



Universidade do Estado do Rio de Janeiro
Centro de Tecnologia e Ciências
Instituto Politécnico

Fábio Bertolino Vasconcellos

**Utilização da biblioteca numérica PETSc na solução de sistemas
algébricos na simulação de reservatórios**

Nova Friburgo

2024

Fábio Bertolino Vasconcellos

**Utilização da biblioteca numérica PETSc na solução de sistemas algébricos na
simulação de reservatórios**



Dissertação apresentada, como requisito parcial para obtenção do título de Mestre, ao Programa de Pós-Graduação em Modelagem Computacional, da Universidade do Estado do Rio de Janeiro.

Orientador: Prof. Dr. Helio Pedro Amaral Souto

Orientador: Prof. Dr. Grazione de Souza

Nova Friburgo

2024

CATALOGAÇÃO NA FONTE
UERJ / REDE SIRIUS / BIBLIOTECA CTC/E

V331 Vasconcellos, Fábio Bertolino.
Utilização da biblioteca numérica PETSc na solução de sistemas
algébricos na simulação de reservatórios / Fábio Bertolino
Vasconcellos. - 2024.
56 f. : il.

Orientadores: Helio Pedro Amaral Souto e Grazione de Souza.
Dissertação (mestrado) – Universidade do Estado do Rio de
Janeiro, Instituto Politécnico.

1. Engenharia de reservatório de óleo – Métodos de simulação –
Teses. 2. Escoamento em meios porosos – Métodos de simulação –
Teses. 3. Equações diferenciais parciais – Soluções numéricas –
Teses. I. Souto, Helio Pedro Amaral. II. Souza, Grazione de. III.
Universidade do Estado do Rio de Janeiro. Instituto Politécnico. IV.
Título.

CDU 532.546:5196

Bibliotecária Fernanda Souza Cruz CRB7/7361

Autorizo, apenas para fins acadêmicos e científicos, a reprodução total ou parcial desta
dissertação, desde que citada a fonte.

Assinatura

Data

Fábio Bertolino Vasconcellos

**Utilização da biblioteca numérica PETSc na solução de sistemas algébricos na
simulação de reservatórios**

Dissertação apresentada, como requisito parcial para obtenção do título de Mestre, ao Programa de Pós-Graduação em Modelagem Computacional, da Universidade do Estado do Rio de Janeiro.

Aprovada em 8 de julho de 2024.

Banca Examinadora:

Prof. Dr. Helio Pedro Amaral Souto (Orientador)
Instituto Politécnico - UERJ

Prof. Dr. Grazione de Souza(Orientador)
Instituto Politécnico - UERJ

Prof. Dr. Márcio Rentes Borges
Laboratório Nacional de Computação Científica - MCTI

Prof. Dr. Ricardo Carvalho de Barros
Instituto Politécnico - UERJ

Nova Friburgo

2024

DEDICATÓRIA

Dedico esta dissertação aos meus pais, por toda a atenção, incentivo e amor.

AGRADECIMENTOS

Agradeço em primeiro lugar a Deus por todo o seu amor.

Agradeço aos meus pais, Celso e Suely, por todo amor incondicional, pela dedicação à minha educação e principalmente por todo o apoio nos meus projetos.

Deixo um agradecimento especial aos meus orientadores e professores Dr. Helio Pedro Amaral Souto e Dr. Graziene de Souza, pelos ensinamentos e orientações, por todo o apoio e dedicação na elaboração desta dissertação. Sobretudo, por sempre estarem presentes e solícitos.

Agradeço aos integrantes atuais e aos que passaram pelo Laboratório de Modelagem Multiescala e Transporte de Partículas (LABTRAN), pois seus trabalhos e conhecimentos ajudaram de forma direta ou indireta nesta dissertação. Também agradeço aos técnicos do laboratório Paulo de Tarço Honório Junior e Hilton Guaraldi da Silva Junior, sempre solícitos e eficientes.

Agradeço aos Professores Dr. Márcio Rentes Borges e Dr. Ricardo Carvalho de Barros, por terem aceito participar da banca de avaliação desta dissertação.

Agradeço a todos os professores e funcionários do IPRJ-UERJ, pela dedicação em suas funções, por proporcionar um ambiente favorável ao ensino e pesquisa e pela transmissão de seus conhecimentos e valores.

Finalmente, agradeço aos meus amigos e colegas de pós-graduação, pelo apoio e companheirismo.

Nunca se fez nada grande sem uma esperança exagerada.

Jules Verne

Tudo o que temos de decidir é o que fazer com o tempo que nos é dado.

J. R. R. Tolkien

RESUMO

VASCONCELLOS, F. B. *Utilização da biblioteca numérica PETSc na solução de sistemas algébricos na simulação de reservatórios*. 2024. 56 f. Dissertação (Mestrado em Modelagem Computacional) – Instituto Politécnico, Universidade do Estado do Rio de Janeiro, Nova Friburgo, 2024.

Nesta dissertação, a biblioteca numérica *Portable Extensible Toolkit for Scientific Computation* (PETSc) foi utilizada na obtenção da solução do sistema de equações algébricas oriundo da discretização da equação governante de um escoamento bidimensional de óleo em um meio poroso, onde ambos são ligeiramente compressíveis. Tipicamente, essa etapa é a responsável pelo maior custo computacional, quando comparada às demais. Assim, além da busca por uma solução acurada, também almejou-se alcançar um melhor desempenho computacional. A solução numérica foi determinada em termos das pressões no reservatório e no poço produtor (via o uso de uma técnica de acoplamento poço-reservatório), empregando-se uma linearização pelo método de Picard e uma formulação implícita no tempo. As variações de pressão em função do tempo são obtidas fazendo-se variar a malha computacional, algumas propriedades físicas e utilizando-se os diferentes métodos de resolução de sistemas algébricos disponíveis na PETSc. As soluções encontradas apresentaram o comportamento físico esperado e concluiu-se que a utilização dessa biblioteca numérica foi bem sucedida.

Palavras-chave: simulação numérica de reservatórios; PETSc; sistemas de equações algébricas; pressão em poços.

ABSTRACT

VASCONCELLOS, F. B. *Use of the PETSc numerical library in solving algebraic systems in reservoir simulation*. 2024. 56 f. Dissertação (Mestrado em Modelagem Computacional) – Instituto Politécnico, Universidade do Estado do Rio de Janeiro, Nova Friburgo, 2024.

In this dissertation, we used the numerical library Portable Extensible Toolkit for Scientific Computation (PETSc) to obtain the solution of the system of algebraic equations arising from the discretization of the governing equation of a two-dimensional oil flow in a porous medium, where both are slightly compressible. Typically, this step is responsible for the highest computational cost compared to the others. Thus, in addition to the search for an accurate solution, we also aimed to achieve better computational performance. We determined the numerical solution in terms of the pressures in the reservoir and the producing well (via a well-reservoir coupling technique), using a Picard method of linearization and a time-implicit formulation. We obtained the pressure variations as a function of time by using different computational meshes, modifying the physical properties, and using the methods for solving algebraic systems available at PETSc. The solutions presented the expected physical behavior, and we conclude that the use of this numerical library has been successful.

Keywords: numerical reservoir simulation; PETSc; algebraic systems of equations; wellbore pressure.

LISTA DE FIGURAS

Figura 1 - Ilustração de um meio poroso	19
Figura 2 - Representação de um domínio bidimensional discretizado	23
Figura 3 - Malha unidimensional.	25
Figura 4 - Biblioteca PETSc	32
Figura 5 - Pressão no poço em função do tempo de produção - validação dos simuladores	40
Figura 6 - Pressão no poço em função do tempo de produção - refinamento de malha I	41
Figura 7 - Pressão no poço em função do tempo de produção - refinamento de malha II	41
Figura 8 - Distribuição do campo de pressões no reservatório	42
Figura 9 - Pressão no poço em função do tempo de produção - variação da permeabilidade	43
Figura 10 - Pressão no poço em função do tempo de produção - variação da porosidade	43
Figura 11 - Pressão no poço em função do tempo de produção - diferentes métodos	44
Figura 12 - Pressão no poço em função do tempo de produção - diferentes pré-condicionadores e o GMRES	45
Figura 13 - Pressão no poço em função do tempo de produção - diferentes pré-condicionadores e o CG	45
Figura 14 - Pressão no poço em função do tempo de produção - diferentes pré-condicionadores e o BICG	46
Figura 15 - Representação da malha espacial - caso com heterogeneidades	49
Figura 16 - Pressão no poço em função do tempo de produção - caso com heterogeneidades	50

LISTA DE TABELAS

Tabela 1 - Tipos de dados da biblioteca PETSc utilizados	33
Tabela 2 - Parâmetros gerais para a rocha, o fluido e a geometria	38
Tabela 3 - Malhas consideradas no estudo de refinamento	38
Tabela 4 - Tempo de execução - CG	47
Tabela 5 - Tempo de execução - GMRES	47
Tabela 6 - Tempo de execução - BICG	47
Tabela 7 - Tempo de execução variando as permeabilidades	48
Tabela 8 - Tempo de simulação variando as porosidades	48
Tabela 9 - Tempo de execução inserindo heterogeneidades	50

SUMÁRIO

	INTRODUÇÃO	11
1	ESCOAMENTO MONOFÁSICO EM RESERVATÓRIOS	18
1.1	O meio poroso e as hipóteses para o escoamento isotérmico	18
1.2	Equação governante escrita em termos da pressão	20
1.3	Condições auxiliares	22
1.4	Acoplamento poço-reservatório	22
2	METODOLOGIA DE RESOLUÇÃO NUMÉRICA	23
2.1	Discretização da equação governante	23
2.2	Linearização do sistema de equações algébricas não-lineares	26
2.3	Determinação do índice de produtividade	26
2.4	Metodologia de solução do sistema de equações algébricas	27
2.4.1	<u>O método dos Gradientes Conjugados</u>	28
3	SOLUÇÃO NUMÉRICA VIA A BIBLIOTECA PETSC	31
3.1	Biblioteca PETSc	31
3.2	Declaração das variáveis	33
3.3	Inicialização das matrizes e vetores	34
3.4	Configuração do método de resolução	35
3.5	Resolução do sistema linear	35
3.6	Verificação dos resultados	36
3.7	Liberação de memória e finalização da execução	36
4	RESULTADOS	37
4.1	Características gerais das simulações	37
4.2	Validação dos resultados utilizando as duas versões dos simuladores	39
4.3	Refinamento de malha	40
4.4	Variação de algumas das propriedades físicas	42
4.5	Comparação de alguns dos métodos de solução e pré-condicionadores da PETSc	44
4.6	Escoamento em um meio heterogêneo	48
	CONCLUSÕES E PERSPECTIVAS	51
	REFERÊNCIAS	53

INTRODUÇÃO

Com o surgimento dos computadores, após a segunda guerra mundial, uma série de problemas de engenharia pôde ser estudado a partir das soluções obtidas numericamente com a utilização de recursos computacionais. Nesta conjuntura, os avanços alcançados, em termos de capacidade de memória e de processamento, têm permitido que problemas cada vez mais realísticos sejam considerados como, por exemplo, os da dinâmica da tensão-deformação em equipamentos, da transferência de calor, das reações químicas, da dinâmica dos fluidos computacional e da simulação de escoamentos em subsuperfície. Nessa última categoria, é possível se destacar a simulação de reservatórios de petróleo, imprescindível na proposição de um planejamento que resulte na produção otimizada, para que se aumente o fator de recuperação de hidrocarbonetos. Esta dissertação é dedicada à simulação de reservatórios empregando a biblioteca *Portable Extensible Toolkit for Scientific Computation* (PETSc) (Balay et al., 2024), tendo em vista a necessidade de se resolverem sistemas de equações algébricas de grande porte, que surgem nos casos de interesse.

Resolução de sistemas de equações algébricas

Na simulação de reservatórios de petróleo na escala de campo (Ma; Chen, 2004; Yang et al., 2018; Yang et al., 2019; Zhang et al., 2022), frequentemente necessita-se resolver sistemas de equações algébricas não-lineares com mais de 1 milhão de incógnitas quando de problemas tridimensionais, mesmo no caso do escoamento monofásico isotérmico monocomponente. Quando se trata de simulações envolvendo a presença de poços horizontais, por exemplo, tipicamente é necessária uma discretização com malhas refinadas para capturar, adequadamente, o escoamento sujeito ao aparecimento dos diferentes efeitos de fronteira (Al-Mohannadi, 2004; Zhao; Zhang; Shan, 2018). Em geral, na simulação de escoamentos monofásicos em reservatórios de petróleo, mais de 70% do esforço computacional é despendido no processo de resolução desses sistemas.

A questão do tempo de execução é crucial na simulação de reservatórios, levando em consideração que, para casos reais, as simulações visam prever a produção ao longo de décadas e podem, em certas situações, durar semanas, mesmo em máquinas destinadas à computação de alto desempenho (Werneck, 2016; Werneck et al., 2019). Esse tipo de estudo é fundamental para a proposição de estratégias de recuperação dos hidrocarbonetos. Dessa forma, é essencial que a indústria de óleo e gás busque empregar métodos numéricos eficientes para a resolução de sistemas de equações algébricas não-lineares, além da implementação de técnicas de paralelização, de modo que seja possível testar, mais

rapidamente, diferentes cenários de produção, a fim de se definir o melhor plano de operação.

A fim de se resolverem de forma computacionalmente eficiente, esses sistemas de equações, diferentes grupos têm, ao longo de décadas, atuado na elaboração de métodos e na construção de códigos numéricos que conduziram à criação de bibliotecas voltadas para o campo da álgebra linear (Demidov, 2020; Croucher et al., 2020). Elas são constituídas por códigos eficientes e flexíveis destinados à resolução de sistemas do tipo $\mathbf{Ax} = \mathbf{b}$, onde \mathbf{A} é a matriz dos coeficientes, \mathbf{x} é o vetor incógnita e \mathbf{b} um vetor cujos elementos são conhecidos. Portanto, necessita-se conhecer corretamente de que forma essas informações devem ser repassadas para tais bibliotecas numéricas. Outro ponto importante, relativo à eficiência computacional é o *hardware* disponível para a realização das simulações (Gratien, 2020).

