realizadas em cantos opostos do reservatório e em apenas um único volume. As vazões são avaliadas diretamente através dos termos fonte/sumidouro das equações governantes, ou seja, não foi empregado modelo de poço.

As curvas de permeabilidade relativa do sistema água-óleo são dadas pelas seguintes equações

$$k_o^{rw}(S^w) = k_o^{rw} \left(\frac{S^w - S^{wc}}{1 - S^{wc} - S^{or}} \right)^{n_w} \quad (19)$$

$$k_o^{ro}(S^w) = k_o^{ro} \left(\frac{1 - S^w - S^{or}}{1 - S^{wc} - S^{or}} \right)^{n_o} \quad (20)$$

onde, S^w , k_o^{rw} , k_o^{ro} , S^{wc} e S^{or} são, respectivamente, a saturação da água, permeabilidade relativa à água para uma saturação de 1- S^{or} , permeabilidade relativa ao óleo para uma saturação de água irreduzível, saturação de água irreduzível e saturação de óleo residual. n_w e n_o são expoentes.

Os dados da simulação estão condensados na Tabela 1.

Tabela 1 - Dados do problema teste.

Porosidade	$\phi = 0,3$
Permeabilidade Absoluta	$k = 0,3 \mu\text{m}^2$
Pressão Inicial	$P_i = 20.685 \text{ kPa}$
Saturação Inicial	$S^{wi} = 0,0$
Densidades	$\rho^{w,o} = 1.000 \text{ kg/m}^3$
Compressibilidades	$c^{w,o} = 7,252 \cdot 10^{-9} \text{ Pa}^{-1}$
Fatores Volume de Formação	$B^{w,o} = \frac{1}{1 + c^{w,o}(P - P_i)}$
Aceleração da Gravidade	$g = 0,0 \text{ m/s}^2$
Saturação de Água Irreduzível	$S^{wi} = 0,0$
Saturação de Óleo Residual	$S^{or} = 0,0$
k_o^{rw}, k_o^{ro}	$k_o^{rw} = k_o^{ro} = 1,0$
Expoentes	$n_w = n_o = 1,5$
Vazões de Produção/ Injeção	$q = 1,0 \text{ m}^3/\text{s}$

As viscosidades dos fluidos são funções da pressão e assumem as seguintes expressões

$$\mu^w = 10^{-3} \left[1 + 1,45 \cdot 10^{-12} (P - 1,38 \cdot 10^7) \right] \quad (21)$$

$$\mu^o = 1,163 \cdot 10^{-2} \left[1 + 1,45 \cdot 10^{-12} (P - 1,38 \cdot 10^7) \right] \quad (22)$$

O critério de convergência utilizado para o método de Newton foi para que a máxima variação da pressão não excedesse 10kPa e a máxima variação da fração mássica não fosse maior do que $5 \cdot 10^{-3}$. Utilizou-se um máximo de 20 iterações. No entanto, se, ao final das 20 iterações, a convergência não for atingida, reduz-se o passo de tempo pela metade e retoma-se este *time step*.

Para a solução do sistema linear, foi empregado o método GMRES (*Generalized Minimal Residual*) com decomposição LU incompleta como preconditionador e um máximo de 75 iterações. O critério de convergência para o *solver* foi o de que a norma do resíduo não fosse maior do que 10^{-5} .

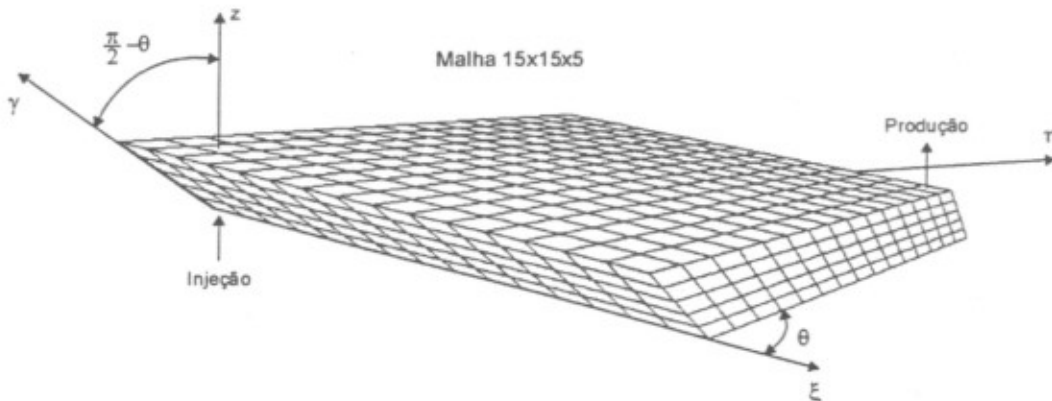


Figura 5 - Malha tridimensional utilizada nos testes.

