

UFRRJ
INSTITUTO DE CIÊNCIAS EXATAS
DEPARTAMENTO DE MATEMÁTICA
PROGRAMA DE PÓS-GRADUAÇÃO EM MODELAGEM
MATEMÁTICA E COMPUTACIONAL

DISSERTAÇÃO

**Fluxo de Solução Salinizada com Íons
Dissolvidos em um Meio Poroso Unidimensional**

Maurício de Carvalho

2016

Maurício de Carvalho

Fluxo de Solução Salinizada com Íons Dissolvidos em um Meio Poroso Unidimensional

Dissertação submetida como requisito parcial para obtenção do grau de **Mestre em Ciências**, no Curso de Pós-Graduação em Modelagem Matemática e Computacional.

Universidade Federal Rural do Rio de Janeiro - UFRRJ

Instituto de Ciências Exatas

Departamento de Matemática

Programa de Pós-Graduação em Modelagem Matemática e Computacional

Orientador: Prof. Dr. Wanderson José Lambert

Coorientador: Duilio Tadeu da Conceição Junior

Seropédica, Brasil

2016

511.8
C331f
T

Carvalho, Maurício de, 1992-
Fluxo de solução salinizada com íons
dissolvidos em um meio poroso
unidimensional / Maurício de Carvalho. -
2016.
81 f.: il.

Orientador: Wanderson José Lambert.
Dissertação (mestrado) - Universidade
Federal Rural do Rio de Janeiro, Curso de
Pós-Graduação em Modelagem Matemática e
Computacional, 2016.
Bibliografia: f. 77-78.

1. Modelos matemáticos - Teses. 2.
Modelos químicos - Teses. 3. Riemann-
Hilbert, Problemas de - Teses. 4.
Materiais porosos - Teses. 5. Equações
diferenciais hiperbólicas - Teses. I.
Lambert, Wanderson José, 1977- II.
Universidade Federal Rural do Rio de
Janeiro. Curso de Pós-Graduação em
Modelagem Matemática e Computacional. III.
Título.

Maurício de Carvalho

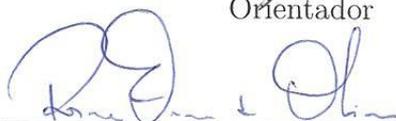
Fluxo de Solução Salinizada com Íons Dissolvidos em um Meio Poroso Unidimensional

Dissertação submetida como requisito parcial para obtenção do grau de **Mestre em Ciências**, no Curso de Pós-Graduação em Modelagem Matemática e Computacional.

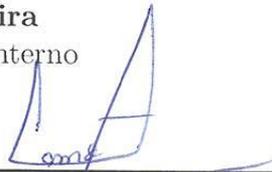
Trabalho aprovado. Seropédica, Brasil, 12 de abril de 2016.



Prof. Dr. Wanderson José Lambert
Orientador



Prof. Dra. Rosane Ferreira de
Oliveira
Titular Interno



Prof. Dr. Amaury Álvarez Cruz
Titular Externo

Seropédica, Brasil

2016

*Este trabalho é dedicado às crianças adultas que,
quando pequenas, sonharam em se tornar grandes cientistas.*

Agradecimentos

Agradeço primeiramente à Deus. Como é bom estar sempre em Tua presença!

Agradecimentos aos meus pais, Maria das Graças Campos de Carvalho e Antônio Guerra de Carvalho. Serei eternamente grato pelo dom da vida e os grandiosos conselhos nos momentos de dificuldade.

Agradecimentos especiais à Jessica Chaves Cardoso. Seu apoio incondicional faz parte dos pilares fundamentais desta conquista.

Agradecimentos ao meu orientador, Wanderson José Lambert. Muitas foram as minhas dificuldades, porém sempre encontrei apoio em seus conselhos e ensinamentos.

Agradecimentos à todos os professores e colegas do PPGMMC. Essa caminhada seria mais árdua sem a companhia de vocês.

Agradecimentos especiais aos familiares e amigos pelo apoio e incentivo. O carinho de vocês que levo comigo é fonte de energia que me impulsiona a vencer.

Agradecimento à CAPES pelo apoio financeiro desta pesquisa.

*So understand,
don't waste your time always searching
for those wasted years.
Face up! Make your stand!
And realize you are living in the golden years.
(Iron Maiden)*

Resumo

Neste trabalho consideramos a injeção de água com íons dissolvidos em um meio poroso linear horizontal cilíndrico com porosidade e permeabilidade absoluta constantes, inicialmente, contendo óleo e água em várias proporções. A água é assumida ter baixa concentração de sais, onde alguns íons estão dissolvidos. Desconsideramos a existência de alguns possíveis minerais na rocha que possam dissolver ou precipitar na fase da água. Existem dois componentes químicos fluidos assim como duas imiscíveis fases: água e óleo, (w, o) . Os íons dissolvidos são: íons divalentes positivos: íons cálcio, Ca^{2+} e íons magnésio, Mg^{2+} ; íons negativos divalentes: íons sulfato, SO_4^{2-} ; íons positivos monovalentes: íons sódio, Na^+ ; íons negativos monovalentes: íons cloro, Cl^- . Os cátions estão envolvidos em um processo rápido de troca de íons com a superfície do meio poroso carregada eletronegativamente X^- , onde o meio absorverá os íons positivos Ca^{2+} , Mg^{2+} e Na^+ . Usando regras simples de misturas e desconsiderando qualquer calor de precipitação ou dissolução de reações de substâncias ou dessorção de íons. Além disso, desconsideramos quaisquer efeitos de contração de volume resultante das misturas e reações em qualquer fase. Resolveremos neste trabalho, o Problema de Riemann e discutiremos algumas características do modelo estudado.

Palavras-chave: Meio Poroso, Equações Hiperbólicas, Problema de Riemann.

Abstract

In this work we consider the injection of water with dissolved ions into a linear horizontal porous rock cylinder with constant porosity and absolute permeability initially containing oil and water in several proportions. The water is assumed to have low salinity concentration, where some ions are dissolved. We disregard that there is in the rocks some possible minerals that can dissolve or precipitate in water phase. There are two chemical fluid components as well as two immiscible phases: water and oil, (w, o) . The dissolved ions are: positive divalent ions: calcium ions, Ca^{2+} and magnesium ions, Mg^{2+} ; negative divalent ions: sulphate ions, SO_4^{2-} ; positive monovalent ions: sodium ions, Na^+ ; negative monovalent ions: chloride ions, Cl^- . The cations are modeled to be involved in fast ion exchange process with a surface negative X^- which can absorb the positive ions, Ca^{2+} , Mg^{2+} and Na^+ . We use simple mixing rules and we disregard any heat of precipitation/dissolution of substance reactions or ion desorption. Moreover we disregard any volume contraction effects resulting from mixing and reactions in any phase. We are going to solve in this work, the Riemann problem and we are going to discuss some features about the studied model.

Keywords: Porous Media, Hyperbolic Equations, Riemann Problem.

Lista de ilustrações

Figura 1	– 1.a: Região espacial Ω com fronteira $\partial\Omega$ e vetor normal \hat{n} . 1.b: Fluxo do vetor \vec{F}_α na fronteira $\partial\Omega$	18
Figura 2	– Superfície de um cilindro de comprimento $x_R - x_L$ e com os vetores normais a cada lado posto na horizontal para melhor visualização.	19
Figura 3	– Meio Poroso isolado de comprimento Δx	21
Figura 4	– Condição inicial do exemplo para a EDP.	25
Figura 5	– Condição inicial para a EDP no problema de Riemann.	26
Figura 6	– 6.a: Material orgânico com maior concentração de íons Na^+ , Ca^{2+} e Mg^{2+} do que a água. 6.b: Gradiente de concentração atua no meio orgânico provocando a dessorção dos íons. 6.c: Concentração de equilíbrio entre o meio orgânico e a água.	28
Figura 7	– Efeito da salinidade na permeabilidade relativa da água e do óleo.	31
Figura 8	– Efeito da salinidade no fluxo fracionário da água.	32
Figura 9	– Curva integral projetada no espaço (s, C_{Ca}, C_{Na}) , associada ao autovalor λ_1 para alguma condição inicial (ponto em azul).	45
Figura 10	– Curva integral projetada no plano (C_{Ca}, C_{Na}) , associada ao autovalor λ_2 e ao autovetor $\vec{r}_{\lambda_2,1}$ para alguma condição inicial (ponto em azul).	47
Figura 11	– Curva integral projetada no plano (C_{SO_4}, C_{Cl}) , associada ao autovalor λ_1 e ao autovetor $\vec{r}_{\lambda_2,2}$ para alguma condição inicial (ponto em azul).	48
Figura 12	– Curva integral projetada no plano (C_{SO_4}, C_{Cl}) , associada ao autovalor λ_1 e ao autovetor $\vec{r}_{\lambda_2,3}$ para alguma condição inicial (ponto em azul).	48
Figura 13	– Curva integral projetada no plano (s, C_{Ca}) , associada ao autovalor λ_{BL} e ao autovetor \vec{r}_{BL} para alguma condição inicial (ponto em azul).	49
Figura 14	– Gráfico da função positiva $\eta(C_{Ca}, C_{Na})$	50
Figura 15	– Interpretação geométrica da Proposição 3.1.6.	52
Figura 16	– 16.a: Para cada ponto fixo (C_{Ca^*}, C_{Na^*}) , s_1 maior que s_2 . 16.b: Superfícies (desenho fora de escala) onde (3.77) e (3.78) são satisfeitas.	53
Figura 17	– Gráfico da função positiva $\omega(C_{Ca}, C_{Na})$	54
Figura 18	– Figura representando $k_{ro}^{LS}k_{rw}^{HS} - k_{ro}^{HS}k_{rw}^{LS}$. Observe que a quantidade nunca é negativa.	57
Figura 19	– Curva $x(t)$ de descontinuidade do tipo salto da função $u(x, t)$	59
Figura 20	– Projeção da curva de choque dada pelas equações (3.124) e (3.125) no plano (s, C_{Na}) para um valor $(s^-, C_{Ca}^-, C_{Na}^-)$	62
Figura 21	– Curvas características da equação (4.4) com a condição inicial (4.5), mostrando as regiões de rarefação e a propagação do choque. Figura adaptada de [9].	67

Figura 22 – 22.a: Envoltória côncava da função de fluxo em alta salinidade. 22.b: Envoltória côncava da função de fluxo em baixa salinidade.	69
Figura 23 – 23.a: Derivada função $f(s)$ em alta salinidade. 23.b: Derivada função $f(s)$ em baixa salinidade. Queremos obter a inversa no intervalo (s^*, s_L) para os dois casos.	69
Figura 24 – Gráfico da solução da equação (4.4) com a condição inicial (4.5) para condições de alta e baixa salinidade em um tempo fixo t_0	70
Figura 25 – Separação do plano (C_{Ca}, C_{Na}) em Γ_R , Γ_R^1 e Γ_R^2	72
Figura 26 – Separação do espaço (s, C_{Ca}, C_{Na}) em (s, Γ_R^1) e (s, Γ_R^2)	72
Figura 27 – A curva azul representa a curva C_1 dada por (4.19). O estado * representa o estado a partir do qual foi feita a curva. Observe se o estado estivesse em Γ_R^1 a curva C_1 seria a projeção de uma rarefação. Por outro lado, em Γ_R^2 a curva C_1 seria a projeção de um choque.	73
Figura 28 – 28.a: Estado V^1 e V^2 projetado no plano (C_{Ca}, C_{Na}) . A curva ligando V^1 até V^2 é uma rarefação da família 1. 28.b: Estados de Riemann no espaço de fase (s, C_{Ca}, C_{Na}) . A solução é V_R até V^1 é uma rarefação de Buckley-Leverett. De V^1 até V^2 é uma rarefação da família 1. De V^2 até V^3 é uma rarefação de Buckley-Leverett. De V^3 até V_R é uma onda da família 2, juntamente com um choque de Buckley-Leverett.	74
Figura 29 – 29.a: Estado V^1 e V^2 projetado no plano (C_{Ca}, C_{Na}) . A curva ligando V^1 até V^2 é um choque da família 1. 29.b: Estados de Riemann no espaço de fase (s, C_{Ca}, C_{Na}) . A solução é V_R até V^1 é uma rarefação de Buckley-Leverett. De V^1 até V^2 é um choque da família 1. De V^2 até V^3 é uma rarefação de Buckley-Leverett. De V^3 até V_R é uma onda da família 2, juntamente com um choque de Buckley-Leverett.	75

Sumário

	Introdução	13
1	MODELAGEM MATEMÁTICA E FÍSICA	16
1.1	Meios Porosos e suas Propriedades	16
1.2	Lei de Darcy e Conservação de Massa	17
1.3	Sistema para o Caso Bifásico	22
2	MODELO COM ÍONS DISSOLVIDOS	27
2.1	Variáveis Usadas na Modelagem Química	27
2.2	Modelo Químico	27
2.3	Efeitos da Alta e Baixa Concentrações de Sais	30
2.4	Equações de Balanço	33
3	SIMPLIFICAÇÃO DO MODELO: QUATRO ÍONS DISSOLVIDOS <i>Ca²⁺, Na⁺, SO₄²⁻ E Cl⁻</i>	35
3.1	Soluções Suaves ou Rarefações	37
3.1.1	Autovalores	38
3.1.2	Autovetores	41
3.1.2.1	Cálculo dos Autovetores para a Matriz a Jacobiana de <i>a(c)</i>	42
3.1.2.2	Autovetores do Sistema Original e as Curvas Integrais	44
3.1.3	Ordem dos Autovalores	49
3.2	Locais de Inflexão	53
3.3	Ondas de Choque	58
4	SOLUÇÕES DE ALGUNS PROBLEMAS DE RIEMANN	65
4.1	Injeção de Água em um Meio de Alta e Baixa Salinidades	66
4.2	Injeção de Água com Salinidade Diferente da Salinidade da Rocha	71
4.2.1	Injeção de Água com Salinidade na Região (s, Γ_R^1)	73
4.2.2	Injeção de Água com Salinidade na Região (s, Γ_R^2)	74
5	CONCLUSÃO	76
	REFERÊNCIAS	77
	APÊNDICE A – CONSTANTES FÍSICAS E QUÍMICAS	79
	APÊNDICE B – VALORES PARA AS FUNÇÕES DE PERMEABILIDADE RELATIVA	80

APÊNDICE C – PROVA DO LEMA (3.2.1)	81
--	----

Introdução

A grande importância neste estudo está relacionada com o melhor aproveitamento e possivelmente melhorias nos sistemas de extração de petróleo. Além disso, ele tem importância do ponto de vista matemático. Sistemas desse tipo quase sempre recebe tratamento numérico, porém este trabalho tem como finalidade encontrar soluções por métodos semi-analíticos.

Existem, basicamente, três metodologias de extração de petróleo utilizadas na indústria (veja [24]). A primeira metodologia, conhecida como *recuperação primária*, consiste em perfurar o poço de petróleo e extrair o óleo contido no reservatório por diferença de pressão entre o o reservatório e a superfície do poço. Embora essa metodologia seja a mais simples de todas, o fator de recuperação de petróleo é muito baixo (cerca de 7% do petróleo é recuperado dependendo do tipo de petróleo). A segunda metodologia, denominada *recuperação secundária*, consiste em perfurar poços de injeção no qual serão injetados água ou gás (ou uma mistura desses) com o objetivo de manter uma diferença de pressão entre o reservatório e o poço produtor. O fluido injetado empurrará o petróleo que por sua vez será recuperado nos poços produtores. Este tipo de recuperação é a mais utilizada atualmente e melhora consideravelmente o fator de recuperação (cerca de 40% após a recuperação primária dependendo do tipo de petróleo). Quaisquer métodos utilizados além da injeção de água ou gás são classificados como técnicas de *recuperação terciária*. Dentre estes podemos destacar os métodos térmicos: cuja ideia é aquecer o petróleo, reduzindo assim a viscosidade e facilitando a extração. A injeção de vapor é a forma mais comum dos métodos térmicos, veja [12]. Além dos métodos térmicos temos métodos químicos que modificam a característica do fluido injetor, por exemplo a mistura de polímeros na água que modificam a mobilidade da água em relação ao óleo, e métodos que modificam a permeabilidade relativa da água em relação à rocha, que se trata o estudo desse trabalho.

Neste trabalho, consideramos o problema de injeção de água com íons dissolvidos em um meio poroso linear horizontal em forma de cilindro com porosidade e permeabilidade absoluta constantes, inicialmente, contendo óleo e água em várias proporções (recuperação secundária). Nosso estudo será como esses íons modifica a forma como o petróleo flui pelo meio poroso e como isso altera o fator de recuperação. Assume-se que a água tenha baixa concentração de sal, na qual alguns íons dissolvidos estão presentes. Existem duas fases imiscíveis: água e óleo, (w, o) (chamado na literatura de fluxo bifásico). Os íons dissolvidos são íons divalentes positivos e negativos bem como íons monovalentes positivos e negativos. Os íons divalentes positivos são: cálcio, Ca^{2+} e magnésio, Mg^{2+} . Os divalentes negativos são íons sulfato, SO_4^{2-} . Os monovalentes positivos são íons sódio, Na^+ e monovalentes

negativos são os íons cloro, Cl^- .

Os cátions modelados estão envolvidos em um processo de troca rápida de íons com a superfície do meio poroso, na qual assumimos a presença de materiais orgânicos dissolvidos de forma que a superfície capture íons positivos Ca^{2+} , Mg^{2+} e Na^+ . Tal superfície é denotada por X^- como em [15].

Os efeitos da baixa salinidade sobre a permeabilidade relativa (capacidade da rocha permitir o fluxo dos fluidos) de cada fase é a principal motivação deste trabalho. Muitos autores têm documentado os benefícios da salinidade na água para melhorias na taxa de recuperação de óleo [10], [13], [16] e [18]. Efeitos de baixa salinidade também tem sido visto em experimentos, veja [8] e [25]. Algumas características do meio poroso são mencionadas na literatura como sendo necessárias para otimização da recuperação de petróleo das quais podemos citar: a presença de argila ou superfície com carga negativa em sua superfície [22]; a presença de componentes polares na fase do óleo [22], [18]; a presença de íons divalentes dissolvidos na água [22], [18].

A dessorção é um fenômeno pelo qual uma substância é liberada a partir ou através de uma superfície. Assumimos que as permeabilidades tanto da água quanto a do óleo sejam modificadas pela dessorção de íons positivos divalentes Ca^{2+} e Mg^{2+} pela superfície. Esse fenômeno será melhor discutido no Capítulo 2. Para modelar esse fenômeno, introduzimos uma função peso $H(\beta_{Ca}, \beta_{Mg})$ que vale 1 se não existe dessorção de íons pela superfície e vale menos que 1 se existe dessorção.

No nosso modelo desconsideramos qualquer calor de precipitação ou dissolução das reações ou dos íons dessorvidos, de modo que o fluxo dos fluidos água e óleo será isotérmico. Além disso, desconsideramos qualquer efeito de contração do volume resultante das misturas e reações das fases.

No Capítulo 1, são definidas algumas propriedades do meios porosos e apresentados algumas equações importantes dentro da teoria. Trabalhos como o de Darcy (ver [5]), tiveram importância fundamental para o desenvolvimento do fenômenos envolvendo meios porosos. Além disso, equações como a de conservação da massa conseguem descrever com boa precisão fenômenos decorrentes do fluxo em duas (ou mais) fases no meio poroso.

Para o Capítulo 2, nossa preocupação será discutir as propriedades químicas do modelo de injeção de água salinizada. Como veremos, a salinidade da água diminui a permeabilidade relativa da rocha o que ajuda na otimização da recuperação do óleo.

No Capítulo 3, consideramos um modelo simplificado da injeção de água salinizada com apenas o íon Ca^{2+} alterando a permeabilidade da rocha. Descreveremos as soluções do sistema, encontrando as famílias de rarefações e choques. Supomos que o leitor tenha um conhecimento básico sobre esse tema, caso contrário tais assuntos são bem abordados em [9], [20] ou [23].

O Capítulo 4 é destinado as soluções semi-analíticas de alguns problemas. As simulações são feitas com quantidades de concentrações frequentemente encontradas na literatura. Com essas soluções em mãos, temos a oportunidade de comparar as permeabilidades relativas de fluxos em alta e baixa (ou nenhuma) salinidade e o quanto isso influencia na recuperação final do óleo.

As ferramentas usadas aqui, provinda da teoria dos sistemas de equações diferenciais parciais hiperbólicas, têm várias aplicações em outras áreas como em meteorologia, aerodinâmica e astrofísica (veja [9]).

1 Modelagem Matemática e Física

Este capítulo tem como objetivo introduzir conceitos que serão usados no modelo, definindo as variáveis presentes e tecendo algumas considerações físicas importantes para a modelagem.

1.1 Meios Porosos e suas Propriedades

Para que possamos obter um bom entendimento das equações, iremos apresentar aqui, breves definições das variáveis consideradas:

1. **Porosidade** (ϕ): Pode ser entendida pela fração do volume de espaço vazio do meio poroso que pode, efetivamente, ser invadida por óleo ou água. É uma medida variando de 0 até 1. Algebricamente, é definida como o espaço vazio molhável dividido pelo volume total do meio poroso. Sua unidade é $[m^3_{vazio}/m^3_{total}]$. Como exemplo, para $\phi = 0$ não há região molhável e para $\phi = 1$ tem apenas um espaço vazio, entretanto, valores típicos estão na ordem de 0.1 até 0.4.
2. **Viscosidade** (μ_α): Parâmetro relacionado com a resistência de um fluido ao fluxo. Trata-se da constante de proporcionalidade entre a pressão e a velocidade gradiente dada pela Lei de Newton. No sistema S.I. tem unidade de Pascal vezes segundo $[Pa.s]$.
3. **Densidade** (ρ_α): Definida por massa dividida pelo volume do fluido α e tem unidades $[kg/m^3]$.
4. **Saturação** (s_α): Fração do volume vazio ocupado pelo fluido α e tem unidade $[m^3_\alpha/m^3_{vazio}]$. Assim como a porosidade, a saturação admite valores no intervalo de zero a um. Para $s_\alpha = 0$ não há fluido no meio poroso e para $s_\alpha = 1$ o meio está completamente cheio.
5. **Velocidade de Darcy** (\vec{u}_α): Vetor velocidade da fase α definida como fluxo do fluido que passa por unidade de tempo pela área da seção $[m^3/s/m^2]$. No S.I., sua unidade é $[m/s]$.
6. **Permeabilidade** (k_α): A permeabilidade de uma rocha pode ser definida como a habilidade ou capacidade da mesma permitir o fluxo do fluido (do qual está saturada) através de seus poros. A unidade de permeabilidade é o Darcy $[D]$ ou, mais habitualmente, o mili-Darcy ou mD ($1D = 10^{-12}m^2$).

Observação: Para obter as equações de conservação de massa da substância α , utilizaremos como quantidade a massa por unidade de volume, denotada por m_α . Em um meio poroso de porosidade ϕ , m_α é definida por

$$m_\alpha = \phi s_\alpha \rho_\alpha. \quad (1.1)$$

1.2 Lei de Darcy e Conservação de Massa

Conservação da Massa

Um conceito muito importante para a modelagem de fluxo em meios porosos é o *princípio da conservação da massa*. Para um sistema fechado, tal princípio diz, a grosso modo, que a variação de uma certa quantidade numa determinada região espacial (pode ser uni, bi ou tridimensional) deve-se apenas ao fluxo pela fronteira.

Para apresentarmos tal princípio, vamos derivar a equação da conservação da massa de uma substância α . Admita que queiramos encontrar a massa total de uma substância α numa região espacial Ω com fronteira $\partial\Omega$, veja Figura 1.a.

Através da equação de massa por volume da substância α , dada por m_α , Eq. (1.1), podemos obter a massa total da substância α , denotada com M_α como

$$M_\alpha = \int_{\Omega} m_\alpha dV = \int_{\Omega} \phi(\vec{r}) s_\alpha(\vec{r}, t) \rho_\alpha(\vec{r}, t) dV, \quad (1.2)$$

sendo $\phi(\vec{r})$, $s_\alpha(\vec{r}, t)$ e $\rho_\alpha(\vec{r}, t)$ a porosidade, a saturação do fluido e a densidade do fluido, respectivamente no ponto \vec{r} no tempo t . Em palavras, a massa total da substância α será a integral volumétrica do produto da porosidade pela saturação e a densidade de massa, sobre o domínio Ω .

Tomando a notação mais usual, vamos definir a seguinte função

$$G_\alpha(s(\vec{r}, t)) = \phi(\vec{r}) s_\alpha(\vec{r}, t) \rho_\alpha(\vec{r}, t). \quad (1.3)$$

Esta função é chamada *função de acumulação*, ver [23]. Note que $G_\alpha = m_\alpha$, porém a função de acumulação pode também aparecer com outras expressões. A definição da função de acumulação pode ser estendida para funções onde a variável independente se conserva em uma região fechada ao longo do tempo. Na equação (1.3) temos a massa do fluido α na expressão da função de acumulação, porém veremos no Capítulo 3 funções de acumulação onde as variáveis conservadas serão as quantidades de íons dissolvidos na água.

O princípio da conservação nos diz que dada uma região tridimensional fechada por uma superfície qualquer $\partial\Omega$: *a variação da massa total no meio deve-se apenas pelo fluxo de massa da fronteira $\partial\Omega$* . Para tanto, definimos o vetor fluxo de massa como

$$\vec{F}_\alpha(s(\vec{r}, t)) = \rho_\alpha(\vec{r}, t) \vec{u}_\alpha(\vec{r}, t). \quad (1.4)$$

No Capítulo 2 iremos mostrar que $\vec{u}_\alpha(\vec{r}, t) = \vec{u}_\alpha(s(\vec{r}, t))$, isto é, a velocidade do fluido é função da saturação. Todavia, optamos por omitir essa dependência nesse momento por simplicidade.

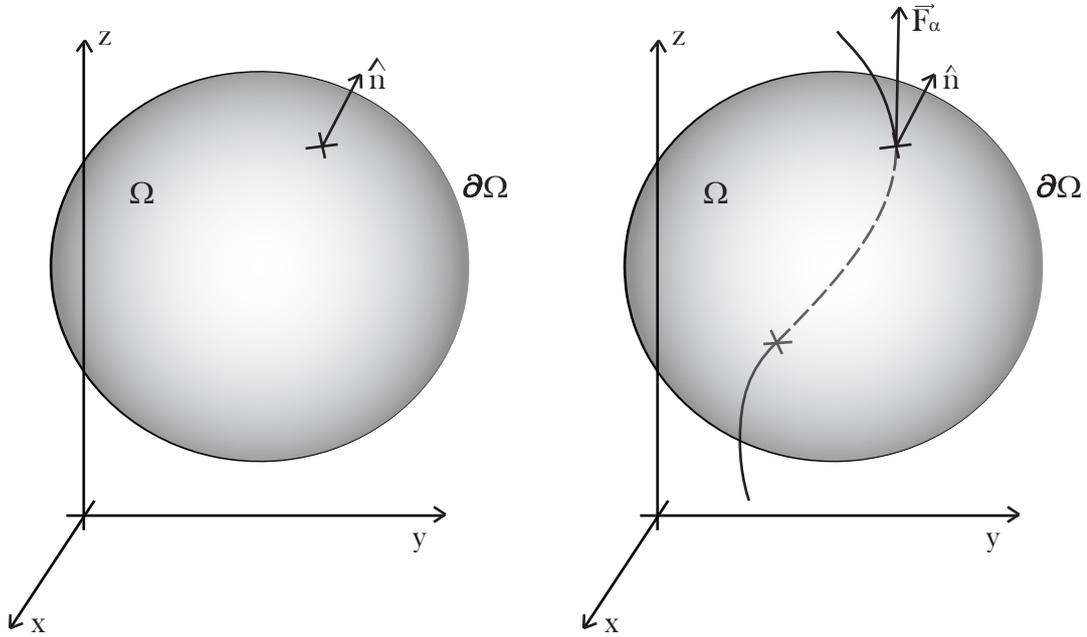


Figura 1 – 1.a: Região espacial Ω com fronteira $\partial\Omega$ e vetor normal \hat{n} . 1.b: Fluxo do vetor \vec{F}_α na fronteira $\partial\Omega$.

Dessa forma podemos encontrar a equação para a conservação de massa, usando (1.2), (1.3) e (1.4) como:

$$\frac{d}{dt} \int_{\Omega} G_\alpha(s(\vec{r}, t)) dV = - \int_{\partial\Omega} \vec{F}_\alpha(s(\vec{r}, t)) \cdot \hat{n} dS, \quad (1.5)$$

o lado direito da equação trata de uma integral de superfície sobre $\partial\Omega$. Aqui \hat{n} representa o vetor unitário normal à superfície $\partial\Omega$ apontando para fora. O sinal negativo se deve ao seguinte raciocínio: se a massa está saindo da região Ω delimitada pela superfície $\partial\Omega$, então o produto escalar da quantidade \vec{F}_α pelo vetor normal \hat{n} produzirá um número positivo. Ora, como a massa está diminuindo, a taxa de variação da massa total deve ser negativa, logo devemos tomar o valor negativo do cálculo desse fluxo, veja Figura 1.b.