Computação de alto desempenho

No trabalho de Cheng, Yang e Sun (2022), por exemplo, os autores utilizaram um supercomputador, com milhares de processadores, para resolver de forma paralelizada o problema do escoamento em subsuperfície. Eles também utilizaram pré-condicionadores e o método iterativo de Newton no processo de resolução. A propósito, o uso de pré-condicionadores (Sun; Cao; Yang, 2009) é uma prática corrente para se acelerar a obtenção das soluções numéricas de sistemas de equações discretas. Nesse sentido, Gratien (2020) relatam que os denominados *Multi-level domain decomposition* (DDML), recentemente apresentados, parecem ser robustos e apresentam boas características de escalabilidade quando do uso das técnicas de paralelização. Zhang et al. (2022) estudaram a aplicação da paralelização e de pré-condicionadores quando do estudo da simulação de escoamentos não-isotérmicos na simulação de reservatórios de petróleo.

Neste contexto, a computação paralela consiste no uso de *hardware* e técnicas de programação que viabilizem a redução do tempo de execução de programas computacionais, em comparação àqueles dos códigos seriais. Dentre as técnicas de paralelização é possível citar, e.g., a *Message Passing Interface* (MPI), a *Application Performance Interface* (API) *Open Multi-Processing* (OpenMP), o *Open Accelerators* (OpenACC), a *Compute Unified Device Architecture* (CUDA) ou híbridos. Li et al. (2023) aplicaram o padrão MPI para estudar o escoamento multifásico em meios porosos, considerando uma formulação totalmente implícita no tempo para poder garantir a estabilidade numérica. Por outro lado, DeVries et al. (2013) empregaram o *Flexible Generalized Minimal Residual* (FGMRES), um método iterativo específico para ser usado quando as matrizes dos coeficientes não são simétricas, tendo sido, então, paralelizado e executado empregando *Graphics Processing Units* (GPUs) e a API OpenMP. Foram considerados sistemas de equações discretas

análogas àsquelas obtidas para casos práticos de problemas de advecção-difusão em três dimensões. Segundo os autores, todas as implementações levaram a ganhos de desempenho computacional.

Exemplos do uso da biblioteca PETSc na simulação numérica

Faz-se, agora, focando na sua utilização nas engenharias e na busca pela melhoria do desempenho computacional, uma breve revisão bibliográfica das aplicações da biblioteca PETSc. Destaca-se que ela possui, conforme relatado em [Mills et al. \(2021\)](#), métodos numéricos específicos para a resolução de equações diferenciais e sistemas algébricos lineares e não lineares, dependentes do tempo, e para a otimização numérica.

[Croucher et al. \(2020\)](#), por exemplo, utilizaram o simulador Waiwera que foi projetado para resolver problemas envolvendo sistemas geotérmicos. Esse código, segundo os autores, foi paralelizado e fez uso intensivo da PETSc ([Katz et al., 2007](#); [Wang](#); [Kolditz; Nagel, 2015](#); [Mills et al., 2021](#)). O referido simulador foi escrito em linguagem Fortran 2003, orientada a objetos, e é do tipo *open-source*. Os autores relataram que os resultados com ele obtidos apresentaram consistência com aqueles alcançados com outros simuladores reconhecidos na literatura, tais como o TOUGH2 (*Transport Of Unsaturated Groundwater and Heat*), além de possuir uma boa escalabilidade quando do uso da versão paralelizada.

Segundo [Wang, Kolditz e Nagel \(2015\)](#), as tecnologias destinadas à estocagem de energia térmica são de interesse atual e buscam melhorar a integração da geração de energia renovável e a eficiência energética. As simulações numéricas do armazenamento termoquímico de calor são desafiadoras e computacionalmente custosas, devido à complexidade em se descreverem os processos acoplados e não-lineares característicos desses sistemas. Tais dificuldades aumentam quando são consideradas geometrias complexas. Para se viabilizarem simulações computacionalmente eficientes, um código utilizando o método dos elementos finitos foi paralelizado, usando as rotinas da biblioteca PETSc, como parte da estrutura do código aberto OpenGeoSys. De acordo com os autores, na simulação da descarga de um armazenador de calor, o tempo de execução foi reduzido significativamente.

As simulações abrangendo a geodinâmica são também caracterizadas pela existência de não linearidades e efeitos tridimensionais, impondo desafios à ciência da computação. Nesse caso específico, [Katz et al. \(2007\)](#) discutiram como o uso da PETSc pode facilitar o desenvolvimento dos simuladores. Como ilustração, os autores realizaram simulações do escoamento estacionário de um fluido não-newtoniano; de ondas magmáticas no manto terrestre; e bifásicos, em meios com alta porosidade, sob cisalhamento simples. Eles destacaram dois dos recursos adicionais da PETSc: o armazenamento estruturado de parâmetros e a saída autodocumentada.

Cuomo et al. (2015) apresentaram uma estrutura, utilizando a computação paralela, direcionada à simulação do fluxo óptico usando um *cluster* de GPUs e a PETSc. Para tanto, na modelagem foi considerada uma equação diferencial parcial (EDP) parabólica e foi implementado um algoritmo paralelizado, adequado para ambientes de computação heterogêneos (multiprocessado, uma ou várias GPUs). Como resultado, o *software* proposto possibilitou um ganho de cerca de 95% em relação à implementação sequencial.

Por sua vez, a suíte TOUGH, simuladores direcionados ao escoamento multifásico não-isotérmico e ao transporte de calor em meios porosos, vem sendo atualizada, por vários desenvolvedores, ao longo dos anos. Em função da crescente complexidade dos processos, bem como da extensão dos domínios de resolução, surgiu a necessidade da realização de melhorias no que diz respeito à eficiência computacional. Jung et al. (2017) relataram que os métodos de resolução de sistemas lineares, paralelizados, da PETSc foram adicionados nas versões TOUGH2 e TOUGH2-MP. Como conclusão, eles constataram que os métodos da PETSc apresentaram, em geral, um melhor desempenho do que os do Aztec paralelizado (original) e do *solver* linear interno da TOUGH3.

Um outro problema desafiador é a simulação numérica da eletrofisiologia cardíaca. O sistema Bidomain, um modelo matemático da atividade bioelétrica cardíaca, constituído por uma equação diferencial parcial elíptica e uma parabólica do tipo reação-difusão, descreve a propagação da excitação elétrica no tecido cardíaco. As duas equações encontram-se acopladas a um sistema de equações diferenciais ordinárias (EDOs), que simula as correntes iônicas através da membrana cardíaca. Na busca pela redução do custo computacional, o desenvolvimento de pré-condicionadores eficientes e escalonáveis para a resolução dos sistemas lineares, provenientes da discretização dessas equações, é fundamental. Centofanti e Scacchi (2024) estudaram o mesmo problema utilizando a PETSc e arquiteturas modernas de computação de alto desempenho, usando várias CPUs (*Central Processing Units*) e GPUs, e verificaram que houve melhorias no desempenho computacional. Ainda segundo os autores, a portabilidade da PETSc engloba a utilização de GPUs e enfatiza a flexibilidade e a extensibilidade, permitindo que os desenvolvedores usem o seu modelo de programação predileto.

De fato, há uma série de problemas de interesse na Física, na Matemática, na Computação e nas Engenharias onde a biblioteca PETSc tem sido utilizada. No trabalho desenvolvido por Kempe et al. (2015), foi abordado o problema do escoamento no interior de uma cavidade, cuja tampa superior é móvel. Foi feita uma comparação do desempenho computacional quando da obtenção da solução das equações de Navier-Stokes, utilizando o método dos volumes finitos, considerando os fluidos como sendo incompressíveis e empregando um método de projeção. O código numérico foi executado em CPUs e GPUs, juntamente com a PETSc. Kang et al. (2023) utilizaram os métodos de Runge-Kutta e a biblioteca PETSc para resolver um problema de interação fluido-fluido. Eles usaram as equações de Navier-Stokes para fluidos compressíveis e realizaram uma série

de experimentos numéricos em larga escala, obtendo resultados satisfatórios em ganho de desempenho.

Prosseguindo, [Bonart et al. \(2017\)](#) trabalharam no acoplamento entre as bibliotecas numéricas da PETSc e ADOL-C. Trata-se de um pacote que facilita a avaliação de derivadas primeiras e superiores de funções vetoriais que são definidas em códigos escritos nas linguagens C ou C++. As suas rotinas podem ser chamadas via programas que usem linguagens de programação vinculadas à linguagem C. Eles usaram a computação paralela para estudar um modelo de coluna de destilação em condições de não equilíbrio.

Um novo esquema, massivamente paralelo, foi desenvolvido para estudar escoamentos em superfícies livres usando o método livre de malha *Incompressible Smoothed Particle Hydrodynamics* (ISPH), para simulações envolvendo o uso de mais de 100 milhões de partículas ([Guo et al., 2018](#)). Com esse propósito, é requerido que seja resolvido um sistema no qual a matriz esparsa, associada à equação de Poisson escrita em termos da pressão, possua uma ordem elevada. Essa não é uma tarefa trivial para problemas que usam tal quantidade de partículas, que se movem em evolução contínua. A biblioteca PETSc e o pré-condicionador HYPRE BoomerAMG foram utilizados a fim de se garantir uma rápida convergência.

[Boffi et al. \(2024\)](#) tiveram como objetivo desenvolver um *solver* paralelizado direcionado para problemas de interação fluido-estrutura. Eles empregaram multiplicadores de Lagrange e o método dos elementos finitos para a discretização espacial. Por outro lado, é utilizado um esquema de primeira ordem, do tipo diferenças finitas, na aproximação temporal. O sistema linear resultante do processo de discretização é resolvido, a cada passo de tempo, usando a versão paralelizada do método GMRES (*Generalized Minimum Residual*) e pré-condicionadores disponíveis na biblioteca PETSc.

No escopo dos aplicativos de geração de imagens, [Carracciolo, D'Amore e Murli \(2006\)](#) analisaram o esforço computacional requerido para o desenvolvimento de um ambiente de *software* distribuído. Tal iniciativa teve por finalidade possibilitar o uso de computadores de alto desempenho e sistemas de armazenamento, para a redução do ruído das sequências ecocardiográficas tridimensionais, assim como a utilização da PETSc.

Em contrapartida, [Hovland e McInnes \(2001\)](#) utilizaram a biblioteca PETSc em aplicações aeroespaciais envolvendo o uso da paralelização e um método de Newton-Krylov-Schwarz. Eles estudaram o escoamento ao redor de um aerofólio do tipo M6 utilizando as equações tridimensionais de Euler e uma formulação totalmente implícita no tempo.

No caso das equações incompressíveis de Navier-Stokes, [Clarke e Krishnamoorthy \(2019\)](#) apontaram que há um custo computacional expressivo quando da resolução numérica de escoamentos multifásicos. Ele é decorrente, em geral, do emprego de uma formulação implícita quando do cálculo da correção de pressão. Os autores utilizaram o método iterativo dos Gradientes Biconjugados Estabilizado e o pré-condicionador de Jacobi, ambos da biblioteca PETSc.

Por fim, destaca-se que em grande parte dos simuladores contemporâneos, aplicados nas engenharias, é necessário que se resolvam sistemas de equações algébricas. Assim, [Jolivet, Roman e Zampini \(2021\)](#) discutem como as bibliotecas PETSc e HPDDM (*High Performance Domain Decomposition Methods*) podem ser usadas, em conjunto, de modo a propiciar aos usuários a utilização dos métodos avançados do subespaço de Krylov (para a resolução de sistemas de equações) e de Schwarz para o particionamento de domínios. São também fornecidos exemplos de aplicações envolvendo a análise de autovalores, a elasticidade, a combustão e o eletromagnetismo.

Aos leitores interessados, dentre outras contribuições que fizeram uso da biblioteca PETSc, destacam-se os trabalhos de [Bhowmick et al. \(2006\)](#), [Boom et al. \(2022\)](#), [Mantravadi, Jagad e Samtaney \(2023\)](#) e [Zhang e Constantinescu \(2023\)](#).

Objetivos

O principal objetivo deste trabalho é o de tornar viável o uso da biblioteca PETSc, quando da simulação de reservatórios de petróleo usando os simuladores desenvolvidos pelo grupo de pesquisa do Laboratório de Modelagem Multiescala e Transporte de Partículas (LABTRAN) do Instituto Politécnico da Universidade do Estado do Rio de Janeiro. Inicialmente, neste trabalho, será abordado o caso do escoamento isotérmico de óleo ligeiramente compressível em um meio poroso que pode sofrer pequenas variações de volume. Ademais, almeja-se compreender e poder utilizar os principais recursos da PETSc de forma a proporcionar a obtenção acurada da solução numérica a um menor custo computacional. Como objetivo secundário, pretende-se estudar o comportamento das soluções numéricas quando da variação da malha computacional e de algumas das propriedades de rocha e de fluido.

Metodologia

Conforme mencionado anteriormente, a metodologia empregada baseia-se na utilização da biblioteca PETSc na busca da solução do sistema de equações algébricas lineares, resultante do processo de discretização da equação diferencial parcial que modela matematicamente o escoamento aqui considerado. Portanto, ela abarca a modelagem físico-matemática e o uso de uma metodologia de solução numérica para a resolução da equação governante, no contexto da simulação de reservatórios. Assim, utiliza-se o método *Control Volume-Finite Difference* (CVDF), uma linearização das equações algébricas não-lineares, utilizando o método de Picard, e uma expansão conservativa na discretização do termo de acúmulo. Por último, emprega-se uma técnica de acoplamento poço-reservatório

de forma a se determinarem as estimativas da pressão reinante no poço produtor.

Organização do trabalho

Na presente introdução, o tema da dissertação foi contextualizado e os objetivos e metodologia apresentados.

A seguir, no Capítulo 1, é apresentada a modelagem físico-matemática aplicada ao escoamento bidimensional isotérmico de óleo em um reservatório contendo um poço produtor vertical. Na sequência, o método numérico empregado na resolução da equação governante é introduzido no Capítulo 2. Portanto, são nele abordados o método CVFD, a linearização via o método de Picard e a técnica de acoplamento poço-reservatório escolhida. Em prosseguimento, no Capítulo 3, faz-se uma breve explanação sobre as principais características e de como se utilizar a biblioteca numérica PETSc no âmbito do presente trabalho.

Os resultados obtidos encontram-se no Capítulo 4. Eles apresentam, primeiramente, o comportamento da pressão no poço produtor sob determinadas condições previamente definidas. Além desse estudo, concentrou-se na realização de uma comparação das performances do método dos Gradientes Conjugados, implementado na versão anterior do simulador numérico, com as de alguns dos diferentes métodos de resolução disponíveis na biblioteca PETSc, utilizada na versão atual. Tal análise foi feita tomando-se como critério de avaliação o tempo de execução. No último capítulo, encontram-se as conclusões e as perspectivas propostas para a realização de trabalhos futuros.

