

EQUAÇÃO DE BUCKLEY-LEVERETT APLICADA EM UM PROBLEMA DE ESCOAMENTO DE FLUIDOS EM MEIO POROSO

Raphael de Oliveira Garcia - IFG/Jataí

Palavras chave: Mecânica de Fluidos, Modelo Matemático, Métodos Numéricos, Equação de Buckley-Leverett.

1 Introdução

Desde a antiguidade a humanidade demonstra o interesse em estudar o comportamento, as propriedades e o escoamento de fluidos que, certamente, foram encorajados pela importância da água à vida de diversas espécies e pela vital dependência presente desde o desenvolvimento de cidades até a higiene pessoal. Concomitantemente, surge o desenvolvimento de técnicas e tecnologias voltadas para a manipulação de fluidos.

O avanço das ciências e da matemática possibilitou a modelagem de problemas que envolviam a dinâmica de fluidos através de equações diferenciais, porém em poucas situações conseguia-se uma solução analítica.

A criação de métodos numéricos trouxe aos pesquisadores novas ferramentas para encontrar soluções em problemas de grande complexidade, que são aplicados em diversas áreas do conhecimento, tais como: Aerodinâmica, Astrofísica, Oceanografia, Meteorologia, Hidráulica, Perfuração, Extração de Petróleo, Poluição, Engenharias, entre outras.

Neste trabalho estudou-se um modelo de escoamento de dois fluidos imiscíveis em um meio poroso descrito pela equação de Buckley-Leverett. O problema descreve o fluxo de um óleo, que está dentro de um tubo preenchido de material poroso, devido ao bombeamento de água por uma das extremidades do tubo.

A imiscibilidade dos fluidos fornece uma condição inicial descontínua que requer uma atenção redobrada, pois um tratamento inadequado resultará em soluções prejudicadas por oscilações espúrias ou difusão numérica excessiva. Sendo assim, o processo de escolha dos métodos numéricos empregados torna-se importante para a obtenção de soluções confiáveis.

O objetivo deste trabalho é aplicar um esquema essencialmente não oscilatório ponderado de alta ordem (WENO), que mantém tal propriedade a medida que se faz a evolução temporal do modelo através de um método Runge-Kutta de terceira ordem de Valor

Total Decrescente (RK-3 TVD).

2 O Problema em estudo

Atualmente, um problema de interesse global é a extração de petróleo subterrâneo através de um tubo preenchido de um meio poroso. Após a perfuração do solo até a fonte subterrânea de óleo, uma certa quantidade é escoada devido à alta pressão que se encontra o petróleo, porém em consequência à extração tem-se a diminuição da pressão que resulta na interrupção do escoamento, deixando ainda no subsolo uma grande quantidade.

Um método padrão subsequente à extração inicial consiste em bombear água para dentro da reserva restante de óleo para forçar a continuidade da extração. Neste caso, o fluido passa a ter duas fases, óleo e água, e o escoamento é retomado no meio poroso constituído de rocha ou areia.

A modelagem matemática que será descrita consiste em representar unidimensionalmente o escoamento do óleo pelo tubo preenchido de material poroso, através do bombeamento de água (LEVEQUE, 2002).

Sejam $0 \leq q \leq 1$ a fração de água saturada e $1 - q$ a fração de óleo. Assim, no momento em que a água entra em contato com o óleo, a condição inicial do problema é:

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

Quando $q = 1$ o fluido é constituído apenas de água e $q = 0$ observa-se apenas óleo. Logo, a interface entre óleo e água está localizada na posição $x = 0$ e o escoamento ocorrerá da esquerda para direita.

A medida em que a água empurra o óleo, uma região com óleo e água é formada e caracterizada por $0 < q < 1$, isto corresponde a uma onda de choque seguido de uma rarefação nas simulações.

Neste modelo os fluidos são essencialmente incompressíveis, o que garante que o fluxo total é igual em qualquer parcela menor do tubo. Assim, em regiões em que $q = 0$ ou em que $q = 1$, as velocidades são distintas porém constantes. Por outro lado, em regiões em que $0 < q < 1$ um diferente comportamento de velocidade é observado devido à diferença entre as tensões superficiais dos fluidos, que influencia no escoamento dentro de meios porosos.

Buckley e Leverett propuseram um modelo em que o fluxo de água e óleo são representados respectivamente pelas seguintes expressões:

$$f = \frac{q^2}{q^2 + a} \quad \text{e} \quad g = \frac{a \cdot q^2}{q^2 + a}, \quad (2)$$

em que a constante $0 < a < 1$ representa a porosidade do meio. Nota-se que $f + g = 1$, o que garante que o fluxo total em qualquer ponto do escoamento é constante. Portanto, basta conhecer o escoamento de um dos fluidos.