Empregou-se um passo de tempo, Δt , variável em cada iteração, escolhido através da seguinte relação

$$\Delta t^{k+1} = \min \left\{ \Delta t_{\max}, \max \left\{ \Delta t_{\min}, \frac{\Delta t^k}{2}, \min \left\{ \Delta t_S, \Delta t_P, 2\Delta t^k \right\} \right\} \right\} \quad (23)$$

com

$$\Delta t_S = \frac{\Delta t^k \Delta S_{\lim}^w}{\Delta S_{\max}^w} \quad \Delta t_P = \frac{\Delta t^k \Delta P_{\lim}}{\Delta P_{\max}} \quad (24)$$

onde, Δt^{k+1} , Δt^k , Δt_{\max} , Δt_{\min} , ΔS_{\max}^w , ΔS_{\lim}^w , ΔP_{\max} , ΔP_{\lim} , são, respectivamente, o novo passo de tempo, o passo de tempo utilizado na iteração atual, o máximo passo de tempo permitido (neste caso foi utilizado $\Delta t_{\max} = 50$ dias), o mínimo passo de tempo permitido ($\Delta t_{\min} = 1$ s), a máxima variação da saturação da água com relação ao tempo atual, a variação máxima permitida para a saturação da água (utilizou-se 0,5), a máxima variação da saturação da água com relação ao tempo atual e a variação máxima permitida para a pressão (utilizou-se $5 \cdot 10^5$ kPa).

Em outras palavras, a relação acima quer dizer que o mínimo passo de tempo entre os valores permitidos pela variação da pressão e saturação, Δt_S e Δt_P , deve respeitar a seguinte relação

$$\Delta t_{\min} \leq \Delta t^k / 2 \leq \min \{ \Delta t_S, \Delta t_P \} \leq 2\Delta t^k \leq \Delta t_{\max} \quad (28)$$

A simulação é encerrada após atingir 1 VPI (volume poroso injetado), ou seja, após a injeção do volume de água equivalente ao volume poroso do reservatório.

Resultados. As Tabelas 2 e 3 mostram os resultados obtidos para ambas as formas da matriz Jacobiana e vários valores do ângulo θ .

Como era de se esperar, o efeito da não-ortogonalidade sobre o processo iterativo é grande para a matriz de 7 diagonais. Note-se que, para ângulos menores que 80° , obteve-se resultados melhores com a matriz de 19 diagonais. Isto devido a um processo iterativo muito mais eficiente, notado através do sensível menor número de iterações no método de Newton e no *solver* comparado com os valores obtidos para a matriz de 7 diagonais.

É importante ter em mente que o custo por iteração, tanto na iteração de Newton, quanto no *solver*, é maior para o método que utiliza a matriz de 19 diagonais, pelo motivo óbvio da matriz ser menos esparsa.

Este efeito é facilmente notado quando se comparam os dois métodos utilizando uma malha cartesiana ortogonal ($\theta = 90^\circ$), caso este em que as 12 diagonais não-ortogonais têm elementos zeros. Com relação a este caso é interessante notar o menor número de iterações no *solver* para a matriz de 19 diagonais. Isso pode ser explicado pelo fato de que, mesmo que ambas as matrizes sejam iguais do ponto de vista de elementos não-nulos, o caso com 19 diagonais leva em consideração as 12 diagonais nulas como pontos de nível zero (não nulos) que podem ser preenchidos pelo processo de fatorização LU incompleta. Desta forma, tem-se um maior condicionamento.

Tabela 2 - Comparação entre as estratégias numéricas para vários graus de não-ortogonalidade, $\theta = 20^\circ, 30^\circ$ e 45° .

