

ANÁLISE DE ESCOAMENTOS
BI-FÁSICOS INCOMPRESSÍVEIS IMISCÍVEIS PELO MÉTODO DOS
ELEMENTOS FINITOS NO CRAY Y-MP2E/232

Alvaro L.G.A. Coutinho, José L.D. Alves e Nelson F.F. Ebecken

Núcleo de Computação Paralela
COPPE/Universidade Federal do Rio de Janeiro
Rio de Janeiro - RJ - 21945-970, Brasil
e-mail: alvaro@coc.ufrj.br

RESUMO

Este trabalho apresenta medições de desempenho de um código para a análise de escoamentos bi-fásicos incompressíveis imiscíveis pelo Método dos Elementos Finitos no supercomputador CRAY Y-MP 2E/232. O código foi validado através da utilização intensiva de ferramentas de visualização científica e todas as medições de desempenho efetuadas alcançaram taxas superiores a 100 Mflops.

ABSTRACT

This work presents performance measurements of a finite element code for the analysis of two-phase immiscible incompressible flows on the CRAY Y-MP 2E/232 supercomputer. Results were validated through intensive utilization of scientific visualization tools and the performance measurements indicated that such code always run above 100 Mflons.

1. Introdução

Este trabalho tem por objetivo relatar as medições de desempenho no supercomputador CRAY-Y-MP 2E/232 instalado no Centro Nacional de Supercomputação da UFRGS, de um código computacional para análise de escoamentos bi-fásicos incompressíveis imiscíveis em meios porosos pelo Método dos Elementos Finitos, especialmente projetado para máquinas de alto desempenho. Problemas desta natureza possuem um interesse especial para a indústria petrolífera onde tais modelos matemáticos são utilizados para a descrição de processos de recuperação secundária de óleo em reservatórios [1, 2]. O código desenvolvido faz uso das estratégias computacionais mais modernas para Dinâmica dos Fluidos Computacional.

O presente trabalho encontra-se organizado da seguinte forma. A Seção seguinte apresenta uma descrição sucinta do modelo computacional desenvolvido. A Seção 3 apresenta os experimentos numéricos realizados, onde se pode observar os resultados de validação do código computacional através da utilização intensiva de ferramentas de visualização científica. A Seção 4 relata as medições de desempenho efetuadas em algumas análises selecionadas, onde observou-se taxas superiores a 100 Mflops. Finalmente na última Seção encontram-se sumarizadas as principais conclusões deste trabalho.

2. Descrição do Modelo Computacional

As equações de conservação de massa e momentum para escoamentos multifásicos particularizadas para o caso de escoamentos bifásicos incompressíveis imiscíveis conduzem a um conjunto acoplado de equações diferenciais parciais não lineares, cujas principais incógnitas são a velocidade total de Darcy, a pressão total do fluido e a saturação de uma fase, sendo usual quando as fases são água e óleo o emprego da saturação de água. Uma descrição completa deste modelo matemático e sua justificação encontram-se na Ref. [3].

O escoamento associado a este modelo é de natureza dual, isto é, as variações de pressão são transmitidas rapidamente, enquanto que a água injetada move-se mais lentamente. De fato, como consequência da incompressibilidade dos fluidos temos que a pressão possui um comportamento puramente elíptico, enquanto que a saturação possui um comportamento parabólico-hiperbólico, apresentando gradientes acentuados e camadas limites.

Sendo assim, métodos numéricos para a solução de problemas desta natureza devem tratar adequadamente as não-linearidades e suprimir as oscilações espúrias que podem

ocorrer na vizinhança das frentes de saturação. Tradicionalmente os simuladores de reservatórios são baseados em aproximações de diferenças finitas e em esquemas explícitos para a integração no tempo do sistema resultante de equações não-lineares.

