



2º CONGRESSO BRASILEIRO DE P&D EM PETRÓLEO & GÁS

TÉCNICAS COMPUTACIONAIS PARA SOLUÇÃO DE PROBLEMAS DE TRANSPORTE TRIDIMENSIONAIS DE GRANDE PORTE

Denis A. F. de Souza¹, Alvaro L. G. A. Coutinho², Marcos A. D. Martins², José L. D. Alves¹

¹ Laboratório de Métodos Computacionais em Engenharia (LAMCE) - COPPE/UFRJ,
Caixa Postal 68552, Cep 21949-900, email: denis@lamce.ufrj.br, jalves@lamce.ufrj.br

² Núcleo de Atendimento em Computação de Alto Desempenho (NACAD) -
COPPE/UFRJ, Caixa Postal 68516, Cep 21945-970 email: alvaro@nacad.ufrj.br, marcos@nacad.ufrj.br

Resumo – Neste trabalho são apresentadas duas técnicas computacionais para aumentar o desempenho computacional do Método dos Elementos Finitos na solução da equação de transporte tridimensional, visando a viabilização de problemas de grande porte aplicados à indústria de óleo e gás. A primeira técnica é um algoritmo de integração no tempo Adaptativo Implícito/Explícito e a segunda uma migração da tradicional estrutura de dados por elementos para as arestas dos elementos, acelerando consideravelmente as multiplicações matriz-vetor inerentes ao solucionador de equações iterativo. Os resultados comprovam a agilidade computacional da metodologia adotada. Tais técnicas além de tornarem viáveis análises em modelos complexos, também podem ser extendidas a diversas outras aplicações, como por exemplo, o escoamento multifásico em meios porosos.

Palavras-Chave: Elementos Finitos; Algoritmos Implícito/Explícitos; Estrutura de Dados por Arestas

Abstract – This work presents two computational techniques to enhance the finite element solution of the three dimensional transport equation, hence the solution of large scale problems applied to the oil and gas industry become feasible. The first one is a Adaptive Implicit/Explicit time integration algorithm and the second a migration of the data structure from the traditional element by element to an edge-based one, which accelerates considerably the matrix-vector multiplications within the iterative solver. The results confirm the computational agility of the methodology addressed. Such techniques, besides making possible the analysis of complex models, can also be extended to several other applications, including for instance, multiphase flow in porous media.

Keywords: Finite Elements, Implicit/Explicit Algorithms, Edge-Based Data Structure

1. Introdução

A simulação computacional via Método dos Elementos Finitos (MEF) em aplicações da engenharia e da indústria de óleo e gás, é em muitos casos, limitada à capacidade computacional disponível. Para a solução de problemas complexos com geometria tipicamente tridimensional e distintas propriedades dos materiais no domínio, técnicas de computação de alto desempenho e otimização do código são necessárias para avaliação correta do fenômeno físico real, bem como a possibilidade de sua análise. A equação de transporte contemplando difusão e advecção é de grande aplicação na indústria de óleo e gás, como por exemplo, em processos de recuperação secundária e terciária, em análises térmicas ou em dispersão de poluentes/contaminantes.