A título de exemplo, iremos deduzir a partir da equação (1.5) uma expressão para o caso unidimensional, ou seja, suponha que estamos considerando o fluxo em uma dimensão.

Exemplo 1.2.1. *Deduza, a partir da equação (1.5), uma equação para o fluxo unidimensional do vetor $\vec{F}_\alpha(s(\vec{r}, t)) = F_\alpha(s(x, t))\hat{i}$ na direção paralela ao eixo do cilindro com área da base A e altura $x_R - x_L$, com $x_R > x_L$ (veja Figura 2).*

Solução: *Uma vez que o fluxo é unidimensional, então todas as funções que dependem da posição \vec{r} na equação (1.5), dependerão agora somente da variável x . Portanto, a equação*

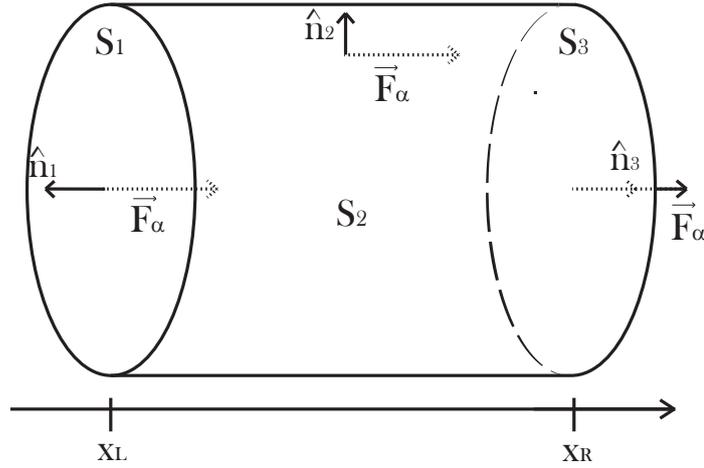


Figura 2 – Superfície de um cilindro de comprimento $x_R - x_L$ e com os vetores normais a cada lado posto na horizontal para melhor visualização.

(1.5) fica

$$\begin{aligned} \frac{d}{dt} \int_{\Omega} G_{\alpha}(s(\vec{r}, t)) dV = & - \int_{S_1} F_{\alpha}(s(x, t)) \cdot \hat{n}_1 dS - \int_{S_2} F_{\alpha}(s(x, t)) \cdot \hat{n}_2 dS \\ & - \int_{S_3} F_{\alpha}(s(x, t)) \cdot \hat{n}_3 dS, \end{aligned}$$

$$\frac{d}{dt} \left(A \int_{x_L}^{x_R} G_{\alpha}(s(x, t)) dx \right) = - \left(\int_{S_1} F_{\alpha}(s(x, t)) \cdot \hat{n}_1 dS + 0 + \int_{S_3} F_{\alpha}(s(x, t)) \cdot \hat{n}_3 dS \right),$$

$$\frac{d}{dt} \left(A \int_{x_L}^{x_R} G_{\alpha}(s(x, t)) dx \right) = - \left(-F_{\alpha}(s(x_L, t)) \int_{S_1} dS + F_{\alpha}(s(x_R, t)) \int_{S_3} dS \right),$$

$$A \frac{d}{dt} \int_{x_L}^{x_R} G_{\alpha}(s(x, t)) dx = A (F_{\alpha}(s(x_L, t)) - F_{\alpha}(s(x_R, t))),$$

onde A é a área da base do cilindro. Logo, dividindo por A em ambos os lados, temos o resultado desejado

$$\frac{d}{dt} \int_{x_L}^{x_R} G_{\alpha}(s(x, t)) dx = F_{\alpha}(s(x_L, t)) - F_{\alpha}(s(x_R, t)). \quad (1.6)$$

Continuando a partir da equação (1.5), enunciaremos agora o Teorema da Divergência. Ele será usado para deduzir a chamada *forma diferencial* da equação (1.5).

Teorema 1.2.1 (Teorema da Divergência). *Seja Ω uma região sólida simples e seja $\partial\Omega$ a superfície fronteira de Ω , orientada positivamente (para fora). Seja \vec{F} um campo vetorial cujas funções componentes têm derivadas parciais contínuas em uma região aberta que contenha Ω . Então*

$$\int_{\partial\Omega} \vec{F} \cdot \hat{n} dS = \int_{\Omega} \nabla \cdot \vec{F} dV. \quad (1.7)$$

Demonstração. A demonstração deste teorema pode ser encontrada em vários livros de cálculo, como por exemplo [21]. \square

Sob as hipóteses do Teorema da Divergência, podemos aplicá-lo na equação (1.5) obtendo

$$\frac{d}{dt} \int_{\Omega} G_{\alpha}(s(\vec{r}, t)) dV = - \int_{\Omega} \nabla \cdot (\vec{F}_{\alpha}(s(\vec{r}, t))) dV. \quad (1.8)$$

Supondo que a derivada parcial em relação ao tempo existe e é contínua, então podemos derivar dentro do sinal da integral, tendo

$$\int_{\Omega} \left(\frac{\partial}{\partial t} G_{\alpha}(s(\vec{r}, t)) + \nabla \cdot \vec{F}_{\alpha}(s(\vec{r}, t)) \right) dV = 0. \quad (1.9)$$

Para que possamos desconsiderar integral e igualarmos apenas o integrando a zero é necessário observar o seguinte Teorema 1.2.2.

Teorema 1.2.2. *Seja $f : \Omega \subset \mathbb{R}^n \rightarrow \mathbb{R}$, se f é contínua e $\int_A f dV = 0, \forall A \subset \Omega$ então $f \equiv 0$.*

Demonstração. A demonstração deste teorema pode ser encontrada em livros de análise, como por exemplo [11]. \square

Como estamos considerando um conjunto qualquer Ω do \mathbb{R}^3 e supondo o integrando uma função contínua, então pelo Teorema 1.2.2 temos

$$\frac{\partial}{\partial t} G_{\alpha}(s(\vec{r}, t)) + \nabla \cdot \vec{F}_{\alpha}(s(\vec{r}, t)) = 0. \quad (1.10)$$

Enquanto a equação (1.10) é chamada de forma diferencial da lei de conservação da massa, a equação (1.6) é chamada de *forma integral*. Existem duas boas razões para considerarmos a forma integral, Eq. (1.6): (i) a equação é baseada em princípios físicos de conservação expressa com integrais relacionadas ao controle de volumes, (ii) a formulação integral requer menos suavidade das soluções e prepara o caminho para a extensão de soluções incluindo descontinuidades. Assim, a forma integral nos fornecerá soluções com descontinuidades que discuremos com mais detalhes no Capítulo 3.

Naturalmente, a equação (1.10) pode ser escrita também como

$$\frac{\partial}{\partial t} (\phi(\vec{r}) s_{\alpha}(\vec{r}) \rho_{\alpha}(\vec{r})) + \nabla \cdot (\rho_{\alpha}(\vec{r}) \vec{u}_{\alpha}(\vec{r})) = 0. \quad (1.11)$$

usando as equações (1.3) e (1.4).

Lei de Darcy

Considere um meio poroso cilíndrico de porosidade homogênea ϕ . Suponha que o fluxo ocorra em uma única direção (o fluxo unidirecional fornece uma equação unidimensional, conforme será visto abaixo) e que a velocidade u_α do fluido em cada seção reta é a mesma pra qualquer ponto pertencente a mesma seção. Tomando duas seções retas (veja Figura 3), a Lei de Darcy diz que o vetor velocidade \vec{u}_α da fase α é proporcional à diferença de pressão aplicada em cada uma das faces e inversamente proporcional ao espaço percorrido e viscosidade do fluido, ou seja,

$$u_\alpha(x) = -\frac{k_\alpha}{\mu_\alpha} \frac{p_\alpha(x + \Delta x) - p_\alpha(x)}{\Delta x}, \quad (1.12)$$

sendo k_α e μ_α a permeabilidade e a viscosidade, respectivamente, da fase α . O sinal negativo na Lei de Darcy deve-se ao fato do fluxo ocorrer sempre da seção de maior para a de menor pressão.

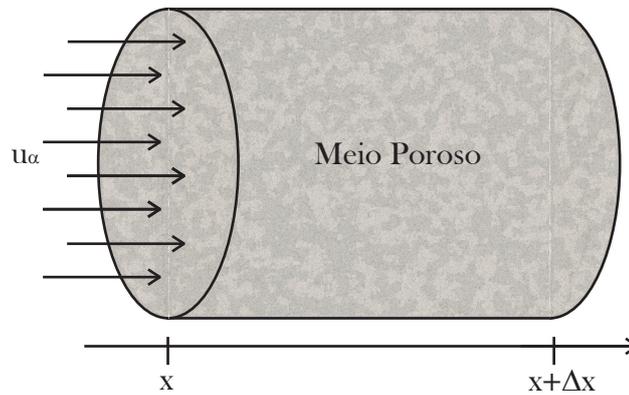


Figura 3 – Meio Poroso isolado de comprimento Δx .

Assim como a permeabilidade, também a viscosidade é função de outras variáveis independentes, porém inicialmente omitiremos tais variáveis. Uma discussão mais apropriada será feita no Capítulo 2. Essa Lei foi descoberta empiricamente por Darcy em 1856 e desde então tem sido verificada experimentalmente em inúmeros casos, veja [5].

Para facilitar a modelagem do problema, é conveniente escrever a permeabilidade da fase α como produto da permeabilidade absoluta (k) vezes a permeabilidade relativa a fase α ($k_{r\alpha}$), ou seja, $k_\alpha = k k_{r\alpha}$. Em geral, a permeabilidade relativa é uma função apenas da saturação, os modelos mais usados são os quadráticos, veja [17]. A permeabilidade absoluta depende da estrutura do meio poroso e é, em geral, muito complicada de ser obtida, entretanto, em nosso modelo assumiremos que ela tem um valor constante como em [15], veja Apêndice A.

Tomando $\Delta x \rightarrow 0$ temos a seguinte equação diferencial para o caso unidirecional para a lei de Darcy

$$u_\alpha(x) = -\frac{k_\alpha}{\mu_\alpha} \frac{dp_\alpha}{dx}(x). \quad (1.13)$$

Para três dimensões a Lei de Darcy torna-se

$$\vec{u}_\alpha(\vec{r}) = -\frac{k_\alpha}{\mu_\alpha} \nabla p_\alpha(\vec{r}), \quad (1.14)$$

sendo \vec{r} o vetor posição.

Se levamos em conta a gravidade (e, conseqüentemente, a pressão hidrostática) haverá um gradiente de pressão para baixo (neste caso o cilindro estaria inclinado) e a lei de Darcy é escrita da seguinte forma

$$\vec{u}_\alpha(\vec{r}) = -\frac{k_\alpha}{\mu_\alpha} \left[\nabla p_\alpha(\vec{r}) + \rho_\alpha(\vec{r}) g \hat{k} \right], \quad (1.15)$$

onde g é a aceleração da gravidade e \hat{k} denota o vetor unitário na direção da ação da gravidade.

1.3 Sistema para o Caso Bifásico

A partir de agora omitiremos a dependência da posição \vec{r} , apenas usando quando necessário. Usando as equações (1.14) e (1.11) e supondo agora que o meio poroso contém água e óleo, então teríamos as seguintes equações

$$\frac{\partial}{\partial t}(\phi s_w \rho_w) + \nabla \cdot (\rho_w \vec{u}_w) = 0 \quad (1.16)$$

$$\frac{\partial}{\partial t}(\phi s_o \rho_o) + \nabla \cdot (\rho_o \vec{u}_o) = 0, \quad (1.17)$$

onde w identifica a equação para o fase da água (em inglês *water*) e o identifica a equação para o fase do óleo (em inglês *oil*). Assim, as equações (1.16) e (1.17) são as equações de conservação de massa da fase água e óleo, respectivamente.

Suponhamos que ϕ seja constante, isso significa que a porosidade da rocha é homogênea. E que ρ_w e ρ_o também sejam constantes, isso significa densidades constantes para a água e o óleo. Para sistemas isotérmicos isso é uma boa aproximação.

Tomando essas simplificações temos nas equações

$$\phi \frac{\partial s_w}{\partial t} + \nabla \cdot \vec{u}_w = 0 \quad (1.18)$$

$$\phi \frac{\partial s_o}{\partial t} + \nabla \cdot \vec{u}_o = 0. \quad (1.19)$$

Além disso, vamos admitir que o meio poroso está completamente preenchido com água e óleo, ou seja

$$s_w + s_o = 1. \quad (1.20)$$

Isso nos dá mais uma equação para ser adicionada juntamente com as equações (1.18)-(1.19), neste caso, uma equação algébrica. A equação (1.20) expressa um vínculo das

soluções das equações diferenciais parciais (1.18) e (1.19). Assim, as equações (1.18) e (1.19), que inicialmente estavam desacopladas, formam agora um sistema de equações diferenciais parciais com a equação algébrica (1.20).

Observe que esta suposição implica que o fluido é incompressível (capacidade de opor-se à compressão sob qualquer condição). Isso pode ser mostrado através das equações, uma vez que somando as equações do sistema e usando a equação algébrica (1.20), temos:

$$\phi \frac{\partial}{\partial t}(s_w + s_o) + \nabla \cdot (\vec{u}_w + \vec{u}_o) = \phi \frac{\partial}{\partial t}(1) + \nabla \cdot (\vec{u}) = \nabla \cdot \vec{u} = 0, \quad (1.21)$$

ou seja, $\vec{u} = \vec{u}_w + \vec{u}_o$, que é chamada velocidade total de Darcy. Além disso para o caso unidimensional u é constante em relação a x .

Trataremos agora de manipulações algébricas de forma a tornar o sistema o mais simples possível. Sendo assim, definimos, inicialmente, uma variável chamada *mobilidade do fluido* dada por

$$\lambda_w = -\frac{kk_{rw}}{\mu_w} \quad \text{e} \quad \lambda_o = -\frac{kk_{ro}}{\mu_o}, \quad (1.22)$$

respectivamente, para a água e óleo.

Basicamente todos os modelos para melhoria da recuperação do óleo estão relacionados ao aumento da mobilidade, isto é, para que possamos recuperar mais óleo é necessário aumentar a velocidade de Darcy \vec{u} aumentando a permeabilidade ou diminuindo a viscosidade. Uma discussão mais apropriada será feita no Capítulo 2.

Definimos a pressão capilar do óleo na água (analogamente da água no óleo), como

$$p_{ow} = p_o - p_w. \quad (1.23)$$

Por simplicidade, assumimos que cada pressão capilar pode ser negligenciada e a pressão na fase aquosa e oleica são tomadas iguais, $p_o = p_w = p$.

Podemos definir as funções de fluxo fracionário para fase água e óleo como

$$f_w = \frac{\lambda_w}{\lambda_w + \lambda_o} = \frac{\frac{kk_{rw}}{\mu_w}}{\frac{kk_{rw}}{\mu_w} + \frac{kk_{ro}}{\mu_o}}, \quad \text{e} \quad f_o = \frac{\lambda_o}{\lambda_w + \lambda_o} = \frac{\frac{kk_{ro}}{\mu_o}}{\frac{kk_{rw}}{\mu_w} + \frac{kk_{ro}}{\mu_o}}. \quad (1.24)$$

Estas funções são a fração do fluxo da água e do óleo, respectivamente.

Usando a lei de Darcy (1.14) e (1.24)

$$\vec{u}_w = \vec{u} f_w, \quad \text{e} \quad \vec{u}_o = \vec{u} f_o, \quad (1.25)$$

sendo $\vec{u} = \vec{u}_w + \vec{u}_o$ a *velocidade total* ou *velocidade de Darcy*.

De fato, temos que

$$\vec{u} = \vec{u}_w + \vec{u}_o = -\left(\frac{kk_{rw}}{\mu_w} + \frac{kk_{ro}}{\mu_o}\right)(\nabla p) = (\lambda_w + \lambda_o)(\nabla p) \quad (1.26)$$

e

$$\vec{u}_w = \vec{u}f_w = (\lambda_w + \lambda_o)(\nabla p) \left(\frac{\lambda_w}{\lambda_w + \lambda_o} \right) = \lambda_w \nabla p. \quad (1.27)$$

De forma análoga

$$\vec{u}_o = \vec{u}f_o = (\lambda_w + \lambda_o)(\nabla p) \left(\frac{\lambda_o}{\lambda_w + \lambda_o} \right) = \lambda_o \nabla p. \quad (1.28)$$

E assim, finalmente, temos o seguinte sistema

$$\phi \frac{\partial s_w}{\partial t} + \nabla \cdot (\vec{u}f_w) = 0, \quad (1.29)$$

$$\phi \frac{\partial s_o}{\partial t} + \nabla \cdot (\vec{u}f_o) = 0. \quad (1.30)$$

Como $\nabla \cdot \vec{u} = 0$, Eq. (1.21), o sistema (1.29)-(1.30) reduz-se a

$$\phi \frac{\partial s_w}{\partial t} + \vec{u} \cdot \nabla f_w = 0, \quad (1.31)$$

$$\phi \frac{\partial s_o}{\partial t} + \vec{u} \cdot \nabla f_o = 0. \quad (1.32)$$

Usando a equação (1.21), temos que para o caso unidimensional u é constante, e assim

$$\phi \frac{\partial s_w}{\partial t} + u \frac{\partial f_w}{\partial x} = 0, \quad (1.33)$$

$$\phi \frac{\partial s_o}{\partial t} + u \frac{\partial f_o}{\partial x} = 0, \quad (1.34)$$

Tomando agora o caso unidimensional e substituindo a equação algébrica (1.20) dentro da segunda EDP e usando o fato que

$$f_w + f_o = 1, \quad (1.35)$$

(isto pode ser visto diretamente da definição de f_w e f_o , Eq. (1.24)), obtemos da equação (1.34) que

$$\phi \frac{\partial}{\partial t}(1 - s_w) + u \frac{\partial}{\partial x}(1 - f_w) = 0 \quad (1.36)$$

que é exatamente a equação (1.33). Esta substituição faz com que o sistema se resuma a apenas uma equação escalar, por exemplo, (1.33).

Para resolver o problema, precisamos considerar condições iniciais e de contorno. Para tanto, imagine que o meio poroso está completamente cheio de óleo ($s_w = 0, s_o = 1$) e injetamos água pura para a recuperação desse óleo ($s_w = 1, s_o = 0$). Como exemplo, vamos supor que o ponto de injeção seja em $x = 0$ e que o meio poroso seja infinito. Essa condição pode ser escrita como:

$$(s_w, s_o)(x, 0) = \begin{cases} (1, 0), & \text{se } x = 0 \\ (0, 1), & \text{se } x > 0 \end{cases} \quad (1.37)$$

A condição (1.37) é chamada de *condição de Riemann-Goursat*. Caso a condição (1.37) fosse substituída por

$$(s_w, s_o)(x, 0) = \begin{cases} (1, 0), & \text{se } x \leq 0 \\ (0, 1), & \text{se } x > 0 \end{cases} \quad (1.38)$$

a condição é chamada simplesmente *condição de Riemann*. Caso os autovalores da matriz do sistema sejam positivos (iremos explorar mais este conceito no Capítulo 3) as duas condições são equivalentes (veja [20]). A Figura 4 ilustra essas condições.

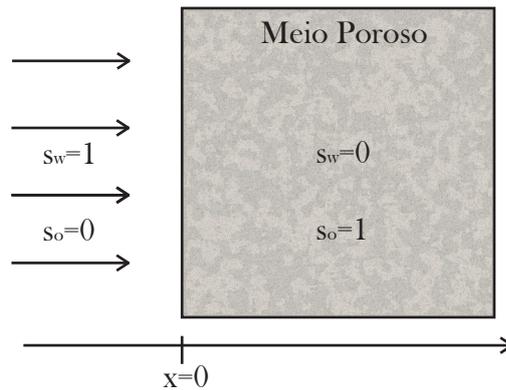


Figura 4 – Condição inicial do exemplo para a EDP.

Uma vez que, resolvendo a equação para saturação de água, podemos encontrar a saturação do óleo via (1.20). Assim, o problema de agora seria de encontrar soluções para a equação (1.33) com a seguinte condição inicial

$$s_w(x, 0) = \begin{cases} 1, & \text{se } x \leq 0 \\ 0, & \text{se } x > 0. \end{cases} \quad (1.39)$$

Assim podemos descrever, a partir da solução deste problema, como a saturação da água varia com o tempo no meio poroso e conseqüentemente descreveremos a evolução da saturação do óleo, de modo a modelar a recuperação do óleo. Esse problema já é conhecido e sua solução pode ser encontrada em vários livros sobre o tema, como por exemplo em [6]. Este problema também será resolvido no Capítulo 4.

A condição inicial (1.39) é um caso particular do problema de Riemann. O problema mais geral é resolver a equação (1.33) com a condição inicial:

$$s_w(x, 0) = \begin{cases} s_L, & \text{se } x \leq 0 \\ s_R, & \text{se } x > 0, \end{cases} \quad (1.40)$$

onde s_L e s_R são constantes. A Figura 5 abaixo ilustra essa condição inicial mais geral.

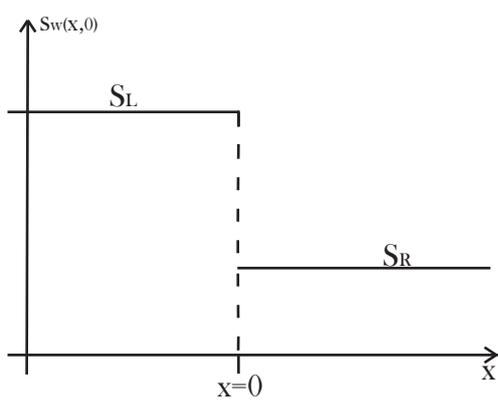


Figura 5 – Condição inicial para a EDP no problema de Riemann.

2 Modelo com Íons Dissolvidos

Neste capítulo, usaremos as definições e os conceitos apresentados no Capítulo 1 para apresentar o modelo que será resolvido no Capítulo 3.

2.1 Variáveis Usadas na Modelagem Química

Esta seção tem por finalidade definir processos, assim como variáveis que serão usadas na modelagem química. A saber:

1. **Absorção:** Processo no qual uma substância infiltra-se em outra substância. A absorção ocorre entre líquidos (ou gases) e sólidos (ou líquidos).
2. **Dessorção:** Processo no qual uma substância (geralmente um líquido) é liberada a partir ou através da superfície de uma outra substância (geralmente um sólido).
3. **Concentração (C_I):** Quantidade de uma substância I por unidade de volume. No modelo, esta substância serão os íons. Os íons usados nesse trabalho serão: cálcio, Ca^{2+} ; magnésio, Mg^{2+} ; sulfato, SO_4^{2-} ; sódio, Na^+ e cloro, Cl^- . No S.I, a unidade de concentração é $[kg/m^3]$, porém utilizaremos a unidade mais usual na literatura, $[mol/l]$.
4. **Material Orgânico (M_c):** Material presente no meio poroso responsável pelo processo de dessorção dos cátions. Modelamos esse material como sendo argila e a superfície desse material é denotada por X^- . Possui unidade $[Kg/l]$.
5. **Quantidade β_I :** Quantidade de íons I absorvidos na superfície do material orgânico (argila). Possui unidade $[mol/kg]$.

2.2 Modelo Químico

Suponhamos que a água tenha baixa salinidade, na qual alguns íons estão dissolvidos. A saber: íons divalentes positivos: cálcio, Ca^{2+} e magnésio, Mg^{2+} ; íons divalentes negativos: sulfato, SO_4^{2-} ; íons monovalentes positivos: sódio, Na^+ ; íons monovalentes negativos: cloro, Cl^- . Os cátions são modelados de modo que possam ser envolvidos em um processo rápido de troca de íons com a superfície negativa X^- do material orgânico, presente no meio poroso na qual pode absorver os íons positivos Ca^{2+} , Mg^{2+} e Na^+ . As quantidades de cátions absorvidos pela superfície são denotados por β_{Ca} , β_{Mg} e β_{Na} , para cálcio, magnésio

e sódio, respectivamente. Tal modelo é amplamente estudado em otimização dos processos de extração de petróleo (veja [15]).

As permeabilidades relativas k_{rw} e k_{ro} são consideradas funções das saturações e desses cátions β_{Ca} , β_{Mg} e β_{Na} , isto é, $k_{rw} = k_{rw}(\beta_{Ca}, \beta_{Mg}, \beta_{Na})$ e $k_{ro} = k_{ro}(\beta_{Ca}, \beta_{Mg}, \beta_{Na})$.

Desconsideramos qualquer calor de precipitação ou dissolução das reações das substâncias ou dessorção dos íons. Além disso, desconsideramos contrações de volume resultantes das misturas e reações em qualquer fase.

A dessorção é um fenômeno pelo qual uma substância é liberada a partir ou através de uma superfície. O processo é o oposto de sorção (isto é, tanto a adsorção ou absorção). Isto ocorre em um sistema que está no estado de equilíbrio de adsorção entre um fluido (gás ou solução líquida) e uma superfície adsorvente (sólido ou fronteira que separa dois fluidos).

Os cátions estão inicialmente absorvidos na superfície do material orgânico que possui carga negativa na qual denotaremos por X^- (supomos que o material orgânico seja argila). Quando a água com íons Na^+ , Ca^{2+} ou Mg^{2+} , em menor quantidade daquela absorvida na superfície, entra em contato com a superfície X^- (Figura 6.a), existe um gradiente de concentração do maior para o menor que faz com que alguns íons, antes presentes no material orgânico, migrem para a água (Figura 6.b). Aos poucos, quanto mais íons são dessorvidos, as quantidades de íons no material orgânico, β_{Na} , β_{Ca} e β_{Mg} , diminui tendendo a uma concentração de equilíbrio entre o material orgânico e a água (Figura 6.c).

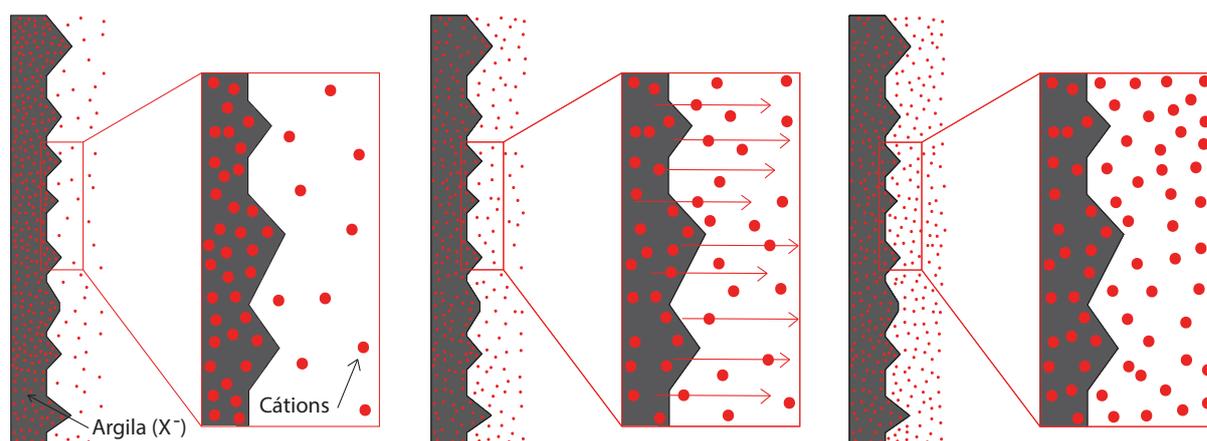
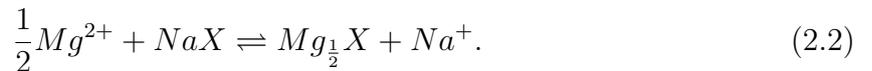
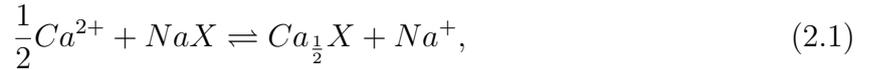


Figura 6 – 6.a: Material orgânico com maior concentração de íons Na^+ , Ca^{2+} e Mg^{2+} do que a água. 6.b: Gradiente de concentração atua no meio orgânico provocando a dessorção dos íons. 6.c: Concentração de equilíbrio entre o meio orgânico e a água.

A dessorção destes íons pode modificar a molhabilidade da superfície da rocha e, conseqüentemente, a mobilidade da água e do óleo (veja [7]). Entende-se por molhabilidade da rocha a tendência de um fluido se espalhar ou aderir em uma superfície sólida na

presença de outro fluido imiscível, veja [3]. Veremos essa mudança na Seção 2.3, onde observaremos também que este processo faz com que diminua o óleo residual (óleo que não pode ser extraído do meio poroso) e, conseqüentemente, aumenta a quantidade de petróleo recuperado (petróleo retirado do meio poroso).