Diversas formulações de elementos finitos foram tentadas no passado [4, 5] porém atualmente as de maior sucesso são primeiramente, aquela que se baseia em uma técnica de partição do operador, onde a equação da saturação é tratada pelo método modificado das características e os campos de pressão e velocidades são obtidos com o mesmo grau de precisão, através da utilização de um método misto [6], ou, uma formulação totalmente implícita onde tanto a pressão como a saturação empregam espaços de mesma ordem e as oscilações espúrias são controladas através de uma técnica de estabilização do tipo Petrov-Galerkin [7].

Do ponto de vista computacional, as principais críticas a estes modelos são, no primeiro caso, a dificuldade de implementação do método modificado das características aliado à dificuldade de solução do sistema de equações resultante do método misto. No segundo caso, os maiores problemas advêm da solução do sistema de equações não-lineares e não-simétrico resultante do processo de discretização. Este sistema, não é dimensionalmente homogêneo (envolve graus de liberdade de pressão e saturação) e tem obviamente o dobro de incógnitas.

O modelo desenvolvido no Programa de Engenharia Civil da COPPE/UFRJ baseia-se numa estratégia segregada, onde a equação da pressão é discretizada através do Método de Galerkin e, a velocidade total é obtida através de uma técnica de pós-processamento superconvergente, a partir dos gradientes de pressão [8]. A equação da saturação é discretizada através da formulação de Petrov-Galerkin com difusão ao longo das linhas de corrente (SUPG) com operador de captura de descontinuidade [9, 10], de forma a tratar adequadamente os termos altamente convectivos. Uma vantagem deste enfoque é que a pressão, velocidade e a saturação são aproximadas com elementos de mesma ordem, no caso triângulos lineares.

O método de avanço no tempo é essencialmente um algoritmo bloco-iterativo preditor-multicorretor, onde soluciona-se em primeiro lugar a equação da pressão usando o método dos gradientes conjugados preconditionado, em seguida atualiza-se o campo de velocidades para finalmente solucionar-se a equação da saturação, que é não-simétrica, através do método do resíduo mínimo generalizado (GMRES) também se valendo de uma técnica de preconditionamento. Continuam-se as iterações por bloco até que as tolerâncias de pressão, saturação, balanço de fluxos e energia sejam satisfeitas. Deve-se salientar aqui que esta estratégia envolve a solução de dois

sistemas de equações, um simétrico e o outro não-simétrico, através de técnicas iterativas adequadas. Estas são do tipo elemento-por-elemento, cujas vantagens principais são que tanto a construção dos preconditionadores e avaliação dos resíduos são mantidas a nível de elemento, evitando a formação e atualização de matrizes Jacobianas. Este enfoque é particularmente eficiente em máquinas dotadas de capacidade de vetorização (e eventualmente paralelização). Entretanto, de forma a se evitar uma dependência de dados intrínseca ao método dos elementos finitos, deve-se reestruturar-se os cálculos a nível de elemento, efetuando-os numa nova ordem, diferente da natural, fornecida através da utilização de um algoritmo de coloração de malhas. Para maiores detalhes destas técnicas, sugere-se as Refs. [11-13].

Um outro ponto importante é a seleção do passo de tempo. O código desenvolvido possui um método de seleção adaptativo do passo de tempo baseado na utilização de um controlador proporcional padrão. Através de estimativas do erro cometido nas principais variáveis (pressão, saturação e derivada no tempo da saturação) em cada instante o próximo passo de tempo é selecionado.

3. Descrição dos Experimentos Numéricos

O problema teste mais comum em simulação de reservatórios para a avaliação de esquemas numéricos é o chamado arranjo de cinco-poços. Este, conforme mostrado na Figura 1 é um arranjo infinito de poços de injeção e produção, onde cada poço injetor é circundado por quatro produtores. Entretanto, devido à dupla simetria existente, é usual analisar-se este problema na configuração diagonal ou paralela, de acordo com a Figura 1. No presente trabalho adotou-se a configuração diagonal, em um domínio quadrado de lado unitário. Os demais dados, ou sejam, mobilidades da água e óleo, função de fluxo fracional, coeficiente de difusão, permeabilidade, porosidade, etc., são aqueles fornecidos por Dahle et al [14]. Entretanto, diferentemente das Refs. [6, 14] não foi desprezado o acoplamento entre os campos de pressões, velocidades e saturação. A condição inicial para a equação da saturação foi de saturação de água unitária no poço injetor. Todas as análises compreenderam um período de tempo correspondente à injeção de um volume poroso. Como usual, o tempo será medido como a razão entre o volume total injetado e o volume poroso total.