1 ESCOAMENTO MONOFÁSICO EM RESERVATÓRIOS

A modelagem físico-matemática, tendo-se em vista a simulação do escoamento monofásico isotérmico em um reservatório de petróleo, depende das características do escoamento, das propriedades físicas do reservatório e do fluido e, principalmente, das hipóteses adotadas. Este capítulo é dedicado à apresentação do modelo adotado, de uma revisão sobre as propriedades de fluido e de rocha, das equações de balanço, da equação diferencial parcial governante, cuja variável dependente é a pressão do óleo, e das condições inicial e de contorno.

1.1 O meio poroso e as hipóteses para o escoamento isotérmico

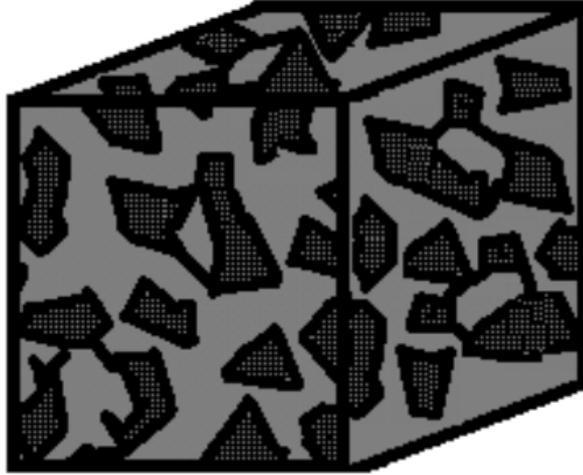
Um meio é considerado poroso como, por exemplo, um reservatório de petróleo, quando ele é formado por uma matriz sólida na qual existem espaços denominados poros, que podem ser preenchidos por fluidos. A porosidade, relação entre o volume poroso e o volume total do material (sólido mais poros), mede a capacidade de armazenamento de fluidos no meio poroso. Quanto mais poroso for um reservatório de petróleo, maior a sua habilidade de estocar hidrocarbonetos (Dandekar, 2013). Em uma rocha reservatório, podem ser definidas dois tipos de porosidade: a efetiva e a total.

A porosidade total inclui os poros isolados e os interconectados. Já a efetiva engloba exclusivamente os poros interconectados (Tiab; Donaldson, 2004). Na Engenharia de Reservatórios, a porosidade efetiva é de maior relevância, pois apenas os poros interconectados permitem o escoamento de fluidos através da rocha. Neste trabalho, utiliza-se sem perda de generalidade o termo porosidade para designar a porosidade efetiva. A título de ilustração, na Figura 1 apresenta-se esquematicamente a estrutura de um meio poroso.

Em geral, a porosidade varia na formação rochosa e diz-se que o reservatório é heterogêneo. Por outro lado, caso ela seja independente da posição e constante, ele é dito ser homogêneo (Tiab; Donaldson, 2004). Na prática, o último é uma exceção e esse conceito é uma idealização que pode auxiliar, por exemplo, na obtenção de uma solução analítica para um caso específico de escoamento.

Uma porosidade elevada não é suficiente para caracterizar a viabilidade econômica de um reservatório, pois os fluidos contidos nos poros das rochas têm que se movimentar para que sejam trazidos à superfície. Isso depende de uma outra propriedade da formação rochosa, a permeabilidade, denotada em geral por k (Dandekar, 2013). A medida da capacidade de um meio poroso permitir a passagem de fluidos, através de seus poros interconectados, é quantificada pela permeabilidade absoluta, ou permeabilidade se o meio poroso encontra-se 100% saturado por uma única fase líquida. Já a permeabilidade efetiva

Figura 1 - Ilustração de um meio poroso (sólido em preto, fluido em cinza)



Fonte: [Souza, 2013](#).

expressa a resistência do reservatório ao deslocamento de qualquer fase, se duas ou mais delas preenchem o meio poroso.

O tensor permeabilidade \mathbf{k} pode mudar espacialmente e em função da direção. Em muitas aplicações, é razoável considerar que ela possa variar somente segundo as três direções principais em um sistema de coordenadas cartesianas. Nesse caso, elas são representadas por k_x , k_y e k_z . O meio poroso é classificado como sendo isotrópico caso $k_x = k_y = k_z$ e anisotrópico quando elas alteram os seus valores segundo as direções espaciais.

Ressalta-se que as propriedades dos fluidos também são necessárias para a descrição do escoamento, como será visto ao longo deste capítulo.

A seguir, são elencadas as hipóteses utilizadas na derivação do modelo:

1. o campo de permeabilidades é heterogêneo e isotrópico;
2. a compressibilidade da rocha é pequena e constante;
3. o fluido é newtoniano;
4. não ocorrem reações químicas;
5. o escoamento é bidimensional, no plano xy , e ocorre a baixas velocidades;
6. o escoamento é monofásico e isotérmico;
7. os efeitos gravitacionais são desprezados;
8. o poço de produção é vertical e penetra totalmente na formação;

9. ausência de dano à formação¹;
10. ausência de estocagem no poço².

Na sequência, utilizam-se essas hipóteses, as propriedades do fluido e da rocha e as equações de balanço (massa e quantidade de movimento) para se obter uma equação governante, escrita em termos da pressão do óleo.

1.2 Equação governante escrita em termos da pressão

Ao se introduzir o fator-volume-formação do óleo (Rosa; Carvalho; Xavier, 2006),

$$B = \frac{\rho_{osc}}{\rho_o},$$

a equação de conservação da massa pode ser escrita na forma (Ertekin; Abou-Kassem; King, 2001)

$$\frac{\partial}{\partial t} \left(\frac{\phi}{B} \right) + \nabla \cdot \left(\frac{\mathbf{v}_o}{B} \right) - \frac{q_m}{V_b \rho_{osc}} = 0, \quad (1)$$

onde ϕ é a porosidade, \mathbf{v}_o é a velocidade superficial do fluido, q_m é o termo fonte, V_b é o volume total do volume de controle (rocha mais poros) e ρ_{osc} é a massa específica do óleo em condições padrão de pressão e temperatura, p_{sc} e T_{sc} , respectivamente.

Para escoamentos a baixas velocidades, tipicamente, a equação que expressa a conservação da quantidade de movimento no escoamento de fluidos em meios porosos é a lei de Darcy clássica (Darcy, 1856; Whitaker, 1999; Ertekin; Abou-Kassem; King, 2001),

$$\mathbf{v}_o = -\frac{\mathbf{k}}{\mu_o} (\nabla p - \rho_o g \nabla D), \quad (2)$$

onde \mathbf{k} é o tensor de permeabilidade absoluta, μ_o é a viscosidade do óleo, ρ_o é a sua massa específica, g é a magnitude da aceleração da gravidade e D é a profundidade (Rosa; Carvalho; Xavier, 2006). Substituindo-se a Equação (2) na Equação (1), tem-se

$$\frac{\partial}{\partial t} \left(\frac{\phi}{B} \right) - \nabla \cdot \left[\frac{\mathbf{k}}{B \mu_o} (\nabla p - \rho_o g \nabla D) \right] - \frac{q_m}{V_b \rho_{osc}} = 0. \quad (3)$$

¹ Redução da permeabilidade em uma região ao redor do poço, devido aos efeitos do fluido de perfuração e da cimentação.

² Quando um poço é colocado em produção, os fluidos inicialmente produzidos originam-se do volume do próprio poço, pois é necessário um certo intervalo de tempo até que os fluidos do reservatório alcancem a superfície. Esse efeito é denominado de estocagem no poço.

Se os efeitos gravitacionais não forem levados em consideração e usando-se a relação $q_m = q_{sc}\rho_{osc}$ tem-se, a partir da Equação (3), que

$$\frac{\partial}{\partial t} \left(\frac{\phi}{B} \right) - \nabla \cdot \left(\frac{\mathbf{k}}{B\mu_o} \nabla p \right) - \frac{q_{sc}}{V_b} = 0. \quad (4)$$

Na Equação (4), o primeiro termo, do lado esquerdo do sinal de igualdade, pode ser reescrito, considerando-se as propriedades do fluido e da rocha, de forma a se obter explicitamente as derivadas parciais da pressão em relação ao tempo (Dyrdaahl, 2014). Este resultado é alcançado utilizando-se a regra da cadeia, de forma que

$$\frac{\partial}{\partial t} \left(\frac{\phi}{B} \right) = \frac{1}{B} \frac{\partial \phi}{\partial t} + \phi \frac{\partial}{\partial t} \left(\frac{1}{B} \right) = \frac{1}{B} \frac{\partial \phi}{\partial p} \frac{\partial p}{\partial t} + \phi \frac{\partial}{\partial p} \left(\frac{1}{B} \right) \frac{\partial p}{\partial t} = \left[\frac{1}{B} \frac{\partial \phi}{\partial p} + \phi \frac{\partial}{\partial p} \left(\frac{1}{B} \right) \right] \frac{\partial p}{\partial t}. \quad (5)$$

Neste trabalho, considera-se que (Ertekin; Abou-Kassem; King, 2001)

$$B = \frac{B^0}{1 + c_o(p - p^0)}, \quad (6)$$

e

$$\phi = \phi^0[1 + c_\phi(p - p^0)], \quad (7)$$

onde B^0 e ϕ^0 são, respectivamente, o fator-volume-formação e a porosidade nas condições de referência para a pressão p^0 , e c_o e c_ϕ representam as compressibilidades do óleo e da rocha, respectivamente.

Substituindo-se as Equações (6) e (7) na Equação (5), obtém-se o resultado

$$\frac{\partial}{\partial t} \left(\frac{\phi}{B} \right) = \left(\frac{\phi c_o}{B^0} + \frac{\phi^0 c_\phi}{B} \right) \frac{\partial p}{\partial t}. \quad (8)$$

Finalmente, a partir das Equações (4) e (8) é possível escrever

$$\Gamma_p \frac{\partial p}{\partial t} - V_b \nabla \cdot \left(\frac{\mathbf{k}}{B\mu_o} \nabla p \right) - q_{sc} = 0, \quad (9)$$

onde

$$\Gamma_p = V_b \left(\frac{\phi c_o}{B^0} + \frac{\phi^0 c_\phi}{B} \right).$$

Ainda necessita-se calcular a viscosidade do fluido na Equação (9). Aqui, utiliza-se a correlação frequentemente aplicada para o caso de fluidos ligeiramente compressíveis em

escoamentos isotérmicos (Ertekin; Abou-Kassem; King, 2001),

$$\mu_o = \frac{\mu^0}{1 - c_p(p - p^0)},$$

onde μ^0 é o valor da viscosidade medida na pressão de referência p^0 e c_p é o coeficiente de variação da viscosidade em relação à pressão.

1.3 Condições auxiliares

A Equação (9) é uma equação diferencial parcial não-linear que será utilizada na determinação da variável dependente (pressão do óleo). Para resolvê-la, é ainda necessário que sejam fornecidas as condições auxiliares (inicial e de contorno) apropriadas.

Como condição inicial utiliza-se

$$p(x, y, t = 0) = p_{ini}(x, y) = p_{inic},$$

onde p_{inic} é a pressão inicial antes do reservatório ser perturbado pela produção/injeção.

No que diz respeito às condições de contorno, as externas são do tipo fluxo nulo nas fronteiras do reservatório

$$\left(\frac{\partial p}{\partial x}\right)_{x=0, L_x} = \left(\frac{\partial p}{\partial y}\right)_{y=0, L_y} = 0,$$

onde L_x e L_y são os respectivos comprimentos do reservatório nas direções x e y .

1.4 Acoplamento poço-reservatório

Se o termo fonte q_{sc} for utilizado para fornecer a vazão de produção na representação do poço, via uma condição de contorno interna, do acoplamento poço-reservatório tem-se que (Ertekin; Abou-Kassem; King, 2001)

$$q_{sc} = -J_w(p - p_{wf}), \tag{10}$$

onde J_w é o índice de produtividade e p_{wf} é a pressão no poço.

A determinação numérica do índice de produtividade, no contexto da simulação de reservatórios, será discutida no Capítulo 2. Por hora, ressalta-se que a Equação (10) permite o cálculo da pressão no poço se a sua vazão for prescrita e vice-versa. Aqui, optou-se por utilizar uma condição de vazão de produção prescrita, ao invés de se fixar o valor da pressão no poço.

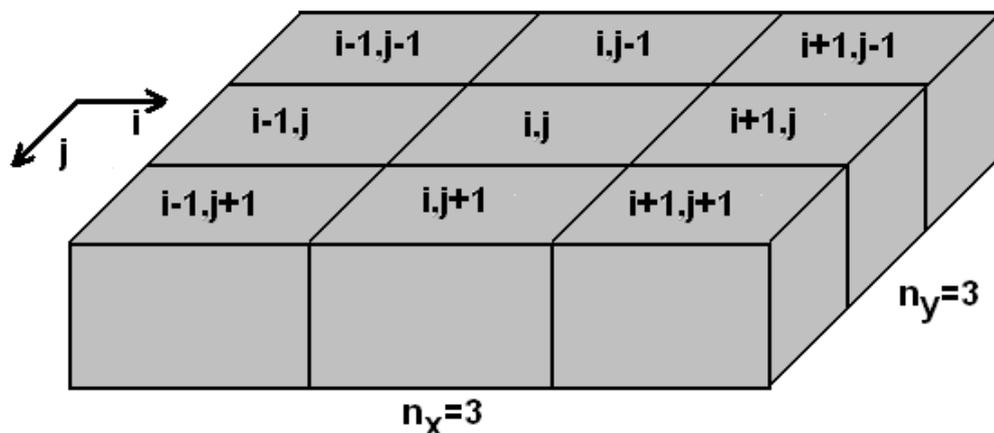
2 METODOLOGIA DE RESOLUÇÃO NUMÉRICA

A simulação numérica é amplamente utilizada nas engenharias e, principalmente, na resolução de problemas de escoamento em reservatórios de petróleo, visto que apenas em alguns casos particulares, simplificados, é possível se obterem soluções analíticas para eles (Ertekin; Abou-Kassem; King, 2001). Agora, neste capítulo, tratar-se-á das questões relativas à obtenção da solução da equação governante introduzida no capítulo anterior. Para tanto, serão utilizados os métodos CVFD e de Picard, um método iterativo de resolução de sistemas algébricos e uma técnica para a determinação do índice de produtividade para o modelo do acoplamento poço-reservatório adotado.