Neste trabalho são descritas duas estratégias computacionais aplicadas ao MEF, visando uma otimização do custo computacional e também a viabilização de análises de grande porte em malhas não estruturadas de tetraedros. A primeira é um algoritmo de integração no tempo Adaptativo Implícito/Explícito (AIE) onde parte da malha é tratada como implícita e parte como explícita de acordo com a evolução da solução. Os métodos Implícito/Explícitos começaram a surgir nos anos 70, com a idéia de uma partição da malha de elementos finitos em dois grupos: o de elementos implícitos e o de explícitos. Diversos autores (Tezduyar, 1990; Tworzydło, 1992) estudaram e desenvolveram os algoritmos Adaptativos Implícito/Explícitos que nada mais são que, uma atualização de n em n passos de tempos das partições, sendo n um número inteiro definido como dado de entrada. Essa estratégia é muito eficiente em problemas de grande porte em malhas com propriedades de materiais relativamente distintas e elementos de tamanhos variados pois une a agilidade dos métodos explícitos com a robustez dos implícitos (Hughes, 1987). Diversos critérios podem ser adotados para escolha das partições, aqui adotaram-se dois critérios com a finalidade de se manter a estabilidade e precisão do método. É utilizado em conjunto um esquema Predictor/Multicorretor que permite o tratamento de possíveis não linearidades. A segunda estratégia computacional para aumentar o desempenho é uma migração da tradicional estrutura de dados por elementos por uma baseada nas arestas dos elementos. Tal modificação permite a realização das operações matriz-vetor inerentes ao solucionador iterativo GMRES (Saad, 1996) de maneira mais eficaz.

De maneira resumida, a metodologia proposta é a união das duas estratégias em conjunto visando a solução de problemas de grande porte. Resultados mostram uma vantagem computacional considerável em relação a abordagem tradicional com um algoritmo totalmente implícito e operações matriz-vetor elemento por elemento.

Na seção 2 será descrito o problema modelado e a equação governante do problema de transporte bem como sua discretização espacial pelo MEF. As técnicas de otimização computacional adotadas são descritas na seção 3. Em 3.1 é apresentado o algoritmo Adaptativo Implícito/Explícito como uma alternativa para integração temporal. Na seção 3.2 é discutida a estrutura de dados por arestas e suas particularidades. Finalmente, na Seção 4 é apresentado um exemplo numérico, com resultados satisfatórios, seguido das conclusões.

2. Problema Modelado

Apesar da grande aplicabilidade da equação de transporte a diversos de problemas aplicados à indústria, sua utilização aqui é restringida ao caso de injeção em reservatórios de petróleo, visando a simulação de processos de recuperação. É considerada a equação do transporte em um domínio $\Omega \subset \mathcal{R}^3$ em um intervalo de tempo T , como segue,

$$\phi \frac{\partial u}{\partial t} + \boldsymbol{\beta} \cdot \nabla u - \nabla \cdot \mathbf{D} \nabla u = f \quad em \quad \Omega \times [0, T] \quad (1)$$

onde u é o campo escalar que representa a concentração da quantidade sendo transportada, ϕ a porosidade do reservatório, $\boldsymbol{\beta}$ o campo de velocidades, \mathbf{D} o tensor de dispersão/difusão e f o termo fonte/sumidouro. Empregando a discretização espacial de elementos finitos, contemplando as técnicas de estabilização SUPG (Brooks e Hughes, 1982), para solução adequada de problemas predominantemente advectivos, e CAU (Galeão e Do Carmo, 1988) para a captura de choques/descontinuidades, a equação diferencial de (1) é então aproximada por um sistema não linear de equações diferenciais ordinárias, representado pela equação semi discreta

$$\mathbf{M}\dot{u} + \mathbf{K}u = \mathbf{F} \quad (2)$$

onde \mathbf{M} e \mathbf{K} são as matrizes de coeficientes e \mathbf{F} o vetor contemplando condições de contorno e termos fonte/sumidouro. Um algoritmo Adaptativo Implícito/Explícito Predictor/Multicorretor (Souza, 2002) pode ser adotado para solução de (2) no tempo considerando possíveis não linearidades. É importante ressaltar que neste trabalho o problema é não linear apenas devido ao termo do operador CAU, contudo em diversos fenômenos como o caso da simulação de reservatórios, as análises são fortemente não lineares.

3. Técnicas de Otimização Computacional

São consideradas duas técnicas para acelerar a eficiência computacional na solução do problema a serem descritas nas seções 2.1 e 2.2.