A reação é assumida instantânea e, então, taxas de reações serão negligenciadas. Para íons positivos Ca^{2+} , Mg^{2+} e Na^+ , temos as reações independentes entre esses íons e a superfície X^-



Em (2.1)-(2.2) desconsideramos os H^+ , que estão presentes mas com uma quantidade muito pequena comparada com os outros íons da reação.

Das equações (2.1) e (2.2), usando a Lei ideal do equilíbrio químico (ver [15]) as constantes da reação de equilíbrio podem ser escritas como:

$$K_{CaNa} = \frac{\beta_{Ca}\gamma_{Na}C_{Na}}{\beta_{Na}\sqrt{\gamma_{Ca}C_{Ca}}} \quad \text{e} \quad K_{MgNa} = \frac{\beta_{Mg}\gamma_{Na}C_{Na}}{\beta_{Na}\sqrt{\gamma_{Mg}C_{Mg}}}. \quad (2.3)$$

As quantidades K_{CaNa} e K_{MgNa} dependem da temperatura. Aqui $\gamma_{Ca}C_{Ca}$, $\gamma_{Mg}C_{Mg}$ e $\gamma_{Na}C_{Na}$ representam as atividades química de cálcio, magnésio e sódio, respectivamente. C_{Ca} , C_{Mg} e C_{Na} são as concentrações dos íons e γ_I para $I = Ca, Mg$ e Na são os coeficientes de atividade dos íons cálcio, magnésio e sódio, respectivamente. Da equação estendida de Debye-Hückel (veja [1]), o coeficiente de atividade é dado satisfazendo

$$\log_{10}(\gamma_I) = \frac{-AZ_I^2\sqrt{I_0}}{1 + a_I B\sqrt{I_0}} + bI_0, \quad (2.4)$$

aqui o índice I refere-se as diferentes espécies (íons) envolvidas nas reações; Z_I refere-se a carga iônica de cada espécie química, b é um parâmetro, $A(T)$ e $B(T)$ são funções dadas da temperatura que assumimos constante, a_I são constantes para cada espécie e I_0 é a força iônica definida como:

$$I_0 = 0.5 \sum_I C_I Z_I, \quad \text{para} \quad I = Ca, Mg \text{ e } Na. \quad (2.5)$$

As constantes e quantidades podem ser encontradas no Apêndice A.

Os fatores K_{CaNa} e K_{MgNa} podem variar com a concentração de água salgada na fase da água de um modo bastante complexo. A maioria dos modelos utilizam uma interpolação linear para obter esses fatores, a partir da tabela de concentração, para cada concentração específica de água salgada.

Uma suposição natural é assumir que a *capacidade de troca de cátions* (denotada por CEC) é constante para uma dada temperatura (em nosso modelo estamos assumindo fluxo isotérmico, entretanto, um possível trabalho seria modelar o problema no qual CEC seja uma função da temperatura). Esta quantidade representa a quantidade máxima do total de cátions que a superfície é capaz de segurar. Isso é feito tomando uma igualdade para a taxa de absorção de cátions, isto é,

$$CEC = 2\beta_{Ca} + 2\beta_{Mg} + \beta_{Na}. \quad (2.6)$$

Das equações (2.3) e (2.6), podemos escrever os cátions absorvidos em função das concentrações de íons ($\gamma_{Ca}C_{Ca}$, $\gamma_{Mg}C_{Mg}$ e $\gamma_{Na}C_{Na}$), K_{CaNa} , K_{MgNa} e CEC . Após alguns algebrismos, obtemos:

$$\beta_{Ca}(C_{Ca}, C_{Mg}, C_{Na}, T) = \frac{K_{CaNa}\sqrt{\gamma_{Na}C_{Ca}}CEC}{2K_{CaNa}\sqrt{\gamma_{Ca}C_{Ca}} + 2K_{MgNa}\sqrt{\gamma_{Mg}C_{Mg}} + \gamma_{Na}C_{Na}}, \quad (2.7)$$

$$\beta_{Mg}(C_{Ca}, C_{Mg}, C_{Na}, T) = \frac{K_{MgNa}\sqrt{\gamma_{Mg}C_{Mg}}CEC}{2K_{CaNa}\sqrt{\gamma_{Ca}C_{Ca}} + 2K_{MgNa}\sqrt{\gamma_{Mg}C_{Mg}} + \gamma_{Na}C_{Na}}, \quad (2.8)$$

$$\beta_{Na}(C_{Ca}, C_{Mg}, C_{Na}, T) = \frac{\gamma_{Na}C_{Na}CEC}{2K_{CaNa}\sqrt{\gamma_{Ca}C_{Ca}} + 2K_{MgNa}\sqrt{\gamma_{Mg}C_{Mg}} + \gamma_{Na}C_{Na}}. \quad (2.9)$$

2.3 Efeitos da Alta e Baixa Concentrações de Sais

Neste modelo identificaremos os efeitos da baixa salinidade sobre a permeabilidade relativa de cada fase. Assumimos que essas permeabilidades são modificadas pela superfície de dessorção dos íons divalentes positivos.

Funções de Permeabilidade Relativa

Um modelo básico muito utilizado (veja [7]) para as funções de permeabilidade relativa são

$$k_{rw}(s, s_{wr}, s_{or}) = k_{rw}^* \left(\frac{s - s_{wr}}{1 - s_{or} - s_{wr}} \right)^{Nk_w}, \quad s_{wr} \leq s \leq 1 - s_{or}, \quad (2.10)$$

$$k_{ro}(s, s_{wr}, s_{or}) = k_{ro}^* \left(\frac{1 - s_{or} - s}{1 - s_{or} - s_{wr}} \right)^{Nk_o}, \quad s_{wr} \leq s \leq 1 - s_{or}, \quad (2.11)$$

para água e óleo, respectivamente. Aqui, s_{wr} e s_{or} são a saturação da água conata (saturação mínima de água para o qual a água começa a se mover no meio poroso) e a saturação do óleo residual (saturação de óleo que não pode ser extraído do meio poroso) do sistema, respectivamente. Além disso, Nk , Nk_o , k_{rw}^* e k_{ro}^* são valores encontrados empiricamente (parâmetros de ajuste). Estes valores, para condições de alta e baixa salinidade, podem ser encontradas no Apêndice B. Ambas permeabilidades relativas estão escritas em função da saturação da água (usamos a notação s).

Assim, definimos dois casos extremos de permeabilidade relativa correspondendo a condições de alta e baixa salinidade, ou seja, substituindo os valores das constantes Nk , Nk_o , k_{wr}^* e k_{ro}^* nas equações (2.10) e (2.11), correspondentes podemos obter

1. Permeabilidades relativas em alta salinidade (*high salinity*):

$$k_{rw}^{HS}(s) = k_{rw}(s, s_{wr}^{HS}, s_{or}^{HS}) \quad \text{e} \quad k_{ro}^{HS}(s) = k_{rw}(s, s_{wr}^{HS}, s_{or}^{HS}) \quad (2.12)$$

para a água e óleo, respectivamente;

2. Permeabilidades relativas em baixa salinidade (*low salinity*):

$$k_{rw}^{LS}(s) = k_{rw}(s, s_{wr}^{LS}, s_{or}^{LS}) \quad \text{e} \quad k_{ro}^{LS}(s) = k_{rw}(s, s_{wr}^{LS}, s_{or}^{LS}) \quad (2.13)$$

para a água e óleo, respectivamente.

A Figura 7 mostra o efeito da alta e baixa salinidade sobre as permeabilidades relativas da água e do óleo, Eq. (2.12) e (2.13). Observe que na baixa salinidade a permeabilidade da água diminui consideravelmente enquanto a do óleo aumenta.

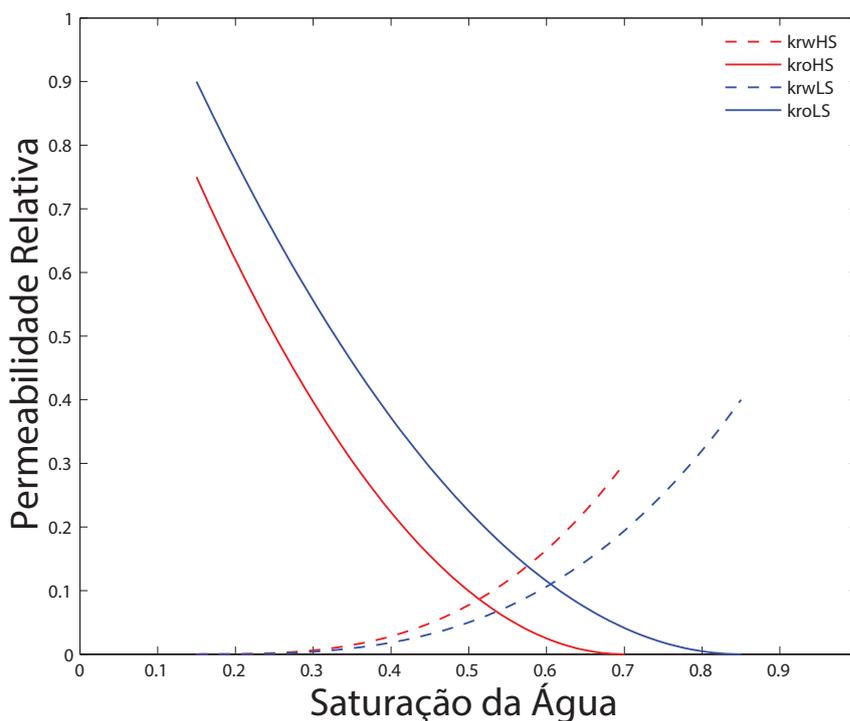


Figura 7 – Efeito da salinidade na permeabilidade relativa da água e do óleo.

A Figura 8 mostra como a alta salinidade interfere no fluxo fracionário, melhorando a recuperação do óleo (fluxo baixo da água implica em aumento no fluxo do óleo, Eq. (1.35)) e diminuindo o óleo residual (óleo restante no meio poroso).

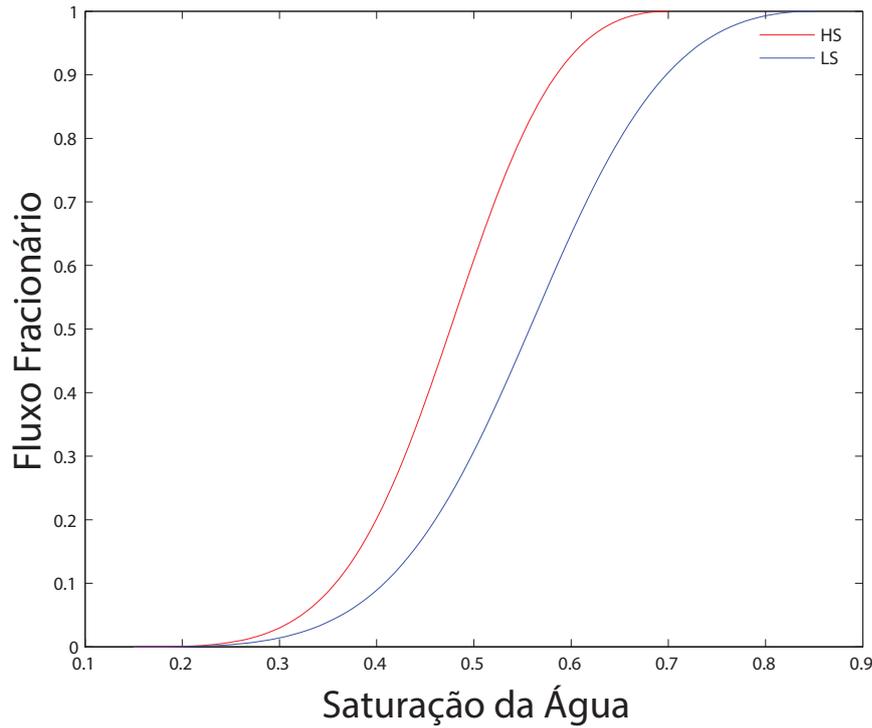


Figura 8 – Efeito da salinidade no fluxo fracionário da água.

Mecanismo para Mudança na Permeabilidade Relativa

Afim de implementar uma condição que seja capaz de mudar os valores das permeabilidades relativas dependendo dos valores das funções β_{Ca} e β_{Mg} (quantidade de cátions presentes no material orgânico), introduzimos uma função de quantidade de íons desorvidos. Esta função pode ser modelada através da seguinte lei empírica:

$$m(\beta_{Ca}, \beta_{Mg}) = \max\{\beta_{Ca}^0 - \beta_{Ca}(t > 0), 0\} + \max\{\beta_{Mg}^0 - \beta_{Mg}(t > 0), 0\}. \quad (2.14)$$

Aqui $\beta_I(t > 0)$ e β_I^0 , para $I = Ca$ e Mg , são a quantidade de íons desorvidos pela superfície para tempos $t > 0$ e tempo inicial $t = 0$, respectivamente.

Usando $m(\beta_{Ca}, \beta_{Mg})$, a função peso $H(\beta_{Ca}, \beta_{Mg})$ é escrita como:

$$H(\beta_{Ca}, \beta_{Mg}) = \frac{1}{1 + rm(\beta_{Ca}, \beta_{Mg})}, \quad (2.15)$$

onde $r > 0$ é uma constante.

A função peso funciona de forma que $H(\beta_{Ca}, \beta_{Mg}) = 1$ se não existe desorção de íon pela superfície e $0 < H(\beta_{Ca}, \beta_{Mg}) < 1$ se existe desorção.

Modelo de Transição de Alta para Baixa Salinidade

O modelo que propomos para a permeabilidade relativa k_{rw} e k_{ro} é escrita como:

$$k_{rw}(s_w, \beta_{Ca}, \beta_{Mg}) = H(\beta_{Ca}, \beta_{Mg})k_{rw}^{HS}(s_w) + [1 - H(\beta_{Ca}, \beta_{Mg})]k_{rw}^{LS}(s_w), \quad (2.16)$$

$$k_{ro}(s_o, \beta_{Ca}, \beta_{Mg}) = H(\beta_{Ca}, \beta_{Mg})k_{ro}^{HS}(s_o) + [1 - H(\beta_{Ca}, \beta_{Mg})]k_{ro}^{LS}(s_o), \quad (2.17)$$

onde $k_{rw}^{HS}(s_w)$ e $k_{ro}^{HS}(s_o)$ são as permeabilidades relativas predeterminadas da água e óleo para alta salinidade (*high salinity*) e $k_{rw}^{LS}(s_w)$ e $k_{ro}^{LS}(s_o)$ são as permeabilidades da água e óleo para baixa salinidade (*low salinity*), Eq. (2.12) e (2.13).

Para o caso em que não há dessorção $k_{rw} = k_{rw}^{HS}$ e $k_{ro} = k_{ro}^{HS}$. Essa condição reflete o estado inicial em alta salinidade da permeabilidade relativa do meio poroso. Por outro lado, quando existe dessorção de íons, a função $m(\beta_{Ca}, \beta_{Mg})$ cresce (veja Eq. (2.14)). Em particular, quando os efeitos da dessorção são grandes o suficiente $k_{rw} \approx k_{rw}^{LS}$ e $k_{ro} \approx k_{ro}^{LS}$, veja equação (2.15).

Este modelo é simples e convexo pelo uso da função peso $H(\beta_{Ca}, \beta_{Mg})$.

2.4 Equações de Balanço

Assim como escrevemos as equações de conservação da massa da água, Eq. (1.33), e óleo, Eq. (1.34), no Capítulo 1, podemos expressar equações de transporte de íons na fase água pelas seguintes equações de balanço para concentração de cálcio (C_{Ca}), magnésio (C_{Mg}), sódio (C_{Na}), sulfato (C_{SO_4}) e cloro (C_{Cl}):

$$\frac{\partial}{\partial t} (\phi C_{Ca} s_w + \beta_{Ca} M_c) + \frac{\partial}{\partial x} (C_{Ca} u_w f_w(s_w, \beta_{Ca}, \beta_{Mg})) = \frac{\partial}{\partial x} \left(\mathcal{D}(\phi, s_w) \frac{\partial}{\partial x} C_{Ca} \right), \quad (2.18)$$

$$\frac{\partial}{\partial t} (\phi C_{Mg} s_w + \beta_{Mg} M_c) + \frac{\partial}{\partial x} (C_{Mg} u_w f_w(s_w, \beta_{Ca}, \beta_{Mg})) = \frac{\partial}{\partial x} \left(\mathcal{D}(\phi, s_w) \frac{\partial}{\partial x} C_{Mg} \right), \quad (2.19)$$

$$\frac{\partial}{\partial t} (\phi C_{Na} s_w + \beta_{Na} M_c) + \frac{\partial}{\partial x} (C_{Na} u_w f_w(s_w, \beta_{Ca}, \beta_{Mg})) = \frac{\partial}{\partial x} \left(\mathcal{D}(\phi, s_w) \frac{\partial}{\partial x} C_{Na} \right), \quad (2.20)$$

$$\frac{\partial}{\partial t} (\phi C_{SO_4} s_w) + \frac{\partial}{\partial x} (C_{SO_4} u_w f_w(s_w, \beta_{Ca}, \beta_{Mg})) = \frac{\partial}{\partial x} \left(\mathcal{D}(\phi, s_w) \frac{\partial}{\partial x} C_{SO_4} \right), \quad (2.21)$$

$$\frac{\partial}{\partial t} (\phi C_{Cl} s_w) + \frac{\partial}{\partial x} (C_{Cl} u_w f_w(s_w, \beta_{Ca}, \beta_{Mg})) = \frac{\partial}{\partial x} \left(\mathcal{D}(\phi, s_w) \frac{\partial}{\partial x} C_{Cl} \right), \quad (2.22)$$

onde M_c é a massa da argila (ou massa de outras substâncias na rocha do reservatório que captura íons divalentes) e é considerada ser constante no tempo, \mathcal{D} é o coeficiente de difusão que depende da água saturada e porosidade e pode ser expressa pela difusão molecular \mathcal{D}_m , pela seguinte regra

$$\mathcal{D}(\phi, s_w) = \mathcal{D}_m \phi^p s_w^q, \quad (2.23)$$

onde p e q são parâmetros obtidos em modelos empíricos ou experimentais. A massa da argila possui unidade de $[Kg/l]$

No sistema existem duas saturações desconhecidas: água (s_w) e óleo (s_o); a velocidade de Darcy u ; uma variável termodinâmica: temperatura, T (a temperatura varia variáveis como as densidades ρ_w e ρ_o); cinco concentrações para os íons dissolvidos: cálcio C_{Ca} , magnésio C_{Mg} , sulfato C_{SO_4} , sódio C_{Na} e cloro C_{Cl} . Entretanto, como estamos assumindo fluxo isotérmico, então T é constante. Desde que (1.20) seja satisfeita, podemos provar que a velocidade de Darcy u é constante (veja Capítulo 1), além disso temos mais uma restrição Eq. (2.6).

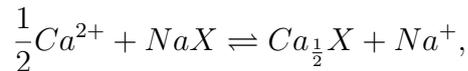
Desse modo temos, no total, 7 equações diferenciais, as quais explicamos a seguir. Inicialmente, temos a conservação de massa de água e óleo, Eqs. (1.33) e (1.34), mas como provado no Capítulo 1, sob as hipóteses tomadas no modelo, uma delas é dependente da outra, de modo que vamos considerar apenas (1.33) e a equação algébrica (1.20). Além disso, temos as equações (2.18)-(2.22) e (2.6), o que torna uma das equações (2.18)-(2.22) linearmente dependente das outras. Entretanto, como tal dependência não é muito explícita, iremos utilizar o sistema (2.18)-(2.22) e (2.6) para fazer simplificações quando necessário. Além disso sabemos que T e u são constantes de modo que o nosso sistema tem o número correto de equações e incógnitas para poder ser resolvido.

3 Simplificação do modelo: quatro íons dissolvidos Ca^{2+} , Na^+ , SO_4^{2-} e Cl^-

Apesar de deduzirmos um modelo completo, vamos desenvolver nessa dissertação, soluções para o modelo no qual consideramos apenas o íon cálcio Ca^{2+} e o íon sódio Na^+ sendo absorvidos pela superfície X^- . Um trabalho futuro é a extensão dessa teoria considerando mais íons e equações.

Dessa forma, esse capítulo apresenta um problema simplificado para obter uma solução analítica para o caso isotérmico do fluxo de água, óleo e íons dissolvidos no meio poroso. Neste problema, injetamos água salgada no meio poroso com água e óleo. Assumimos que os íons presentes são Ca^{2+} , Na^+ , SO_4^{2-} e Cl^- . Os sais na água neste caso são o cloreto de sódio ($NaCl$) e o sulfato de cálcio ($CaSO_4$).

As reações (2.1)-(2.2) reduzem-se a (2.1)



sendo X^- a superfície do material orgânico presente no meio poroso. Usando a lei ideal do equilíbrio químico, K_{CaNa} é dado por (2.3.a)

$$K_{CaNa} = \frac{\beta_{Ca}\gamma_{Na}C_{Na}}{\beta_{Na}\sqrt{\gamma_{Ca}C_{Ca}}},$$

onde γ_{Na} e γ_{Ca} são dados por (2.4). Assumindo que a capacidade de troca de cátions CEC é constante, isto é,

$$2\beta_{Ca} + \beta_{Na} = CEC, \quad (3.1)$$

podemos obter, similarmente para (2.7)-(2.9), β_{Ca} e β_{Na} como função de C_{Ca} e C_{Na} como

$$\beta_{Ca}(C_{Ca}, C_{Na}) = \frac{K_{CaNa}\sqrt{\gamma_{Ca}C_{Ca}}CEC}{2K_{CaNa}\sqrt{\gamma_{Ca}C_{Ca}} + \gamma_{Na}C_{Na}}, \quad (3.2)$$

$$\beta_{Na}(C_{Ca}, C_{Na}) = \frac{\gamma_{Na}C_{Na}CEC}{2K_{CaNa}\sqrt{\gamma_{Ca}C_{Ca}} + \gamma_{Na}C_{Na}}. \quad (3.3)$$

Além disso, derivando a equação (3.1) obtemos uma outra importante igualdade

$$2\frac{\partial\beta_{Ca}}{\partial C_i} + \frac{\partial\beta_{Na}}{\partial C_i} = 0, \quad (3.4)$$

onde $i = Ca, Na$. Essa equação será importante futuramente e simplificará muitas expressões facilitando na análise das soluções do sistema.

Aqui, podemos executar um tratamento similar antes utilizado. Identificamos os efeitos da baixa salinidade sobre a permeabilidade relativa de cada fase. Assumimos que

estas permeabilidades são apenas modificadas pela dessorção de íons positivos divalentes Ca^{2+} pela superfície. Para utilizar essa metodologia, introduzimos uma função peso $H(\beta_{Ca})$ que vale 1 se não existe dessorção de íons pela superfície e vale menos que 1 se existe dessorção. A quantidade de íons dessorvidos é dada por

$$m(\beta_{Ca}) = \max\{\beta_{Ca}^0 - \beta_{Ca}(t > 0), 0\}. \quad (3.5)$$

Aqui $\beta_{Ca}(t > 0)$ e β_{Ca}^0 é a quantidade de íons dessorvidos pela superfície para tempos $t > 0$ e tempo inicial $t = 0$, respectivamente.

Usando $m(\beta_{Ca})$, a função peso $H(\beta_{Ca})$ é escrita como

$$H(\beta_{Ca}) = \frac{1}{1 + rm(\beta_{Ca})}, \quad (3.6)$$

onde r é uma constante. A permeabilidade relativa da água k_{rw} é escrita como:

$$k_{rw}(s_w, \beta_{Ca}) = H(\beta_{Ca})k_{rw}^{HS}(s_w) + [1 - H(\beta_{Ca})]k_{rw}^{LS}(s_w), \quad (3.7)$$

onde $k_{rw}^{HS}(s_w)$ é a permeabilidade relativa predeterminada da água em alta salinidade e $k_{rw}^{LS}(s_w)$ é a permeabilidade relativa predeterminada da água em baixa permeabilidade, na qual depende apenas da fase saturada. Analogamente definimos a permeabilidade relativa do óleo como

$$k_{ro}(s_w, \beta_{Ca}) = H(\beta_{Ca})k_{ro}^{HS}(s_o) + [1 - H(\beta_{Ca})]k_{ro}^{LS}(s_o). \quad (3.8)$$

Como estamos assumindo que (1.20) é satisfeito e que T é constante, então é simples ver que ρ_w e a velocidade são constantes usando a conservação de massa para água e óleo. Para simplificarmos o sistema vamos fazer a troca de variáveis $(x, t) \rightarrow (x/u, t/\phi)$. Além disso, desconsiderando a difusão é considerada muito pequena comparada com as outras escalas do problema, o sistema de equações (1.33) e (2.18)-(2.22) pode ser escrito na forma

$$\frac{\partial}{\partial t} s_w + \frac{\partial}{\partial x} f_w(s_w, \beta_{Ca}) = 0, \quad (3.9)$$

$$\frac{\partial}{\partial t} (C_{Ca}s_w + \beta_{Ca}M_c) + \frac{\partial}{\partial x} (C_{Ca}f_w(s_w, \beta_{Ca})) = 0, \quad (3.10)$$

$$\frac{\partial}{\partial t} (C_{Na}s_w + \beta_{Na}M_c) + \frac{\partial}{\partial x} (C_{Na}f_w(s_w, \beta_{Ca})) = 0, \quad (3.11)$$

$$\frac{\partial}{\partial t} C_{SO_4}s_w + \frac{\partial}{\partial x} (C_{SO_4}f_w(s_w, \beta_{Ca})) = 0, \quad (3.12)$$

$$\frac{\partial}{\partial t} C_{Cl}s_w + \frac{\partial}{\partial x} (C_{Cl}f_w(s_w, \beta_{Ca})) = 0. \quad (3.13)$$

Das equações (3.2)-(3.3) e (2.4), observamos que β_I para $I = Ca$ e Na dependem de C_{Ca} , C_{Na} , C_{SO_4} e C_{Cl} , por causa do parâmetro γ_I que depende da força iônica I_o , dado

por (2.5), que depende de todas as concentrações (C_{Ca} , C_{Na} , C_{SO_4} e C_{Cl}). Contudo, para simplificar nossos cálculos, podemos desconsiderar a dependência de β_I (para $I = Ca$ e Na) em C_{SO_4} e C_{Cl} , porque esta dependência é pequena comparada com as outras variáveis do sistema.

Podemos escrever o problema geral (3.9)-(3.13) de forma genérica

$$\frac{\partial G(V)}{\partial t} + \frac{\partial F(V)}{\partial x} = 0, \quad (3.14)$$

onde as variáveis desconhecidas são escritas como um vetor $V = (s_w, C_{Ca}, C_{Na}, C_{SO_4}, C_{Cl})$, a função de acumulação $G(V) = (s_w, C_{Ca}s_w + \beta_{Ca}M_c, C_{Na}s_w + \beta_{Na}M_c, C_{SO_4}s_w, C_{Cl}s_w)$ e a função de fluxo $F(V) = (f_w, C_{Ca}f_w, C_{Na}f_w, C_{SO_4}f_w, C_{Cl}f_w)$.

Já que existe apenas uma saturação, assim como apenas um fluxo fracionário relacionados a água, vamos a partir de agora abandonar o sub-índice w ciente de que podemos recuperar os valores da saturação da água como também a saturação do óleo via (1.20).

3.1 Soluções Suaves ou Rarefações

Usando o método das características para encontrar as soluções suaves de (3.14), é possível encontrar as velocidades das características e, posteriormente, as curvas integrais e de rarefação. Estas estruturas (soluções) são importantes para resolver o problema de Riemann. Uma discussão maior será feita no Capítulo 4, onde iremos apresentar as soluções do sistema.