2.1 Discretização da equação governante

Conforme mencionado, o método de discretização empregado neste trabalho é o CVFD e são utilizadas malhas de blocos centrados (Aziz; Settari, 1990; Islam et al., 2010). Uma representação esquemática de um domínio bidimensional discretizado está ilustrada na Figura 2, para o sistema de coordenadas cartesianas. A solução numérica é obtida nos blocos da malha computacional (mais precisamente, nos nós centrais) e o sistema algébrico de equações resultante do processo de discretização, da equação governante, é resolvido mediante o emprego de um método iterativo, uma vez que se utiliza uma formulação totalmente implícita no tempo.

Figura 2 - Representação de um domínio bidimensional discretizado



Fonte: Souza, 2013.

Para um problema bidimensional, a equação governante (9) pode ser posta na forma

$$\frac{\partial}{\partial x} \left(\mathbb{T}_x \frac{\partial p}{\partial x} \right) dx + \frac{\partial}{\partial y} \left(\mathbb{T}_y \frac{\partial p}{\partial y} \right) dy = \Gamma_p \frac{\partial p}{\partial t} + q_{sc}, \quad (11)$$

onde foram introduzidas as novas variáveis

$$\mathbb{T}_x \equiv \frac{A_x k_x}{\mu B},$$

$$\mathbb{T}_y \equiv \frac{A_y k_y}{\mu B},$$

sendo que $A_x = dyL_z$, $A_y = dxL_z$ e $V_b = dxdyL_z$, considerando-se que L_z é a espessura do reservatório e que A_x e A_y não são, respectivamente, funções de x e de y , seguindo os desenvolvimentos contidos em [Ertekin, Abou-Kassem e King \(2001\)](#).

Considerando-se um arranjo de malha de blocos centrados, como o apresentado na Figura 2, e empregando-se aproximações do tipo diferenças centradas a três pontos ([Ertekin; Abou-Kassem; King, 2001](#)) obtém-se, para a direção do eixo x ,

$$\frac{\partial}{\partial x} \left(\mathbb{T}_x \frac{\partial p}{\partial x} \right)_{i,j}^{n+1} \cong \frac{1}{\Delta x_{i,j}} \left[\left(\mathbb{T}_x \frac{\partial p}{\partial x} \right)_{i+\frac{1}{2},j} - \left(\mathbb{T}_x \frac{\partial p}{\partial x} \right)_{i-\frac{1}{2},j} \right]^{n+1},$$

onde $\Delta x_{i,j}$ é o espaçamento da malha na direção x , $n + 1$ representa o nível temporal em que as pressões são calculadas (n indica o nível de tempo no qual a pressão é conhecida).

Em seguida, a fim de se aproximarem as derivadas parciais em relação a x , leva-se em conta a representação da Figura 3 e implementa-se, novamente, um esquema a três pontos simétrico. Nela, os nós $i - 1/2$ e $i + 1/2$ encontram-se posicionados nas faces laterais e o nó i no centro da célula (bloco), de forma que

$$\left(\frac{\partial p}{\partial x} \right)_{i+\frac{1}{2},j}^{n+1} \cong \frac{p_{i+1,j}^{n+1} - p_{i,j}^{n+1}}{\Delta x_{i+\frac{1}{2},j}}$$

$$\left(\frac{\partial p}{\partial x} \right)_{i-\frac{1}{2},j}^{n+1} \cong \frac{p_{i,j}^{n+1} - p_{i-1,j}^{n+1}}{\Delta x_{i-\frac{1}{2},j}}$$

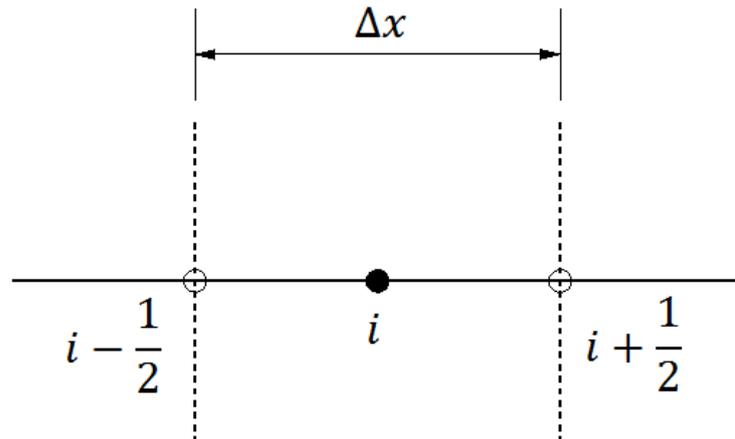
onde $\Delta x_{i\pm 1/2,j}$ é a distância entre os centros das células representadas por i e $i \pm 1$, considerando-se o tamanho das células constantes em toda a malha. Analogamente, obtém-se respectivamente as aproximações para as derivadas em relação a y .

Tomando-se como exemplo a direção do eixo x , introduz-se a nova variável transmissibilidade

$$T_{x,i\pm\frac{1}{2},j}^{n+1} = \left(\frac{A_x k_x}{\mu B \Delta x} \right)_{i\pm\frac{1}{2},j}^{n+1}$$

e emprega-se uma média harmônica, em se tratando das propriedades de rocha e de geometria, e uma média aritmética (sendo a malha uniforme), com respeito a do fluido, para se determinarem os seus valores em $i \pm 1/2, j$, a partir daqueles conhecidos em i, j e $i \pm 1, j$. Procedese de forma similar no caso da transmissibilidade na direção do eixo y .

Figura 3 - Malha unidimensional



Fonte: Chung et al., 2015 .

Finalmente, utilizando-se uma formulação implícita no tempo, é possível se obter a forma final discretizada da Equação (11):

$$\begin{aligned}
 & T_{x,i+1/2,j}^{n+1} (p_{i+1,j}^{n+1} - p_{i,j}^{n+1}) - T_{x,i-1/2,j}^{n+1} (p_{i,j}^{n+1} - p_{i-1,j}^{n+1}) \\
 & + T_{y,i,j+1/2}^{n+1} (p_{i,j+1}^{n+1} - p_{i,j}^{n+1}) - T_{y,i,j-1/2}^{n+1} (p_{i,j}^{n+1} - p_{i,j-1}^{n+1}) \\
 & = \Gamma_{i,j}^{n+1} (p_{i,j}^{n+1} - p_{i,j}^n) + (q_{sc})_{i,j}^{n+1}, \tag{12}
 \end{aligned}$$

onde foi utilizada uma aproximação de Euler recuada no tempo

$$\left(\frac{\partial p}{\partial t} \right)_{i,j}^{n+1} \cong \frac{p_{i,j}^{n+1} - p_{i,j}^n}{\Delta t},$$

sendo Δt o passo de tempo, diferença entre os níveis de tempo t^{n+1} e t^n .

No que diz respeito ao coeficiente do termo transiente, ele é calculado a partir de uma expansão conservativa (Ertekin; Abou-Kassem; King, 2001),

$$\Gamma_{i,j}^{n+1} = \left[\frac{\phi^n c_o}{B^0} + \frac{\phi^0 c_\phi}{B^{n+1}} \right] \frac{V_{b,i,j}}{\Delta t}.$$

2.2 Linearização do sistema de equações algébricas não-lineares

A Equação (12) representa um conjunto de equações algébricas não-lineares em termos da incógnita pressão. Portanto, para que se possa utilizar as técnicas desenvolvidas especificamente para a resolução de sistemas de equações lineares, elas devem ser linearizadas. Então, pensando-se em uma simples iteração, para a determinação da transmissibilidade na direção do eixo x (Ertekin; Abou-Kassem; King, 2001), introduz-se a aproximação

$$T_{x,i\pm\frac{1}{2},j}^{n+1} \cong T_{x,i\pm\frac{1}{2},j}^{n+1,v} = \left(\frac{A_x k}{\mu B \Delta x} \right)_{i\pm\frac{1}{2},j}^{n+1,v},$$

observando que expressões análogas são utilizadas para a direção do eixo y , de modo que a Equação (12) pode ser reescrita como

$$\begin{aligned} & T_{x,i+\frac{1}{2},j}^{n+1,v} (p_{i+1,j}^{n+1,v+1} - p_{i,j}^{n+1,v+1}) - T_{x,i-\frac{1}{2},j}^{n+1,v} (p_{i,j}^{n+1,v+1} - p_{i-1,j}^{n+1,v+1}) \\ & + T_{y,i,j+\frac{1}{2}}^{n+1,v} (p_{i,j+1}^{n+1,v+1} - p_{i,j}^{n+1,v+1}) - T_{y,i,j-\frac{1}{2}}^{n+1,v} (p_{i,j}^{n+1,v+1} - p_{i,j-1}^{n+1,v+1}) \\ & = \Gamma_{i,j}^{n+1,v} (p_{i,j}^{n+1,v+1} - p_{i,j,k}^n) + (q_{sc})_{i,j}^{n+1,v}, \end{aligned}$$

onde os níveis de iteração são indicados por v (valores conhecidos) e $v + 1$ (valores desconhecidos). O mesmo procedimento é utilizado para os termos $\Gamma_{i,j}$ e $(q_{sc})_{i,j}$.

2.3 Determinação do índice de produtividade

No caso do acoplamento poço-reservatório, também se lineariza o termo que contém o índice de produtividade J_w . Aqui, apenas poços verticais são considerados, negligenciando-se as perdas de carga e os efeitos inerciais no seu interior. A taxa de fluxo no poço, q_{sc} , está relacionada com a diferença de pressão por intermédio do índice de produtividade e a sua forma discretizada é dada por

$$(q_{sc})_{i,j}^{n+1,v} = -J_{w,i,j}^{n+1,v} \left[p_{i,j}^{n+1,v+1} - (p_{wf})_{i,j}^{n+1,v+1} \right],$$

para um poço produtor vertical.

Portanto, em se tratando desse poço em particular, o índice de produtividade é

calculado por (Al-Mohannadi, 2004)

$$J_{i,j}^{n+1} = \left[\frac{2\pi \sqrt{k_x k_y} \Delta z}{\mu B \ln \left(\frac{r_{eq}}{r_w} \right)} \right]_{i,j}^{n+1},$$

onde

$$r_{eq} = 0,28 \left[\frac{\sqrt{\frac{k_y}{k_x}} (\Delta_x)^2 + \sqrt{\frac{k_x}{k_y}} (\Delta_y)^2}{\left(\frac{k_y}{k_x} \right)^{1/4} + \left(\frac{k_x}{k_y} \right)^{1/4}} \right]_{i,j}^{n+1},$$

com r_{eq} sendo o raio equivalente (Peaceman, 1983) e r_w é o raio do poço.

2.4 Metodologia de solução do sistema de equações algébricas

Os sistemas oriundos da linearização das equações algébricas não-lineares possuem, em geral, matrizes dos coeficientes esparsas e elevada quantidade de incógnitas. Então, é necessária uma grande quantidade de memória e velocidade de processamento quando da resolução deles.

O método dos Gradientes Conjugados (GC) foi implementado em uma versão anterior de um simulador do grupo de pesquisa (Lopes, 2016). Ele é considerado como um dos métodos iterativos mais eficientes para a resolução de sistemas lineares não-estacionários, pois herda informações das iterações precedentes e as considera quando da realização de cada iteração subsequente. Simplificando, as etapas do método GC consistem em executar passos, em cada iteração, na direção oposta à do gradiente da função a ser minimizada, de tal forma que a direção já pesquisada não seja repetida, até que seja encontrado o mínimo estrito e global. A minimização ocorre nos chamados subespaços de pesquisa (espaço de Krylov), gerados a partir dos resíduos de cada iteração (Canal, 2000).

Supondo-se que não sejam introduzidos erros de arredondamento, se a matriz dos coeficientes \mathbf{A} possui m autovalores distintos, o método deve convergir em no máximo m iterações. Por outro lado, se ela possuir muitos autovalores distintos cujas magnitudes variam enormemente, o método provavelmente necessitará de um grande número de iterações para que a convergência seja alcançada.

A convergência pode ser acelerada mediante o pré-condicionamento da matriz \mathbf{A} . Ele consiste em transformar o sistema original em um outro que tem a mesma solução, porém, possuindo propriedades mais favoráveis para que a convergência seja atingida com menos

iterrações. A matriz pré-condicionadora é escolhida de tal forma que $\mathbf{A}' = \mathbf{C}\mathbf{A}\mathbf{C}^T$, onde a matriz \mathbf{C} é dita ser não-singular e pré-condicionadora. O método GC implementado na versão anterior do simulador numérico não dispunha de um pré-condicionador. Entretanto, a biblioteca PETSc, usada na versão atual, disponibiliza diferentes métodos de pré-condicionamento como, por exemplo, o SSOR (*Symmetric Successive Over-Relaxation*). Alguns destes métodos foram empregados na obtenção dos resultados e uma comparação dos desempenhos deles foi empreendida (Capítulo 4).