3.1. Algoritmo Adaptativo Implícito/Explícito

Os métodos conhecidos como Implícito/Explícitos têm a idéia de partição da malha de elementos finitos em dois grupos: o de elementos implícitos (I); e o de explícitos (E). A escolha dessas partições pode ser feita de diversas maneiras com o propósito de melhor representar o fenômeno físico modelado. Diversos autores (Tezduyar, 1990; Tworzydło, 1992) estudaram e desenvolveram os algoritmos Adaptativos Implícito/Explícitos que nada mais são que, uma atualização de n em n passos de tempo das partições, sendo n um número inteiro definido como dado de entrada. Neste trabalho, foram adotados dois critérios para seleção das partições. O primeiro trata implicitamente os elementos com variação acentuada na solução, ou seja, com alto gradiente relativo, mantendo-se a precisão dos resultados, como segue,

$$\text{se } \|\mathbf{grad}^e\| \geq \eta \text{grad}_m \text{ então } e \in I \quad (3)$$

onde

$$\text{grad}_m = \frac{\sum_{e=1}^{NEL} \|\mathbf{grad}^e\|}{\sqrt{NEL}} \quad (4)$$

η é um parâmetro de controle no intervalo $[0,1]$ e NEL o número de elementos da malha.

Segundo, respeitar a condição de CFL (ou número de *Courant*) tratando implicitamente elementos com CFL^e maior que a unidade, preservando a estabilidade do algoritmo explícito de integração no tempo, de modo que,

$$\text{se } CFL^e = \frac{\|\boldsymbol{\beta}^e\| \Delta t}{\phi^e h^e} > 1.0 \text{ então } e \in I \quad (5)$$

onde Δt é o passo de tempo e h^e um parâmetro da malha.

O esquema de integração no tempo resultante para a partição explícita é,

$$\mathbf{M}_L \dot{\mathbf{u}}_{n+1} = \mathbf{F}_{n+1} \quad (6)$$

onde \mathbf{M}_L é a matriz de massa diagonal, resultando em um sistema de equações algébricas de solução trivial. O esquema para partição implícita é,

$$\mathbf{M}^* \dot{\mathbf{u}}_{n+1} = \mathbf{F}_{n+1} \quad (7)$$

onde a matriz de massa efetiva \mathbf{M}^* é uma combinação linear de \mathbf{M} e \mathbf{K} , como segue.

$$\mathbf{M}^* = (\mathbf{M} + \alpha \Delta t \mathbf{K}) \quad (8)$$

O parâmetro α é adotado igual a 0.5, representando o método implícito de integração no tempo da regra trapezoidal (Hughes, 1987). O sistema efetivo (7) é resolvido pelo solucionador iterativo GMRES (Saad, 1996) com pré-condicionador diagonal para matrizes de coeficientes não simétricas, podendo utilizar uma abordagem tradicional elemento por elemento e também uma otimização por arestas, como a ser descrito a seguir.

3.2. Estrutura de Dados por Arestas

A estrutura de dados por arestas para o MEF surgiu em aplicações da mecânica dos fluidos computacional para malhas não-estruturadas de triângulos e tetraedros (Peraire *et al.*, 1992; Luo *et al.*, 1994). Largamente estudada por Löhner (1994; 2001; 2002), a estrutura de dados por arestas se mostrou muito eficiente na solução de sistemas de equações de grande porte utilizando métodos iterativos. Tais métodos exigem a realização de operações matriz-vetor, as quais, são o maior custo da solução total por elementos finitos. A simples troca dos cálculos dos elementos pelas arestas

chega a reduzir em até 50 % o tempo de processamento de uma análise (Martins *et al.*, 2001; 1998; Coutinho *et al.*, 2001). A utilização de agrupamentos de arestas denominados *superedges* (Löhner, 1994) melhora ainda mais o desempenho computacional. A utilização da estrutura de dados por arestas tem uma sobrecarga para a geração das arestas e montagem das matrizes das arestas, contudo essa perda em tempo de processamento é irrelevante frente à aceleração alcançada nas operações matriz-vetor. Portanto, a escolha da estrutura de dados por arestas se justifica, uma vez que problemas de grande porte estão sendo tratados e é feita uma avaliação de sua utilização em união com o algoritmo de integração no tempo AIE, já descrito na seção anterior, onde a utilização da estrutura de dados por arestas acelera a solução da partição implícita. A seguir é apresentado um exemplo numérico para avaliação do desempenho computacional da metodologia proposta.