Estas características são propriedades de leis de conservação, que aplicadas ao problema em questão fornece a equação diferencial parcial não linear,

$$q_t + f(q) q_x = 0, \quad (3)$$

em que $f(q)$ é fluxo de água saturada, q a fração de água, o subscrito t é a derivada parcial com relação ao tempo e o subscrito x é a derivação com relação a posição.

3 Métodos Numéricos e Simulações

Para a discretização espacial utilizou-se um método WENO-5 (esquemas numéricos essencialmente não oscilatórios ponderados) e para a discretização temporal aplicou-se um método Runge-Kutta de terceira ordem TVD.

No método WENO-5 o domínio espacial é subdividido em intervalos e os fluxos das variáveis são aproximados nos pontos médios dos intervalos (LEVEQUE, 2002). Para manter a propriedade de ser não oscilatório, durante a evolução temporal, escolheu-se um método pertencente à classe TVD.

A formulação matemática desses métodos encontra-se em (JIANG; SHU, 1996) e questões sobre a estabilidade pode ser obtida em (MOTAMED *et al*, 2011).

Um código em Octave foi implementado para a obtenção de soluções numéricas em forma de gráficos e vídeos que auxiliam no entendimento do comportamento da evolução temporal.

Para a simulação considerou-se as equações (1), (2) e (3), juntamente com uma condição de radiação em ambas as extremidades do domínio espacial definido pelo intervalo $[-1, 1]$, subdividido em 128 subintervalos iguais. O espaçamento temporal é 10 vezes menor que um subintervalo espacial.

A tubulação por onde os fluidos serão escoados está representado pelo intervalo $[0, 1]$ no eixo horizontal e escolheu-se $a = 0,5$.

A Figura 1 mostra a condição inicial, onde no eixo horizontal temos o domínio de simulação. Para um ponto $x < 0$ tem-se apenas água, para $x > 0$ apenas óleo, pois no eixo

vertical representa-se a fração q . Após 256 interações, mostra-se o escoamento dos fluidos e o surgimento da região que representa a mistura dos dois fluidos, Figura 2. Depois de 420 interações a região que possui apenas óleo atravessa o domínio, deixando o tubo todo com mistura de água e óleo, Figura 3.

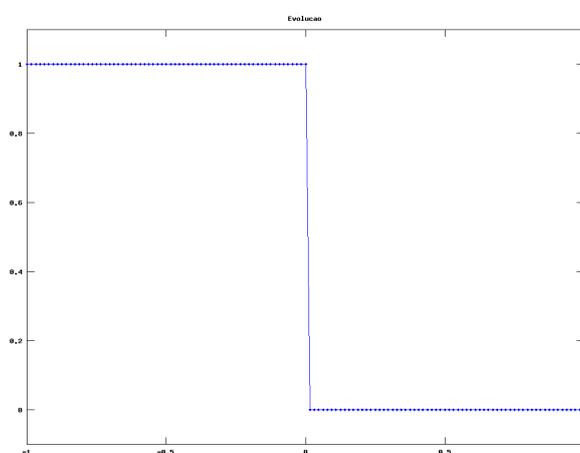


Figura 1. Condição inicial

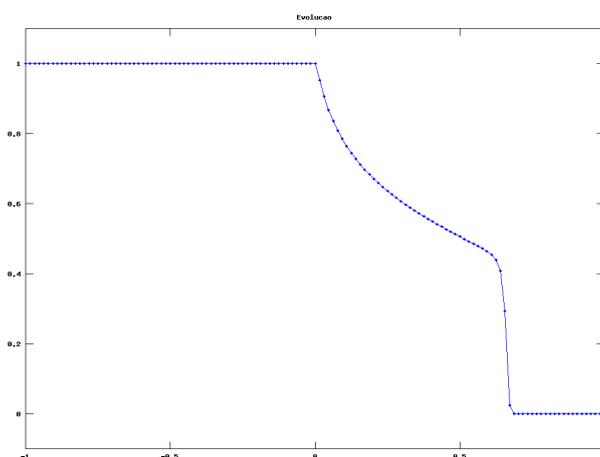


Figura 2. Evolução temporal após 256 interações – nota-se o surgimento da região em que a água mistura-se com o óleo.