Considerando-se primeiramente uma malha consistindo de 3200 triângulos foram efetuadas diversas análises, inicialmente com passo fixo, com intuito de se verificar o maior intervalo de tempo para o qual a solução era estável. Os resultados numéricos indicam que os valores máximos do passo de tempo são 1.25×10^{-3} volumes porosos injetados (PVI) para o algoritmo bloco-iterativo e 0.25×10^{-3}

PVI para uma versão simplificada do mesmo onde efetua-se apenas 1 iteração por passo de tempo. Estes valores, bastante pequenos, se devem principalmente à necessidade de modelagem da formação e posterior estabelecimento do choque nos instantes iniciais da análise.

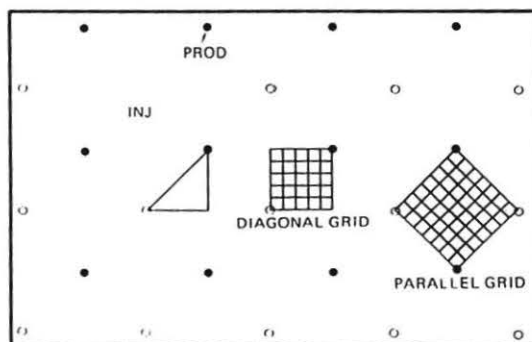


Figura 1 - Problema de Cinco-Poços.

Em seguida foram efetuadas diversas análises visando-se calibrar os mecanismos de controle adaptativo do passo de tempo. De forma geral, os resultados foram no mínimo 2 vezes mais rápidos, tendo sido observado um ganho máximo em torno de 5. O valor máximo admitido para o intervalo de tempo foi de 25×10^{-3} PVI, valor este sempre atingido.

A Figura 2 mostra a malha utilizada e as curvas de iso-saturação de água para um instante em torno de 0.25 PVI. A Figura 3 mostra uma elevação da distribuição de saturação de água no mesmo instante. Cabe salientar aqui que estas figuras foram produzidas utilizando-se as facilidades do Laboratório de Visualização do CESUP. Foi utilizado o software MPGS da CRAY Research Inc., e foram gerados arquivos de interface no formato MOVIE.BYU, permitindo inclusive a animação de uma seqüência de quadros semelhante àquele da Figura 3.

Uma vez que as soluções obtidas com a malha anterior ainda apresentavam pequenas oscilações ao pé da frente de saturação de água, foram efetuadas uma outra série de análises em um modelo mais-refinado, contendo 12800 triângulos. Foram repetidas as análises anteriores, porém observou-se um ganho ainda maior quando da utilização da estratégia adaptativa do passo de tempo, cujo ganho máximo sobre uma solução com passo fixo foi de aproximadamente 10.

A Figura 4 mostra a malha refinada utilizada e as curvas de iso-saturação de água para um instante em torno de 0.25 PVI. Comparando os resultados desta Figura com os anteriores, pode-se notar que já praticamente não existem oscilações. A Figura 5 mostra uma elevação da distribuição de saturação de água para um instante em torno de 0.50 PVI, enquanto que a Figura 6 apresenta uma outra vista do mesmo instante onde pode-se observar a presença de um gradiente de saturação de água extremamente elevado. Para a produção destas figuras e a correspondente seqüência animada foram utilizados os mesmos recursos disponíveis.