2.4.1 O método dos Gradientes Conjugados

Trata-se do método mais utilizado quando a matriz dos coeficientes é simétrica e positivo-definida. Para se evitar que se tome a mesma direção quando da correção da solução em uma dada iteração, o método considera m direções conjugadas linearmente independentes $\mathbf{v}_1, \mathbf{v}_2, \dots, \mathbf{v}_m$ e, por meio da minimização da função,

$$F(\mathbf{x}^k + \alpha\mathbf{v}^k) = \frac{1}{2}(\mathbf{x}^k + \alpha\mathbf{v}^k)^T \mathbf{A}(\mathbf{x}^k + \alpha\mathbf{v}^k) - \mathbf{b}^T(\mathbf{x}^k + \alpha\mathbf{v}^k),$$

em cada uma das direções separadamente, constrói uma sequência de aproximações que fornece o mínimo da função

$$F(\mathbf{x}) = \frac{1}{2}\mathbf{x}^T \mathbf{A}\mathbf{x} - \mathbf{b}^T \mathbf{x}$$

após m passos, onde m é o número de equações do sistema linear. Dois vetores \mathbf{a} e \mathbf{b} são ditos serem conjugados caso

$$\mathbf{a} \cdot \mathbf{A}\mathbf{b} = \mathbf{b} \cdot \mathbf{A}\mathbf{a} = 0.$$

Procedendo-se ao cálculo do valor de α que minimiza a função $F(\mathbf{x} + \alpha\mathbf{v})$, obtém-se

$$\begin{aligned} \frac{d}{d\alpha}F(\mathbf{x} + \alpha\mathbf{v}) &= \frac{1}{2}\mathbf{v} \cdot \mathbf{A}(\mathbf{x} + \alpha\mathbf{v}) + \frac{1}{2}(\mathbf{x} + \alpha\mathbf{v}) \cdot \mathbf{A}\mathbf{v} - \mathbf{b} \cdot \mathbf{v} \\ &= \frac{1}{2}\mathbf{A}(\mathbf{x} + \alpha\mathbf{v}) \cdot \mathbf{v} + \frac{1}{2}(\mathbf{x} + \alpha\mathbf{v}) \cdot \mathbf{A}\mathbf{v} - \mathbf{b} \cdot \mathbf{v} \\ &= \frac{1}{2}(\mathbf{x} + \alpha\mathbf{v}) \cdot \mathbf{A}^T\mathbf{v} + \frac{1}{2}(\mathbf{x} + \alpha\mathbf{v}) \cdot \mathbf{A}\mathbf{v} - \mathbf{b} \cdot \mathbf{v} \\ &= (\mathbf{x} + \alpha\mathbf{v}) \cdot \mathbf{A}\mathbf{v} - \mathbf{b} \cdot \mathbf{v} \\ &= \alpha\mathbf{v} \cdot \mathbf{A}\mathbf{v} + \mathbf{A}\mathbf{x} \cdot \mathbf{v} - \mathbf{b} \cdot \mathbf{v} \\ &= \alpha\mathbf{v} \cdot \mathbf{A}\mathbf{v} + (\mathbf{A}\mathbf{x} - \mathbf{b}) \cdot \mathbf{v} \\ &= \alpha\mathbf{v} \cdot \mathbf{A}\mathbf{v} - \mathbf{r} \cdot \mathbf{v}. \end{aligned}$$

Então,

$$\alpha = \frac{\mathbf{r} \cdot \mathbf{v}}{\mathbf{v} \cdot \mathbf{A}\mathbf{v}}$$

e

$$\mathbf{x}^{k+1} = \mathbf{x}^k + \alpha^k \mathbf{v}^k.$$

Como é sabido que $\mathbf{r} = \mathbf{b} - \mathbf{A}\mathbf{x}$,

$$\begin{aligned} \mathbf{r}^{k+1} &= \mathbf{b} - \mathbf{A}\mathbf{x}^{k+1} \\ &= \mathbf{b} - \mathbf{A}(\mathbf{x}^k + \alpha_k \mathbf{v}^k) \\ &= \mathbf{b} - \mathbf{A}\mathbf{x}^k - \alpha_k \mathbf{A}\mathbf{v}^k \\ &= \mathbf{r}^k - \alpha_k \mathbf{A}\mathbf{v}^k. \end{aligned}$$

Em seguida, determinam-se os vetores \mathbf{v} de modo que eles minimizem o valor do resíduo \mathbf{r} :

$$\mathbf{v}^{k+1} = \mathbf{r}^{k+1} + \beta_k \mathbf{v}^k.$$

Agora, da condição para que os vetores \mathbf{v} sejam conjugados,

$$\begin{aligned} \mathbf{v}^k \cdot \mathbf{A}\mathbf{v}^{k+1} &= 0 \\ \mathbf{v}^k \cdot (\mathbf{r}^{k+1} + \beta_k \mathbf{v}^k) &= 0 \\ \mathbf{v}^k \cdot \mathbf{A}\mathbf{r}^{k+1} + \beta_k (\mathbf{v}^k \cdot \mathbf{A}\mathbf{v}^k) &= 0 \\ \mathbf{A}^T \mathbf{v}^k \cdot \mathbf{r}^{k+1} + \beta_k (\mathbf{v}^k \cdot \mathbf{A}\mathbf{v}^k) &= 0 \end{aligned}$$

que resulta em

$$\beta = -\frac{\mathbf{r}^{k+1} \cdot \mathbf{A}\mathbf{v}^k}{\mathbf{v}^k \cdot \mathbf{A}\mathbf{v}^k}.$$

portanto, pode-se resumir a implementação do método dos Gradientes Conjugados na sequência fornecida no Algoritmo 1.

Algoritmo 1: Método dos Gradientes Conjugados.

Entrada: forneça \mathbf{A} , \mathbf{b} , $\mathbf{x}^{(0)}$, $\mathbf{v}^0 = \mathbf{r}^0 = \mathbf{b} - \mathbf{A}\mathbf{x}^0$, o número máximo de iterações $nmax$ e a tolerância tol ;

```

1 para  $k = 0:nmax$  faça
2    $\alpha_k = \frac{\mathbf{r}^k \cdot \mathbf{v}^k}{\mathbf{v}^k \cdot \mathbf{A}\mathbf{v}^k}$ 
3    $\mathbf{x}^{k+1} = \mathbf{x}^k + \alpha_k \mathbf{v}^k$ 
4    $\mathbf{r}^{k+1} = \mathbf{r}^k - \alpha_k \mathbf{A}\mathbf{v}^k$ 
5    $\beta_k = -\frac{\mathbf{r}^{k+1} \cdot \mathbf{A}\mathbf{v}^k}{\mathbf{v}^k \cdot \mathbf{A}\mathbf{v}^k}$ 
6    $\mathbf{v}^{k+1} = \mathbf{r}^{k+1} + \beta_k \mathbf{v}^k$ 
7   se  $|x^{(k+1)} - x^{(k)}| < tol$  então
8      $\mathbf{x} = \mathbf{x}^{k+1}$  senão
9     para  $k = nmax$  não houve convergência.

```

3 SOLUÇÃO NUMÉRICA VIA A BIBLIOTECA PETSC

No Capítulo 1, foi obtida a equação governante do escoamento monofásico isotérmico de óleo no interior de um reservatório contendo um poço produtor vertical. Dando prosseguimento, no Capítulo 2, os métodos CVFD e de Picard possibilitaram a obtenção da sua forma final discretizada e linearizada. Em função da utilização de um método implícito no tempo, um sistema de equações algébricas lineares (cuja matriz dos coeficientes é simétrica) deve ser solucionado, a cada passo de tempo, por métodos do tipo direto ou indireto (iterativo) (Dornelles, 2016). Neste trabalho, optou-se por utilizar os métodos iterativos.

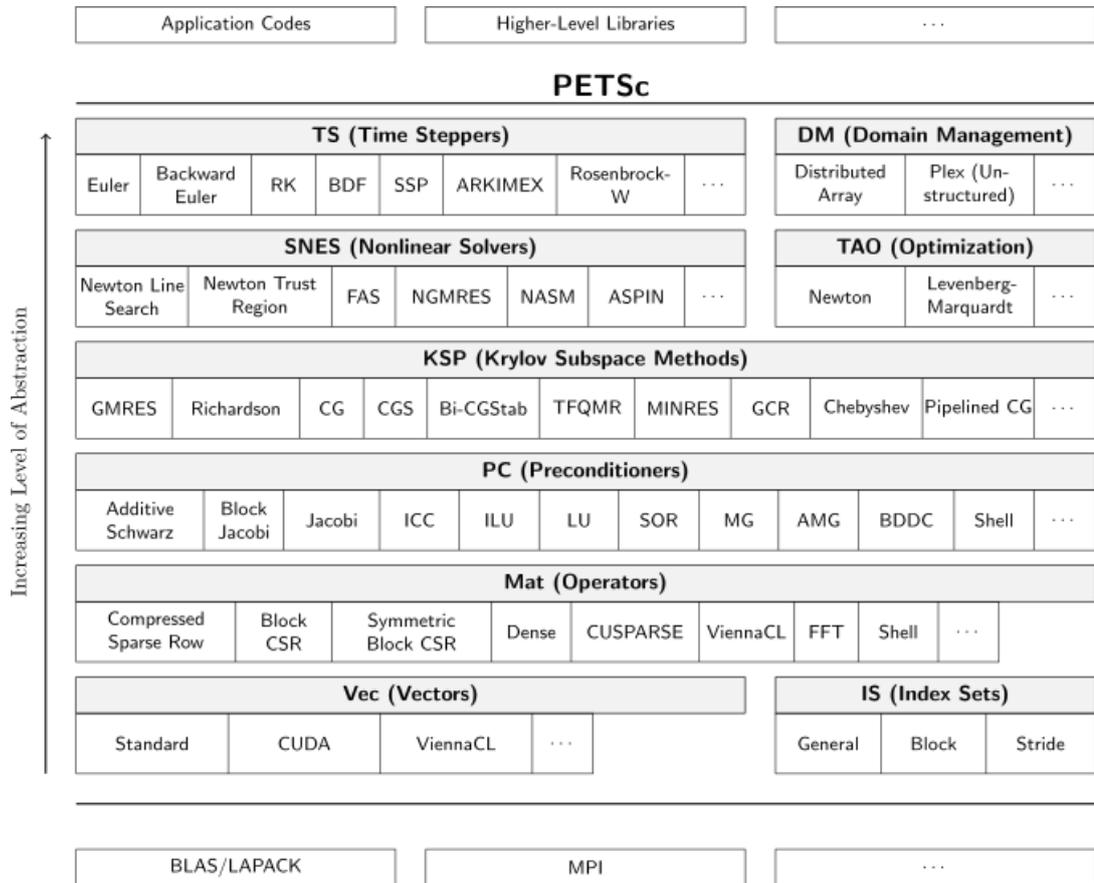
3.1 Biblioteca PETSc

A biblioteca *Portable, Extensible Toolkit for Scientific Computation* fornece um conjunto de estrutura de dados e rotinas para aplicações em larga escala, com recursos para a execução em paralelo ou em série, facilitando a implementação de códigos destinados à computação científica, os quais podem ser escritos, por exemplo, nas linguagens C, C++, Fortran ou Python. Ela contém a biblioteca *Toolkit for Advanced Optimization* (TAO) voltada para a resolução de equações diferenciais parciais e problemas que demandam um elevado desempenho computacional. Por padrão, todos os programas são executados utilizando a *Message Passing Interface* (MPI) (Balay et al., 2024). A sua estrutura computacional permite uma integração com a linguagem escolhida pelo usuário, possibilitando o aproveitamento de um programa computacional pré-existente³, flexibilizando a reutilização de códigos numéricos.

De modo a viabilizar a sua utilização, é necessário instalá-la juntamente com um conjunto de “pacotes de programas” que proporcionem a compilação e a execução do programa computacional criado pelo usuário. As orientações para a sua instalação e utilização encontram-se disponíveis no endereço eletrônico <https://petsc.org> (Balay et al., 2024). Neste trabalho, a distribuição empregada é a PETSc 3.18 de 2022 e o código numérico foi desenvolvido usando a linguagem de programação C. A Figura 4 introduz a estrutura de hierarquia da PETSc/TAO, organizada segundo o nível de abstração do programa, contendo os principais objetos algébricos, os tipos de métodos de resolução e os pré-condicionadores disponíveis (Balay et al., 2024).

³ Desde que se respeite a restrição das “palavras” reservadas da biblioteca PETSc.

Figura 4 - Biblioteca PETSc



Fonte: [Balay et al., 2024](#).

Para a obtenção da solução numérica, conforme adiantado, escolheu-se o ambiente de programação em linguagem C e a utilização de alguns dos recursos da biblioteca científica PETSc.

Após a discretização da equação governante, a matriz dos coeficientes \mathbf{A} , associada ao sistema de equações algébricas linearizadas, é esparsa, simétrica, pentadiagonal e com predominância da diagonal principal. As componentes do vetor \mathbf{b} contêm as pressões obtidas no passo de tempo anterior, acrescidas do termo fonte.

No Algoritmo 2, lista-se as principais etapas a serem efetivadas para a implementação da utilização de um dos métodos de resolução do pacote *Krylov Subspace Methods* (KSP) contidos na sua biblioteca `<petscksp.h>`.

Algoritmo 2: Resolução básica utilizando a PETSc

- 1 Inicialização da biblioteca PETSc adequada ao problema;
 - 2 Declaração das variáveis do tipo PETSc;
 - 3 Obtenção dos parâmetros do problema;
 - 4 Inicialização das matrizes e vetores;
 - 5 Configuração do *solver*;
 - 6 Resolução do sistema linear $\mathbf{Ax} = \mathbf{b}$ pelo método escolhido;
 - 7 Verificação dos resultados e/ou arquivamento de dados;
 - 8 Liberação da memória e finalização da biblioteca PETSc.
-

3.2 Declaração das variáveis

Os principais tipos de dados da PETSc podem ser vistos na Tabela 1. Um fato interessante é a possibilidade de se alterar o tamanho das variáveis. Por exemplo, é possível mudar a configuração de uma variável do tipo PetscInt de 32 bits para 64 bits.

Tabela 1 - Tipos de dados da biblioteca PETSc utilizados

Tipo	Descrição
PetscInt	Variável para números inteiros
PetscScalar	Variável para números reais com precisão dupla
PetscReal	Representa um número Real de um PetscScalar
PetscBool	Variável lógica: 0 ou 1
Vec	Declaração de um vetor
Mat	Declaração de uma matriz
KSP	Declaração de soluções da família KSP
PC	Declaração dos pré-condicionadores

Fonte: O autor, 2024.

Os parâmetros de entrada do simulador encontram-se organizados em arquivos, facilitando a realização das simulações numéricas e evitando a necessidade da recompilação do código numérico a cada alteração deles. Na sequência, é fornecido um exemplo de declaração de variáveis, onde N_x e N_y representam os números de células na malha computacional, nas direções x e y , respectivamente:

```
//Declaração das variáveis principais
Vec          x,b;
Mat          A;
Ksp          ksp;
PC           pc;
```

```

    PetscInt      Nx,Ny,col[5];
    PetscScalar   *resultado,v[5];
//Variáveis comuns
    int          i,j;
    double       Lx,Ly,Lz;

```

As variáveis seguem as mesmas regras da sintaxe da linguagem C, podendo ser declaradas como global ou local. Os vetores e matrizes são apenas apontados, sendo necessário realizar a alocação de memória e as configurações dos parâmetros.