	20°		30°		45°	
	7 Diag.	19 Diag.	7 Diag.	19 Diag.	7 Diag.	19 Diag.
Nº de iterações no método de Newton	1951	597	1941	592	1157	467
Média	7	2	7	2	6	2
Nº de iterações no solver	42.519	10.761	42.542	10.777	26.695	7.720
Média	170	43	172	43	145	42
Nº total de <i>time steps</i>	249	248	247	245	183	183
$\bar{\Delta t}^*$	0,700	0,703	0,706	0,710	1,92	1,92
CPU**	$2,778 \cdot 10^3$	$1,599 \cdot 10^3$	$2,742 \cdot 10^3$	$1,642 \cdot 10^3$	$1,604 \cdot 10^3$	$1,140 \cdot 10^3$
Jacobian / Resíduos**	$6,006 \cdot 10^2$	$3,569 \cdot 10^2$	$6,040 \cdot 10^2$	$3,598 \cdot 10^2$	$3,498 \cdot 10^2$	$2,702 \cdot 10^2$
<i>Solver</i> **	$1,458 \cdot 10^3$	$1,004 \cdot 10^3$	$1,401 \cdot 10^3$	$1,038 \cdot 10^3$	$8,243 \cdot 10^2$	$6,885 \cdot 10^2$

* em dias.

** em segundos.

Tabela 3 - Comparação entre as estratégias numéricas para vários graus de não-ortogonalidade, $\theta = 60^\circ, 80^\circ$ e 90° .

	60°		80°		90°	
	7 Diag.	19 Diag.	7 Diag.	19 Diag.	7 Diag.	19 Diag.
Nº de iterações no método de Newton	728	377	481	329	297	297
Média	5	2	4	3	2	2
Nº de iterações no solver	18.328	5.876	11.817	4.671	6.177	4.354
Média	133	42	108	42	58	41
Nº total de <i>time steps</i>	137	137	109	109	105	105
$\bar{\Delta t}^*$	3,85	3,85	6,08	6,24	6,64	6,64
CPU**	$1,088 \cdot 10^3$	$9,202 \cdot 10^2$	$7,048 \cdot 10^2$	$7,849 \cdot 10^2$	$3,839 \cdot 10^2$	$6,787 \cdot 10^2$
Jacobian / Resíduos**	$2,313 \cdot 10^2$	$2,218 \cdot 10^2$	$1,429 \cdot 10^2$	$2,033 \cdot 10^2$	$8,574 \cdot 10^1$	$1,743 \cdot 10^2$
<i>Solver</i> **	$5,807 \cdot 10^2$	$5,486 \cdot 10^2$	$3,761 \cdot 10^2$	$4,536 \cdot 10^2$	$1,849 \cdot 10^2$	$3,887 \cdot 10^2$

* em dias.

** em segundos.

Para mostrar o efeito do preconditionador no número de iterações no *solver* para a matriz de 19 diagonais, como mostrado acima, o caso cartesiano foi novamente resolvido, porém, agora com o método de Jacobi. Visto que este método utiliza como matriz de preconditionamento apenas a diagonal principal da matriz Jacobiana, espera-se que o número de iterações no *solver* para a matriz de 19 diagonais seja idêntico ao obtido com a matriz de 7. Isto é o que pode ser observado na Tabela 4 abaixo.

Tabela 4 - Resultado do problema cartesiano ($\theta = 90^\circ$) com o método de Jacobi como preconditionador.

	7 Diag.	19 Diag.
Nº de iterações no método de Newton	314	314
Média	3	3
Nº de iterações no solver	22.686	22.686
Média	231	231
Nº total de time steps	98	98
$\overline{\Delta t}$ *	6,96	6,96
CPU**	$7,518 \cdot 10^2$	$1,133 \cdot 10^3$

* em dias.

** em segundos.

Outro comportamento interessante de ser observado nos resultados é a mínima variação das médias de iterações para a matriz com 19 diagonais, o que mostra a independência deste método com relação a não-ortogonalidade da malha.

Com relação a liberdade dada ao algoritmo através da escolha automática do passo de tempo, pode-se dizer que ambas as estratégias numéricas tiveram comportamentos muito próximos, todavia, nos casos onde houve pequena diferença, foi observado uma vantagem para o método com matriz de 19 diagonais. Este efeito pode ser observado nas Tabelas 2 e 3 através do passo de tempo médio, $\overline{\Delta t}$, e do número total de *time steps*.

A Tabela 5 quantifica a eficiência de cada estratégia com relação ao tempo de CPU, ilustrando a análise feita acima.

Tabela 5 - Razão CPU¹⁹ / CPU⁷.