4. Exemplo Numérico

Foi escolhido, para avaliação computacional da metodologia proposta, um exemplo de injeção contínua de água em um reservatório de petróleo com um poço injetor central e quatro produtores nos cantos, em um domínio de 1200x2200x170 pés. O domínio foi dividido respectivamente em 60x220x85 células, onde os dados para cada célula bem como a descrição do problema estão em (Christie, 2001) e na internet (www.spe.org/csp/). Os dados do exemplo foram extraídos do *10th spe comparative solution project* que visa a simulação de reservatórios. Contudo, os dados foram utilizados para tratar o problema de injeção contínua. Como o programa desenvolvido é baseado em elementos tetraédricos, cada célula foi dividido em 5 tetraedros gerando uma malha com mais de 5 milhões elementos. Note que, com a tecnologia atual, este problema demanda recursos de computação de alto desempenho. Deste modo, foi feito um modelo reduzido agrupando-se os blocos em 5 níveis de *upscaling* das propriedades, empregando-se a técnica da média harmônica. O modelo reduzido, dividido em 12x44x17 blocos com 5 tetraedros cada, resultou em uma malha utilizada para testes e aferição de desempenho computacional em arquiteturas *cache based* (PC's). Detalhes das malhas dos modelos completo e reduzidos se encontram na Figura 1. Os dados de porosidade e permeabilidades para o modelo idealizado se encontram na Figura 2. Os coeficientes de dispersão/difusão foram estimados em função das permeabilidades segundo (Loula *et al.*, 1995). O campo de velocidades adotado foi estimado a partir de uma análise permanente da pressão e posterior avaliação das velocidades nos elementos pela Lei de Darcy (Aziz, 1979). Apesar de simplificada, esta hipótese aqui não se faz relevante, pois o desempenho computacional é o objetivo. Foi adotado um passo de tempo constante de 0.1 para a simulação de 5000 passos de tempo. Para o método iterativo GMRES foram adotados um total de 20 vetores na base de *Krylov* e uma tolerância de 10^{-2} . As iterações da multicorreção foram limitadas em 3 com uma tolerância de 10^{-1} . O parâmetro de controle η foi fixado em 0.1 e as atualizações das partições de 10 em 10 passos de tempo. Note que todas as unidades são coerentes e por isso foram omitidas.

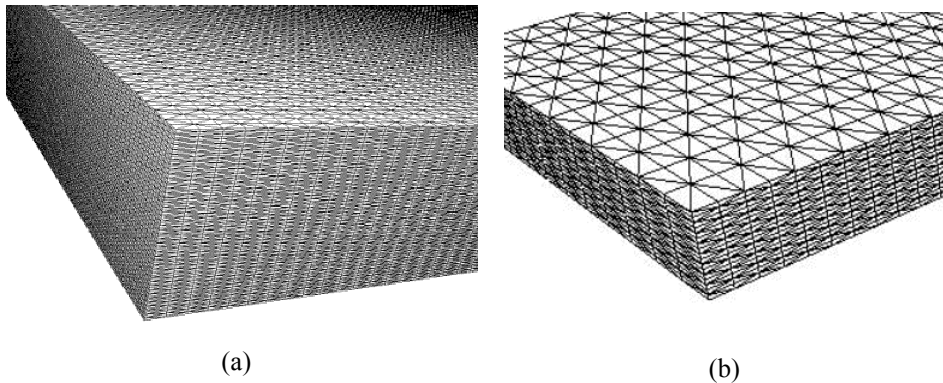


Figura 1. Detalhes das malhas de elementos finitos: (a) modelo completo com 5 610 000 elementos e 1 159 366 nós; (b) modelo reduzido com 44 880 elementos e 10 530 nós