3.3 Inicialização das matrizes e vetores

As matrizes e os vetores necessitam de uma atenção especial em função do tipo de método que se deseja utilizar, influenciando diretamente nas configurações e alocações de memória. Por padrão, as matrizes são alocadas em uma forma compactada via a técnica conhecida como *Compressed Sparse Row* (CSR) (Werneck et al., 2019). Segue um exemplo de configuração da matriz e dos vetores:

```

//Parametrização da matriz
    MatCreate(PETSC_COMM_WORLD, &A);
    MatSetSizes(A, PETSC_DECIDE, PETSC_DECIDE, Nx * Ny, Nx * Ny);
    MatSetFromOptions(A);
    MatSetUp(A);
//Parametrização do vetor
    VecCreate(PETSC_COMM_WORLD, &x);
    VecSetSizes(x, PETSC_DECIDE, Nx * Ny);
    VecSetFromOptions(x);
//Função para configurar vetores com as mesmas dimensões
    VecDuplicate(x, &b);

```

Após a locação de memória, pode-se passar para a etapa de definição dos valores dos elementos dos vetores e da matriz. É fornecido, agora, um exemplo com a inicialização do vetor **b** e da matriz **A**. Para inserir cada linha da matriz, é necessário fornecer um *array* com a posição e outro contendo os valores, *col* e *v* respectivamente, enquanto que a variável *i* informa qual é a linha:

```

//Função para alocar um valor a todos os elementos do vetor
    VecSet(b, P_ref);
//Função para inserir os valores de uma linha na matriz pentadiagonal "A"
    MatSetValues(A, 1, &i, 5, col, v, INSERT_VALUES)

```

```
//Funções de construção devem ser chamadas
  MatAssemblyBegin(A, MAT_FINAL_ASSEMBLY);
  MatAssemblyEnd(A, MAT_FINAL_ASSEMBLY);
```

3.4 Configuração do método de resolução

Uma vez escolhido o método KSP, é necessário configurarem as suas opções. Quando uma função de configuração não é chamada, a PETSc utiliza as definidas como padrão. Por exemplo, caso não esteja determinado que o *KSPSetType* é o do método dos Gradientes Conjugados (KSPCG), por padrão seria escolhido o GMRES. Por intermédio da função *KSPSetTolerances* são estabelecidos os critérios de tolerância:

```
//Criação do solver linear e configurações das opções
  KSPCreate(PETSC_COMM_WORLD, &ksp);
  KSPSetType(ksp, KSPCG);
  KSPSetOperators(ksp, A, A);
  KSPSetTolerances(ksp, 1.e-10 , 1.e-50, PETSC_DEFAULT, PETSC_DEFAULT);
```

3.5 Resolução do sistema linear

A função *KSPSolve* é a responsável por dar início ao processo de resolução do sistema algébrico $\mathbf{Ax} = \mathbf{b}$, sendo imprescindível fornecer os vetores \mathbf{x} e \mathbf{b} , sabendo-se que a matriz \mathbf{A} já foi configurada via a função *KSPSetOperators*. Após ter sido alcançada a convergência, a solução do sistema é armazenada no vetor \mathbf{x} .

A função *KSPSetInitialGuessNonzero* permite informar a estimativa inicial. Quando ela não for configurada, o padrão é o de se começar com $\mathbf{x} = \mathbf{0}$, que pode aumentar consideravelmente o número de iterações e o tempo de execução até a convergência, de acordo com a tolerância estipulada,

```
//Resolução do sistema linear
  KSPSetInitialGuessNonzero(ksp, PETSC_TRUE).
  KSPSetFromOptions(ksp);
  KSPSolve(ksp, b, x);
```

3.6 Verificação dos resultados

Para se ter acesso às informações de cada componente do vetor solução é necessário utilizar um ponteiro e a função *VecGetArray*. Também pode-se manipular diretamente o próprio vetor, mediante o uso de diversas funções pré-existentes como, por exemplo, a função *VecView*, que exhibe no monitor os elementos do vetor:

```
//Função para apontar os dados do vetor para o ponteiro "resultado"
    VecGetArray(x, &resultado);
//Imprimi na tela o vetor solução
    VecView(x,PETSC_VIEWER_STDOUT_WORLD);
```

3.7 Liberação de memória e finalização da execução

Para que a simulação seja finalizada, é indispensável que seja feita a liberação da memória alocada. A cada tipo de dado corresponde uma função específica para tal finalidade. A última função chamada em um código PETSc é a *PetscFinalize*, responsável por concluir a execução do programa:

```
VecRestoreArray(&resultado);
VecDestroy(&x);VecDestroy(&b);
MatDestroy(&A);
KSPDestroy(&ksp);
PetscFinalize();
```

Por outro lado, a função *PetscInitialize* é a encarregada por iniciar a aplicação da biblioteca, sendo a primeira função PETSc dentro do código.

4 RESULTADOS

Neste capítulo, na Seção 4.1, são apresentados os parâmetros e os valores considerados nas simulações. Os resultados obtidos com o método dos Gradientes Conjugados (versão anterior) e com o seu equivalente disponível na PETSc (versão atual) são comparados e validados na Seção 4.2. Em seguida, é feito um estudo de refinamento de malha, na Seção 4.3, a fim de se verificar se o método numérico é convergente. Na Seção 4.4, encontram-se os resultados determinados variando-se os valores da permeabilidade e porosidade e é realizada uma análise de sensibilidade, auxiliar na verificação do comportamento físico do escoamento. Por fim, na Seção 4.5, procede-se a uma análise de desempenho computacional levando em conta os *solvers* e pré-condicionadores da PETSc utilizados, como parâmetro de comparação usam-se os tempos de execução.

4.1 Características gerais das simulações

Nas simulações de reservatório, quando se tem por meta a estimativa da pressão no poço, utiliza-se um passo de tempo variável para melhor capturar os efeitos que se desenrolam nos instantes iniciais da produção. Portanto, um passo de tempo inicial, Δt_i , é multiplicado, sequencialmente, pelo fator $F_{\Delta t}$, a cada passo de tempo, até se atingir o passo de tempo final, Δt_{final} .

Os parâmetros gerais, as propriedades da rocha, do fluido e geométricas, para a construção do caso de referência, podem ser encontrados na Tabela 2, tendo sido considerada a viscosidade constante. A Tabela 3 exhibe a quantidade de células, nas direções dos eixos x e y , respectivamente n_x e n_y , consideradas na proposição das diferentes malhas computacionais utilizadas na investigação do comportamento da solução numérica, ao se implementar o refinamento de malha, com o poço localizado na célula central da malha. Ele é crucial para que se possa garantir a obtenção de soluções numéricas acuradas, além de se reduzir a estocagem numérica associada ao uso da técnica de acoplamento poço-reservatório escolhida (Peaceman, 1978; Peaceman, 1983; Souza, 2013).

No que diz respeito à versão atual do simulador II, ela foi desenvolvida usando-se a linguagem de programação C padrão. Os gráficos apresentados foram gerados utilizando-se o *pgfplots*, que é um dos pacotes, de código aberto, do editor de texto LaTeX.

Tabela 2 - Parâmetros gerais para a rocha, o fluido e a geometria

Parâmetro	Valor	Unidade
B_0	1,3	$\text{m}^3/\text{std m}^3$
c_o	$8,0 \times 10^{-7}$	kPa^{-1}
c_r	$5,0 \times 10^{-7}$	kPa^{-1}
$F_{\Delta t}$	1,1	–
$k_x = k_y = k$	0,05	μm^2
$L_x = L_y$	1.000	m
L_z	50	m
$p_{inic} = p_0$	69.000	kPa
q_{sc}	-1.000	m^3/dia
t_{final}	100	dia
tol	1×10^{-6}	kPa
Δt_i	0,001	dia
Δt_{final}	5	dia
μ^0	0,001	$\text{Pa} \cdot \text{s}$
ρ_{ref}	840	kg/m^3
ρ_r	2.500	kg/m^3
$\phi_{ini} = \phi_0$	0,2	–

Fonte: O autor, 2024.

Tabela 3 - Malhas consideradas no estudo de refinamento

Malha	n_x	n_y
1	11	11
2	33	33
3	65	65
4	129	129
5	257	257
6	513	513
7	1025	1025

Fonte: O autor, 2024.

As simulações foram executadas em um nó do *cluster* do Laboratório de Computação de Alto Desempenho (LACAD) do Instituto Politécnico da UERJ, cujas especificações são as seguintes:

1. Modelo: Dell;
2. Processador: Intel(R) Xeon Silver 4210 2,2 GHz;
3. Memória: 128 Gb;
4. *Instruction Set*: 64 bits;
5. Capacidade de armazenamento: 0,5 TB;
6. Número de núcleos: 10;
7. Número de *threads*: 20;
8. Sistema operacional: Linux OpenSuse 15.5;
9. Biblioteca PETSc/TAO 3.18.

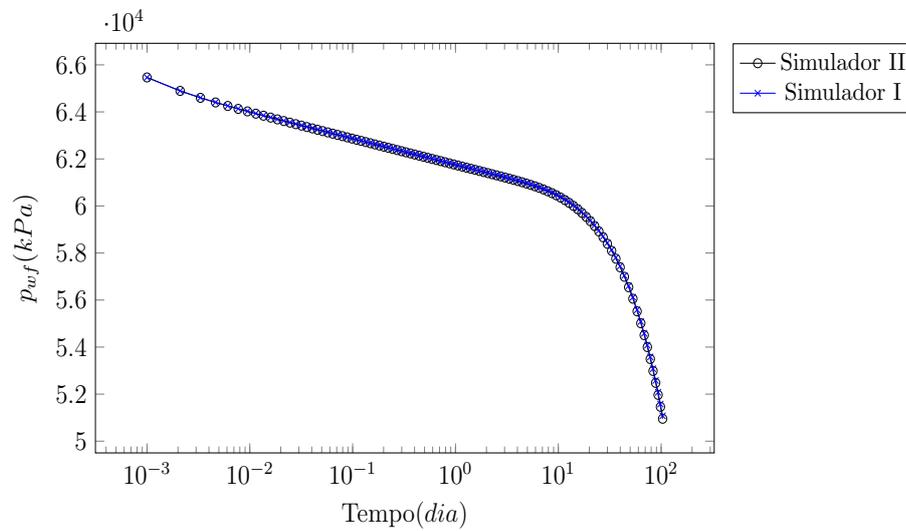
Os resultados para a pressão no poço são apresentados em gráficos conhecidos como *especializado*, no qual tem-se a pressão no poço *versus* o tempo de produção. A escala do tempo é logarítmica, como tipicamente usada na área da Análise de Testes de Pressão na Engenharia de Petróleo (Rosa; Carvalho; Xavier, 2006).

4.2 Validação dos resultados utilizando as duas versões dos simuladores

Na Figura 5, comparam-se os resultados obtidos com os Simuladores I (anterior) e II (atual). No primeiro, pré-existente, foi implementado o método dos Gradientes Conjugados. O segundo, desenvolvido neste trabalho, empregou o método *Conjugate Gradient* (CG) da biblioteca PETSc. Todos os valores foram calculados com a Malha 5.

Verifica-se, para todos os valores da pressão no poço, que as curvas encontram-se sobrepostas; isto é, foram obtidos os mesmos resultados para todos os passos de tempo. Ademais, os tempos de execução foram diferentes, sendo de 50,86 segundos para o Simulador I e 76,09 segundos para o II. Vale ressaltar que como o Simulador II usa a biblioteca PETSc, sendo possível avaliar diversos métodos de soluções, mediante o uso de diferentes funções internas, existindo, então, particularidades inerentes no que diz respeito às configurações e definições dos parâmetros internos, que podem levar a um aumento do tempo de execução. Destaca-se que os resultados obtidos com o Simulador I já haviam sido validados em trabalhos anteriores, inclusive usando soluções analíticas para os casos simplificados (Lopes, 2016).

Figura 5 - Pressão no poço em função do tempo de produção - validação dos simuladores



Fonte: O autor, 2024.

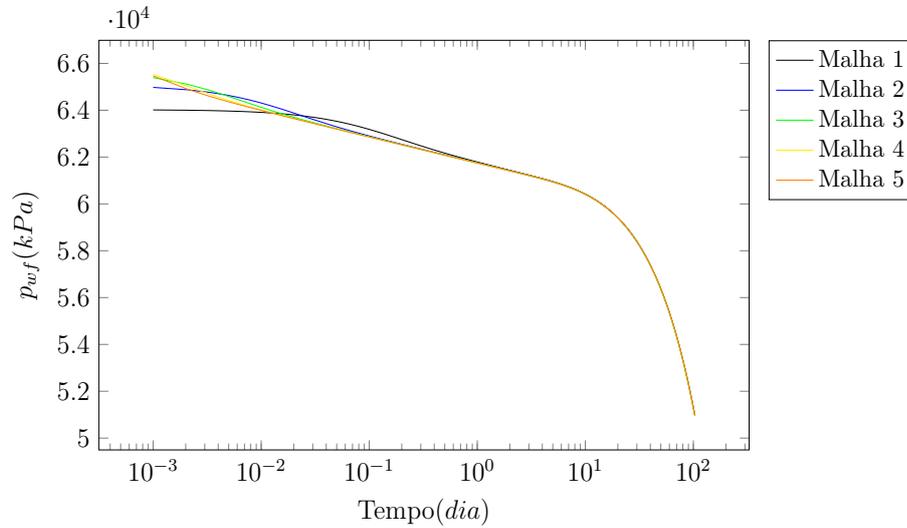
4.3 Refinamento de malha

Neste estudo, foram empregadas sete malhas de modo a se determinar a mais adequada tendo em vista a convergência numérica do método (Aziz; Settari, 1990; Ertekin; Abou-Kassem; King, 2001). Elas foram refinadas nas direções dos eixos x e y , mantendo-se inalteradas as propriedades físicas e as condições de operação do caso de referência.

Na Figura 6, mostram-se os valores obtidos sob o refinamento de malha, sendo perceptível, nos instantes iniciais da produção, o surgimento de patamares provocados pelo aparecimento do artefato numérico. Ele é chamado de estocagem numérica, devido à semelhança qualitativa da variação de pw_f , em função do tempo, quando da presença da estocagem física no poço (Souza, 2013). Eles já eram esperados e são consequência da escolha da técnica de acoplamento poço-reservatório aqui empregada. Ela foi introduzida por Peaceman (1978), que considerou que o escoamento, na região de interação entre o poço e o reservatório, se dava em condições de regime permanente. A magnitude do artefato é dependente da malha computacional empregada e das propriedades de fluido e de rocha, por exemplo.