Admitindo que $V(x, t) = V(\xi)$, no qual $\xi = x/t$ e assumindo que V é uma função suave, aplicando a regra da cadeia e reescrevendo (3.14) temos

$$B \frac{\partial}{\partial \xi}(V) \frac{\partial \xi}{\partial t} + A \frac{\partial}{\partial \xi}(V) \frac{\partial \xi}{\partial x} = 0, \quad (3.15)$$

sendo B e A as matrizes jacobianas de $G(V)$ e $F(V)$, respectivamente, com respeito à $V = (s_w, C_{Ca}, C_{Na}, C_{SO_4}, C_{Cl})$. Para o sistema (3.9)- (3.13), B e A são dadas por

$$B = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ C_{Ca} & s + M_c \frac{\partial \beta_{Ca}}{\partial C_{Ca}} & M_c \frac{\partial \beta_{Ca}}{\partial C_{Na}} & 0 & 0 \\ C_{Na} & M_c \frac{\partial \beta_{Na}}{\partial C_{Ca}} & s + M_c \frac{\partial \beta_{Na}}{\partial C_{Na}} & 0 & 0 \\ C_{SO_4} & 0 & 0 & s & 0 \\ C_{Cl} & 0 & 0 & 0 & s \end{pmatrix} \quad (3.16)$$

e

$$A = \begin{pmatrix} \frac{\partial f}{\partial s} & \frac{\partial f}{\partial C_{Ca}} & \frac{\partial f}{\partial C_{Na}} & 0 & 0 \\ C_{Ca} \frac{\partial f}{\partial s} & f + C_{Ca} \frac{\partial f}{\partial C_{Ca}} & C_{Ca} \frac{\partial f}{\partial C_{Na}} & 0 & 0 \\ C_{Na} \frac{\partial f}{\partial s} & C_{Na} \frac{\partial f}{\partial C_{Ca}} & f + C_{Na} \frac{\partial f}{\partial C_{Na}} & 0 & 0 \\ C_{SO_4} \frac{\partial f}{\partial s} & C_{SO_4} \frac{\partial f}{\partial C_{Ca}} & C_{SO_4} \frac{\partial f}{\partial C_{Na}} & f & 0 \\ C_{Cl} \frac{\partial f}{\partial s} & C_{Cl} \frac{\partial f}{\partial C_{Ca}} & C_{Cl} \frac{\partial f}{\partial C_{Na}} & 0 & f \end{pmatrix}. \quad (3.17)$$

As velocidades das curvas características são os autovalores $\lambda = \lambda(V)$ do sistema

$$A\vec{r} = \lambda B\vec{r} \quad (3.18)$$

e \vec{r} são os autovetores à direita.

Para encontrar λ , precisamos resolver a equação característica

$$\det(A - \lambda B) = 0 \quad (3.19)$$

e \vec{r} , para cada λ diferente, é obtido resolvendo (3.18). Porém para encontrar os autovalores e autovetores usaremos o Teorema 3.1.1 e o Teorema 3.1.2, que serão enunciados logo a seguir.

Dos autovetores podemos obter as curvas integrais satisfazendo

$$\frac{dV}{d\xi} = \vec{r}(V). \quad (3.20)$$

As soluções suaves, chamadas de *curvas de rarefação* ou *rarefação admissível*, são curvas integrais para o qual λ cresce ao longo da curva integral, ou seja,

$$\frac{d\lambda(V)}{d\xi} = \nabla\lambda(V) \cdot \vec{r} > 0. \quad (3.21)$$

Maiores detalhes de como são encontradas as rarefações podem ser vistos em [9].

3.1.1 Autovalores

Com o intuito de simplificar os cálculos, para encontrarmos os autovalores, provaremos e usaremos o Teorema 3.1.1.

Teorema 3.1.1. *Seja um sistema hiperbólico da forma*

$$s_t + f(s, \vec{c})_x = 0, \quad (3.22)$$

$$(s\vec{c} + \vec{a}(\vec{c}))_t + (f(s, \vec{c})\vec{c})_x = 0, \quad (3.23)$$

sendo $f : \mathbb{R}^{n+1} \rightarrow \mathbb{R}$, $\vec{a} : \mathbb{R}^n \rightarrow \mathbb{R}^n$ e as incógnitas $s = s(x, t) : \mathbb{R} \times \mathbb{R}^+ \rightarrow \mathbb{I}$ e as componentes do vetor \vec{c} , ou seja, $c_i = c_i(x, t) : \mathbb{R} \times \mathbb{R}^+ \rightarrow \mathbb{I}$ no qual $\mathbb{I} = (0, 1)$ e $i = 1, 2, \dots, n$. Suponha que o fluxo fracionário seja suave (derivadas parciais contínuas e diferente de zero) e $s \geq 0 \forall (x, t)$. Então os autovalores do sistema (3.22)-(3.23) são: o autovalor de Buckley-Leverett, denotado por λ_{BL} , $\lambda_{BL} = \frac{\partial f}{\partial s}$ e os autovalores que podem ser escritos da forma

$$\lambda(s, c) = \frac{f(s, \vec{c})}{s + h(\vec{c})}, \quad (3.24)$$

sendo $h(\vec{c})$ os autovalores da matriz $H(\vec{c})$, a matriz jacobiana de $\vec{a}(c)$.

Demonstração. Iniciamos escrevendo o sistema (3.22)-(3.23) na forma (3.15). A matriz A é escrita como

$$A = \begin{pmatrix} \frac{\partial f}{\partial s} & \frac{\partial f}{\partial c_1} & \dots & \frac{\partial f}{\partial c_n} \\ \frac{\partial f}{\partial s} c_1 & \frac{\partial f}{\partial c_1} c_1 + f & \dots & \frac{\partial f}{\partial c_n} c_1 \\ \vdots & \vdots & \dots & \vdots \\ \frac{\partial f}{\partial s} c_n & \frac{\partial f}{\partial c_1} c_n & \dots & \frac{\partial f}{\partial c_n} c_n + f \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \nabla f \\ c_1 \nabla f \\ \vdots \\ c_n \nabla f \end{pmatrix} + f \begin{pmatrix} 0 & 0 & \dots & 0 \\ 0 & 1 & \dots & 0 \\ \vdots & \vdots & \dots & \vdots \\ 0 & 0 & \dots & 1 \end{pmatrix} \quad (3.25)$$

$$= F + fW, \quad (3.26)$$

enquanto B pode ser escrita como

$$B = \begin{pmatrix} 1 & 0 & \dots & 0 \\ c_1 & s + \frac{\partial a_1(c)}{\partial c_1} & \dots & \frac{\partial a_1(c)}{\partial c_n} \\ \vdots & \vdots & \dots & \vdots \\ c_n & \frac{\partial a_n(c)}{\partial c_1} & \dots & s + \frac{\partial a_n(c)}{\partial c_n} \end{pmatrix} \quad (3.27)$$

$$= \begin{pmatrix} 1 & 0 & \dots & 0 \\ c_1 & 0 & \dots & 0 \\ \vdots & \vdots & \dots & \vdots \\ c_n & 0 & \dots & 0 \end{pmatrix} + s \begin{pmatrix} 0 & 0 & \dots & 0 \\ 0 & 1 & \dots & 0 \\ \vdots & \vdots & \dots & \vdots \\ 0 & 0 & \dots & 1 \end{pmatrix} + \begin{pmatrix} 0 & 0 & \dots & 0 \\ 0 & \frac{\partial a_1(c)}{\partial c_1} & \dots & \frac{\partial a_1(c)}{\partial c_n} \\ \vdots & \vdots & \dots & \vdots \\ 0 & \frac{\partial a_n(c)}{\partial c_1} & \dots & \frac{\partial a_n(c)}{\partial c_n} \end{pmatrix} \quad (3.28)$$

$$= V + sW + H'. \quad (3.29)$$

Observe que para calcular autovalores, podemos usar o polinômio característico a partir do determinante:

$$\det(A - \lambda B) = \det(F + fW - \lambda(V + sW + H')) = 0, \quad (3.30)$$

e se aplicarmos a operação $L_i - c_i L_1 \rightarrow L_i$ as matrizes W e H' permanecem inalteradas, no qual L_i representa a i -ésima linha de qualquer matriz. Por outro lado as matrizes F e V tomam a seguinte forma, respectivamente:

$$F' = \begin{pmatrix} \nabla f \\ 0 \\ \vdots \\ 0 \end{pmatrix} \quad e \quad V' = \begin{pmatrix} 1 & 0 & \dots & 0 \\ 0 & 0 & \dots & 0 \\ \vdots & \vdots & \dots & \vdots \\ 0 & 0 & \dots & 0 \end{pmatrix}. \quad (3.31)$$

Então temos que

$$\det(A - \lambda B) = \left(\frac{\partial f}{\partial s} - \lambda \right) \det((f - \lambda s)I - \lambda H),$$

onde I é a matriz identidade $n \times n$ e H é a matriz H' sem a primeira linha e primeira coluna.

A partir dessa equação obtemos o primeiro autovalor

$$\lambda_{BL} = \frac{\partial f}{\partial s}. \quad (3.32)$$

Suponhamos agora que $\lambda \neq 0$ e seja $h = \frac{f - \lambda s}{\lambda}$, então podemos escrever

$$\det(A - \lambda B) = \left(\frac{\partial f}{\partial s} - \lambda \right) \frac{1}{\lambda} \det(hI - H), \quad (3.33)$$

ou seja, h são os autovalores da matriz H , Jacobiana de $a(\vec{c})$.

Portanto, se h é autovalor de H , temos

$$h = \frac{f - \lambda s}{\lambda} \implies \lambda = \frac{f}{s + h}, \quad (3.34)$$

como queríamos demonstrar. \square

Observe que o sistema do modelo (3.9)-(3.13) segue a forma do sistema do Teorema 3.1.1. Além disso, não encontraremos autovalor nulo para o sistema pois f é diferente de zero no intervalo $s_{wr} \leq s \leq 1 - s_{or}$.

O primeiro autovalor do sistema, usando o Teorema 3.1.1 é,

$$\lambda_{BL} = \frac{\partial f}{\partial s}, \quad (3.35)$$

conhecido como autovalor de Buckley-Leverett, chamado assim em referência ao problema clássico de Buckley-Leverett onde apenas a saturação varia, veja [2].

Agora, calculando os autovalores $h(\vec{c})$ da jacobiana da função vetorial $a(c)$ em nosso modelo, teremos

$$\det(H - hI) = \det \begin{pmatrix} M_c \frac{\partial \beta_{Ca}}{\partial C_{Ca}} - h & M_c \frac{\partial \beta_{Ca}}{\partial C_{Na}} & 0 & 0 \\ M_c \frac{\partial \beta_{Na}}{\partial C_{Ca}} & M_c \frac{\partial \beta_{Na}}{\partial C_{Na}} - h & 0 & 0 \\ 0 & 0 & -h & 0 \\ 0 & 0 & 0 & -h \end{pmatrix} \quad (3.36)$$

$$= h^2 \left[\left(M_c \frac{\partial \beta_{Ca}}{\partial C_{Ca}} - h \right) \left(M_c \frac{\partial \beta_{Na}}{\partial C_{Na}} - h \right) - M_c^2 \frac{\partial \beta_{Na}}{\partial C_{Ca}} \frac{\partial \beta_{Ca}}{\partial C_{Na}} \right] \quad (3.37)$$

$$= h^2 \left[M_c^2 \frac{\partial \beta_{Ca}}{\partial C_{Ca}} \frac{\partial \beta_{Na}}{\partial C_{Na}} - h M_c \left(\frac{\partial \beta_{Ca}}{\partial C_{Ca}} + \frac{\partial \beta_{Na}}{\partial C_{Na}} \right) + h^2 - M_c^2 \frac{\partial \beta_{Na}}{\partial C_{Ca}} \frac{\partial \beta_{Ca}}{\partial C_{Na}} \right] \quad (3.38)$$

Usando agora a equação (3.4), temos que a equação anterior reduz-se a

$$h^3 \left[h - M_c \left(\frac{\partial \beta_{Na}}{\partial C_{Na}} - \frac{1}{2} \frac{\partial \beta_{Na}}{\partial C_{Ca}} \right) \right] = 0, \quad (3.39)$$

o que nos leva aos autovalores da matriz H

$$h_1 = M_c \left(\frac{\partial \beta_{Na}}{\partial C_{Na}} - \frac{1}{2} \frac{\partial \beta_{Na}}{\partial C_{Ca}} \right) \quad \text{e} \quad h_2 = 0. \quad (3.40)$$

Assim, usando a equação (3.40.a), o autovalor da matriz do sistema original pode ser encontrado

$$\lambda_1 = \frac{f}{s - M_c \left(\frac{\partial \beta_{Na}}{\partial C_{Na}} - \frac{1}{2} \frac{\partial \beta_{Na}}{\partial C_{Ca}} \right)} = \frac{2f}{2s + M_c \left(2 \frac{\partial \beta_{Na}}{\partial C_{Na}} - \frac{\partial \beta_{Na}}{\partial C_{Ca}} \right)}. \quad (3.41)$$

Por outro lado, se tomarmos (3.40.b), então o autovalor da matriz original fica

$$\lambda_2 = \frac{f}{s - 0} = \frac{f}{s}. \quad (3.42)$$

3.1.2 Autovetores

Dado o sistema (3.22)-(3.23), podemos escrevê-lo da seguinte forma

$$u_t + \mathbb{A}(u)u_x = 0, \quad (3.43)$$

onde $u = (s \ \vec{c})^T$ e

$$\mathbb{A}(u) = \begin{pmatrix} f_s(s, c) & (f_c(s, c))^T \\ 0 & f(s, c)(sI + H(c))^{-1} \end{pmatrix}, \quad (3.44)$$

aqui $f_s(s, \vec{c}) = \frac{\partial f}{\partial s}(s, c)$, $f_c(s, c) = \left(\frac{\partial f}{\partial c_1}, \dots, \frac{\partial f}{\partial c_n} \right)$ e $H(\vec{c})$ é a jacobiana de $a(\vec{c})$.

Com o mesmo intuito de facilitar o cálculos, usaremos o Teorema 3.1.2 para encontrar os autovetores do sistema.

Teorema 3.1.2. *Seja $u = (s, c) \in \mathbb{I}^{n+1}$. Sob as hipóteses de suavidade da solução, os autovetores de (3.44) podem ser escritos d na forma*

$$\vec{r} = (\langle f_c(s, c), e \rangle, (\lambda - f_s)e) \in \mathbb{I}^{n+1}, \quad (3.45)$$

onde $e = e(c) \in \mathbb{R}^n$ são os autovetores de $H(c)$, matriz jacobiana de $a(c)$ que possui inversa por hipótese, correspondente ao autovalor $h(c)$.

Demonstração. A demonstração deste teorema pode ser verificada através do seguinte cálculo direto,

$$\begin{aligned} (\mathbb{A}(u) - \lambda I)\vec{r} &= \begin{pmatrix} f_s(s, c) - \lambda & (f_c(s, c))^T \\ 0 & f(s, c)(sI + H(c))^{-1} - \lambda \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \langle f_c(s, c), e \rangle \\ (\lambda - f_s(s, c))e \end{pmatrix} \\ &= \begin{pmatrix} (f_s(s, c) - \lambda)\langle f_c(s, c), e \rangle + (\lambda - f_s(s, c))\langle f_c(s, c), e \rangle \\ (f(s, c)(sI + H(c))^{-1} - \lambda)(\lambda - f_s(s, c))e \end{pmatrix}. \end{aligned} \quad (3.46)$$

Se \vec{r} é um autovalor de $\mathbb{A}(u)$, então o resultado da equação (3.46) é igual ao vetor nulo. Na primeira linha de (3.46), obtemos o resultado desejado, ou seja, a primeira coordenada do vetor é igual a zero. A partir da segunda linha em diante, é suficiente mostrarmos que:

$$(f(s, c)(sI + H(c))^{-1} - \lambda)e = \vec{0} \quad (3.47)$$

Agora, como temos por hipótese que $(sI + H(c))^{-1}$ tem inversa, podemos multiplicar por $(sI + H(c))$ ambos os lados de (3.47) e mostrar que o lado esquerdo dessa equação também se anula. Assim fazendo esta operação temos que

$$\begin{aligned} (sI + H(c))(f(s, c)(sI + H(c))^{-1} - \lambda)e &= (f(s, c)I - \lambda(sI + H(c)))e \\ &= f(s, c)Ie - \frac{f(s, c)}{s+h(c)}(sIe + H(c)e) \\ &= f(s, c)e - \frac{f(s, c)}{s+h(c)}(se + h(c)e) \\ &= f(s, c)e - \frac{f(s, c)}{s+h(c)}(s + h(c))e = \vec{0}. \end{aligned}$$

ou seja, (3.45) é um autovetor e obtemos assim o resultado que queríamos demonstrar. \square

Resultados similares aos Teoremas 3.1.1 e 3.1.2 podem ser encontrados em [14].

3.1.2.1 Cálculo dos Autovetores para a Matriz a Jacobiana de $a(c)$

Inicialmente é necessário obter todos os autovetores da matriz H , a jacobiana de $a(c)$.

Para o primeiro autovalor $h_1 = M_c \left(\frac{\partial \beta_{Na}}{\partial C_{Ca}} - \frac{1}{2} \frac{\partial \beta_{Na}}{\partial C_{Ca}} \right)$, substituindo na matriz (3.36) e usando a equação (3.4) temos

$$(H - h_1 I)v_{h_1} = \vec{0}, \quad (3.48)$$

$$M_c \begin{pmatrix} -\frac{\partial \beta_{Na}}{\partial C_{Na}} & \frac{\partial \beta_{Ca}}{\partial C_{Na}} & 0 & 0 \\ \frac{\partial \beta_{Na}}{\partial C_{Ca}} & \frac{1}{2} \frac{\partial \beta_{Na}}{\partial C_{Ca}} & 0 & 0 \\ 0 & 0 & \frac{1}{2} \frac{\partial \beta_{Na}}{\partial C_{Ca}} - \frac{\partial \beta_{Na}}{\partial C_{Na}} & 0 \\ 0 & 0 & 0 & \frac{1}{2} \frac{\partial \beta_{Na}}{\partial C_{Ca}} - \frac{\partial \beta_{Na}}{\partial C_{Na}} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} v_1 \\ v_2 \\ v_3 \\ v_4 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \\ 0 \\ 0 \end{pmatrix}, \quad (3.49)$$

Este sistema deve ter infinitas soluções e uma vez que a terceira e quarta linha da matriz do sistema são linearmente independentes, temos que é necessário que a primeira e a segunda linhas sejam múltiplas uma da outra. Desconsiderando a primeira linha e desde que $\frac{\partial \beta_{Na}}{\partial C_{Ca}} \neq 0$ e $\frac{\partial \beta_{Na}}{\partial C_{Na}} - \frac{1}{2} \frac{\partial \beta_{Na}}{\partial C_{Ca}} \neq 0$ (isso será demonstrado na seção 3.1.3), após algumas operações elementares, o sistema fica

$$\begin{pmatrix} 2 & 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} v_1 \\ v_2 \\ v_3 \\ v_4 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \\ 0 \\ 0 \end{pmatrix}, \quad (3.50)$$

ou seja, a solução do sistema são todos os vetores múltiplos do autovetor

$$\vec{v}_{h_1} = (1, -2, 0, 0). \quad (3.51)$$

Analogamente, tomando agora $h_2 = 0$, substituindo em (3.36) temos

$$(H - h_2 I)v_{h_2} = \vec{0}, \quad (3.52)$$

$$\begin{pmatrix} M_c \frac{\partial \beta_{Ca}}{\partial C_{Ca}} & M_c \frac{\partial \beta_{Ca}}{\partial C_{Na}} & 0 & 0 \\ M_c \frac{\partial \beta_{Na}}{\partial C_{Ca}} & M_c \frac{\partial \beta_{Na}}{\partial C_{Na}} & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} v_1 \\ v_2 \\ v_3 \\ v_4 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \\ 0 \\ 0 \end{pmatrix}, \quad (3.53)$$

o qual, após usarmos a equação (3.4) e aplicar a operação elementar $L_2 + 2L_1 \rightarrow L_2$, torna-se

$$\begin{pmatrix} \frac{\partial \beta_{Na}}{\partial C_{Ca}} & \frac{\partial \beta_{Na}}{\partial C_{Na}} & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} v_1 \\ v_2 \\ v_3 \\ v_4 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \\ 0 \\ 0 \end{pmatrix}. \quad (3.54)$$

A solução para o sistema homogêneo com a matriz (3.54) pode ser qualquer vetor $\vec{v}_{h_2} \in \mathbb{R}^4$ escrito através da seguinte combinação linear

$$\vec{v}_{h_2} = c_1 \begin{pmatrix} -\frac{\partial \beta_{Na}}{\partial C_{Na}} \\ \frac{\partial \beta_{Na}}{\partial C_{Ca}} \\ 0 \\ 0 \end{pmatrix} + c_2 \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \\ 1 \\ 0 \end{pmatrix} + c_3 \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \\ 0 \\ 1 \end{pmatrix}, \quad (3.55)$$

onde $c_i \in \mathbb{R}$, com $i = 1, 2, 3$. Assim, com esse autovalor obtemos três autovetores, ou seja, o autovalor possui multiplicidade algébrica e geométrica três. Denotaremos os autovetores por $\vec{v}_{h_2,1}$, $\vec{v}_{h_2,2}$ e $\vec{v}_{h_2,3}$, respectivamente, definindo-os como

$$\vec{v}_{h_2,1} = \left(-\frac{\partial \beta_{Na}}{\partial C_{Na}}, \frac{\partial \beta_{Na}}{\partial C_{Ca}}, 0, 0 \right), \quad (3.56)$$

$$\vec{v}_{h_2,2} = (0, 0, 1, 0) \quad \text{e} \quad (3.57)$$

$$\vec{v}_{h_2,3} = (0, 0, 0, 1). \quad (3.58)$$

E agora, com os resultados dos autovalores e autovetores da matriz H , podemos encontrar os autovetores do sistema original na forma de (3.44).

3.1.2.2 Autovetores do Sistema Original e as Curvas Integrais

Para o primeiro autovetor associado ao primeiro autovalor λ_1 , temos a partir do Teorema 3.1.2 e do autovetor (3.51) que

$$\vec{r}_{\lambda_1} = (\langle f_c(s, c), \vec{v}_{h_1} \rangle, (\lambda_1 - f_s(s, c))\vec{v}_{h_1}), \quad (3.59)$$

ou seja, podemos tomar o autovetor como

$$\vec{r}_{\lambda_1} = \left(2 \frac{\partial f}{\partial C_{Na}} - \frac{\partial f}{\partial C_{Ca}}, \frac{\partial f}{\partial s} - \lambda_1, 2 \left(\lambda_1 - \frac{\partial f}{\partial s} \right), 0, 0 \right), \quad (3.60)$$

sendo λ_1 dado por (3.41).

Vamos observar agora como são as curvas integrais associadas a esse campo vetorial. As curvas satisfazem a equação (3.20), que pode ser escrita como:

$$\left(\frac{\partial s}{\partial \xi}, \frac{\partial C_{Ca}}{\partial \xi}, \frac{\partial C_{Na}}{\partial \xi}, \frac{\partial C_{SO_4}}{\partial \xi}, \frac{\partial C_{Cl}}{\partial \xi} \right) = \left(2 \frac{\partial f}{\partial C_{Na}} - \frac{\partial f}{\partial C_{Ca}}, \frac{\partial f}{\partial s} - \lambda_1, 2 \left(\lambda_1 - \frac{\partial f}{\partial s} \right), 0, 0 \right). \quad (3.61)$$

Da equação (3.61), as concentrações C_{SO_4} e C_{Cl} são constantes. Além disso as variáveis s , C_{Ca} e C_{Na} satisfazem o seguinte sistema:

$$\frac{\partial s}{\partial \xi} = 2 \frac{\partial f}{\partial C_{Na}} - \frac{\partial f}{\partial C_{Ca}}, \quad (3.62)$$

$$\frac{\partial C_{Ca}}{\partial \xi} = \frac{\partial f}{\partial s} - \lambda_1, \quad (3.63)$$

$$\frac{\partial C_{Na}}{\partial \xi} = 2 \left(\lambda_1 - \frac{\partial f}{\partial s} \right), \quad (3.64)$$

onde λ_1 é dado por (3.41).

Podemos resumir as informações sobre as curvas integrais da primeira família na seguinte proposição.

Proposição 3.1.1. *As curvas integrais associadas ao autovalor λ_1 , Eq. (3.41), são formadas de apenas um ramo associado ao autovetor \vec{r}_{λ_1} , Eq. (3.60), no qual C_{SO_4} e C_{Cl} são constantes e s , C_{Ca} e C_{Na} satisfazem o sistema (3.62)-(3.64).*

A Figura (9) ilustra a solução do sistema para uma condição inicial arbitrária (ponto em azul). É possível também observar nesta mesma figura que a curva integral é uma curva no espaço fase, podendo inclusive admitir valores que não têm interpretação física. Observe que existem pontos na curva o qual valores de concentrações admitem valores negativos. Portanto, quando estivermos considerando as ondas de rarefações em busca das soluções do problema geral, iremos considerar apenas pedaços da curva no intervalo que tenha sentido considerar as concentrações C_{Ca} e C_{Na} .

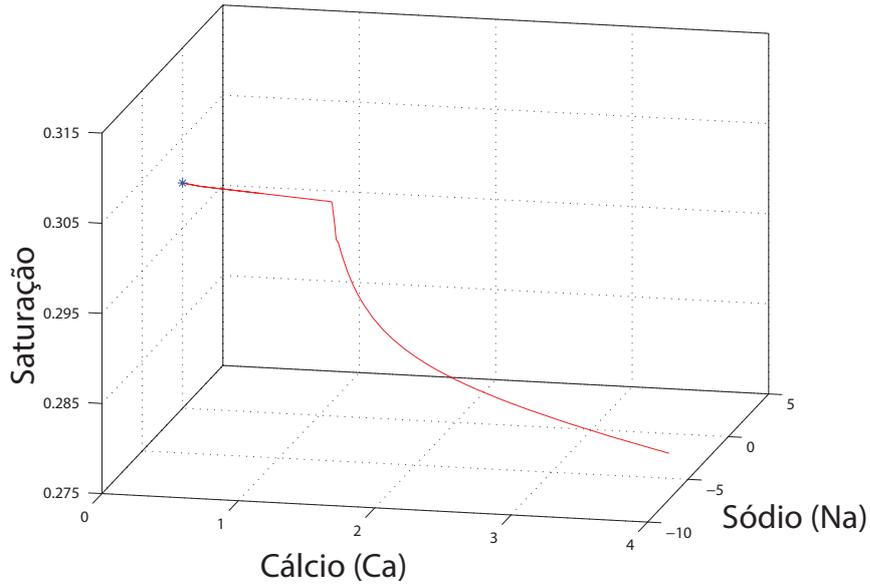


Figura 9 – Curva integral projetada no espaço (s, C_{Ca}, C_{Na}) , associada ao autovalor λ_1 para alguma condição inicial (ponto em azul).

Antes de calcularmos o primeiro autovetor $\vec{r}_{\lambda_2,1}$ associado ao segundo autovalor do sistema original, vamos enunciar uma proposição que nos ajudará na simplificação da expressão desse autovetor.

Proposição 3.1.2. *Seja $F = F(\theta)$ com $\theta = \theta(\gamma_1, \gamma_2)$ uma função derivável para todo ponto $(\gamma_1, \gamma_2) \in \Omega \subset \mathbb{R}^+ \times \mathbb{R}^+$, então*

$$\frac{\partial F}{\partial \gamma_1} \frac{\partial \theta}{\partial \gamma_2} - \frac{\partial F}{\partial \gamma_2} \frac{\partial \theta}{\partial \gamma_1} = 0.$$

Demonstração. Calculando explicitamente, temos:

$$\frac{\partial F}{\partial \gamma_1} \frac{\partial \theta}{\partial \gamma_2} - \frac{\partial F}{\partial \gamma_2} \frac{\partial \theta}{\partial \gamma_1} = \frac{\partial F}{\partial \theta} \frac{\partial \theta}{\partial \gamma_1} \frac{\partial \theta}{\partial \gamma_2} - \frac{\partial F}{\partial \theta} \frac{\partial \theta}{\partial \gamma_2} \frac{\partial \theta}{\partial \gamma_1} = 0.$$

□

Para o autovetor associado ao autovalor λ_2 , temos a partir do Teorema 3.1.2 e do autovetor (3.56) que

$$\vec{r}_{\lambda_2,1} = (\langle f_c(s, c), \vec{v}_{h_2,1} \rangle, (\lambda_2 - f_s(s, c)) \vec{v}_{h_2,1}), \quad (3.65)$$

ou seja,

$$\vec{r}_{\lambda_2,1} = \left(-\frac{\partial f}{\partial C_{Ca}} \frac{\partial \beta_{Na}}{\partial C_{Na}} + \frac{\partial f}{\partial C_{Na}} \frac{\partial \beta_{Na}}{\partial C_{Ca}}, -(\lambda_2 - f_s(s, c)) \frac{\partial \beta_{Na}}{\partial C_{Na}}, (\lambda_2 - f_s(s, c)) \frac{\partial \beta_{Na}}{\partial C_{Ca}}, 0, 0 \right). \quad (3.66)$$

Usando o resultado da Proposição 3.1.2 na primeira coordenada, temos que o autovetor $\vec{r}_{\lambda_2,1}$ pode ser escrito como

$$\vec{r}_{\lambda_2,1} = (\lambda_2 - f_s(s, c)) \left(0, -\frac{\partial \beta_{Na}}{\partial C_{Na}}, \frac{\partial \beta_{Na}}{\partial C_{Ca}}, 0, 0 \right). \quad (3.67)$$

Da mesma forma que procedemos com o primeiro autovalor λ_1 , vamos observar como são as curvas integrais associadas à segunda família. Tais curvas satisfazem (3.20), que nesse caso podem ser escritas como:

$$\left(\frac{\partial s}{\partial \xi}, \frac{\partial C_{Ca}}{\partial \xi}, \frac{\partial C_{Na}}{\partial \xi}, \frac{\partial C_{SO_4}}{\partial \xi}, \frac{\partial C_{Cl}}{\partial \xi} \right) = (\lambda_2 - f_s(s, c)) \left(0, -\frac{\partial \beta_{Na}}{\partial C_{Na}}, \frac{\partial \beta_{Na}}{\partial C_{Ca}}, 0, 0 \right). \quad (3.68)$$

Da equação (3.68), podemos escrever o seguinte sistema

$$\frac{\partial C_{Ca}}{\partial \xi} = -(\lambda_2 - f_s(s, c)) \frac{\partial \beta_{Na}}{\partial C_{Na}} \quad \text{e} \quad \frac{\partial C_{Na}}{\partial \xi} = (\lambda_2 - f_s(s, c)) \frac{\partial \beta_{Na}}{\partial C_{Ca}}, \quad (3.69)$$

Se $(\lambda_2 - f_s(s, c)) \neq 0$, então dividindo a equação (3.69.a) pela (3.69.b) obtemos:

$$\frac{\partial C_{Ca}}{\partial C_{Na}} = -\frac{\partial \beta_{Na}}{\partial C_{Na}} \left(\frac{\partial \beta_{Na}}{\partial C_{Ca}} \right)^{-1} \implies \frac{\partial \beta_{Na}}{\partial C_{Na}} \partial C_{Na} + \frac{\partial \beta_{Na}}{\partial C_{Ca}} \partial C_{Ca} = 0, \quad (3.70)$$

ou seja, a diferencial total de β_{Na} é zero, portanto, β_{Na} é constante ao longo dessa curva. Dessa forma, a curva integral satisfaz s , C_{SO_4} , C_{Cl} e β_{Na} constantes se $(\lambda_2 - f_s(s, c)) \neq 0$. Para os valores para os quais $(\lambda_2 - f_s(s, c)) = 0$, a curva ainda pode ser desenhada, entretanto devemos entender isso como um processo de limite.