4. Medição de Desempenho

O código desenvolvido foi projetado inicialmente para o computador IBM 3090/VF, utilizando-se a linguagem FORTRAN e valendo-se de técnicas de programação e algoritmos adequados à esta arquitetura [11-13]. O código foi então migrado para o CRAY/Y-MP, tarefa esta realizada com relativa facilidade, envolvendo basicamente a supressão de variáveis de precisão dupla e a especificação de diretivas de compilação para ignorar a dependência de dados (CDIR\$IVDEP) equivalentes àquelas usadas no sistema IBM. Cabe salientar que a utilização destas é necessária à vetorização total do código, uma vez que a dependência de dados realmente inexistente, devido à reordenação dos elementos pelo algoritmo de coloração de malhas. Não foi efetuado nenhum esforço adicional de otimização do código para o CRAY Y-MP. As medições de desempenho foram realizadas utilizando-se algumas das facilidades disponíveis no UNICOS, flowview e perfview. Para tanto, foram selecionadas 3 análises, descritas a seguir:

- i) Malha 3200 elementos - passo fixo = 0.25×10^{-3} PVI - número máximo de elementos em cada cor = 64

Ferramenta utilizada - flowview

Sumário da análise:

- Número de passos de tempo = 4000
- Número Médio de Bloco-Iterações
por passo de tempo = 3.899
- Número Médio de Iterações
GMRES por solução de sistema = 5.138
- Número Médio de Iterações
PCG por solução de sistema = 1.695
- CPU = 808.647 s
- Memória = 694377 palavras
- Utilização da Máquina = 45.7% de 2-CPU's

O resultado do flowview encontra-se na Figura 7, onde pode-se verificar que a rotina TRIA2D ocupa a maior parte do tempo da análise. De forma a esclarecer qual é a função das 5 principais rotinas apontadas no flowview, estas são descritas de forma sucinta abaixo:

- . TRIA2D- cálculo e atualização das matrizes dos elementos para a equação da saturação;
- . LOCAL- mapeamento local/global de informações (gather/scatter);
- . MATVEC- produto matriz-vetor elemento-por-elemento;
- . POSVEL- cálculo do campo de velocidades;
- . TRIP2D- cálculo e atualização das matrizes dos elementos para a equação da pressão.

Deve-se salientar que todas as rotinas acima possuem seus loops vetorizados.

- ii) Malha 3200 elementos - passo variável - malha subdividida em 8 cores (537 + 530 + 519 + 513 + 496 + 474 + 94 + 37) - ferramenta de análise - perfview.

Sumário da análise:

- Número de Passos de tempo = 795
- Número Médio de Bloco Iterações
por passo de tempo = 3.128
- Número de Soluções de Sistemas
lineares não-simétricos = 2487
- Número Médio de Iterações
GMRES por Solução de Sistema = 4.058
- Número de Soluções de Sistemas
lineares simétricos = 872
- Número Médio de Iterações
PCG por solução de sistema = 4.056
- CPU = 107.238 s
- Memória = 694377 palavras
- Utilização da máquina = 49.7% de 2 CPU's.

O resultado do perfview indica que o código aparenta ser eficientemente vetorizado, atingindo em média 104.2 Mflops. As cinco rotinas apontadas anteriormente continuam sendo responsáveis por 79% do tempo de processamento, com destaque para a rotina TRIA2D com 45.6% do tempo total, atingido 128.3 Mflops. Entretanto, a rotina LOCAL, apesar de possuir seus loops vetorizados alcançou apenas 12.6 Mflops. Isto se deve ao número excessivo de vezes em que esta rotina é chamada,

sendo recomendado no perfview que esta rotina seja incorporada àquelas que a utilizam (in-lining). Pode-se observar também que todas as rotinas de cálculo atingiram taxas acima de 110 Mflops.

- iii) Malha 12800 elementos - passo variável - malha subdividida em 8 cores - ferramenta de análise - perfview.