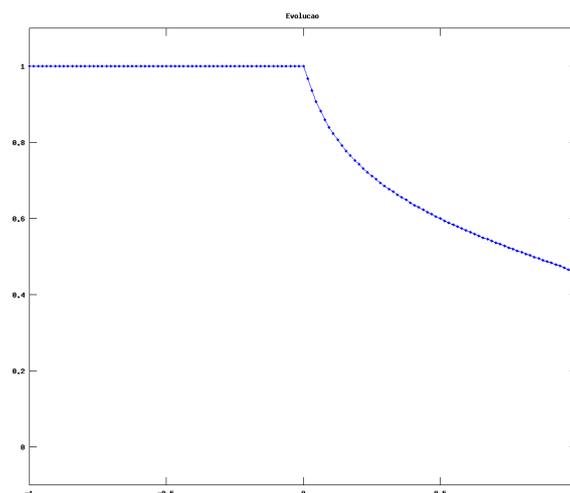


Figura 3. Evolução temporal após 420 iterações – verifica-se o momento em que a região constituída apenas de óleo atravessa a tubulação.

Conclui-se os métodos numéricos empregados foram suficientes para encontrar soluções confiáveis para o escoamento de dois fluidos através de um meio poroso, uma vez que as Figuras (2) e (3) não apresentam oscilações nas transições entre os fluidos e nem excessivas suavizações devido à difusão numérica.

4 Referências bibliográficas

JIANG, G. S; SHU, C. W. Efficient Implementation of Weighted ENO Schemes. *Journal of Computational Physics*, v. 126, n.0130, 1996, p. 202-228.

LEVEQUE, R. J. *Finite Volume Methods for Hyperbolic Problems*. Nova Iorque, Cambridge University Press, 2002.

MOTAMED, M; MACDONALD, C. B; RUUTH, S. J. On the Linear Stability of the Fifth-Order WENO Discretization. *J. Sci. Comput.*, v. 47, 2011, p. 127-149.

NOMOGRAMA COM LÓGICA FUZZY PARA O CÂNCER DE PRÓSTATA - NFCP

Graciele Paraguaia Silveira – CAJ/UFG

Palavras chave: Câncer de Próstata, Modelo Matemático, Lógica Fuzzy, Software, Biomatemática.

1 Introdução

A prevenção e controle de câncer, em países desenvolvidos e em desenvolvimento, constitui-se num dos mais importantes desafios científicos e de saúde pública, da nossa época (INCA, 2012).

O termo câncer é utilizado genericamente para representar uma classe de mais de 100 doenças caracterizadas pelo crescimento descontrolado de células anormais do organismo.

O Instituto Nacional do Câncer - INCA - é o órgão do Ministério da Saúde responsável pelas ações de prevenção e controle da doença no Brasil.

Segundo estimativas do INCA para 2012, no Brasil surgirão 518.510 novos casos de câncer, sendo 257.870 entre os homens e 260.640 entre as mulheres. Quanto ao câncer de próstata, são esperados 60.180 novos casos, o que representa um risco de 62/100 mil homens.

A próstata é uma glândula do sistema urogenital masculino e se localiza abaixo da bexiga. Produz parte do líquido seminal e também o PSA (Antígeno Prostático Específico).

O câncer de próstata é o sexto tipo mais comum no mundo. No Brasil, constitui-se numa das principais causas de morte por doença maligna (FERREIRA; NARDI, 1999).

Para a tentativa de se obter um diagnóstico precoce são indicados o exame clínico (toque retal) e a dosagem sérica do PSA. Os resultados podem sugerir a realização da biópsia prostática.

O toque retal é usado para avaliar a extensão local do tumor. No entanto, algumas lesões benignas podem simular o câncer, sendo que o toque normal também não exclui a presença da doença.

O PSA é um marcador tumoral desde 1986 e o nível de PSA é considerado normal de 0 a 4 ng/ml; levemente elevado entre 4 e 10 ng/ml; moderadamente elevado entre 10 e 20 ng/ml e altamente elevado para valores acima de 20 ng/ml.

Quanto maior o índice de PSA, maiores são as possibilidades de doença extra-prostática. Entretanto, somente o nível de PSA não é suficiente para determinar o estágio do tumor, pois há pacientes com mesmo PSA em estádios diferentes.

Embora o nível de PSA seja considerado normal de 0 a 4 ng/ml, estudos já mostraram que 22% dos homens com câncer de próstata frequentemente têm PSA entre 2,6 e 4 ng/ml (Zhu *et al*, 2005).