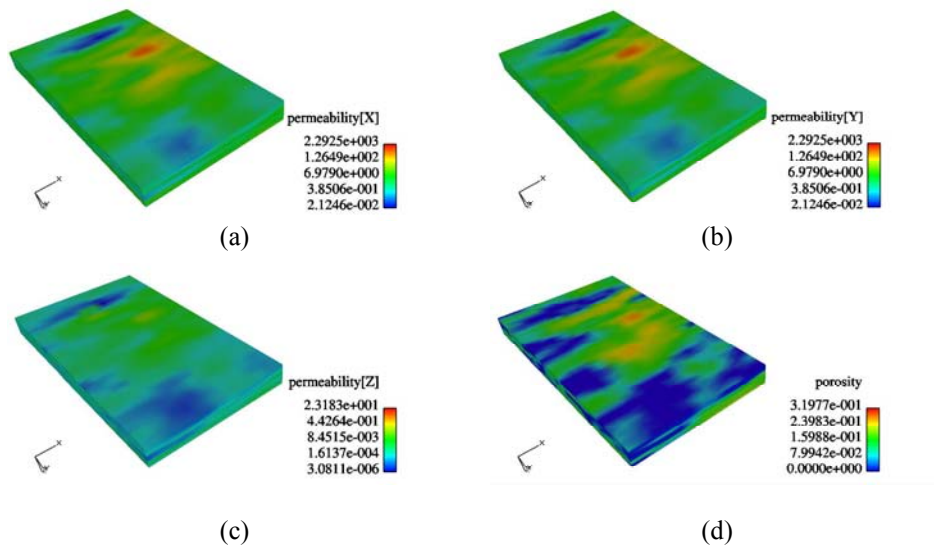


Figura 2. Propriedades dos materiais do modelo reduzido: (a) permeabilidade em x; (b) permeabilidade em y; (c) permeabilidade em z; (d) porosidade

O desempenho computacional tanto do algoritmo AIE, bem como da estrutura de dados por arestas já se mostram significantes quando comparados a um tratamento tradicional totalmente implícito elemento por elemento. A união do algoritmo AIE aresta por aresta se mostrou ainda mais rápido como se pode observar na Tabela 1.

Tabela 1. Comparação entre abordagens

Abordagem	Tempo relativo
Totalmente Implícito por elemento	1.000
AIE por elemento	0.892
Totalmente Implícito por aresta (<i>superedges</i>)	0.889
AIE por aresta (<i>superedges</i>)	0.851

5. Conclusões

Foi apresentada uma implementação de um algoritmo AIE em conjunto com uma estrutura de dados por arestas (*superedges*) para solução de problemas de transporte tridimensionais e de grande porte para malhas não estruturadas de tetraedros para o MEF. A vantagem de cada estratégia em separado foi avaliada e ambas se mostraram capazes de reduzir o tempo de processamento das análises. A utilização conjunta das duas estratégias teve um desempenho ainda melhor, pois chegou a reduzir o tempo da análises em 15 %, quando comparado a um programa com abordagens tradicionais. É importante ressaltar que a união das metodologias requer um percentual mínimo de elementos implícitos para se tornar uma alternativa interessante. Mais além, estas técnicas computacionais aplicadas ao MEF podem ser estendidas a diversas aplicações tais como Mecânica do Sólidos Computacional, Mecânica dos Fluidos Computacional e em especial no caso de escoamentos multifásicos em meios porosos. Como etapa futura, está prevista a análise do modelo completo, ou seja, uma malha com mais de 5.5 milhões de tetraedros, no supercomputador CRAY SV1 da COPPE, para verificação de taxas de vetorização e paralelização do código, novas tomadas de tempo e obtenção de resultados mais realistas do fenômeno modelado.