Para os autovetores $\vec{r}_{\lambda_2,2}$ e $\vec{r}_{\lambda_2,3}$, procedemos da mesma forma e obtemos os autovetores a partir dos autovetores de matriz H , que são dados $\vec{v}_{h_2,2}$ e $\vec{v}_{h_2,3}$, (3.57) e (3.58), respectivamente. Logo, obtemos facilmente que

$$\vec{r}_{\lambda_2,2} = (\langle f_c(s, c), \vec{v}_{h_2,2} \rangle, (\lambda_2 - f_s(s, c)) \vec{v}_{h_2,2}) = (\lambda_2 - f_s(s, c)) (0, 0, 0, 1, 0) \quad (3.71)$$

e

$$\vec{r}_{\lambda_2,3} = (\langle f_c(s, c), \vec{v}_{h_2,3} \rangle, (\lambda_2 - f_s(s, c)) \vec{v}_{h_2,3}) = (\lambda_2 - f_s(s, c)) (0, 0, 0, 0, 1). \quad (3.72)$$

Utilizando o mesmo cálculo feito para o campo $\vec{r}_{\lambda_2,1}$, verificamos que se $\lambda_2 - f_s(s, c) \neq 0$, a curva integral associada ao autovetor $\vec{r}_{\lambda_2,2}$ satisfaz s , C_{Ca} , C_{Na} e C_{Cl} constantes e C_{SO_4} qualquer.

A curva integral associada ao autovetor $\vec{r}_{\lambda_2,3}$ satisfaz s , C_{Ca} , C_{Na} e C_{SO_4} constantes e C_{Cl} qualquer. Pela mesma observação acima, podemos dizer que as curvas também podem ser obtidas por um processo limite, entretanto, os valores para os quais $\lambda_2 - f_s(s, c) = 0$ formam região de bifurcação para a solução, de modo que ela mudará ao cruzar tal curva.

Podemos resumir as informações anteriores na proposição a seguir.

Proposição 3.1.3. *Se $\lambda_2 - f_s(s, c) \neq 0$, as curvas integrais associadas ao autovalor λ_2 , Eq. (3.42), são formadas de 3 ramos:*

1. *Um ramo associado ao autovetor $\vec{r}_{\lambda_2,1}$, Eq. (3.67), no qual s , C_{SO_4} , C_{Cl} e β_{Na} são constantes, veja Fig. (10);*
2. *Um ramo associado ao autovetor $\vec{r}_{\lambda_2,2}$, Eq. (3.71), no qual s , C_{Ca} , C_{Na} e C_{Cl} são constantes e C_{SO_4} qualquer, veja Fig. (11);*
3. *Um ramo associado ao autovetor $\vec{r}_{\lambda_2,3}$, Eq. (3.72), no qual s , C_{Ca} , C_{Na} e C_{SO_4} são constantes e C_{Cl} qualquer, veja Fig. (12).*

Caso $\lambda_2 - f_s(s, c) = 0$ temos uma região de bifurcação para a solução.

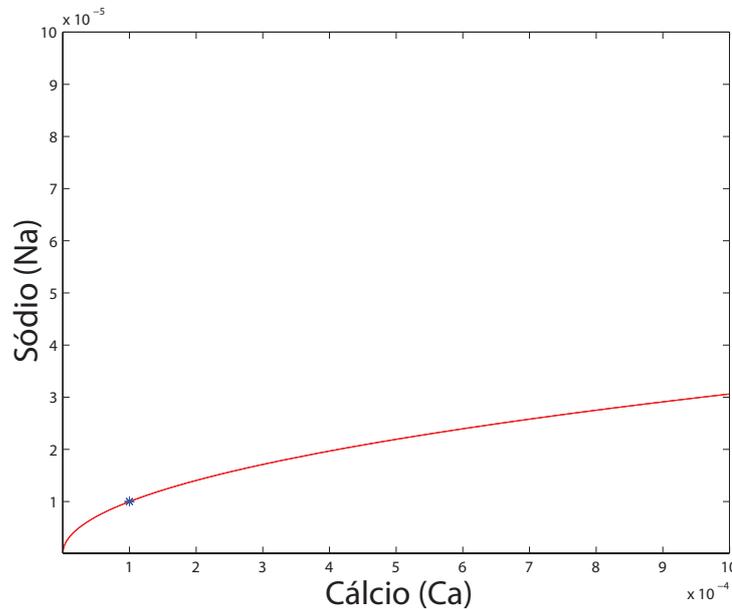


Figura 10 – Curva integral projetada no plano (C_{Ca}, C_{Na}) , associada ao autovalor λ_2 e ao autovetor $\vec{r}_{\lambda_2,1}$ para alguma condição inicial (ponto em azul).

Veremos mais a frente que a região onde $\lambda_2 - f_s(s, c) = 0$, faz parte do local de inflexão da família λ_1 , Proposição 3.2.1. Além disso, veremos que a família λ_2 é linearmente degenerada, Proposição 3.2.4.

Finalmente, para o último autovetor associado ao autovalor λ_{BL} , citado no Teorema 3.1.1, não podemos usar o Teorema 3.1.2 pois λ_{BL} não é autovalor de H . Porém, observe que o vetor

$$\vec{r}_{BL} = (1, 0, 0, 0, 0). \quad (3.73)$$

é um autovetor do sistema. Este resultado pode ser justificado a partir da observação da matriz original $A - \lambda_{BL}B$. Dessa forma, na curva integral para essa família, apenas a saturação s mudará. Esta matriz contém a primeira coluna nula e os outros elementos

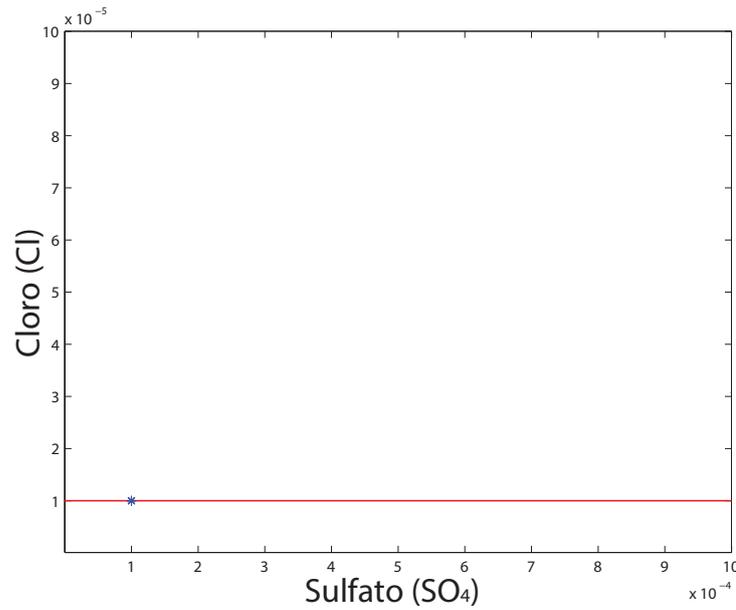


Figura 11 – Curva integral projetada no plano (C_{SO_4}, C_{Cl}) , associada ao autovalor λ_1 e ao autovetor $\vec{r}_{\lambda_2,2}$ para alguma condição inicial (ponto em azul).

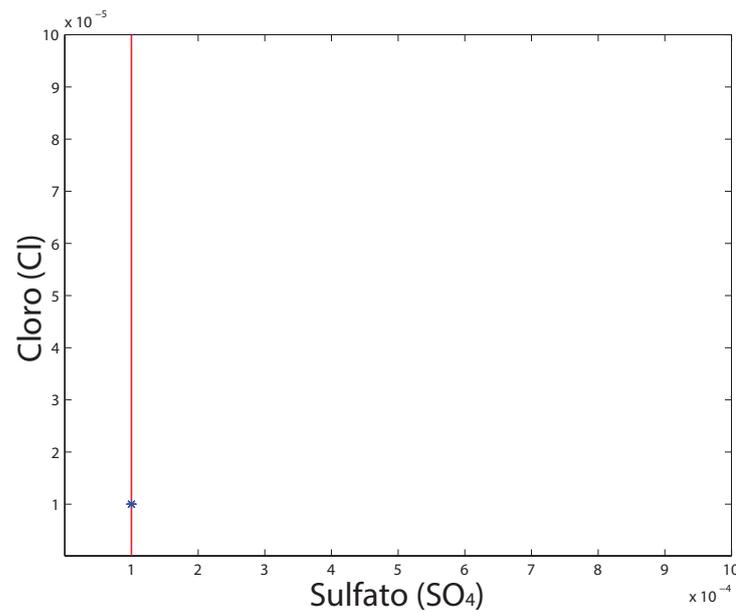


Figura 12 – Curva integral projetada no plano (C_{SO_4}, C_{Cl}) , associada ao autovalor λ_1 e ao autovetor $\vec{r}_{\lambda_2,3}$ para alguma condição inicial (ponto em azul).

da matriz não possuem derivadas com relação a s . Isso impossibilita que outras linhas ou colunas tornem-se nulas. Assim, podemos verificar pelo produto

$$(A - \lambda_{BL}B)\vec{r}_{BL} = 0, \tag{3.74}$$

o que caracteriza a propriedade dos autovetores.

Analogamente, iremos resumir essas informações em uma proposição.

Proposição 3.1.4. *As curvas integrais associadas ao autovalor λ_{BL} , Eq. (3.32), são formadas de apenas um ramo associado ao autovetor $\vec{r}_{\lambda_{BL}}$, Eq. (3.73), no qual C_{Ca} , C_{Na} , C_{SO_4} e C_{Cl} são constantes e apenas s varia, veja Fig. (13).*

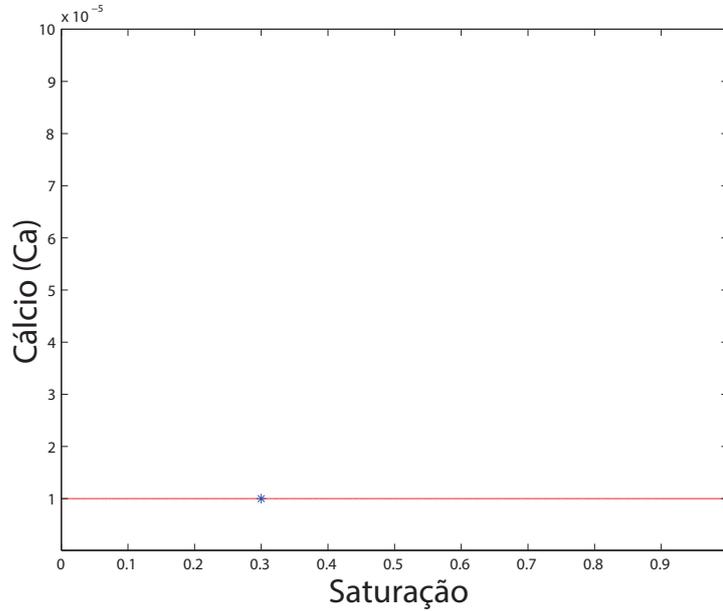


Figura 13 – Curva integral projetada no plano (s, C_{Ca}) , associada ao autovalor λ_{BL} e ao autovetor \vec{r}_{BL} para alguma condição inicial (ponto em azul).

Observe que obtemos assim, uma base do \mathbb{R}^5 formada com os autovetores do sistema (característica de todo sistema hiperbólico). E finalmente encontramos as cinco ondas de rarefações resumidas nas Proposições 3.1.1, 3.1.3 e 3.1.4.

3.1.3 Ordem dos Autovalores

Esta seção tem como finalidade ordenar os autovalores. Estamos interessados em saber essa informação pelo fato que toda solução do problema de Riemann é construída da família mais lenta para a família mais rápida (ver [9]).

Nossa primeira tarefa será definir a seguinte função

$$\eta(C_{Ca}, C_{Na}) = M_c \left(\frac{\partial \beta_{Na}}{\partial C_{Na}} - \frac{1}{2} \frac{\partial \beta_{Na}}{\partial C_{Ca}} \right), \quad (3.75)$$

que é exatamente o autovalor h_1 , e mostrar que ela é sempre positiva.

A demonstração deste fato é bastante difícil (senão impossível!) uma vez que as expressões das derivadas de β_{Na} são bem complicadas. Porém, como todos os valores das concentrações de Ca e Na definem um conjunto limitado tomando valores no intervalo de 10^{-7} a 10^{-4} , podemos verificar graficamente o sinal de $\eta(C_{Ca}, C_{Na})$. A Figura 14 abaixo mostra o gráfico desta função para todo o domínio em que estamos interessados em

procurar soluções para o sistema. É possível ver graficamente que a função $\eta(C_{Ca}, C_{Na})$ não se anula para nenhum valor do domínio (C_{Ca}, C_{Na}) e sempre assume valores positivos.

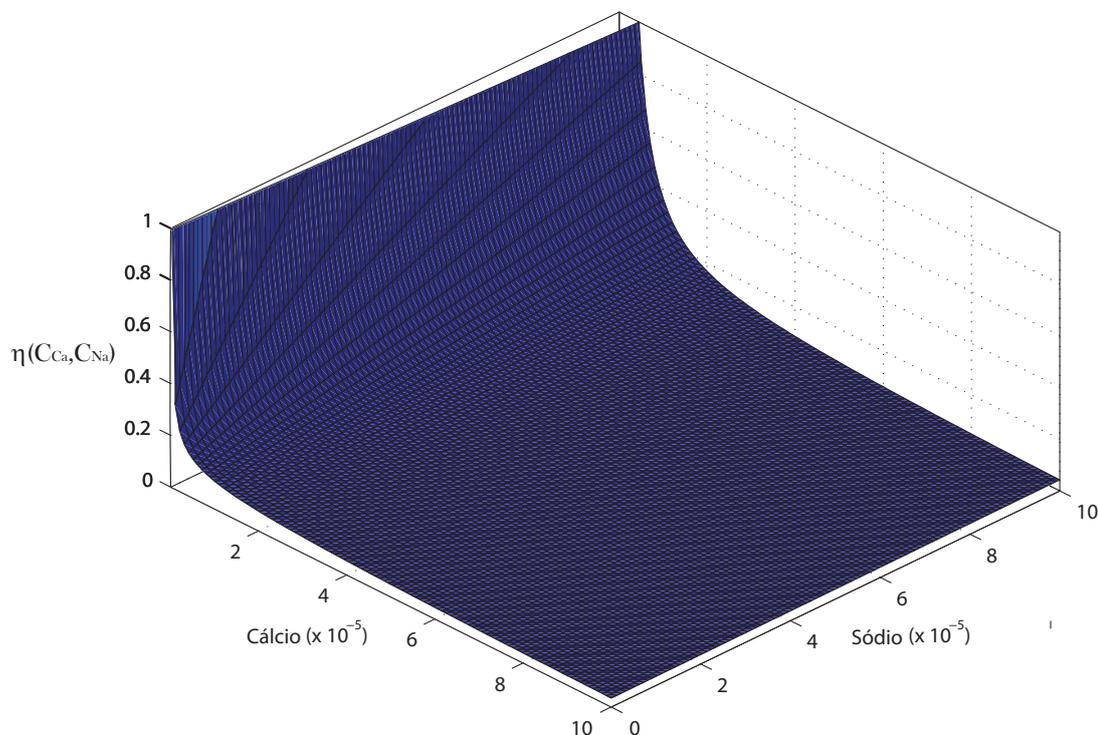


Figura 14 – Gráfico da função positiva $\eta(C_{Ca}, C_{Na})$.

Uma vez verificada a função positiva $\eta(C_{Ca}, C_{Na})$, segue direto que

$$\frac{f}{s + \eta(C_{Ca}, C_{Na})} < \frac{f}{s}, \quad (3.76)$$

ou seja, $\lambda_1 < \lambda_2$ para todos os valores (s, C_{Ca}, C_{Na}) . Resultado que podemos enunciar como:

Proposição 3.1.5. *Como $\eta(C_{Ca}, C_{Na})$, dado por Eq. (3.75), é positivo em todo o seu domínio de definição, então o autovalor λ_1 é menor que λ_2 também em todo o domínio.*

Nossa tarefa agora é dividir o espaço tridimensional (s, C_{Ca}, C_{Na}) em regiões onde saberemos qual a ordem dos autovalores (λ_{BL} , λ_1 e λ_2). Assim, dado um ponto (s, C_{Ca}, C_{Na}) , queremos saber qual o menor autovalor, o intermediário e o maior. A próxima Proposição 3.1.6 nos ajudará nessa tarefa.

Proposição 3.1.6. *Seja $f(s, \beta_{Ca}(C_{Ca}, C_{Na}))$ uma função contínua e estritamente crescente definida pela equação (1.24.a). Suponha s_1 e s_2 pertencentes a um intervalo onde a função é côncava. Suponha ainda que*

$$\frac{f(s_1, \beta_{Na}(C_{Ca^*}, C_{Na^*}))}{s_1 + \eta(C_{Ca^*}, C_{Na^*})} = \frac{\partial f}{\partial s}(s_1, \beta_{Na}(C_{Ca^*}, C_{Na^*})) \quad (3.77)$$

e

$$\frac{f(s_2, \beta_{Na}(C_{Ca^*}, C_{Na^*}))}{s_2} = \frac{\partial f}{\partial s}(s_2, \beta_{Na}(C_{Ca^*}, C_{Na^*})), \quad (3.78)$$

sendo C_{Ca^*} e C_{Na^*} concentrações fixas de cálcio e sódio, respectivamente. Então $s_1 > s_2$.

Demonstração. Inicialmente, perceba que como C_{Ca^*} e C_{Na^*} são concentrações fixas, então a função $f(s, \beta_{Ca}(C_{Ca^*}, C_{Na^*})) = f(s)$, ou seja, a função de fluxo depende apenas da saturação.

Inicialmente, suponha que $s_1 < s_2$. Logo podemos escrever que

$$s_2 = s_1 + \varepsilon, \quad (3.79)$$

para algum $\varepsilon > 0$. Como a função é estritamente crescente, então temos que

$$f(s_1, \beta_{Na}(C_{Ca^*}, C_{Na^*})) < f(s_2, \beta_{Na}(C_{Ca^*}, C_{Na^*})). \quad (3.80)$$

Dividindo esta inequação por s_2 , teremos

$$\frac{f(s_1, \beta_{Na}(C_{Ca^*}, C_{Na^*}))}{s_2} < \frac{f(s_2, \beta_{Na}(C_{Ca^*}, C_{Na^*}))}{s_2} \quad (3.81)$$

$$\frac{f(s_1, \beta_{Na}(C_{Ca^*}, C_{Na^*}))}{s_1 + \varepsilon} < \frac{f(s_2, \beta_{Na}(C_{Ca^*}, C_{Na^*}))}{s_2}. \quad (3.82)$$

Uma vez que tanto ε como $\eta(C_{Ca^*}, C_{Na^*})$ são valores positivos, podemos substituir tanto um pelo outro sem perda de generalidade. Dessa forma, podemos escrever que

$$\frac{f(s_1, \beta_{Na}(C_{Ca^*}, C_{Na^*}))}{s_1 + \varepsilon} = \frac{f(s_1, \beta_{Na}(C_{Ca^*}, C_{Na^*}))}{s_1 + \eta(C_{Ca^*}, C_{Na^*})}. \quad (3.83)$$

Agora, usando Eq. (3.77) e (3.78), a inequação (3.82) pode ser escrita como

$$\frac{\partial f}{\partial s}(s_1, \beta_{Na}(C_{Ca^*}, C_{Na^*})) < \frac{\partial f}{\partial s}(s_2, \beta_{Na}(C_{Ca^*}, C_{Na^*})). \quad (3.84)$$

Expandindo o lado direito da inequação (3.84) em uma série de Taylor em torno do ponto $s = s_1$, vemos que

$$\frac{\partial f}{\partial s}(s_1, \beta_{Na}(C_{Ca^*}, C_{Na^*})) < \frac{\partial f}{\partial s}(s_1, \beta_{Na}(C_{Ca^*}, C_{Na^*})) + \varepsilon \frac{\partial^2 f}{\partial s^2}(\theta, \beta_{Na}(C_{Ca^*}, C_{Na^*})), \quad (3.85)$$

com $\theta \in (s_1 - \varepsilon, s_1 + \varepsilon)$.

Finalmente ao cancelar as parcelas em comum, vemos que

$$0 < \varepsilon \frac{\partial^2 f}{\partial s^2}(\theta, \beta_{Na}(C_{Ca^*}, C_{Na^*})). \quad (3.86)$$

Ora, uma vez que a função é côncava no intervalo contendo θ , a derivada segunda da função de fluxo é negativa. Assim, a equação (3.86) nos mostra que necessariamente $\varepsilon < 0$. Uma contradição com (3.79). Portanto, $s_1 > s_2$. \square

Graficamente, a Proposição 3.1.6 nos diz que tomando as retas de angulação (3.77) e (3.78) que tangenciam a curva $f(s, \beta_{Ca}(C_{Ca^*}, C_{Na^*}))$ nos pontos $(s_1, f(s_1, \beta_{Ca}(C_{Ca^*}, C_{Na^*})))$ e $(s_2, f(s_2, \beta_{Ca}(C_{Ca^*}, C_{Na^*})))$, respectivamente, então teremos s_1 à direita de s_2 . A Figura 15 abaixo ilustra este fato.

Note que $s_1 = s_1(C_{Ca}, C_{Na})$ e $s_2 = s_2(C_{Ca}, C_{Na})$, ou seja, é uma superfície no plano (s, C_{Ca}, C_{Na}) , veja Figura 16.

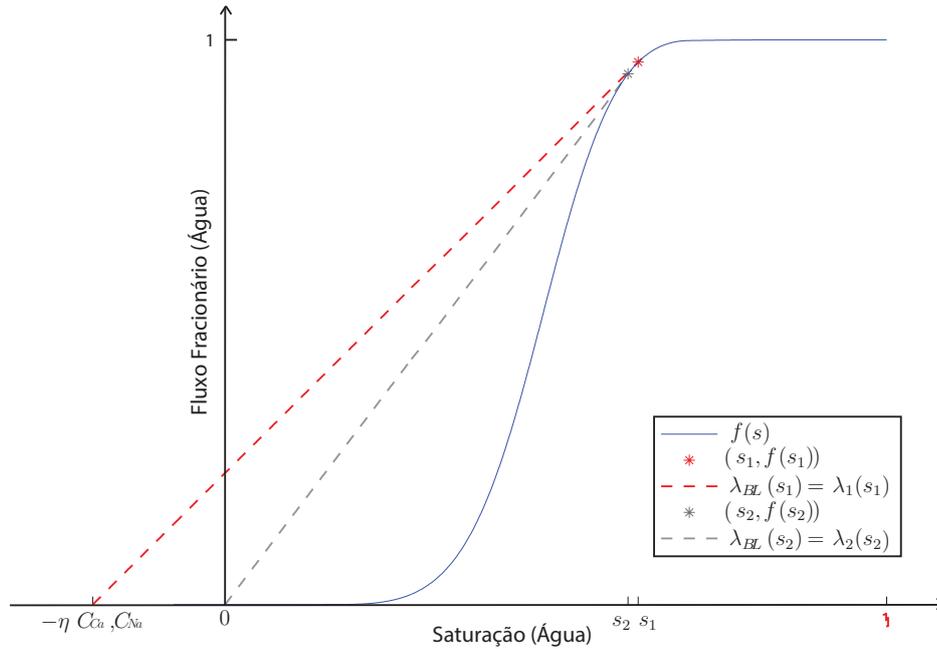


Figura 15 – Interpretação geométrica da Proposição 3.1.6.

Além disso, analisando ainda a Figura 15, podemos provar a seguinte proposição:

Proposição 3.1.7. Tome s_1 satisfazendo (3.77) e s_2 satisfazendo (3.78). Então:

1. Para $s < s_2$, temos que $\lambda_1 < \lambda_2 < \lambda_{BL}$.
2. Para $s \in (s_2, s_1)$, temos que $\lambda_1 < \lambda_{BL} < \lambda_2$.
3. Para $s > s_1$, temos que $\lambda_{BL} < \lambda_1 < \lambda_2$.

A Proposição (3.1.7) é de grande importância uma vez que poderemos descobrir intervalos da saturação onde as os autovalores serão ordenados do menor para o maior. Além disso, ela nos mostra que existem duas superfícies que não têm interseção onde as equações (3.77) e (3.78) são satisfeitas. A Figura 16.a ilustra que para todo ponto fixo (C_{Ca^*}, C_{Na^*}) no domínio, s_1 é maior que s_2 . A Figura 16.b mostra duas superfícies fora de escala que não se interceptam, dividindo o espaço em regiões onde $\lambda_{BL} < \lambda_1 < \lambda_2$, $\lambda_1 < \lambda_{BL} < \lambda_2$ e $\lambda_1 < \lambda_2 < \lambda_{BL}$.

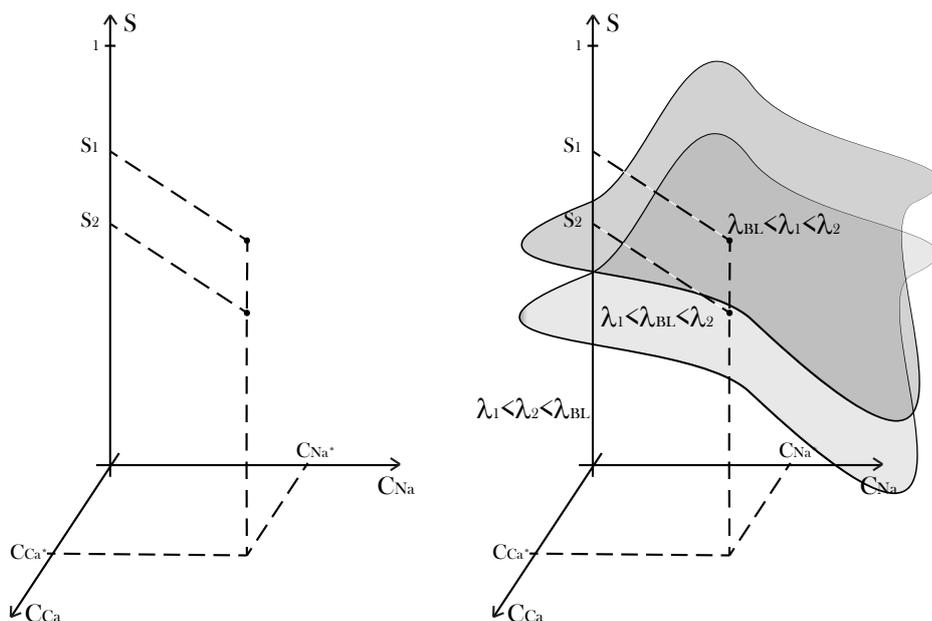


Figura 16 – 16.a: Para cada ponto fixo (C_{Ca^*}, C_{Na^*}) , s_1 maior que s_2 . 16.b: Superfícies (desenho fora de escala) onde (3.77) e (3.78) são satisfeitas.