Com a realização da biópsia prostática o patologista pode distinguir tumor benigno de maligno e identificar o grau de diferenciação celular. No sistema de Gleason, que classifica a arquitetura glandular, os tumores são separados em 5 graus, sendo que o grau 1 representa as lesões menos agressivas e o grau 5 as mais agressivas.

A avaliação do estado clínico visa determinar a extensão da doença, a partir dos exames que descrevemos. O sistema TNM (tumor, nodo e metástase) é utilizado para indicar o estado clínico dos pacientes. A Tabela 1 descreve parte da classificação TNM, presente na edição publicada pelo INCA em 2004, que usamos no modelo.

Tabela 1: Estado Clínico do Câncer de Próstata - Tabela TNM.

Estágio	Descrição
T1a	Não palpável; 5% maligno
T1b	Não palpável; mais de 5% maligno
T1c	Identificado por biópsia
T2a	Palpável; envolve metade de um lobo
T2b	Palpável; envolve mais da metade de um lobo
T2c	Envolve ambos os lobos
T3a	Extensão extra-prostática

O estadiamento patológico avalia a extensão do tumor, que os especialistas classificam como: Localizado (câncer confinado na glândula); Localmente Avançado (câncer já além da próstata) e Metastático (tumor se espalhando pelo organismo).

1.1 Nomogramas para o Câncer de Próstata

O julgamento clínico, tradicionalmente, tem formado a base para as estimativas de riscos, aconselhamento de pacientes e tomadas de decisões. Entretanto, as pessoas têm dificuldades para prever resultados, devido às várias linhas e tendências que existem (STEPHENSON; KATTAN, 2006).

No caso do câncer de próstata, um dos problemas que o especialista enfrenta, após o diagnóstico, é estabelecer o estágio em que este se encontra para que possa administrar a terapia apropriada. O processo de tomada de decisão ocorre com base nos resultados dos exames já citados e, quando necessário, também com o auxílio dos nomogramas estatísticos de Stephenson e Kattan *et al.*

Kattan e colaboradores (2006) desenvolveram seus nomogramas - baseados no estado clínico do tumor, nível de PSA e grau de Gleason - que fornecem as probabilidades, para os diferentes estágios do tumor de próstata. O modelo estatístico de Kattan *et al.* foi construído a partir da análise de regressão logística modificada, restrita a splines cúbicos.

Contudo recorrer a nomogramas construídos em outros países constitui-se em um problema. Os nomogramas são elaborados de acordo com as características de uma determinada população, como localização geográfica, hábitos alimentares, fatores ambientais aos quais estão submetidos, além do próprio fator genético e da época em que vivem.

Um outro fato importante é que as variáveis utilizadas por Kattan *et al.* são variáveis incertas. Como vimos, o estado clínico é obtido pelo exame do toque retal, que depende da experiência e percepção do especialista. Por vezes a ultra-sonografia transretal é indicada como exame complementar, pois pode auxiliar na identificação de áreas suspeitas. Porém, esse procedimento também detecta nódulos intra-prostáticos de outra natureza, como: infarto prostático, cistos e áreas de fibrose (FERREIRA, NARDI; 1999).

Nos nomogramas os níveis de PSA são considerados nos intervalos < 4 , $(4, 10]$, $(10, 20]$, > 20 e, dessa forma, dois pacientes com níveis de PSA iguais a 10 e 10,1 ng/ml, com mesmo estado clínico e mesmo escore de Gleason, têm diferentes probabilidades de estar em um determinado estágio patológico. Já um paciente com nível de PSA igual a 20 ng/ml, tem a mesma probabilidade daquele com 10,1 ng/ml.

O grau de Gleason é atribuído por um patologista, após a análise de uma amostra do tumor, que pode ser bastante heterogêneo. Tem-se, portanto, um valor numérico preciso representando uma situação subjetiva.

Diante de todos esses fatores, ressaltamos a importância de se desenvolver um modelo matemático - e um software para apoiar os profissionais de urologia brasileiros - que combine os dados fornecidos pelos exames, para prever o estágio patológico do câncer de próstata.

A Lógica Fuzzy foi escolhida devido a sua capacidade de lidar com as incertezas envolvidas e atenuar a transição entre as classificações das variáveis do problema.

2 O Sistema Baseado em Regras Fuzzy - SBRF

Um sistema baseado em regras fuzzy - SBRF - é formado por quatro módulos principais: um módulo de fuzzificação, que representa as variáveis de entrada e saída, por conjuntos fuzzy; um módulo de inferência; uma base de regras e um módulo de defuzzificação, que transforma a saída em um valor numérico (BARROS; BASSANEZI, 2010).