Sumário da análise:

- Número de Passo de Tempo = 1982
- Número Médio de Bloco Iterações
por passo de tempo = 3.294
- Número de Soluções de Sistemas
lineares não-simétricos = 6529
- Número Médio de Iterações
GMRES por Solução de Sistema = 4.144
- Número de Soluções de Sistemas
lineares simétricos = 2185
- Número Médio de Iterações
PCG por solução de sistema = 3.690
- CPU = 1038.874 s
- Memória = 969639 palavras
- Utilização da máquina = 49.5% of 2 CPU's.

Nesta análise foi atingida uma taxa de 112.4 Mflops. As rotinas apontadas anteriormente continuam responsáveis pela maior parte do processamento, mantendo a mesma ordem. Entretanto, foi observado um aumento sensível nas taxas de Mflops, como por exemplo, na rotina MATVEC que saltou de 146.8 Mflops para 170.7 Mflops.

5. Conclusões

Diversas conclusões surgiram ao longo do presente trabalho. Inicialmente a premissa inicial de desenvolvimento do código, qual seja, uma estrutura de dados e seleção de algoritmos tendo em vista a utilização de uma CPU vetorial mostrou-se adequada, gerando um código eficiente. Apesar deste ter sido desenvolvido e testado inicialmente em ambientes IBM, sua migração foi simples, restringindo-se apenas à compatibilização dos respectivos dialetos FORTRAN. Todas as medições de desempenho indicaram taxas acima de 100 Mflops, cabendo salientar que todas as rotinas envolvendo cálculos foram vetorizadas. É evidente que se mais um ciclo de otimização específico para o CRAY Y-MP fosse realizado poderíamos observar ganhos

significativos. Mas é claro que tal ciclo poderia comprometer a portabilidade do código. Mais importante talvez, seria a introdução de modificação permitindo o processamento paralelo.

Por outro lado, de importância fundamental foi o uso dos recursos de visualização disponíveis nas estações gráficas de alto desempenho do Laboratório de Visualização do CESUP Estas, com seu recursos de animação de fácil utilização e aprendizado, permitem ao engenheiro um ponto de vista extremamente rico para a análise de seus problemas.

6. Agradecimentos

Gostaríamos de agradecer ao Prof. A.G.Grohes do Curso de Pós-Graduação em Engenharia Civil da UFRGS, a Sra. D.G. Ewald do CESUP/UFRGS e a todo o pessoal de suporte do CESUP/UFRGS. Esta pesquisa foi financiada pelo CNPq, através do projeto 461559/92-7.

7. Referências

- [1] K. Aziz and A. Settari, " Petroleum Reservoir Simulation", Applied Science Publishers, 1979.
- [2] R.E. Ewing. "The Mathematics of Reservoir Simulation", SIAM, Philadelphia, 1983.
- [3] G. Chavent e J. Jaffre, "Mathematical Models and Finite Elements for Reservoir Simulation", North Holland, Amsterdam, 1986.
- [4] A. Spivak, H.S. Price e A. Settari, "Solution of the Equations for Multidimensional, Two-Phase, Immiscible Flow by Variational Methods", Society of Petroleum Engineers Journal, Vol. 17, pp. 27-41, 1977.
- [5] R.W. Lewis, K. Morgan e K.H. Johnson, "A Finite Element Study of Two-Dimensional Multiphase Flow with Particular Reference to the Five-Spot Problem", Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering, Vol. 44, pp. 17-47, 1984.
- [6] H.K. Dahle, M.S. Espedal e O. Saevareid, "Characteristic, Local Grid Refinement Techniques for Reservoir Flow Problems", International Journal for Numerical Methods in Engineering, Vol. 34, pp. 1051-1069, 1992.