	20°	30°	45°	60°	80°	90°
CPU ¹⁹ / CPU ⁷	0,576	0,599	0,711	0,846	1,11	1,77 / 1,51*

* com o método de Jacobi como preconditionador.

CONCLUSÕES

Para o método dos volumes finitos em coordenadas generalizadas aplicado a simulação numérica de reservatórios de petróleo, mostrou-se duas estratégias numéricas para tratar os termos não-ortogonais.

Uma estratégia calcula a matriz Jacobiana de forma inexacta avaliando os termos de derivada cruzada explícitos, obtendo a mesma forma de matriz do caso ortogonal. A outra é calcular a Jacobiana exata levando-se em consideração todos os termos e, assim, obtendo-se uma matriz com 19 diagonais para um problema tridimensional.

De acordo com os resultados obtidos vê-se que cada uma das estratégias têm um comportamento distinto com relação a não-ortogonalidade da malha.

A técnica que utiliza a matriz Jacobiana aproximada com 7 diagonais é fortemente influenciada pelos termos não ortogonais e apresentou resultados piores na taxa de convergência e, inclusive, no tempo de CPU, para ângulos menores que 80°.

Entretanto, para os ângulos de 80° e 90°, a situação se inverte devido ao maior custo por iteração da matriz de 19 diagonais e a melhora do processo iterativo da outra estratégia.

AGRADECIMENTOS

Os autores agradecem ao CENPES/PETROBRÁS pelo suporte financeiro parcial deste trabalho através de convênio com o SINMEC – Laboratório de Simulação Numérica em Mecânica dos Fluidos e Transferência de Calor da UFSC.

REFERÊNCIAS

- Aavatsmark, I., Barkve, T., Boe, O., Mannseth, T., 1994, "Discretization on Non-Orthogonal, Curvilinear Grids for Multi-Phase Flow", Proc. 4th European Conference on the Mathematics of Oil Recovery, Roros, vol. D, 17 pp.
- Britto, P. R. F., Pedrosa Jr., O. A. e Home, R., 1991, "Application of Boundary-Fitted Curvilinear Grid to Reservoir Simulation", XI COBEM, São Paulo, Dez., pp. 129-132.
- Cunha, A. R., 1996, *Uma Metodologia Para Simulação Numérica Tridimensional de Reservatórios de Petróleo Utilizando Modelo Black-Oil e Formulação em Frações Mássicas*, Dissertação de Mestrado, Florianópolis-SC, UFSC.
- Hirasaki, G. J. e O'Dell, P. M. 1970, "Representation of Reservoir Geometry for Numerical Simulation", SPEJ, Dec.
- Maliska, C. R., Cunha, A. R., Livramento, M. A. e Silva, A. F. C., 1994, "Tridimensional Petroleum Reservoir Simulation Using Generalized Curvilinear Coordinates", V Encontro Nacional de Ciências Térmicas, São Paulo, Dez., pp. 363-366.
- Maliska, C. R., Silva, A. F. C., A. O. Czesnat, A. O. e Lucianetti R. M., 1997, "Three-Dimensional Multiphase Flow Simulation in Petroleum Reservoir using the Mass Fraction as Dependent Variables", SPEJ, Sep.
- Prais, F. e Campagnolo, E. A., 1991, "Modelagem do Escoamento Multifásico em Simulação de Reservatório", XI COBEM, pp. 545-548, São Paulo, Dez.
- Sharp, H. N. e Anderson, D. A., 1985, "Orthogonal Curvilinear Grid Generation With Present Internal Boundaries for Reservoir Simulation", SPEJ, Feb.
- Sonier, F. e Chaumet, P., 1974, "A Fully Implicit Three Dimensional Model in Curvilinear Coordinates", Trans. SPE 253, pp. 361-70.

ABSTRACT

The usual approach for solving the conservation equations in petroleum reservoir simulation is to use the Newton's method. When boundary-fitted non-orthogonal grids are used two strategies can be employed to obtain the Jacobian matrix. If all non-orthogonal terms are treated implicitly, the Jacobian matrix will have 19 diagonals. The other strategy is to evaluate implicitly only the orthogonal terms, keeping the non-orthogonal terms in the previous iteration. Of course, this strategy does not affect the quality of the results, but may influence the convergence rate of the method.

In this paper it is analyzed the behavior of a non-orthogonal finite-volume method for petroleum reservoir simulation for both strategies. The dependence of the convergence rate on the degree of non-orthogonality of the grid is analyzed.