Na próxima seção, Seção 3.2, veremos que uma dessas superfícies, Eq. (3.77), corresponde ao local de inflexão da família λ_1 .

3.2 Locais de Inflexão

As curvas de rarefação são úteis para construir ondas onde os autovalores variam monotonicamente. A inflexão é uma estrutura no qual a monotonicidade falha, assim curvas de rarefação param nesta curva.

Qualquer estado V na curva de inflexão obtida pelo autopar (λ_i, \vec{r}_i) satisfaz:

$$\nabla \lambda_i(V) \cdot \vec{r}_i(V) = 0. \quad (3.87)$$

Esta estrutura tem codimensão um no espaço de estados V .

Locais de Inflexão para λ_1

Os locais de inflexão para λ_1 , usando (3.41), (3.60) e (3.87), é denotado por \mathcal{I}_1 e a Proposição 3.2.1, enunciada abaixo, nos dará a equação deste local de inflexão.

Para auxiliar na demonstração da Proposição 3.2.1, vamos provar o seguinte lema:

Lema 3.2.1. *Da equação (3.41) e fixado o autovetor (3.60), obtemos:*

$$\nabla \lambda_1 \cdot \vec{r}_{\lambda_1} = f M_c \left(\frac{\partial f}{\partial s} - \lambda_1 \right) \omega(C_{Ca}, C_{Na}), \quad (3.88)$$

no qual

$$\omega(C_{Ca}, C_{Na}) = \frac{\partial^2 \beta_{Na}}{\partial C_{Ca}^2} + 2 \frac{\partial^2 \beta_{Na}}{\partial C_{Na}^2} - 3 \frac{\partial^2 \beta_{Na}}{\partial C_{Na} \partial C_{Ca}}. \quad (3.89)$$

A prova do Lema 3.2.1 pode ser encontrado no Apêndice C.

Observamos agora que a função $\omega(C_{Ca}, C_{Na})$, definida por 3.89 é sempre positiva.

Procederemos da mesma forma que na Seção 3.1.3 com a função $\eta(C_{Ca}, C_{Na})$, ou seja, uma vez que a expressão da função $\omega(C_{Ca}, C_{Na})$ é bem complicada (mais do que a função $\eta(C_{Ca}, C_{Na})!$), vamos justificar o sinal da função graficamente. A Figura 17 mostra o gráfico da função para os valores em que temos interesse em resolver o sistema. É possível observar que para todos os valores das concentrações C_{Ca} e C_{Na} no intervalo de 10^{-7} a 10^{-4} , a função é positiva.

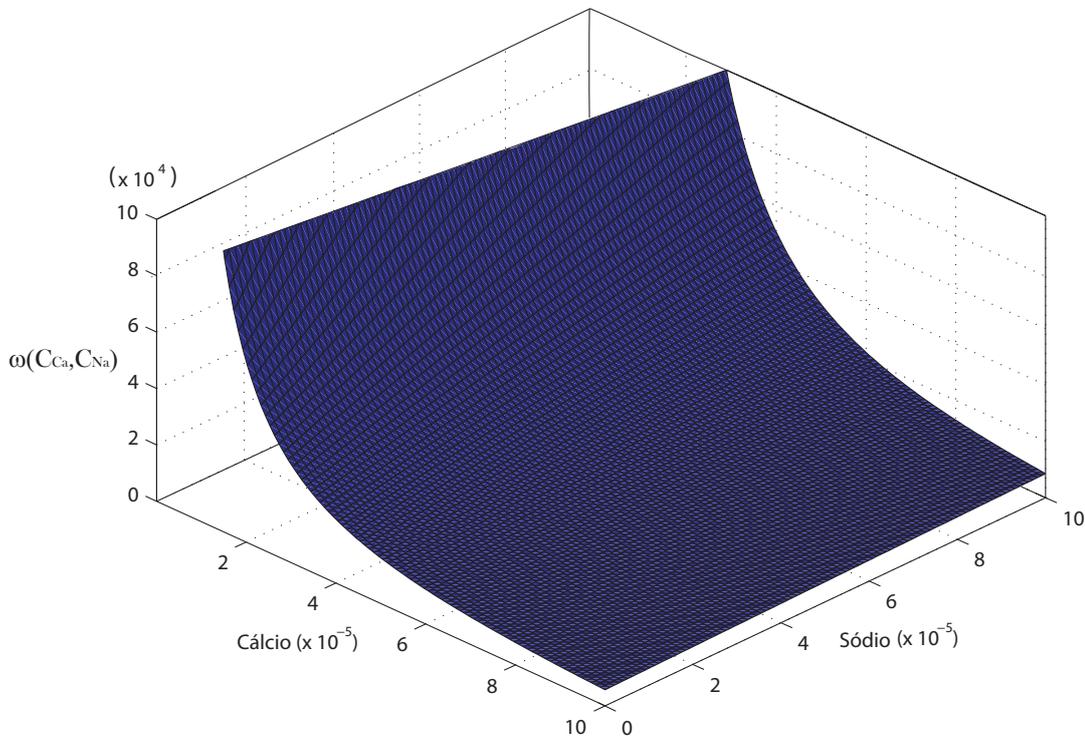


Figura 17 – Gráfico da função positiva $\omega(C_{Ca}, C_{Na})$.

Além disso, para valores de saturação no intervalo $s_{wr} < s < 1 - s_{or}$, a função de fluxo f é positiva (veja Figura 8).

Assim, o local de inflexão \mathcal{I}_1 é dado pelo conjunto

$$\mathcal{I}_1 = \left\{ V \in \mathbb{R}^5 / \lambda_1 = \frac{\partial f}{\partial s} \right\}, \quad (3.90)$$

onde $V = (s, C_{Ca}, C_{Na}, C_{SO_4}, C_{Cl})$ e λ_1 é dado pela equação (3.41).

Com o resultado do Lema 3.2.1 e da observação acima podemos também estabelecer a seguinte proposição:

Proposição 3.2.1. *O local de inflexão \mathcal{I}_1 , dado pelo conjunto (3.90), é um estrutura bidimensional no espaço projetado (s, C_{Ca}, C_{Na}) . Além disso, quando consideramos $V = (s, C_{Ca}, C_{Na}, C_{SO_4}, C_{Cl})$, torna-se uma estrutura 4 dimensional regrada em C_{SO_4} e C_{Cl} .*

Note que o local de inflexão está exatamente sobre o conjunto de coincidência entre os dois autovalores λ_{BL} e λ_1 . Além disso, esse conjunto separa o espaço fase em duas regiões onde a ordem dos autovalores mudam, veja Seção 3.1.3.

Olhando para o Lema 3.2.1 também podemos estabelecer parte da estrutura da solução associada à curva integral. Sabemos que quando $\nabla\lambda_1 \cdot r_{\lambda_1} > 0$, a curva integral na direção do autovetor é uma rarefação e a contrária é um choque. Portanto, conhecendo o sinal de $\nabla\lambda_1 \cdot r_{\lambda_1}$ nas regiões dividida por \mathcal{I}_1 , podemos enunciar a seguinte preposição:

Proposição 3.2.2. *Se $\frac{\partial f}{\partial s} > \lambda_1$, a curva integral na mesma direção do autovetor é uma rarefação admissível. Se $\frac{\partial f}{\partial s} < \lambda_1$, a solução na direção do autovetor é um choque.*

Agora, somos capazes de estabelecermos o sentido de crescimento das quantidades s , C_{Ca} , C_{Na} , C_{Cl} e C_{SO_4} através da análise do autovetor r_{λ_1} . Pelas equações (3.63)-(3.64) e pela Proposição 3.2.2, podemos verificar que como ao longo da rarefação

$$\frac{dC_{Ca}}{d\xi} = \frac{\partial f}{\partial s} - \lambda_1 \quad \text{e} \quad \frac{dC_{Na}}{d\xi} = 2 \left(\lambda_1 - \frac{\partial f}{\partial s} \right),$$

então C_{Ca} cresce e C_{Na} decresce ao longo da rarefação. Além disso, a projeção da curva de rarefação no plano (C_{Ca}, C_{Na}) é uma reta de coeficiente angular -2.

Entretanto, a análise para a saturação demanda um pouco mais de cálculos, visto que a EDO para a rarefação satisfaz Eq. (3.62)

$$\frac{ds}{d\xi} = 2 \frac{\partial f}{\partial C_{Na}} - \frac{\partial f}{\partial C_{Ca}}.$$

Através da definição de f_w , dada em (1.24), e das permeabilidades relativas, dadas em (3.7) e (3.8), podemos calcular

$$\frac{\partial f}{\partial C_i} = \frac{\frac{k_{rw}}{\mu_w}}{\frac{k_{rw}}{\mu_w} + \frac{k_{ro}}{\mu_o}} = \frac{\frac{\partial k_{rw}}{\partial C_i} k_{ro} - \frac{\partial k_{ro}}{\partial C_i} k_{rw}}{\mu_w \mu_o \left(\frac{k_{rw}}{\mu_w} + \frac{k_{ro}}{\mu_o} \right)^2}. \quad (3.91)$$

para $i = Ca$ ou Na .

Usando (3.91) em (3.62), temos, após alguns cálculos:

$$2 \frac{\partial f}{\partial C_{Na}} - \frac{\partial f}{\partial C_{Ca}} = \frac{\left(2 \frac{\partial k_{rw}}{\partial C_{Na}} - \frac{\partial k_{rw}}{\partial C_{Ca}} \right) k_{ro} - \left(2 \frac{\partial k_{ro}}{\partial C_{Na}} - \frac{\partial k_{ro}}{\partial C_{Ca}} \right) k_{rw}}{\mu_w \mu_o \left(\frac{k_{rw}}{\mu_w} + \frac{k_{ro}}{\mu_o} \right)^2}. \quad (3.92)$$

Através da definição de k_{rw} e k_{ro} , Eq. (3.7) e (3.8), após alguns tediosos cálculos podemos escrever

$$2 \frac{\partial f}{\partial C_{Na}} - \frac{\partial f}{\partial C_{Ca}} = \frac{(k_{ro}^{LS} k_{rw}^{HS} - k_{ro}^{HS} k_{rw}^{LS}) \left(2 \frac{\partial H}{\partial C_{Na}} - \frac{\partial H}{\partial C_{Ca}} \right)}{\mu_w \mu_o \left(\frac{k_{rw}}{\mu_w} + \frac{k_{ro}}{\mu_o} \right)^2}. \quad (3.93)$$

Note que apesar da função de fluxo depender de s , C_{Ca} e C_{Na} , conseguimos desacoplá-la em duas parcelas. Uma delas depende exclusivamente da saturação, que é $k_{ro}^{LS} k_{rw}^{HS} - k_{ro}^{HS} k_{rw}^{LS}$. É possível fazer uma análise mais detalhada sobre o sinal dessa quantidade, entretanto, como depende apenas de uma variável, o gráfico já é suficiente. Conforme podemos ver pela Figura 18, $k_{ro}^{LS} k_{rw}^{HS} - k_{ro}^{HS} k_{rw}^{LS}$ nunca é negativo. Dessa forma, para analisar o sinal de (3.93), basta analisar $2 \frac{\partial H}{\partial C_{Na}} - \frac{\partial H}{\partial C_{Ca}}$, visto que todas as outras quantidades são positivas. Vamos fazer algumas considerações sobre tal quantidade.

Usando a definição de H , Eq. (3.6), fazer o cálculo de $2 \frac{\partial H}{\partial C_{Na}} - \frac{\partial H}{\partial C_{Ca}}$. Após aplicar a regra da cadeia, obtemos

$$2 \frac{\partial H}{\partial C_{Na}} - \frac{\partial H}{\partial C_{Ca}} = \frac{-rm'}{(1+rm)^2} \left(2 \frac{\partial \beta_{Ca}}{\partial C_{Na}} - \frac{\partial \beta_{Ca}}{\partial C_{Ca}} \right). \quad (3.94)$$

Observe que a função m não é suave, Eq. (3.5), entretanto, podemos defini-la de modo que seja, mas mantendo o seguinte comportamento:

1. Se $\beta_{Ca}(t > 0) > \beta_{Ca}^0$, então $m(\beta_{Ca}) = 0$.
2. Se $\beta_{Ca}(t > 0) < \beta_{Ca}^0$, então $m(\beta_{Ca}) = \beta_{Ca}(t = 0) - \beta_{Ca}(t > 0)$.

De modo que m' nunca será positiva. Dessa forma $\frac{-rm'}{(1+rm)^2} \geq 0$. Fica faltando analisar $2 \frac{\partial \beta_{Ca}}{\partial C_{Na}} - \frac{\partial \beta_{Ca}}{\partial C_{Ca}}$. Neste caso, basta usarmos as equações (3.1) e (3.75). Derivando (3.1) com respeito a C_{Ca} e C_{Na} , chegamos em (3.4), o que nos fornece

$$\frac{\partial \beta_{Ca}}{\partial C_{Ca}} = -\frac{1}{2} \frac{\partial \beta_{Na}}{\partial C_{Ca}} \quad \text{e} \quad \frac{\partial \beta_{Ca}}{\partial C_{Na}} = -\frac{1}{2} \frac{\partial \beta_{Na}}{\partial C_{Na}} \quad (3.95)$$

de modo que

$$2 \frac{\partial \beta_{Ca}}{\partial C_{Na}} - \frac{\partial \beta_{Ca}}{\partial C_{Ca}} = - \left(\frac{\partial \beta_{Na}}{\partial C_{Na}} - \frac{1}{2} \frac{\partial \beta_{Na}}{\partial C_{Ca}} \right) = -\frac{1}{M_c} \eta(C_{Ca}, C_{Na}). \quad (3.96)$$

Da equação (3.75) e da Figura (14), vemos que $\eta(C_{Ca}, C_{Na}) > 0$. Coletando todas as informações acima, temos que $\frac{ds}{d\xi} \leq 0$ ao longo da rarefação, ou seja, a saturação decresce ou permanece constante (veja esse comportamento da saturação na Figura 9).

Podemos resumir a análise acima na seguinte Proposição:

Proposição 3.2.3. *Ao longo da rarefação da família associada ao autopar $(\lambda_1, r_{\lambda_1})$, a saturação s é não crescente, a concentração C_{Ca} é crescente e a concentração C_{Na} é decrescente.*

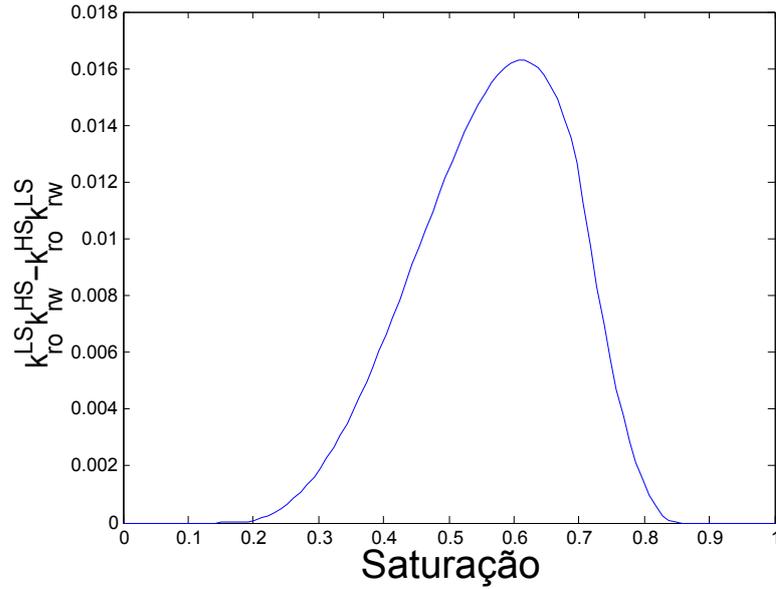


Figura 18 – Figura representando $k_{ro}^{LS}k_{rw}^{HS} - k_{ro}^{HS}k_{rw}^{LS}$. Observe que a quantidade nunca é negativa.

Locais de Inflexão para λ_2

Para os autopares associados à λ_2 , usando (3.42), (3.67), (3.71), (3.72) e (3.87), cada campo é um campo linearmente degenerado, pois se

$$\nabla\lambda_2 = \left(\frac{\partial f}{\partial s} \frac{1}{s} - \frac{f}{s^2}, \frac{\partial f}{\partial C_{Ca}} \frac{1}{s}, \frac{\partial f}{\partial C_{Na}} \frac{1}{s}, 0, 0 \right), \quad (3.97)$$

então

$$\begin{aligned} \nabla\lambda_2 \cdot \vec{r}_{\lambda_2,1} &= \left(\frac{1}{s} \frac{\partial f}{\partial s} - \frac{f}{s^2}, \frac{1}{s} \frac{\partial f}{\partial C_{Ca}}, \frac{1}{s} \frac{\partial f}{\partial C_{Na}}, 0, 0 \right) \cdot \left(0, -\frac{\partial \beta_{Ca}}{\partial C_{Na}}, \frac{\partial \beta_{Ca}}{\partial C_{Ca}}, 0, 0 \right) \\ &= \frac{1}{s} \left(-\frac{\partial f}{\partial C_{Ca}} \frac{\partial \beta_{Ca}}{\partial C_{Na}} + \frac{\partial f}{\partial C_{Na}} \frac{\partial \beta_{Ca}}{\partial C_{Ca}} \right) = 0, \end{aligned} \quad (3.98)$$

onde a Proposição 3.1.2 foi usada na última igualdade.

Continuando os cálculos para os outros autovetores, temos

$$\nabla\lambda_2 \cdot \vec{r}_{\lambda_2,2} = \left(\frac{1}{s} \frac{\partial f}{\partial s} - \frac{f}{s^2}, \frac{1}{s} \frac{\partial f}{\partial C_{Ca}}, \frac{1}{s} \frac{\partial f}{\partial C_{Na}}, 0, 0 \right) \cdot (0, 0, 0, 1, 0) = 0, \quad (3.99)$$

$$\nabla\lambda_2 \cdot \vec{r}_{\lambda_2,3} = \left(\frac{1}{s} \frac{\partial f}{\partial s} - \frac{f}{s^2}, \frac{1}{s} \frac{\partial f}{\partial C_{Ca}}, \frac{1}{s} \frac{\partial f}{\partial C_{Na}}, 0, 0 \right) \cdot (0, 0, 0, 0, 1) = 0. \quad (3.100)$$

Podemos resumir o resultado na proposição a seguir.

Proposição 3.2.4. *O campo associado a família λ_2 é linearmente degenerado, i.e., as curvas integrais e de choques coincidem.*

Locais de Inflexão para λ_{BL}

Para o campo de Buckley-Leverett λ_{BL} , usando (3.32), (3.73) e (3.87), o local de inflexão satisfaz a seguinte equação

$$\nabla \lambda_{BL} \cdot \vec{r}_{BL} = \left(\frac{\partial^2 f}{\partial s^2}, \frac{\partial^2 f}{\partial C_{Ca} \partial s}, \frac{\partial^2 f}{\partial C_{Na} \partial s}, 0, 0 \right) \cdot (1, 0, 0, 0, 0) = 0 \quad \Rightarrow \quad \frac{\partial^2 f}{\partial s^2} = 0. \quad (3.101)$$

Então o local de inflexão para esta onda, denotada por \mathcal{I}_{BL} é o conjunto

$$\mathcal{I}_{BL} = \left\{ V \in \mathbb{R}^5 / \frac{\partial^2 f}{\partial s^2} = 0 \right\}, \quad (3.102)$$

onde $V = (s, C_{Ca}, C_{Na}, C_{SO_4}, C_{Cl})$.

Analogamente, podemos enunciar \mathcal{I}_{BL} com a seguinte proposição.

Proposição 3.2.5. *O local de inflexão \mathcal{I}_{BL} , dado pelo conjunto (3.102), é um estrutura bidimensional no espaço projetado (s, C_{Ca}, C_{Na}) . Além disso, quando consideramos $V = (s, C_{Ca}, C_{Na}, C_{SO_4}, C_{Cl})$, torna-se uma estrutura de dimensão 4 regradada em C_{SO_4} e C_{Cl} .*

O local de inflexão para λ_{BL} corresponde a todo ponto de inflexão da curva de fluxo (fixando C_{Ca} e C_{Na}), veja Figura 15.

3.3 Ondas de Choque

Para entendermos o que são as ondas de choques e a importância na solução do problema de Riemann, vamos considerar inicialmente o caso onde o vetor V tem apenas uma coordenada (que denotaremos u), isto é, estamos tratando de um sistema com apenas uma equação. Inicialmente, considere uma solução $u(x, t)$ tal que $u(x, t)$, $F(u)$ e suas derivadas são contínuas em todos os pontos exceto sobre a linha $x = x(t)$ no plano $x - t$ no qual a $u(x, t)$ tem uma descontinuidade do tipo salto. Além disso, tomamos como função de acumulação $G(u) = u$. Seleccionamos dois pontos fixos x_L e x_R no eixo x tal que $x_L < x(t) < x_R$ (Figura 19). Usando a lei de conservação na forma integral discutida no Capítulo 1 (veja Exemplo 1.2.1) no intervalo $[x_L, x_R]$, temos que

$$\begin{aligned} F(u(x_L, t)) - F(u(x_R, t)) &= \frac{d}{dt} \left(\int_{x_L}^{x_R} u(x, t) dx \right), \\ &= \frac{d}{dt} \left(\int_{x_L}^{x(t)} u(x, t) dx + \int_{x(t)}^{x_R} u(x, t) dx \right), \\ &= \int_{x_L}^{x(t)} \frac{\partial}{\partial t} u(x, t) dx + \int_{x(t)}^{x_R} \frac{\partial}{\partial t} u(x, t) dx, \end{aligned} \quad (3.103)$$

e usando o fato de estarmos sobre a característica $x = x(t)$, aplicando a regra da cadeia, temos que

$$\begin{aligned} F(u(x_L, t)) - F(u(x_R, t)) &= \int_{x_L}^{x(t)} u_t dx + \frac{dx}{dt} u(x(t)^-, t) + \int_{x(t)}^{x_R} u_t dx - \frac{dx}{dt} u(x(t)^+, t), \\ &= \int_{x_L}^{x(t)} u_t dx + \int_{x(t)}^{x_R} u_t dx + v^s (u_L - u_R), \end{aligned} \quad (3.104)$$

onde $x(t)^-$ e $x(t)^+$ denotam os limites laterais por valores à esquerda e à direita de $x(t)$, respectivamente (veja novamente a Figura 19) e o valor $v^s = dx/dt$ é chamada *velocidade de descontinuidade*.

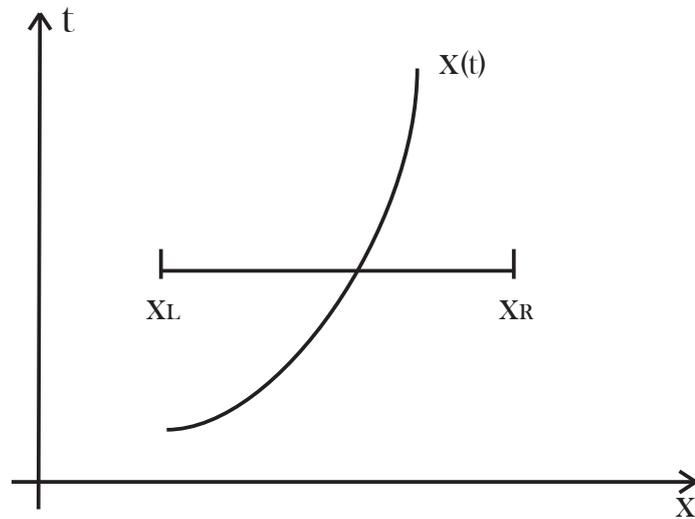


Figura 19 – Curva $x(t)$ de descontinuidade do tipo salto da função $u(x, t)$.

Como $u_t(x, t)$ é limitada, as integrais desaparecem quando tomamos o limite $x_L \rightarrow x(t)$ e $x_R \rightarrow x(t)$, de forma que a equação (3.104) torna-se

$$F(u(x_L, t)) - F(u(x_R, t)) = v^s (u_L - u_R). \quad (3.105)$$

A equação (3.105), relaciona os saltos $\Delta F = F(u(x_R, t)) - F(u(x_L, t))$, $\Delta u = u(x_R, t) - u(x_L, t)$ e a velocidade de descontinuidade v^s , e é chamada de condição de *Rankine-Hugoniot*.

Tipicamente, descontinuidades ou choques aparecem em soluções dos problemas de Riemann (ou Cauchy para equações hiperbólicas não-lineares, ver [20]).

A condição de Rankine-Hugoniot (*RH*) para choques precisa ser satisfeita de forma a expressar a conservação de uma certa quantidade ao longo dessas descontinuidades.

A equação (3.105) vale tanto para o caso escalar quanto para o caso de sistema. Considerando agora o modelo, para um estado dado V^- , o conjunto de estados V^+ que

satisfazem a condição RH é chamado de *Rankine-Hugoniot locus* (RH locus) de V^- , o qual é denotado por $\mathcal{RH}(V^-)$. No modelo, como a função de acumulação é uma função vetorial $G(V)$, a condição de Rankine-Hugoniot pode ser estendida e escrita como:

$$v^s (G(V^+) - G(V^-)) = F(V^+) - F(V^-), \quad (3.106)$$

onde V^- é o estado à esquerda do choque e V^+ é o estado à direita do choque. Para mais detalhes veja [23].

Para o sistema (3.9)-(3.13), a condição de Rankine Hugoniot (3.106) torna-se

$$v^s (s^+ - s^-) = f^+ - f^-, \quad (3.107)$$

$$v^s (C_{Ca}^+ s^+ - C_{Ca}^- s^- + M_c(\beta_{Ca}^+ - \beta_{Ca}^-)) = C_{Ca}^+ f^+ - C_{Ca}^- f^-, \quad (3.108)$$

$$v^s (C_{Na}^+ s^+ - C_{Na}^- s^- + M_c(\beta_{Na}^+ - \beta_{Na}^-)) = C_{Na}^+ f^+ - C_{Na}^- f^-, \quad (3.109)$$

$$v^s (C_{SO_4}^+ s^+ - C_{SO_4}^- s^-) = C_{SO_4}^+ f^+ - C_{SO_4}^- f^-, \quad (3.110)$$

$$v^s (C_{Cl}^+ s^+ - C_{Cl}^- s^-) = C_{Cl}^+ f^+ - C_{Cl}^- f^-, \quad (3.111)$$

onde usamos a notação $f^+ = f(s^+, \beta_{Ca}^+)$ e $f^- = f(s^-, \beta_{Ca}^-)$ para facilitar os cálculos.

Para o estado fixo à esquerda $V^- = (s^-, C_{Ca}^-, C_{Na}^-, C_{SO_4}^-, C_{Cl}^-)$, das equações (3.107)-(3.111) podemos obter $V^+ = (s^+, C_{Ca}^+, C_{Na}^+, C_{SO_4}^+, C_{Cl}^+)$ onde Hugoniot locus é satisfeita. Para isso, analisaremos os seguintes casos.

Caso 1:

Suponhamos que $s^+ \neq s^-$.

Da equação (3.107), podemos isolar v^s como função de s^+ , s^- , β_{Ca}^+ , β_{Ca}^- da seguinte forma

$$v^s = \frac{f^+ - f^-}{s^+ - s^-}. \quad (3.112)$$

Substituindo v^s dado por (3.112) em (3.110), obtemos que

$$\begin{aligned} \left(\frac{f^+ - f^-}{s^+ - s^-} \right) (C_{SO_4}^+ s^+ - C_{SO_4}^- s^-) &= C_{SO_4}^+ f^+ - C_{SO_4}^- f^- \\ -f^+ C_{SO_4}^- s^- - f^- C_{SO_4}^+ s^+ &= -s^+ C_{SO_4}^- f^- - s^- C_{SO_4}^+ f^+ \\ C_{SO_4}^+ (s^- f^+ - s^+ f^-) &= C_{SO_4}^- (s^- f^+ - s^+ f^-) \\ (s^- f^+ - s^+ f^-) (C_{SO_4}^+ - C_{SO_4}^-) &= 0 \end{aligned} \quad (3.113)$$

Analogamente, podemos substituir v^s em (3.111) e obter que

$$(s^- f^+ - s^+ f^-) (C_{Cl}^+ - C_{Cl}^-) = 0 \quad (3.114)$$

Das equações (3.113)-(3.114) temos:

$$s^- f^+ = s^+ f^- \quad \text{ou} \quad C_{SO_4}^+ = C_{SO_4}^- \text{ e } C_{Cl}^+ = C_{Cl}^-. \quad (3.115)$$

Caso 1.1:

Suponhamos $s^- f^+ = s^+ f^-$.