-
- [7] H.P. Langtangen, "Implicit Finite Element Methods for Two-Phase Flow in Oil Reservoirs", *International Journal for Numerical Methods in Fluids*, Vol. 10, pp. 651-681, 1990.
- [8] O.C. Zienkiewicz and J.Z. Zhu, "The Superconvergent Patch Recovery and a-Posterior Error Estimates. Part 1: The Recovery Techniques", *International Journal for Numerical Methods in Engineering*, Vol. 33, pp. 1131-1364, 1992.
- [9] A.N. Brooks e T.J.R. Hughes, "Streamline Upwind/ Petrov-Galerkin Formulations for Convection Dominated Flows with Particular Emphasis on the Incompressible Navier-Stokes Equations", *Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering*, Vol. 32, pp. 199-259, 1982.
- [10] G.J. Le Beau e T.E. Tezduyar, "Finite Element Computation of Compressible Flows with the SUPG Formulations", *Army High Performance Computing Research Center, AHPCRC Preprint 91-44*, 1991.
- [11] A.L.G.A. Coutinho, J.L.D. Alves, N.F.F. Ebecken e L.M. Troina, "Conjugate Gradient Solution of Finite Element Equations on the IBM 3090 Vector Computer Utilizing Polynomial Preconditionings", *Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering*, Vol. 84, pp. 129-145, 1990.
- [12] A.L.G.A. Coutinho, J.L.D. Alves e N.F.F. Ebecken, "A Study of Implementation Schemes for Vectorized EBE Sparse Matrix-Vector Multiplications". *Advances in Engineering Software*, Vol. 13, pp. 130-135, 1991.
- [13] A.L.G.A. Coutinho, J.L.D. Alves, L. Landau, N.F.F. Ebecken e L.M. Troina, "Comparison of Lanczos and Conjugate Gradients for the Element-by-Element Solution of Finite Element Equations on the IBM 3090 Vector Computer", *Computer and Structures*, Vol. 39, pp. 47-55, 1991.
- [14] H.K. Dahle, M.S. Espedal, R.E. Ewing e O. Saevareid, "Characteristic Adaptive Subdomain Methods for Reservoir Flow Problems", *Numerical Methods for Partial Differential Equations*, Vol. 6, pp. 279-309, 1990.

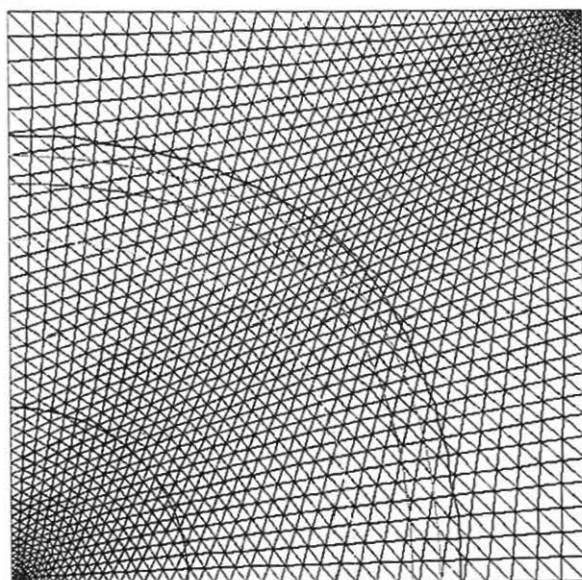


Figura 2 - Malha de Elementos Finitos e Curvas de Isosaturação de Água.

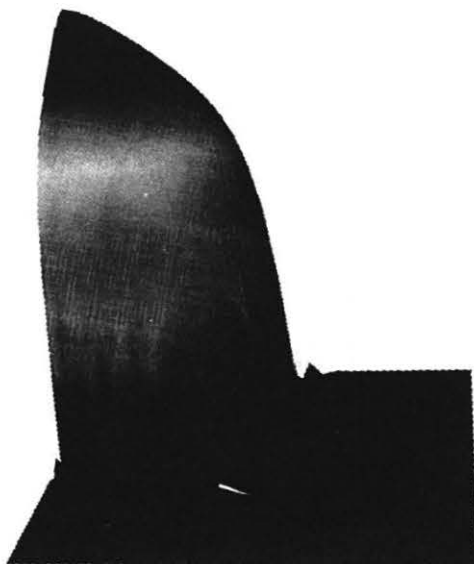


Figura 3 - Elevação da Distribuição de Saturação de Água.