No modelo fuzzy, as variáveis de entrada consideradas foram (SILVEIRA, 2007):

- *Estado Clínico*, linguisticamente classificado como T1, T2a, T2b, T2c e T3a, de acordo com o sistema TNM;
- *Nível de PSA* considerado Normal (até 4 ng/ml), Levemente Elevado (4-10 ng/ml), Moderadamente Elevado (10-20 ng/ml) e Altamente Elevado (acima de 20 ng/ml);
- *Escore de Gleason* classificado em Bem Diferenciado (graus 2, 3 e 4), Médio Diferenciado (grau 5), Médio-Baixo Diferenciado (grau 6), Pouco Diferenciado (grau 7) e Indiferenciado (graus 8, 9 e 10).

As funções de pertinências escolhidas para as variáveis de entrada foram trapezoidais.

Para a variável de saída Estádio da Doença foram atribuídos os termos linguísticos: Localizado, Localmente Avançado e Metastático. Trata-se de uma variável qualitativa e por isso foi escolhida uma escala de 0 a 1 para indicar a extensão da doença. Inicialmente foram utilizadas funções triangulares.

A base de regras fuzzy foi elaborada a partir de todas as diferentes combinações entre estado clínico, nível de PSA e escore de Gleason. Levamos em conta todos os termos linguísticos atribuídos às variáveis e todas as probabilidades presentes nos nomogramas de Stephenson e Kattan - para os diferentes estádios da doença - e ao todo foram construídas 285 regras. A seguir apresentamos um exemplo de construção de uma das regras:

Se estado clínico é T2a e nível de PSA é normal e escore de Gleason é 6, então estágio patológico é: localizado (0,51), localmente avançado (0,44) e metastático (0,05).

Os pesos que ponderaram as regras foram atribuídos conforme as probabilidades de ocorrência dos estádios.

O processo de inferência foi feito pelo Método de Mamdani e a defuzzificação pelo Método do Centro de Gravidade.

Simulações do modelo foram realizadas, com dados reais de pacientes do Hospital das

Clínicas da UNICAMP, utilizando as funções de pertinência da saída triangulares. Os resultados obtidos pelo SBRF representam a possibilidade (que foi transformada em probabilidade) de o paciente estar em cada um dos estádios do câncer.

Uma primeira análise dos resultados mostrou que estes estavam mais próximos dos apresentados nos nomogramas estrangeiros, do que da realidade clínica dos pacientes.

Diante disso, adaptamos as funções de pertinência que descrevem a saída do sistema. O método usado foi ajuste de curvas - método dos mínimos quadrados - nos pontos que representam as probabilidades de cada estágio, para várias amostras de pacientes.

Simulações de pacientes foram realizadas, utilizando as novas funções de pertinências da saída do sistema. Por exemplo, um paciente com estado clínico T2a, nível de PSA 4 (Normal) e grau de Gleason 6 (Médio-Baixo Diferenciado). As probabilidades determinadas pelo SBRF, de que o câncer de próstata esteja localizado, localmente avançado e metastático são, respectivamente, 75%, 25% e 0%. Já nos nomogramas de Kattan *et al*, referentes a esse quadro clínico, constam respectivamente as seguintes probabilidades: 64%, 34% e 2%.

Pode-se observar que a probabilidade para tumor localizado se elevou, enquanto que a probabilidade de estar localmente avançado decresceu e a de metástase reduziu-se a zero.

Na avaliação do especialista, os resultados obtidos com as funções de pertinências da saída do sistema adaptadas, mostraram-se de modo geral mais otimistas em relação ao estágio do câncer de próstata. Portanto, foram considerados mais coerentes com a realidade clínica enfrentada pelos pacientes brasileiros, quando comparados aos resultados fornecidos pelos nomogramas estrangeiros.

O modelo é mais abrangente, no sentido de que o médico pode avaliar, numa escala contínua, a variável Estado Clínico e a saída Estádio da Doença. Isso permite uma transição gradual entre os estádios e não uma transição abrupta, como ocorre se observarmos os nomogramas tradicionais.

Para analisar o poder discriminatório do modelo fuzzy, como um teste de diagnóstico, foi construída a curva ROC (*Receiver Operating Characteristic*). Os resultados foram publicados em (SILVEIRA *et al*, 2010).

3 O Software NFCP

Com o objetivo de auxiliar os especialistas no processo de tomada de decisão, em relação ao estadiamento patológico do câncer de próstata, um software foi desenvolvido a