Substituindo v^s nas equações (3.108) e (3.109) e fazendo cálculos semelhantes ao que fizemos na equação (3.110), as expressões tornam-se

$$(s^+ f^- - s^- f^+) (C_{Ca}^+ - C_{Ca}^-) = M_c(\beta_{Ca}^+ - \beta_{Ca}^-)(f^+ - f^-), \quad (3.116)$$

$$(s^+ f^- - s^- f^+) (C_{Na}^+ - C_{Na}^-) = M_c(\beta_{Na}^+ - \beta_{Na}^-)(f^+ - f^-). \quad (3.117)$$

Neste caso, como (3.115.a) é satisfeita, a equação (3.117) fica

$$M_c(\beta_{Na}^+ - \beta_{Na}^-)(f^+ - f^-) = 0. \quad (3.118)$$

No entanto, como $s^+ \neq s^-$, temos que $s^+/s^- \neq 1$. Portanto, como $f^+/f^- = s^+/s^-$, isso implica que $f^+ \neq f^-$. Concluindo da equação (3.118) que

$$\beta_{Na}^+ = \beta_{Na}^-. \quad (3.119)$$

Analogamente, poderíamos substituir (3.115.a) em (3.116) e obter que $\beta_{Ca}^+ = \beta_{Ca}^-$. Porém, podemos mostrar que se $\beta_{Na}^+ = \beta_{Na}^-$ então $\beta_{Ca}^+ = \beta_{Ca}^-$. Esta implicação é bem simples, usando apenas a equação (3.1). Logo, se temos que $2\beta_{Ca}^+ + \beta_{Na}^+ = CEC$ e $2\beta_{Ca}^- + \beta_{Na}^- = CEC$, podemos subtrair uma equação da outra obtendo

$$2(\beta_{Ca}^+ - \beta_{Ca}^-) + (\beta_{Na}^+ - \beta_{Na}^-) = 0, \quad (3.120)$$

que supondo $\beta_{Na}^+ = \beta_{Na}^-$ nos mostra que

$$\beta_{Ca}^+ = \beta_{Ca}^-. \quad (3.121)$$

As soluções da equação (3.119) define um conjunto de pontos que deve satisfazer (3.115.a) para obter uma curva no espaço fase. Porém uma vez que a função $f = f(s, \beta_{Ca})$ depende apenas da saturação (por causa da equação (3.121)), a equação (3.115.a) tem no máximo uma quantidade finita de pontos (uma incógnita para uma equação não linear). Concluimos que neste caso não podemos obter uma curva, ou seja, (3.115.a) não é possível se $s^+ \neq s^-$.

Caso 1.2:

Suponhamos agora que $C_{SO_4}^+ = C_{SO_4}^-$ e $C_{Cl}^+ = C_{Cl}^-$.

Tomando duas vezes a equação (3.116) mais a equação (3.117) e usando o fato de que $2\beta_{Ca} + \beta_{Na} = CEC$, chegamos que

$$(s^+ f^- - s^- f^+) [2(C_{Ca}^+ - C_{Ca}^-) + (C_{Na}^+ - C_{Na}^-)] = 0 \quad (3.122)$$

E como estamos supondo $s^+ f^- \neq s^- f^+$, da equação (3.122), temos que

$$2(C_{Ca}^+ - C_{Ca}^-) + (C_{Na}^+ - C_{Na}^-) = 0. \quad (3.123)$$

Assim, podemos isolar a variável C_{Ca}^+ da equação (3.123), que fica

$$C_{Ca}^+ = \frac{C_{Na}^- - C_{Na}^+}{2} + C_{Ca}^- \quad (3.124)$$

e substituir em (3.116), o que resulta em

$$(s^+ f^- - s^- f^+) (C_{Na}^- - C_{Na}^+) = 2M_c(\beta_{Ca}^+ - \beta_{Ca}^-)(f^+ - f^-). \quad (3.125)$$

A solução dessa equação (3.125) com a restrição de (3.124) são dois ramos. A Figura 20 abaixo mostra essas duas curvas projetadas no plano saturação-sódio. Um desses ramos é o de Buckley Leverett (ramo onde somente a saturação varia), o outro é obtido quando tanto s quanto C_{Ca} e C_{Na} variam. O ponto em azul simboliza um valor arbitrário para $(s^-, C_{Ca}^-, C_{Na}^-)$.

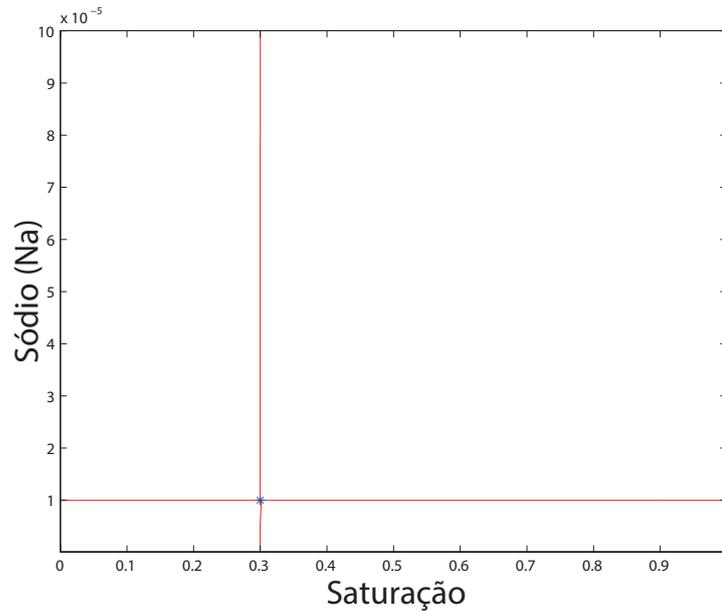


Figura 20 – Projeção da curva de choque dada pelas equações (3.124) e (3.125) no plano (s, C_{Na}) para um valor $(s^-, C_{Ca}^-, C_{Na}^-)$.

Caso 2:

Suponhamos agora que $s^+ = s^-$. Usaremos a notação s^+ em nossos cálculos.

Tomando a equação (3.107), temos que $f^+ = f^-$. Usaremos a notação f^+ a partir de agora em nossos cálculos.

Multiplicando a equação (3.108) por dois e somando a equação (3.109) teremos que

$$v^s s^+ \left[2(C_{Ca}^+ - C_{Ca}^-) + (C_{Na}^+ - C_{Na}^-) \right] = f^+ \left[2(C_{Ca}^+ - C_{Ca}^-) + (C_{Na}^+ - C_{Na}^-) \right]. \quad (3.126)$$

Assim, teremos (3.126) sendo satisfeita se

$$v^s = \frac{f^+}{s^+} \quad \text{ou} \quad 2(C_{Ca}^+ - C_{Ca}^-) + (C_{Na}^+ - C_{Na}^-) = 0. \quad (3.127)$$

Caso 2.1:

Suponhamos $v^s = f^+/s^+$.

O valor v^s neste caso, coincide com o autovalor λ_2 , uma vez que observamos que os campos relacionados com esse autovalor são linearmente degenerados.

Usando (3.127.a) em (3.109), vemos que

$$\left(\frac{f^+}{s^+} \right) (C_{Na}^+ s^+ - C_{Na}^- s^- + M_c(\beta_{Na}^+ - \beta_{Na}^-)) = C_{Na}^+ f^+ - C_{Na}^- f^-,$$

$$\frac{f^+}{s^+} M_c(\beta_{Na}^+ - \beta_{Na}^-) = 0. \quad (3.128)$$

Obtendo novamente a equação (3.119). A diferença aqui é que neste caso a saturação não varia. Da mesma forma, como vimos anteriormente, se substituirmos (3.127.a) em (3.108), chegaremos em (3.121).

Note que o campo associado a esta velocidade é linearmente degenerado para $\lambda_2 = f/s$, conforme provado na Seção 3.2. Assim, para o caso de $v^s = \lambda_2$, as ondas de choque coincidem com as curvas integrais resumidas na Proposição 3.1.3 (veja também proposição 3.2.4).

Caso 2.2:

Supondo que $2(C_{Ca}^+ - C_{Ca}^-) + (C_{Na}^+ - C_{Na}^-) = 0$.

Neste caso, podemos proceder da maneira similar no caso quando a saturação não era constante. Assim tomando a equação (3.124) e substituir em (3.108), obtemos

$$v^s \left(s^+ \left(\frac{C_{Na}^- - C_{Na}^+}{2} \right) + M_c(\beta_{Ca}^+ - \beta_{Ca}^-) \right) = f^+ \left(\frac{C_{Na}^- - C_{Na}^+}{2} \right) \quad (3.129)$$

Agora podemos observar que se tomarmos a equação (3.109), isolarmos o v^s e substituirmos novamente em (3.129), obteremos uma equação para apenas uma incógnita e novamente teremos como solução uma quantidade finita de pontos. Assim essas duas equações não define uma curva em nosso espaço fase.

Obtemos assim as cinco ondas de choques que satisfazem a condição de Rankine Hugoniot, Eq. (3.106), e podemos assim resumir nossos resultados na seguinte proposição.

Proposição 3.3.1. *Os choques que satisfazem as condições de Rankine Hugoniot têm as seguintes estruturas:*

1. *Ramo no qual C_{Ca} , C_{Na} , C_{SO_4} e C_{Cl} são constantes, e apenas s varia, ramo de Buckley-Leverett. A velocidade de choque é dada por (3.112), Caso 1.2 (Fig. 20);*
2. *Ramo no qual C_{SO_4} e C_{Cl} são constantes, a concentração C_{Ca}^+ satisfaz (3.124) e C_{Na}^+ e s^+ satisfazem (3.125). A velocidade de choque é dada por (3.112), Caso 1.2 (Fig. 20);*
3. *Ramo coincidente com as curvas integrais do autovalor λ_2 onde a velocidade do choque é dada por (3.127.a), onde as concentrações de C_{SO_4} , C_{Cl} e a saturação s não variam; e as concentrações C_{Ca} e C_{Na} satisfazem a equação (3.119), Caso 2.1 (Fig. 10);*
4. *Ramo coincidente com as curvas integrais do autovalor λ_2 onde a velocidade do choque é dada por (3.127.a), onde as concentrações de C_{Ca} , C_{Na} , C_{Cl} e a saturação s não variam; e apenas a concentração C_{SO_4} varia, Caso 2.1 (Fig. 11);*
5. *Ramo coincidente com as curvas integrais do autovalor λ_2 onde a velocidade do choque é dada por (3.127.a), onde as concentrações de C_{Ca} , C_{Na} , C_{SO_4} e a saturação s não variam; e apenas a concentração C_{Cl} varia, Caso 2.1 (Fig. 12).*

4 Soluções de Alguns Problemas de Riemann

Este Capítulo tem por finalidade apresentar algumas soluções para o Problema de Riemann assim como discutir os resultados encontrados.

O problema de Riemann associado a (3.14) é a solução dessas equações com condição inicial constante por partes.

$$V(x, 0) = \begin{cases} V_L & \text{se } x \leq 0, \\ V_R & \text{se } x > 0. \end{cases} \quad (4.1)$$

Este problema trata exatamente do mesmo problema para uma equação visto no Capítulo 1, porém agora V_L e V_R são vetores constantes.

Uma solução de Riemann é uma sequência de ondas elementares w_k (choques e rarefações) para $k = 1, 2, \dots, m$ e estados constantes V_k para $k = 1, 2, \dots, m$.

$$V_L \equiv V^0 \xrightarrow{w_1} V^1 \xrightarrow{w_2} \dots \xrightarrow{w_m} V^m \equiv V_R. \quad (4.2)$$

Representamos qualquer estado por V . As ondas w_k tem estados à esquerda e à direita V^{k-1} e V^k e velocidades $\xi_k^- < \xi_k^+$ no caso das ondas de rarefação e $v = \xi_k^- = \xi_k^+$ no caso de ondas choques. O estado à esquerda da primeira onda w_1 é $V^0 = V_L$ e o estado à direita de w_m é $V^m = V_R$. Na solução de Riemann é necessário que $\xi_k^+ \leq \xi_{k+1}^-$; esta inequação é chamada *compatibilidade geométrica*. Quando $\xi_k^+ < \xi_{k+1}^-$ existe um estado constante diferente V^{k+1} entre w_k e w_{k+1} ; nesta sequência a onda w_k é indicada por \mapsto . Se $\xi_k^+ = \xi_{k+1}^-$ não existe um estado atual constante no espaço físico, então a onda w_k é uma composição de w_{k+1} ; é indicado por \twoheadrightarrow .

Quando for útil enfatizar as sequências de ondas (4.2) ao invés dos estados, usamos a notação

$$w_1 \twoheadrightarrow w_2 \twoheadrightarrow \dots \twoheadrightarrow w_m, \quad (4.3)$$

onde para cada w_k , \twoheadrightarrow representa \mapsto para o caso $\xi_k^+ < \xi_{k+1}^-$ e \twoheadrightarrow para o caso $\xi_k^+ = \xi_{k+1}^-$.

Inicialmente, encontraremos soluções para o caso onde não há dessorção de íons, ou seja, resolveremos o problema para o caso de alta salinidade e baixa salinidade. Nosso objetivo é comparar as soluções destes casos com a solução com dessorção.

4.1 Injeção de Água em um Meio de Alta e Baixa Salinidades

Para o caso de injeção em no meio poroso em alta e baixa salinidades, o sistema (3.9)-(3.13) se resume a uma única equação diferencial

$$\frac{\partial}{\partial t} s_w + \frac{\partial}{\partial x} f_w(s_w) = 0, \quad (4.4)$$

com a equação algébrica (1.20). A função de fluxo aqui não mais depende da concentração de cálcio e sódio. Analizaremos os casos onde a água está na mesma salinidade do meio poroso, ou seja, analizaremos dois casos: no primeiro, injetamos água em alta salinidade e o meio se encontra em alta salinidade; no segundo, injetamos água em baixa salinidade e o meio se encontra em baixa salinidade.

Aqui as funções de fluxo são dadas por (1.24) onde as permeabilidades relativas são dadas pela equações (2.12) no primeiro caso e (2.13) no segundo caso.

Nesta seção, iremos encontrar a solução para o seguinte problema: consideramos, inicialmente, que o reservatório está completamente preenchido com óleo ($s_w = 0$ e $s_o = 1$) em condições de alta (respectivamente em baixa) salinidade. Injetamos no meio poroso uma solução de água em alta (respectivamente em baixa) salinidade com concentração constante de sal durante a injeção (no ponto de injeção $s_w = 1$ e $s_o = 0$).

As condições iniciais neste caso se resumem as condições exemplificadas no Capítulo 1, Eq. (1.39), dadas dadas por

$$s_w(x, 0) = \begin{cases} 1, & \text{se } x \leq 0 \\ 0, & \text{se } x > 0. \end{cases} \quad (4.5)$$

De agora em diante abandonaremos a notação w , deixando subentendido que nos referimos a saturação da água. A solução da equação (4.4) com condição inicial (4.5) é baseada na teoria de Oleinik (veja [4]). Ao obtermos esta solução estaremos aptos a descrever a saturação da água (consequentemente do óleo) ao longo do meio poroso em qualquer tempo t . A unicidade da solução é assegurada pelas condições de entropia, que neste caso, usamos as condições de entropia de Olienik-Liu, veja [6].

A partir de agora, abandonaremos o índice w na notação da saturação da água e da função de fluxo. Usaremos a notação $\mathcal{R}(s_1, s_2)$ e $\mathcal{S}(s_1, s_2)$ para referirmos que a solução se dá por ondas de rarefação e choque do ponto s_1 ao ponto s_2 , respectivamente.

Inicialmente, encontraremos as rarefações. Para a equação (4.4), substituindo $s(x, t) = s(\xi)$ com $\xi = x/t$ e aplicando a regra da cadeia, temos

$$\frac{ds}{d\xi} \frac{\partial \xi}{\partial t} + \frac{\partial f}{\partial s} \frac{ds}{d\xi} \frac{\partial \xi}{\partial x} = 0 \quad \longrightarrow \quad \left(\frac{-x}{t^2} + \frac{\partial f}{\partial s} \frac{1}{t} \right) \frac{ds}{d\xi} = 0 \quad \longrightarrow \quad \xi = \frac{\partial f}{\partial s}. \quad (4.6)$$

Observe que para o caso onde $\frac{ds}{d\xi} = 0$, a solução da EDP não satisfaz a condição inicial (4.5).

Dentro da teoria de leis de conservação no caso escalar, o valor de ξ , que no caso de sistemas são os autovalores, corresponde à inclinação das características na região de rarefação (que é exatamente o mesmo valor da inclinação da curva tangente à curva $f(s)$ no ponto s). A Figura 21 ilustra as curvas características do problema (4.4) com a condição inicial (4.5). Observe a inclinação das características na região de rarefação. Para mais detalhes da teoria veja [9], [20] ou [23]. Figura adaptada de [9].

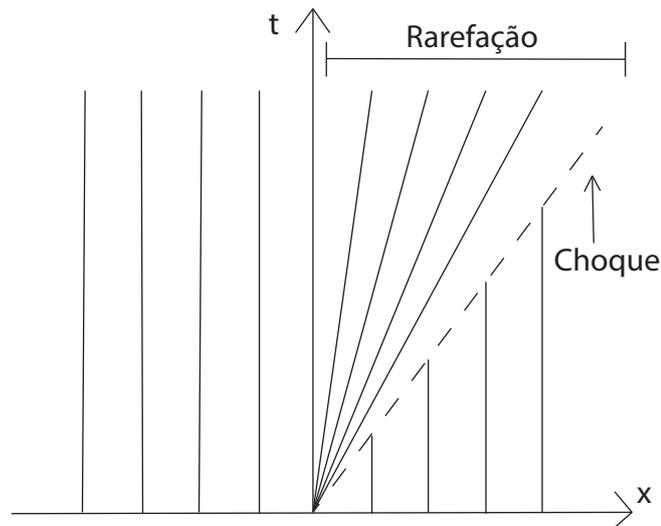


Figura 21 – Curvas características da equação (4.4) com a condição inicial (4.5), mostrando as regiões de rarefação e a propagação do choque. Figura adaptada de [9].

Denotaremos ξ por λ_{BL} em referência aos autovalores de um sistema (como no Capítulo 3).

Usaremos agora a condição de Rankine-Hugoniot para encontrarmos a velocidade do choque. Para um valor fixo s^- , o Rankine-Hugoniot locus, denotado por $\mathcal{RH}(s^-)$, são os estados s^+ , que podem ser alcançados pela curva de choque (desconsiderando as condições de entropia) que se propaga com velocidade v^s , obtida através da solução da condição de Rankine-Hugoniot, Eq. (3.105). Para a equação (4.4), a condição fica

$$v^s(s^+ - s^-) = (f^+ - f^-), \tag{4.7}$$

onde denotamos $f^+ = f(s^+)$ e $f^- = f(s^-)$.

Supondo $s^- \neq s^+$ e isolando v^s na Eq. (4.7), os estados s^+ pertencentes $\mathcal{RH}(s^-)$, são pontos que satisfazem

$$v^s = \frac{f^+ - f^-}{s^+ - s^-}. \tag{4.8}$$

Este choque é o chamado choque de Buckley Leverett. O valor de v^s é a velocidade do choque que denotaremos por v_{BL} (inclinação da reta por onde propaga o choque mostrada na Figura 21).

Para o caso onde $s^- = s^+$, teremos $f^+ = f^-$, o que não nos fornece uma curva contínua ou neste caso, uma onda de choque.

Pelo fato da condição inicial (4.5) não ser contínua, rigorosamente, a EDP (4.4) não faz sentido. Entretanto podemos considerar a forma integral da equação, veja Capítulo 1, Eq. (1.6). Para o forma integral não há solução única, entretanto podemos encontrar uma solução de choque, dada por uma descontinuidade que se propaga com velocidade constante (neste caso v_{BL}). Outra possível solução para este problema é considerar a onda de rarefação dada por $[f'(x)]^{-1}$. A solução para o problema neste caso será a composição destas possíveis soluções.

Seguindo a solução descrita por Oleinik, a solução corresponde à envoltória côncava do fluxo. Dessa forma, partimos do estado $s_L = 1$ até o estado $s = s^*$ pela onda de rarefação, com velocidade λ_{BL} , onde s^* satisfaz

$$\lambda_{BL} = \frac{\partial f(s^*)}{\partial s} = \frac{f(s^*)}{s^*}. \quad (4.9)$$

Partindo de s^* até o estado $s_R = 0$ pela onda de choque, com velocidade

$$v_{BL} = \frac{f(0) - f(s^*)}{0 - s^*} = \frac{f(s^*)}{s^*}. \quad (4.10)$$

Para montar a função de solução a partir destas estruturas (choque e rarefação), é preciso analisar a envoltória côncava superior da função $f(s)$, para mais detalhes veja [2]. A Figura 22 ilustra a envoltória da função $f(s)$ para os dois casos de alta e baixa salinidade, respectivamente. Partindo de $s_L = 1$ até $s = s^*$ temos uma rarefação, enquanto de $s = s^*$ até $s_R = 0$ temos um choque.

Neste caso a solução se dará pela seguinte sequência de ondas

$$\mathcal{R}(1, s^*) \mapsto \mathcal{S}(s^*, 0). \quad (4.11)$$

A solução para o problema será

$$s(s, t) = \begin{cases} s_L, & \text{se } x \leq f'(s_L)t \\ [f'(x)]^{-1}, & \text{se } f'(s_L)t < x < f'(s^*)t \\ s_R, & \text{se } x \geq f'(s^*)t \end{cases} \quad (4.12)$$

onde u^* satisfaz

$$f'(s^*) = \frac{f(s^*) - f(s_R)}{s^* - s_R}. \quad (4.13)$$

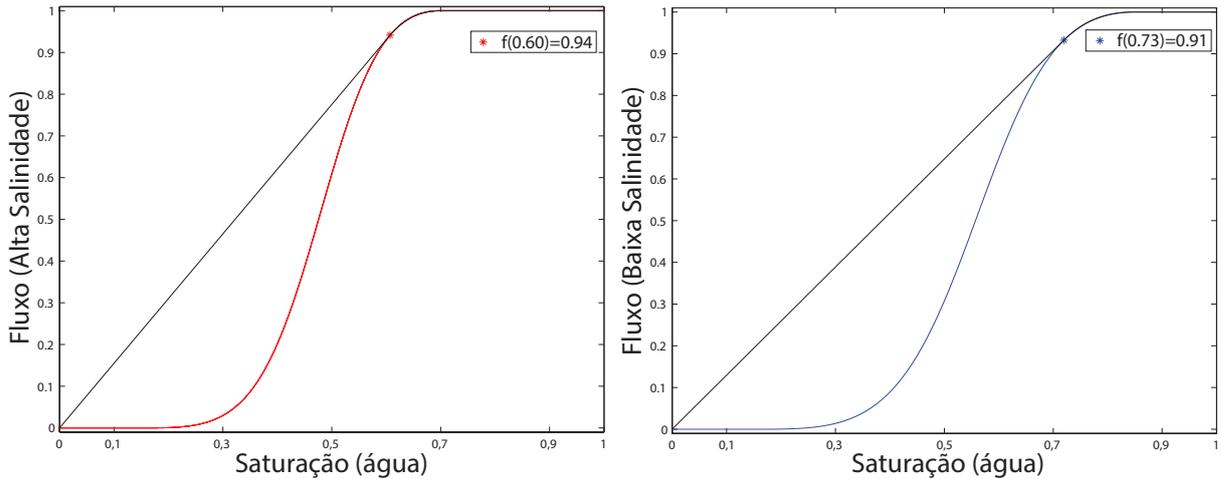


Figura 22 – 22.a: Envoltória côncava da função de fluxo em alta salinidade. 22.b: Envoltória côncava da função de fluxo em baixa salinidade.

Para cada caso (alta e baixa salinidade) teremos um valor de s^* diferente o que diferenciará as duas soluções. Além disso como a função de fluxo não é a mesma, as duas soluções produzirá ondas de rarefação distintas.

A Figura 23 ilustra o intervalo que temos que inverter para encontrar a solução (4.12), enquanto a Figura 24 ilustra as soluções dos dois casos para um t_0 fixo. Embora, a princípio, a função $[f'(x)]^{-1}$ seja bem complicada de se obter, métodos numéricos podem ser aplicados com uma boa precisão. Em nosso modelo usamos o método de Newton, onde dado um ponto $x \in [f'(s_L)t, f'(s^*)t]$ com t fixo, buscamos s , tal que seja raiz da seguinte função

$$g(s) = f'(s) - x. \tag{4.14}$$

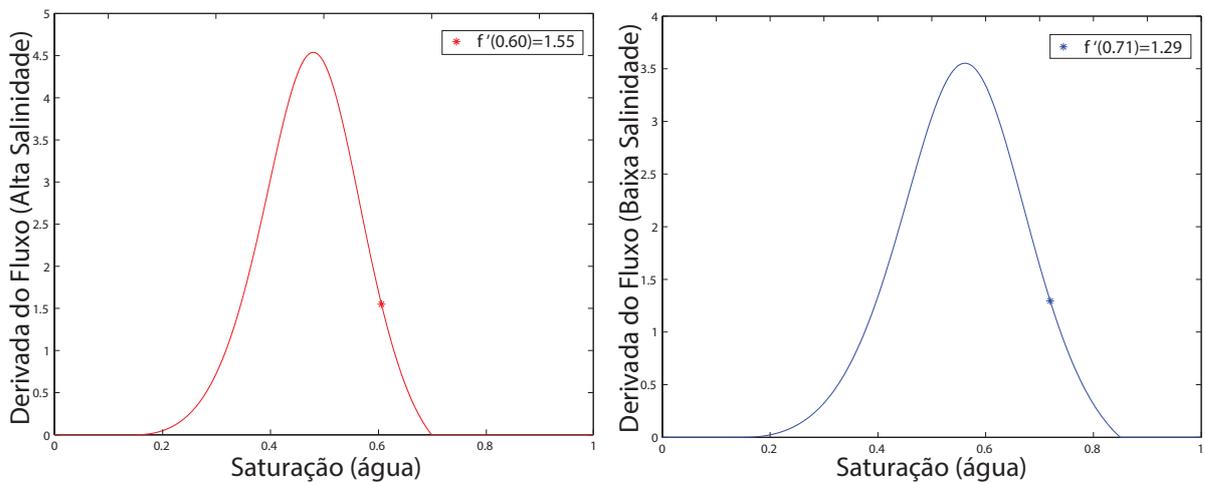


Figura 23 – 23.a: Derivada função $f(s)$ em alta salinidade. 23.b: Derivada função $f(s)$ em baixa salinidade. Queremos obter a inversa no intervalo (s^*, s_L) para os dois casos.

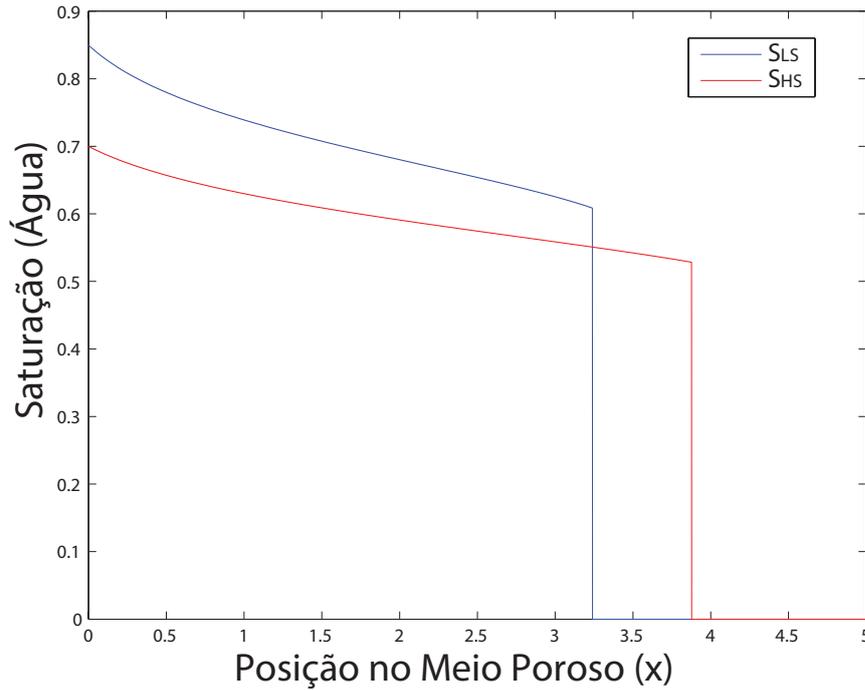


Figura 24 – Gráfico da solução da equação (4.4) com a condição inicial (4.5) para condições de alta e baixa salinidade em um tempo fixo t_0 .

Na Figura 24 podemos observar a frente de onda da interface água e óleo se propagando com velocidade $v_{BL} = f'(s^*)$ (veja valor na Figura 23). Esta onda de choque é mais veloz para o caso de alta salinidade do que na baixa, porém a baixa salinidade diminui o óleo residual (óleo que não é possível de se retirar). Podemos obter facilmente as ondas de saturação do óleo via equação (1.20).