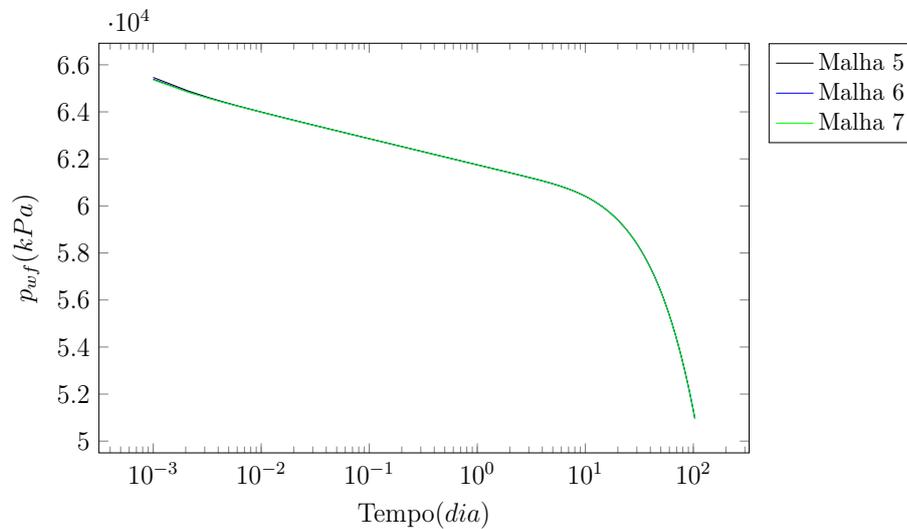
É possível verificar, na Figura 7, a redução do efeito do artefato numérico à medida que as malhas são refinadas. Isso mostra que as soluções, a partir da Malha 5, não apresentam alterações significativas nos valores da pressão no poço e pode-se considerar que a convergência numérica foi estabelecida. Vale destacar que a mitigação da estocagem numérica não faz parte dos objetivos desta dissertação. Em conclusão, reteve-se a Malha 5 como sendo aquela que deve ser usada em conjunto com os demais parâmetros e valores já estipulados para o caso de referência.

Figura 6 - Pressão no poço em função do tempo de produção - refinamento de malha I



Fonte: O autor, 2024.

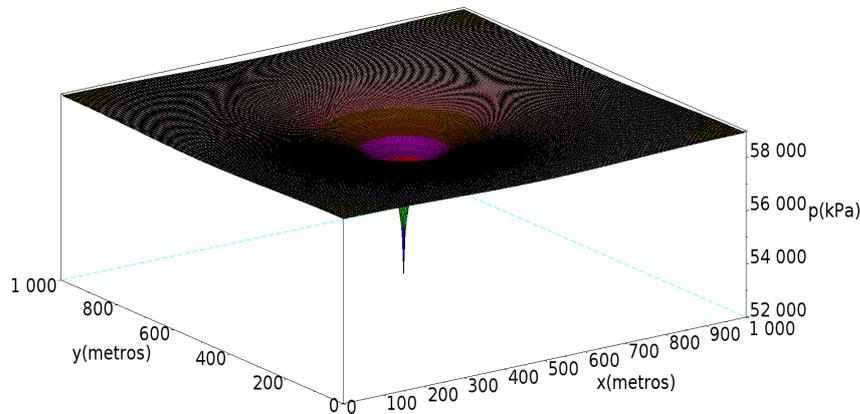
Figura 7 - Pressão no poço em função do tempo de produção - refinamento de malha II



Fonte: O autor, 2024.

Na Figura 8, a título de ilustração, é exibida a superfície que fornece a distribuição de pressão no interior do reservatório, computada utilizando-se a Malha 5. A distribuição simétrica obtida exhibe o comportamento físico esperado, tendo em vista as propriedades de rocha consideradas (campos homogêneos de permeabilidade absoluta e de porosidade inicial), com as menores pressões localizadas na região onde está localizado o poço produtor.

Figura 8 - Distribuição do campo de pressões no reservatório



Legenda: Valores para o caso de referência após transcorridos 100 dias de simulação.

Fonte: O autor, 2024.

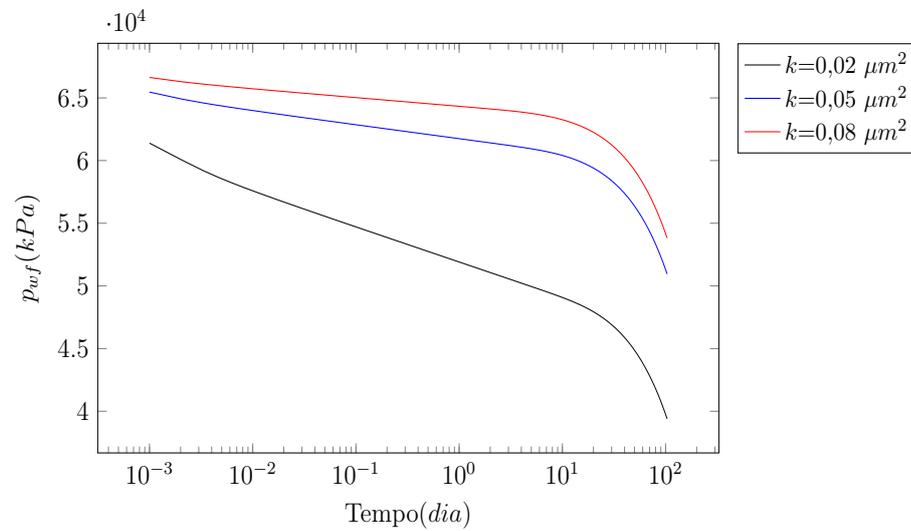
4.4 Variação de algumas das propriedades físicas

A alteração de alguns dos valores das propriedades físicas pode ajudar a se constatar se os resultados, numericamente calculados, estão de acordo com aqueles conhecidos na literatura.

Por exemplo, na Figura 9 encontram-se os correspondentes à diminuição e à elevação da permeabilidade absoluta, tomando-se como ponto de partida o caso de referência. É sabido, de acordo com a lei de Darcy, que a velocidade de escoamento, de um fluido no interior de um meio poroso, depende diretamente do valor da permeabilidade absoluta e inversamente do da viscosidade. Além disso, averígua-se que para os menores valores da permeabilidade absoluta obtêm-se as maiores variações de pressão, devido ao fato do aumento da resistência ao escoamento através do meio poroso (Ertekin; Abou-Kassem; King, 2001).

Na Figura 10, tem-se os resultados das simulações quando se aumentam e se diminuem os valores da porosidade do caso de referência. É de conhecimento geral que a porosidade é uma propriedade relacionada à capacidade de armazenamento do volume de fluido no reservatório. Da figura, pode-se atestar que para os maiores valores de porosidade correspondem as menores quedas de pressão, em função do aumento do volume de fluido estocado nos poros. A porosidade também influencia na capacidade do meio poroso em transportar o fluido. Quanto menor o seu valor, mais rápido se dará o seu deslocamento e, desta forma, os efeitos de fronteira se farão sentir mais cedo, como pode ser observado na

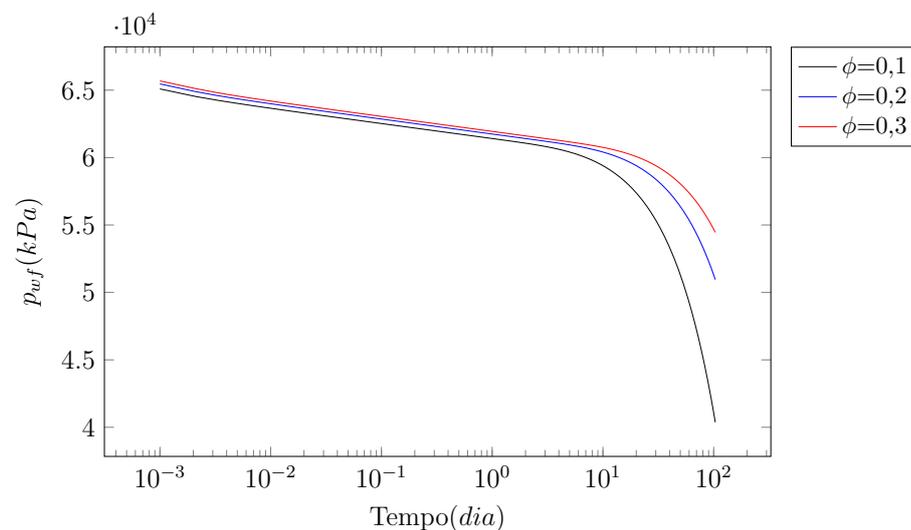
Figura 9 - Pressão no poço em função do tempo de produção - variação da permeabilidade



Fonte: O autor, 2024.

mudança, mais acentuada, no perfil das curvas de pressão para os tempos tardios (Rosa; Carvalho; Xavier, 2006). Portanto, o efeito da sua variação é inverso ao da permeabilidade absoluta.

Figura 10 - Pressão no poço em função do tempo de produção - variação da porosidade



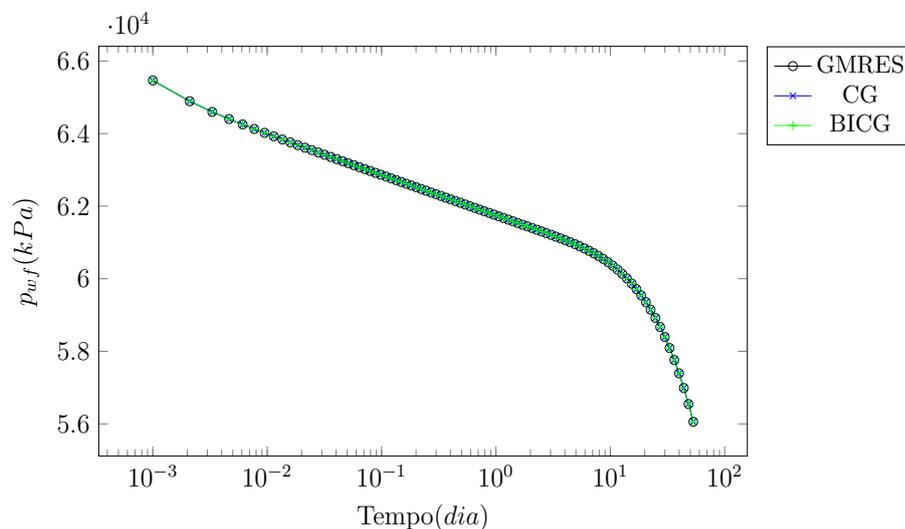
Fonte: O autor, 2024.

4.5 Comparação de alguns dos métodos de solução e pré-condicionadores da PETSc

A versão da biblioteca PETSc 3.18 permite ao usuário escolher um dentre os 51 métodos de resolução de sistemas de equações disponíveis na biblioteca KSP. Em alguns casos, pode-se também trabalhar em conjunto com um dos 55 tipos de pré-condicionadores. Essa diversidade mostra a versatilidade da biblioteca e, dentre as possibilidades de escolha, foram selecionados os métodos GMRES (*Generalized Minimal Residual Method*), CG (*Conjugate Gradient Method*) e BICG (*Biconjugate Gradient Method*), em conjunto com os pré-condicionadores de Jacobi, LU, ILU (*Incomplete LU*), SSOR (*Successive Over-Relaxation Method*). Destaca-se que também foram realizadas simulações sem o uso de um pré-condicionador, quando da comparação dos tempos de execução das simulações.

Inicia-se pelos valores obtidos sem o emprego de pré-condicionadores, Figura 11. Percebe-se que é difícil distinguir as curvas umas das outras, sendo que o erro relativo calculado foi inferior a 0,001%. No entanto, existem variações consideráveis no que se refere aos tempos de execução, sendo que o menor valor foi alcançado com o uso do método CG, com a duração de 76,09 s para executar a simulação do caso de referência, seguido pelo GMRES com 154,49 s e, por fim, o BICG com 148,89 s.

Figura 11 - Pressão no poço em função do tempo de produção - diferentes métodos



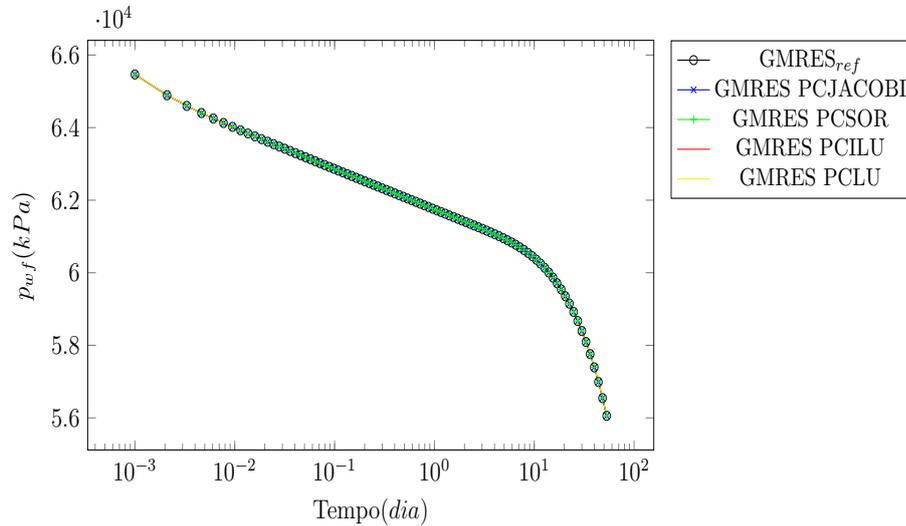
Legenda: Obtenção da solução empregando os métodos GMRES, CG e BICG.

Fonte: O autor, 2024.

Nas Figuras 12, 13 e 14 têm-se as curvas de pressão determinadas com os mesmos três métodos, só que agora fez-se uso também dos pré-condicionadores. Pode-se afirmar também que as curvas encontram-se sobrepostas, tanto nos casos daquelas computadas

com os pré-condicionadores Jacobi, SSOR, ILU, LU, como sem os mesmos. Entretanto, uma vez mais, houve alterações substanciais no que diz respeito aos tempos de execução.