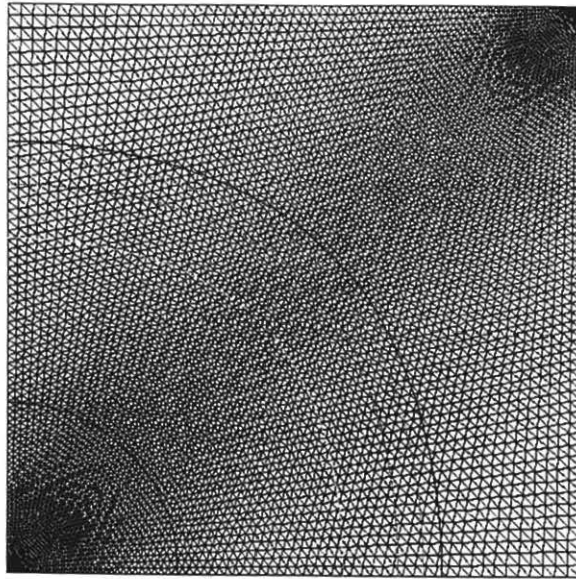


Figura 4 - Malha Refinada de Elementos Finitos e Curvas de Isosaturação de Água.

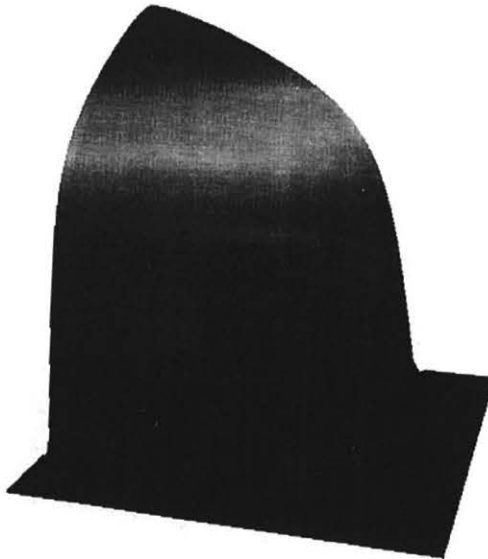


Figura 5 - Elevação da Distribuição de Saturação de Água.

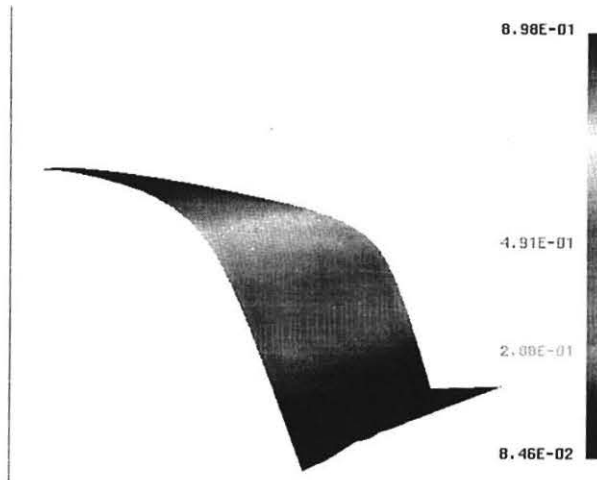


Figura 6 - Elevação da Distribuição de Saturação de Água.

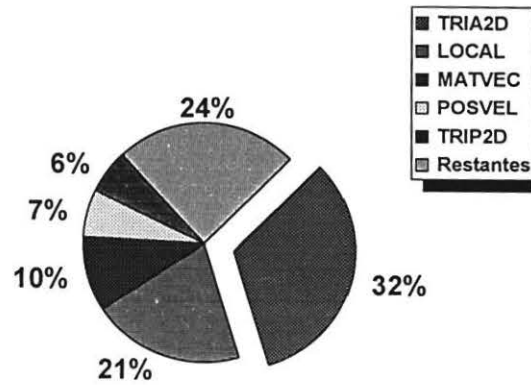


Figura 7 - Distribuição de Tempo de CPU no CRAY Y-MP.