Como estamos supondo em nosso modelo que os fluidos são incompressíveis, a mesma quantidade de água que é injetada é a mesma quantidade de óleo extraído do meio poroso. Podemos obter a quantidade de óleo recuperado através da integral

$$Q(t) = K \int_0^L s(x, t) dx, \quad \text{com} \quad K = \frac{\phi V}{L}, \quad (4.15)$$

onde ϕ é a porosidade, L e V são o comprimento e o volume total do meio poroso, respectivamente.

Observe, através das soluções que a maior recuperação de óleo está associada ao fluxo sob baixa salinidade. Na seção posterior, iremos considerar a solução do problema de Riemann no qual consideramos que haja diferença nas salinidade da água de injeção e do material orgânico presente no meio poroso. Não iremos apresentar a solução completa do problema de Riemann, o qual pretendemos fazer como continuação desse trabalho, mas através dessa solução teremos a noção do comportamento da solução do problema de Riemann.

4.2 Injeção de Água com Salinidade Diferente da Salinidade da Rocha

Vamos considerar aqui dois problemas de Riemann. Deixamos claro que não vamos resolver o problema de Riemann completo, mas temos todos os ingredientes para fazê-lo, o que pretendemos fazer como uma sequência natural desse trabalho. A solução do problema de Riemann irá se utilizar do princípio da compatibilidade geométrica, sempre indo da onda mais lenta para a onda mais rápida.

Antes de iniciarmos nossa solução vamos fazer alguns comentários que serão usados em ambas as soluções. Sabemos que a família associada a λ_2 é mais rápida que a λ_1 e através da Proposição 3.2.4, a família 2 é linearmente degenerada, dessa forma os choques e as rarefações são a mesma onda. Além disso, a única forma de atingirmos os estados de concentração de cálcio, sódio, sulfato e cloro à direita (ou seja, em V_R) é através de uma onda desse tipo. Sabemos que temos 3 ondas desse tipo: uma onda no qual β_{Na} constante, outra apenas variando cloro e outra apenas variando sulfato. Dessa forma, para obtermos o estado V_R a ser atingido, construímos, a partir de V_R tais curvas, de modo que os estados que estão nessas curvas podem atingir V_R .

Note, por outro lado que como cloro e sulfato não interferem fundamentalmente na solução, então é interessante fazermos a curva $\beta_{Na} = \beta_{Na}((C_{Ca})_R, (C_{Na})_R)$ apenas no plano (C_{Ca}, C_{Na}) . Vamos definir essa curva como $\Gamma_R = \Gamma((C_{Ca})_R, (C_{Na})_R)$, o qual é denotada por

$$\Gamma_R = \{(C_{Ca}, C_{Na}) \text{ tal que } \beta_{Na}(C_{Ca}, C_{Na}) = \beta_{Na}((C_{Ca})_R, (C_{Na})_R)\} \quad (4.16)$$

Essa curva divide o plano $C_{Ca} - C_{Na}$ em duas regiões $\Gamma_R^1 = \Gamma_R^1((C_{Ca})_R, (C_{Na})_R)$ e $\Gamma_R^2 = \Gamma_R^2((C_{Ca})_R, (C_{Na})_R)$, que definimos da seguinte forma (veja Figura 25)

$$\Gamma_R^1 = \{(C_{Ca}, C_{Na}) \text{ que estão à esquerda da curva } \Gamma_R\} \text{ e} \quad (4.17)$$

$$\Gamma_R^2 = \{(C_{Ca}, C_{Na}) \text{ que estão à direita da curva } \Gamma_R\}. \quad (4.18)$$

Aqui, direita e esquerda da curva Γ_R é tomada seguindo o sentido de crescimento de C_{Ca} e C_{Na} .

Por outro lado, como essas estruturas são iguais para todos os valores de s , podemos regrá-las no espaço (s, C_{Ca}, C_{Na}) . Então a superfície (s, Γ_R) divide nosso espaço (s, C_{Ca}, C_{Na}) em (s, Γ_R^1) e (s, Γ_R^2) . Veja Figura 26.

Além disso, no plano (C_{Ca}, C_{Na}) , tanto os choques quanto as curvas integrais satisfazem a mesma expressão (3.124). Dessa forma, a curva associada a família 1 projetada no plano (C_{Ca}, C_{Na}) será denotada como C_1 , veja Figura 27, e satisfaz:

$$C_{Ca} = -\frac{1}{2}C_{Na} + \frac{((C_{Na})_L + 2(C_{Ca})_L)}{2}. \quad (4.19)$$

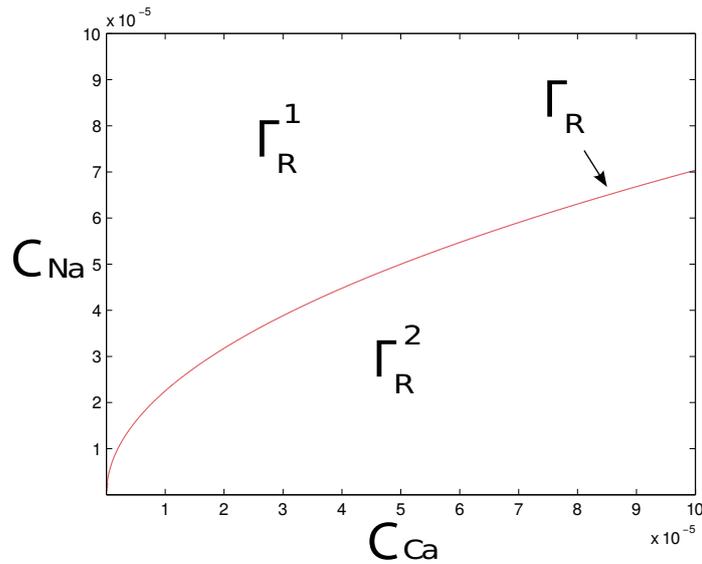


Figura 25 – Separação do plano (C_{Ca}, C_{Na}) em Γ_R , Γ_R^1 e Γ_R^2 .

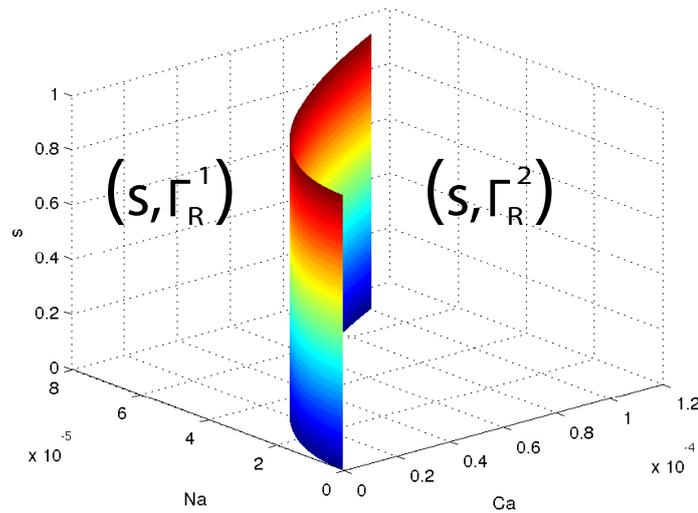


Figura 26 – Separação do espaço (s, C_{Ca}, C_{Na}) em (s, Γ_R^1) e (s, Γ_R^2) .

A Proposição 3.1.1 juntamente com a discussão sobre as equações (3.2) estabelecem que ao longo da rarefação C_{Ca} é crescente e C_{Na} é decrescente. Então para estados em (s, Γ_R^1) , a variável C_{Ca} deve crescer e C_{Na} decrescer para atingir (s, Γ_R) , de tal modo que a onda deve ser uma rarefação. Para estados em (s, Γ_R^2) , a variável C_{Ca} deve decrescer e C_{Na} crescer para atingir (s, Γ_R) , de forma que a onda deve ser um choque, veja Figura 27.

Através dessa observação útil podemos resolver o problema de Riemann. Note que através dos nossos cálculos, a modelagem mostra que o mais importante é a posição que o estado a direita se encontra em relação ao estado a esquerda e disso que depende a solução do problema de Riemann.

V_3 , temos um choque de velocidade

$$v^s = \frac{f}{s},$$

ligando V_3 até V_R que é o estado a direita. Esse estado também representa um choque na saturação, pois, há coincidência entre a velocidade das ondas (rarefação e choque) nesse estado. Tal solução é descrita na Figura 28.

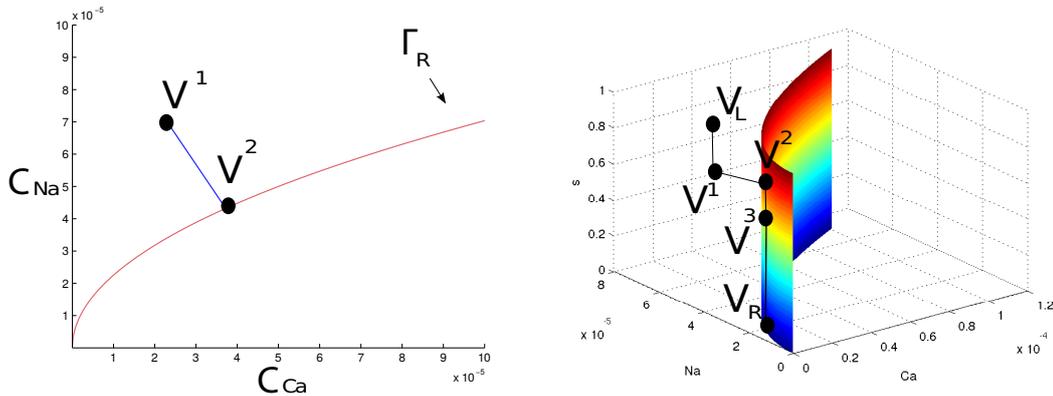


Figura 28 – 28.a: Estado V^1 e V^2 projetado no plano (C_{Ca}, C_{Na}) . A curva ligando V^1 até V^2 é uma rarefação da família 1. 28.b: Estados de Riemann no espaço de fase (s, C_{Ca}, C_{Na}) . A solução é V_R até V^1 é uma rarefação de Buckley-Leverett. De V^1 até V^2 é uma rarefação da família 1. De V^2 até V^3 é uma rarefação de Buckley-Leverett. De V^3 até V_R é uma onda da família 2, juntamente com um choque de Buckley-Leverett.

4.2.2 Injeção de Água com Salinidade na Região (s, Γ_R^2)

O problema de Riemann considerado aqui é:

$$\begin{cases} V_L = (s_L, (C_{Ca})_L, (C_{Na})_L, (C_{Cl})_L, (C_{SO_4})_L) = (1, 5 \times 10^{-5}, 2 \times 10^{-5}, 1 \times 10^{-5}, 1 \times 10^{-5}), & \text{se } x \leq 0, \\ V_R = (s_R, (C_{Ca})_R, (C_{Na})_R, (C_{Cl})_R, (C_{SO_4})_R) = (0, 5 \times 10^{-5}, 5 \times 10^{-5}, 5 \times 10^{-5}, 5 \times 10^{-5}), & \text{se } x > 0. \end{cases}$$

Veja Figura 29.

Através da Proposição 3.1.7, podemos ver que a onda mais lenta para $s = 1$ é a de Buckley-Leverett. Nesta onda apenas a saturação da água varia e todas as outras quantidades são constantes. Portanto, a primeira onda será uma rarefação de Buckley-Leverett iniciando em V_L , até um estado $V^1 = (s_1, 5 \times 10^{-5}, 2 \times 10^{-5}, 10^{-5}, 10^{-5})$, onde s_1 representa o ponto de coincidência entre λ_{BL} e λ_1 , e está sobre a superfície de coincidência mostrada na Figura 16.b. A partir de V^1 , que está em Γ_R^2 , portanto a onda que deve atingir a superfície (s, Γ_R) deve ser um choque, pois C_{Ca} é decrescente. O estado que atinge (s, Γ_R) , denotamos por V^2 . A partir de V^2 existe uma outra rarefação de Buckley-Leverett,

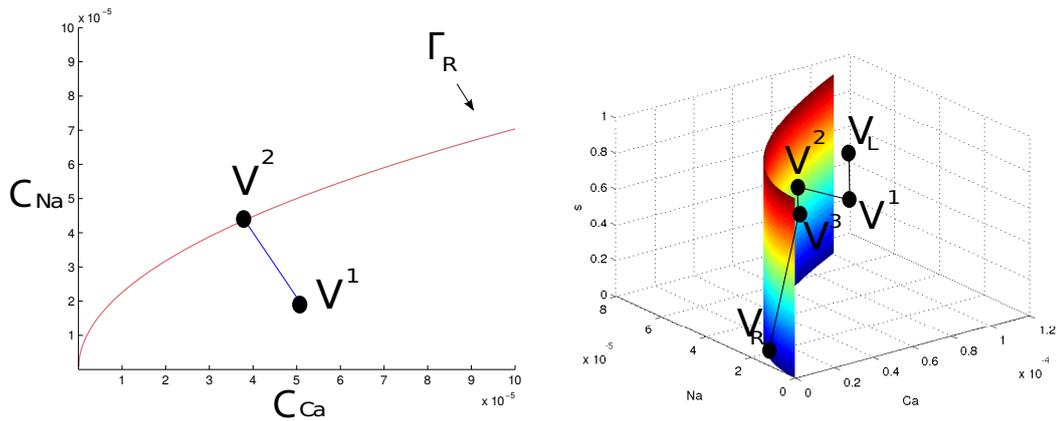


Figura 29 – 29.a: Estado V^1 e V^2 projetado no plano (C_{Ca}, C_{Na}) . A curva ligando V^1 até V^2 é um choque da família 1. 29.b: Estados de Riemann no espaço de fase (s, C_{Ca}, C_{Na}) . A solução é V_R até V^1 é uma rarefação de Buckley-Leverett. De V^1 até V^2 é um choque da família 1. De V^2 até V^3 é uma rarefação de Buckley-Leverett. De V^3 até V_R é uma onda da família 2, juntamente com um choque de Buckley-Leverett.

que é construída até atingirmos o estado V^3 , o qual está sobre a coincidência entre λ_2 e λ_{BL} . Neste ponto a saturação vale s_2 , veja *Figura 16.b*. A partir de V_3 , temos um choque de velocidade

$$v^s = \frac{f}{s},$$

ligando V_3 até V_R que é o estado a direita. Esse estado também representa um choque na saturação, pois, há coincidência entre a velocidade das ondas (rarefação e choque) nesse estado. Tal solução é descrita na *Figura 29*.

5 Conclusão

Conseguimos obter várias estruturas matemáticas para um modelo modificado do original proposto por [15]. Tais estruturas são suficientes para dar-nos suporte para encontrarmos a solução completa do Problema de Riemann. No Capítulo 4, fizemos a descrição de dois desses problemas, mas conseguimos identificar uma forma de fatiar o espaço para obter o problema completo. Também temos que resolver o problema completo para podermos identificar em quais condições há um aumento da recuperação. Na primeira parte do Capítulo 4, vemos que a recuperação é maior quando se injeta água com salinidade mais baixa, mas aqui não podemos, ainda, sem resolver o problema completamente, identificar esta situação.

Uma extensão natural desse trabalho será a solução completa do problema de Riemann. Pretendemos finalizar esse trabalho para a publicação em alguma revista internacional na área.

Também podemos considerar mais generalizações no modelo, tais como a dependência da função de fluxo f_w e f_o em relação aos íons de cloro e sulfato, via força iônica I_0 . Uma outra possibilidade de generalização é a consideração de mais íons no modelo e verificar como eles modificam a solução.

Modelos mais complexos envolvem a possibilidade de outras reações além do fenômeno de dessorção, os quais também são linhas interessantes de estudo. Acreditamos que temos muitos assuntos que possam ser abordados nessa mesma linha de estudo.

Referências

- 1 APPELO, C. A. J., POSTMA, D., *Geochemistry, groundwater and pollution*, Second Edition, CRC Press, 2005. Citado na página 29.
- 2 BUCKLEY, S. E., LEVERETT, M. C., *Mechanism of fluid displacement in sands*, Trans. AIME, v. 146, 1942. Citado 2 vezes nas páginas 40 e 68.
- 3 CRAG, F. F. JR., *The Reservoir Engineering Aspects of Waterflooding*, Monograph Series, SPE, Richardson, TX, 1971. Citado na página 29.
- 4 DAFERMOS, C., *Hyperbolic Conservation Laws in Continuum Physics*, EUA: Springer Verlag, 2010. Citado na página 66.
- 5 DARCY, H., *Les Fontaines Publiques de la Ville de Dijon*, Paris: Victor Dalmont, 1856. Citado 2 vezes nas páginas 14 e 21.
- 6 DUIJN, C. J., *An Introduction to Conservation Laws: Theory and Applications to Multi-Phase Flow*, Eindhoven University of Technology, Eindhoven, 2003. Citado 2 vezes nas páginas 25 e 66.
- 7 HIORTH, A., CATHLES, L. M., MADLAND, M. V., *The Impact of Pore Water Chemistry on Carbonate Surface Charge and Oil Wettability*, Springer Science, 2010. Citado 2 vezes nas páginas 28 e 30.
- 8 LAGER, A., WEBB, K. J. AND RICHMOND, D. M., *LoSal Enhanced Oil Recovery: An Experimental Investigation*, Paper SPE 113946-MS, 2008. Citado na página 14.
- 9 LEVEQUE, R. J. , *Numerical Methods for Conservation Laws*, Birkhauser, Second edition, 1994. Citado 6 vezes nas páginas 9, 14, 15, 38, 49 e 67.
- 10 LIGTHELM, D. J., HOFMAN, J., BRUSSEE, N., MARCELIS, F. AND LINDE, H., *Novel Waterflooding Strategy by Manipulation of Injection Brine Composition*, Paper SPE 119835-MS, 2009. Citado na página 14.
- 11 LIMA, L. E., *Curso de Análise*, Vol. 1, Projeto Euclides, IMPA, 2006. Citado na página 20.
- 12 LAMBERT, W. J., *Riemann solutions of balance system with phase change for thermal flow in porous media.*, Doctoral Thesis, IMPA, 2006. Citado na página 13.
- 13 MORROW, N. R., VALAT, M. AND YIDLIZ, H., *Effect of Brine Composition on recovery of an Alaskan Crude Oil by Waterflooding*, Paper 96-94, 1996. Citado na página 14.

- 14 OLAV, D., THORMOD, J., ASLAK, T. E RAGNAR, W., *Multicomponent Chromatography in a Two Phase Environments*, SIAM Journal on Applied Mathematics, Vol. 52, No. 1, February 1992. Citado na página 42.
- 15 OMEKEH, A., FRIIS, H. A., FJELDE, I. E EVJE, S., *Modeling of Ion-Exchange and Solubility in Low Salinity Water Flooding*, Society of Petroleum Engineers, Paper SPE 154144, 2012. Citado 5 vezes nas páginas 14, 21, 28, 29 e 76.
- 16 PATIL, S. B., DANDEKAR, A. Y., PATIL, S. AND KHATANIAR, D., *Low Salinity Brine Injection for EOR on Alaska North Slope (ANS)*, Paper 12004-MS, 2008. Citado na página 14.
- 17 PEACEMAN, D. W., *Fundamentals of Numerical Reservoir Simulation*, Developments in Petroleum Science 6, Elsevier Scientific Publishing Company, 1977. Citado na página 21.
- 18 SHARMA, M. M. AND FILOCO, P. R., *Effect of Brine Salinity and Crude-oil Properties on Oil Recovery and Residual Saturations*, SPE Journal, 5(3):293-300, 2000. Citado na página 14.
- 19 SKOOG, WEST, HOLLER, CROUCH, *Fundamentos da Química Analítica*, Tradução da 8ª Edição norte-americana, Thomson, 2014. Nenhuma citação no texto.
- 20 SMOLLER, J., *Shock Waves and Reaction-Diffusion Equations*, Springer-Verlag, 1983. Citado 4 vezes nas páginas 14, 25, 59 e 67.
- 21 STEWART, J., *Cálculo*, Vol. 2, Tradução da 7ª Edição norte-americana, Cengage Learning, 2014. Citado na página 20.
- 22 TANG, G. Q. AND MORROW, N. R., *Influence of Brine Composition and Fines Migration on Crude Oil/Brine/Rock Interactions and Oil Recovery*, SPE Journal, 24(2-4):99-111, 1999. Citado na página 14.
- 23 TORO, E. F., *Riemann Solvers and Numerical Methods for Fluid Dynamics - A Practical Introduction*, 2ª Edição, Springer, 1999. Citado 4 vezes nas páginas 14, 17, 60 e 67.
- 24 TZIMAS, E., *Enhanced Oil Recovery using Carbon Dioxide in the European Energy System*, European Commission Joint Research Center, 2005. Citado na página 13.
- 25 WEBB, K. J., BLACK, C. J. J. AND AL-AJEEL, H., *Low Salinity Oil Recovery - Log-Inject-Log*, Paper SPE 89379-MS, 2004. Citado na página 14.

APÊNDICE A – Constantes Físicas e Químicas

Coefficientes de Atividade: Alguns valores usuais para as constantes a_i^0 :

$$a_{Ca}^0 = 5, \quad a_{Na}^0 = 4, \quad a_{Cl}^0 = 3.5, \quad a_{Mg}^0 = 5.5, \quad a_{SO_4}^0 = 5, \quad (A.1)$$

para as constantes b_i^0 :

$$b_{Ca}^0 = 0.165, \quad b_{Na}^0 = 0.075, \quad b_{Cl}^0 = 0.015, \quad b_{Mg}^0 = 0.2, \quad b_{SO_4}^0 = -0.04. \quad (A.2)$$

Alguns valores para A(T) e B(T):

$$A(T = 80) = 0.5706, \quad B(T = 80) = 0.3381. \quad (A.3)$$

Propriedades do Meio Poroso Linear Cilíndrico: Os seguintes valores são extensamente usadas na literatura:

- Porosidade: $\phi = 0.274$.
- Masa de Argila: $Mc = 0.088$ Kg/Litre of core
- Permeabilidade Absoluta: $k = 500\text{mD} = 5000.98710^{15}m^2$.

Propriedades do Óleo e Água Salinizada

- Viscosidade do Óleo: $\mu_o = 0.6$ cp ($1 \text{ cp} = 10^{-3} \text{ Pa s}$)
- Viscosidade da Água: $\mu_w = 0.3$ cp

Propriedades Relacionadas com o Processo de Troca de Cátions.

- Capacidade de Troca de Cátion: $CEC = 0.013eq/Kg$ de argila
- Fator Seletividade : $K_{CaNa}^{HS} = 5.1, K_{CaNa}^{LS} = 1.7$
- Fator Seletividade : $K_{MgNa}^{HS} = 4.8, K_{MgNa}^{LS} = 1.6$
- Constante r : $r = 400$.

APÊNDICE B – Valores para as Funções de Permeabilidade Relativa

Condições em Alta Salinidade (HS): O seguinte conjunto de valores para condições de alta salinidade foram usados:

$$k_{rw}^* = 0.3, \quad k_{ro}^* = 0.75, \quad s_{wr}^{HS} = 0.15, \quad s_{or}^{HS} = 0.3, \quad Nk_w = 3, \quad Nk_o = 2. \quad (\text{B.1})$$

Aplicando estes valores em (2.10) e (2.11), obtemos as seguintes curvas para a permeabilidade relativa:

$$k_{rw}^{HS}(s) = k_{rw}(s, s_{wr}^{HS}, s_{or}^{HS}) \quad \text{e} \quad k_{ro}^{HS}(s) = k_{rw}(s, s_{wr}^{HS}, s_{or}^{HS}), \quad s_{wr}^{HS} \leq s \leq 1 - s_{or}^{HS}. \quad (\text{B.2})$$

onde s é a saturação da água.

Condições em Baixa Salinidade (LS): O seguinte conjunto de valores para condições de baixa salinidade foram usados:

$$k_{rw}^* = 0.4, \quad k_{ro}^* = 0.9, \quad s_{wr}^{LS} = 0.15, \quad s_{or}^{LS} = 0.15, \quad Nk_w = 3, \quad Nk_o = 2. \quad (\text{B.3})$$

Aplicando estes valores em (2.10) e (2.11), obtemos as seguintes curvas para a permeabilidade relativa:

$$k_{rw}^{LS}(s) = k_{rw}(s, s_{wr}^{LS}, s_{or}^{LS}) \quad \text{e} \quad k_{ro}^{LS}(s) = k_{rw}(s, s_{wr}^{LS}, s_{or}^{LS}), \quad s_{wr}^{LS} \leq s \leq 1 - s_{or}^{LS}. \quad (\text{B.4})$$

onde s é a saturação da água.

APÊNDICE C – Prova do Lema (3.2.1)

Demonstração. Seja a equação

$$\nabla \lambda_1 \cdot \vec{r}_{\lambda_1} = \nabla \left(\frac{2f}{\gamma} \right) \cdot \left(2 \frac{\partial f}{\partial C_{Na}} - \frac{\partial f}{\partial C_{Ca}}, -\theta, 2\theta, 0, 0 \right) \quad (\text{C.1})$$

onde

$$\gamma = \left(2s + M_c \left(2 \frac{\partial \beta_{Na}}{\partial C_{Na}} - \frac{\partial \beta_{Na}}{\partial C_{Ca}} \right) \right), \quad \theta = \lambda_1 - \frac{\partial f}{\partial s} \quad \text{e} \quad \lambda_1 = \frac{2f}{\gamma}. \quad (\text{C.2})$$

Fazendo os cálculos, temos

$$\begin{aligned} \nabla \lambda_1 \cdot \vec{r}_{\lambda_1} &= \frac{1}{\gamma^2} \left(2 \frac{\partial f}{\partial s} \gamma - 4f, 2 \frac{\partial f}{\partial C_{Ca}} \gamma - 2f M_c \left(2 \frac{\partial^2 \beta_{Na}}{\partial C_{Ca} \partial C_{Na}} - \frac{\partial^2 \beta_{Na}}{\partial C_{Ca}^2} \right), \right. \\ &\left. 2 \frac{\partial f}{\partial C_{Na}} \gamma - 2f M_c \left(2 \frac{\partial^2 \beta_{Na}}{\partial C_{Na}^2} - \frac{\partial^2 \beta_{Na}}{\partial C_{Na} \partial C_{Ca}} \right), 0, 0 \right) \cdot \left(2 \frac{\partial f}{\partial C_{Na}} - \frac{\partial f}{\partial C_{Ca}}, -\theta, 2\theta, 0, 0 \right). \end{aligned}$$

Tomando o produto interno, temos

$$\begin{aligned} \nabla \lambda_1 \cdot \vec{r}_{\lambda_1} &= \left(2 \frac{\partial f}{\partial s} \gamma - 4f \right) \left(2 \frac{\partial f}{\partial C_{Na}} - \frac{\partial f}{\partial C_{Ca}} \right) - \\ &\left(2 \frac{\partial f}{\partial C_{Ca}} \gamma - 2f M_c \left(2 \frac{\partial^2 \beta_{Na}}{\partial C_{Ca} \partial C_{Na}} - \frac{\partial^2 \beta_{Na}}{\partial C_{Ca}^2} \right) \right) \theta + \\ &\left(2 \frac{\partial f}{\partial C_{Na}} \gamma - 2f M_c \left(2 \frac{\partial^2 \beta_{Na}}{\partial C_{Na}^2} - \frac{\partial^2 \beta_{Na}}{\partial C_{Na} \partial C_{Ca}} \right) \right) 2\theta. \end{aligned}$$

Dividindo a equação por 2 e reescrevendo a equação, teremos

$$\begin{aligned} \nabla \lambda_1 \cdot \vec{r}_{\lambda_1} &= \left(\frac{\partial f}{\partial s} \gamma - 2f + \gamma \theta \right) \left(2 \frac{\partial f}{\partial C_{Na}} - \frac{\partial f}{\partial C_{Ca}} \right) + \\ &f M_c \theta \left(2 \frac{\partial^2 \beta_{Na}}{\partial C_{Ca} \partial C_{Na}} - \frac{\partial^2 \beta_{Na}}{\partial C_{Ca}^2} - 2 \frac{\partial^2 \beta_{Na}}{\partial C_{Na}^2} + \frac{\partial^2 \beta_{Na}}{\partial C_{Na} \partial C_{Ca}} \right). \end{aligned}$$

Substituindo o valor da variável θ vemos que a primeira parcela se anula. Finalmente usando a igualdade das derivadas cruzadas, obtemos

$$\nabla \lambda_1 \cdot \vec{r}_{\lambda_1} = f M_c \left(\frac{\partial f}{\partial s} - \lambda_1 \right) \left(\frac{\partial^2 \beta_{Na}}{\partial C_{Ca}^2} + 2 \frac{\partial^2 \beta_{Na}}{\partial C_{Na}^2} - 3 \frac{\partial^2 \beta_{Na}}{\partial C_{Na} \partial C_{Ca}} \right). \quad (\text{C.3})$$

□