6. Agradecimentos

Os autores agradecem à Agência Nacional do Petróleo (ANP) e em especial ao PRH02 pelo apoio financeiro, indispensável no desenvolvimento deste trabalho.

7. Referências

AZIZ, K., SETTARI, A., *Petroleum Reservoir Simulation*, Elsevier Applied Science Publishers, 1979.

- BROOKS, A. N., HUGHES, T. J. R., Streamline upwind/Petrov-Galerkin formulation for convection dominated flows with particular emphasis on the incompressible Navier-Stokes equations, *Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering*, v. 32, pp. 199-259, 1982.
- CHRISTIE, M. A., Tenth SPE comparative solution project: a comparison of upscaling techniques, SPE 66599, 2001.
- COUTINHO, A. L. G. A., MARTINS, M. A. D., ALVES, J. L. D., *et al.*, Edge-based finite element techniques for non-linear solid mechanics problems. *Int. J. Num. Meth. Eng.* v 50 (9), pp. 2053-2068, 2001.
- GALEÃO, A. C., CARMO, E. G. D., A consistent approximate upwind Petrov-Galerkin method for convection-dominated problems, *Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering* v. 68, pp. 83-95, 1988.
- HUGHES, T. J. R., *The Finite Element Method – Linear static and dynamic finite element analysis*, Englewood Cliffs, NJ, Prentice-Hall, 1987.
- LÖHNER, R., Edges, stars, superedges and chains, *Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering*, Vol. 111, pp. 255-263, 1994.
- LÖHNER, R., *Applied CFD techniques – an introduction based on finite element methods*, John Wiley & Sons, 2001.
- LÖHNER, R., GALLE, M., Minimization of indirect addressing for edge-based field solvers”, *Comm. Num. Meth. Engng.*, v.18 , pp. 335-343, 2002.
- LOULA, A. F. D., GUERREIRO, J. N. C., RIBEIRO, L. F. B., LANDAU, L., Tracer injection simulations by finite element method, SPE 27047, v. 4, n. 1, pp. 150-156, 1995.
- LUO, H., BAUM, J. D., LÖHNER, R., Edge-based finite element scheme for the euler equations, *AIAA Journal*, 32 (6), pp. 1183-1190, 1994.
- MARTINS, M. A. D., COUTINHO, A. L. G. A., ALVES, J. L. D., Parallel iterative solution of finite element systems of equations employing edge-based data structures, 8th SIAM Conference on Parallel Processing for Scientific Computing, Editors, M. Heath *et al.*, 1997.
- MARTINS, M. A. D., ALVES, J. L. D., COUTINHO, L. G. A., Parallel edge-based finite element techniques for Nonlinear solid mechanics. *Lecture Notes in Computer Sciences* v. 1981, pp. 506-518, 2001.
- PERAIRE, J., PEIRO, J., MORGAN, K., A 3d finite element multigrid solver for the euler equations, *AIAA Paper* 92-0449, 1992.
- SAAD, Y., Schultz, M. H., GMRES: Generalized minimal residual algorithm for solving non-symmetric systems. *SIAM Journal of Scientific and Statistical Computing*, v. 7, pp. 856-869, 1996.
- SOUZA, D. A. F., Edge-based adaptive implicit/explicit algorithm for three dimensional transport problems, COPPE/UFRJ, M. Sc. Thesis, 2002.
- TEZDUYAR, T. E., LIOU, J., Adaptive implicit-explicit finite element algorithms for fluid mechanics problems, *Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering*, v. 78, pp. 165-180, 1990.
- TWORZYDLO, W. W., ODEN, J. T., THORNTON, E. A., Adaptive implicit/explicit finite element methods for compressible viscous flows, *Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering*, v. 95, pp. 397-440, 1992.