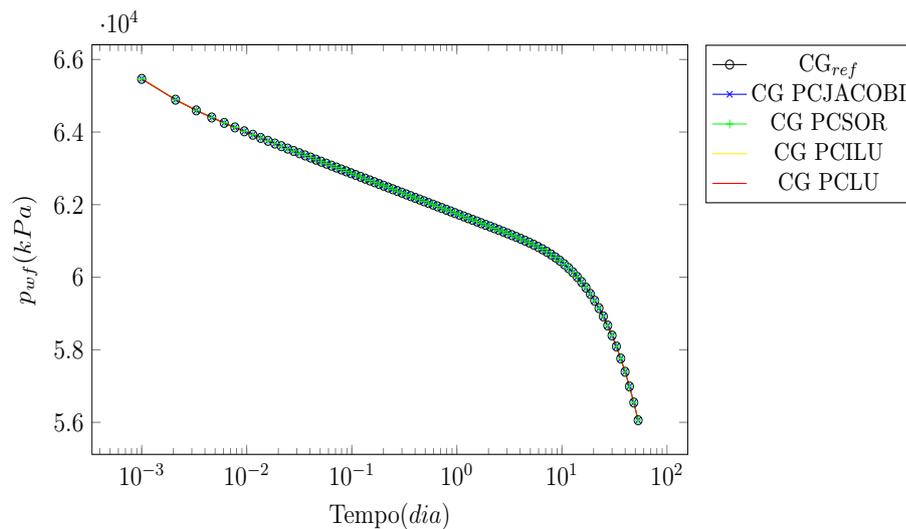
Figura 12 - Pressão no poço em função do tempo de produção - diferentes pré-condicionadores e o GMRES



Legenda: Comparação das soluções obtidas com o GMRES sem pré-condicionador e com os pré-condicionadores de Jacobi, SSOR, ILU e LU.

Fonte: O autor, 2024.

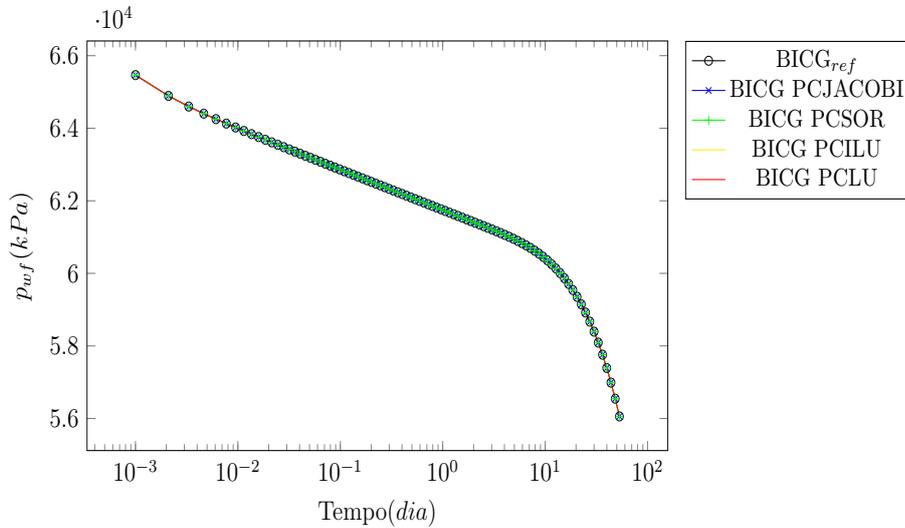
Figura 13 - Pressão no poço em função do tempo de produção - diferentes pré-condicionadores e o CG



Legenda: Comparação das soluções obtidas com o CG sem pré-condicionador e com os pré-condicionadores de Jacobi, SSOR, ILU e LU.

Fonte: O autor, 2024.

Figura 14 - Pressão no poço em função do tempo de produção - diferentes pré-condicionadores e o BICG



Legenda: Comparação das soluções obtidas com o BICG sem pré-condicionador e com os pré-condicionadores Jacobi, SSOR, ILU e LU.

Fonte: O autor, 2024.

Chama-se a atenção para o fato de que o método BICG não teria o seu emprego recomendado para o problema estudado, uma vez que a matriz dos coeficientes é simétrica. Como consequência, é natural que se tenha um tempo de execução aproximadamente duas vezes maior do que o do CG. No entanto, como a finalidade principal era a de se familiarizar com os métodos disponíveis na PETSc, ele foi implementado e como resultado gerou soluções que convergiram como as dos demais métodos, Figuras 11 e 14. Além disso, salienta-se que ele pode ser de extrema utilidade, na simulação de reservatórios, quando a matriz dos coeficientes não for mais simétrica, como no caso de alguns escoamentos multifásicos (Ertekin; Abou-Kassem; King, 2001).

As Tabelas 5, 4 e 6 contêm os valores dos tempos de execução quando da utilização dos referidos métodos e respectivos pré-condicionadores. Para o método GMRES, o uso dos pré-condicionadores não resultou numa diminuição do tempo de execução, quando comparado ao caso no qual eles não foram utilizados. Diferentemente, em se tratando do método CG, o pré-condicionador SSOR conseguiu melhorar o tempo de simulação em 6,57%. Já para o método BICG, o mesmo pré-condicionador também melhorou o tempo de simulação em 13,9%. No entanto, as conclusões aqui dispostas não devem servir como base para uma generalização, pois a eficiência dos pré-condicionadores está associada às características da matriz dos coeficientes (dos seus autovalores). Como pôde ser visto, o

método CG é muito eficiente no caso das matrizes simétricas.

Tabela 4 - Tempo de execução - CG

Método	Pré-condicionador	Tempo (s)
CG	–	76,09
	Jacobi	101,02
	LU	746,49
	ILU	73,8
	SSOR	71,0

Fonte: O autor, 2024.

Tabela 5 - Tempo de execução - GMRES

Método	Pré-condicionador	Tempo (s)
GMRES	–	144,49
	Jacobi	546,43
	LU	722,1
	ILU	146,54
	SSOR	163,5

Fonte: O autor, 2024.

Tabela 6 - Tempo de execução - BICG

Método	Pré-condicionador	Tempo (s)
BICG	–	148,89
	Jacobi	198,37
	LU	732,31
	ILU	144,11
	SSOR	128,18

Fonte: O autor, 2024.

Os resultados calculados quando se variaram os valores da permeabilidade e da porosidade foram discutidos na Seção 4.4. Embora o foco tenha sido a validação deles e o entendimento da física do problema, vale investigar se essas propriedades também podem afetar o tempo de execução.

Na Tabela 7, encontram-se os tempos de simulação quando da variação da permeabilidade absoluta. Ela está diretamente relacionada com os valores das transmissibilidades,

que aparecem nas diagonais principais da matriz dos coeficientes, alterando a dominância da diagonal principal, influenciando, assim, no número de iterações para que se obtenha a convergência e, com isso, o tempo de execução. Vê-se que os respectivos tempos aumentam conforme os seus valores crescem.

Tabela 7 - Tempo de execução variando as permeabilidades

Solução	Tempo (s)
$k= 0,02 \mu\text{m}^2$	63,03
$k= 0,05 \mu\text{m}^2$	71,04
$k= 0,08 \mu\text{m}^2$	84,15

Fonte: O autor, 2024.

Por sua vez, a mudança dos valores da porosidade leva a modificações apenas nos termos que compõem a diagonal principal, como consequência alteração do peso da dominância da diagonal. Tal fato levou a uma redução do tempo de execução à medida que os seus valores foram aumentando, Tabela 8.

Tabela 8 - Tempo de simulação variando as porosidades

Solução	Tempo (s)
$\phi=0,1$	92,32
$\phi=0,2$	71,04
$\phi=0,3$	68,46

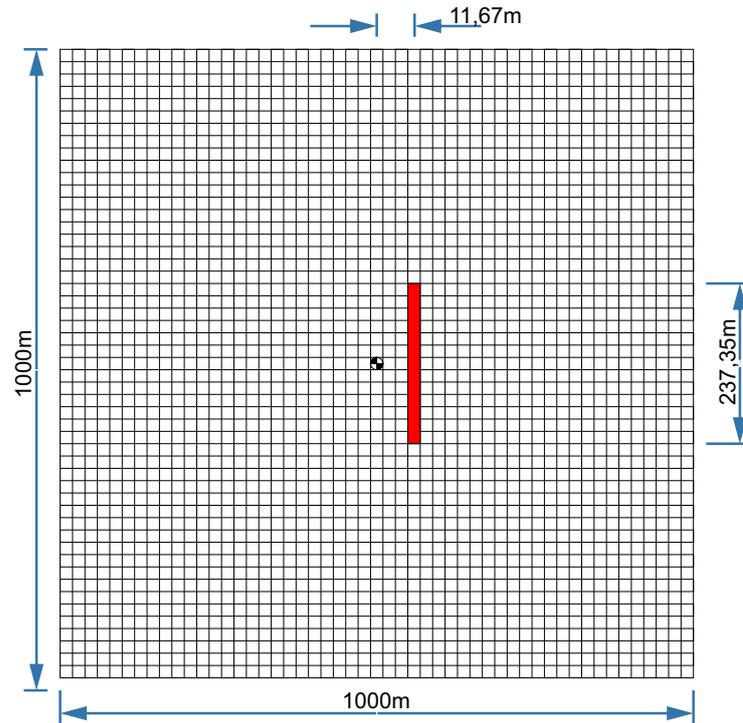
Fonte: O autor, 2024.

4.6 Escoamento em um meio heterogêneo

Neste ponto, inclui-se uma discussão tratando do escoamento em meios heterogêneos. As heterogeneidades aumentam a complexidade quando da obtenção das soluções e introduzem dificuldades adicionais quando das suas implementações. Entretanto, esse é um caminho a ser percorrido, a fim de que se possa tratar de problemas mais próximos dos encontrados na realidade. Com o objetivo de se verificar o comportamento da solução numérica do Simulador II, alterou-se a permeabilidade absoluta em uma dada região (faixa) do reservatório, com o seu comprimento perfazendo um total de 61 células e ela está localizada a uma distância de 3 células do poço produtor.

Na Figura 15, há uma representação simplificada do reservatório discretizado contendo a região de heterogeneidade em vermelho. No centro da malha está o poço produtor. Os valores modificados da permeabilidade podem ser vistos na Tabela 9.

Figura 15 - Representação da malha espacial - caso com heterogeneidades



Legenda: Representação da malha com a heterogeneidade no reservatório de pressão, faixa em vermelho variando a permeabilidade.

Fonte: O autor, 2024.

Como pode ser constatado, vide a Tabela 9, a modificação do campo de permeabilidade absoluta, na região especificada; isto é, a inclusão de uma heterogeneidade no domínio do problema físico-matemático, implicou um maior número de iterações para que a convergência fosse atingida, influenciando, assim, diretamente no tempo de execução.

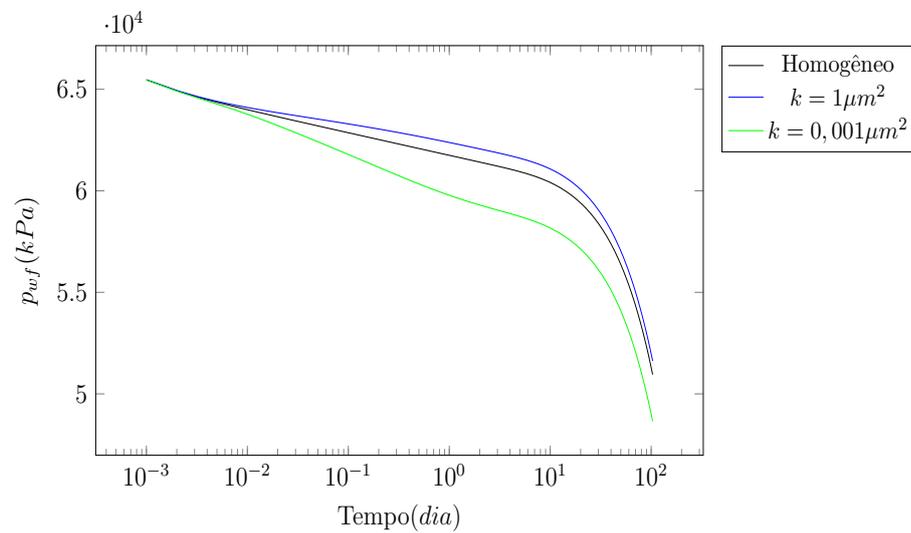
Na Figura 16, são mostradas as curvas de pressão no poço quando do escoamento nos meios homogêneo e heterogêneo. Elas estão, qualitativamente, de acordo com a física do escoamento, com as maiores pressões no poço estando relacionadas à existência de uma região de maior permeabilidade. A faixa do reservatório contendo os maiores valores da permeabilidade absoluta se comporta como um canal que oferece uma menor resistência ao escoamento, e também é responsável pelo aumento da permeabilidade equivalente do sistema compreendendo as diferentes regiões do reservatório. A inclinação da curva da pressão no poço *versus* o tempo, no gráfico especializado, também é uma função do valor da permeabilidade, como pode ser observado na figura.

Tabela 9 - Tempo de execução inserindo heterogeneidades

Meio	Tempo (s)
Homogêneo - $k = 0,05 \mu\text{m}^2$	71,04
Heterogêneo - faixa com $k=0,001 \mu\text{m}^2$	88,41
Heterogêneo - faixa com $k= 1,0 \mu\text{m}^2$	101,15

Fonte: O autor, 2024.

Figura 16 - Pressão no poço em função do tempo de produção - caso com heterogeneidades



Legenda: Comparação das soluções variando a permeabilidade em uma região do reservatório.

Fonte: O autor, 2024.

CONCLUSÕES E PERSPECTIVAS

Neste trabalho, a utilização da biblioteca PETSc exigiu, primeiramente, a compreensão da forma como as matrizes e os vetores são armazenados e utilizados, além de como se deve proceder para se escolher um dado método de resolução. Posteriormente, codificaram-se os módulos típicos presentes nos simuladores de reservatórios, tais como os associados ao cálculo das propriedades do fluido e ao método de Picard. Desta forma, finalizadas as implementações, as simulações e as discussões acerca dos resultados, passa-se agora às conclusões e às perspectivas futuras.

Conclusões

O uso de bibliotecas científicas, como a PETSc, é uma prática moderna no campo da modelagem computacional. Trata-se de uma ferramenta versátil para as simulações de escoamentos em reservatórios de petróleo, quando se precisa de muita capacidade de memória e de processamento, devido ao tamanho das malhas e à quantidade de passos de tempo requeridos para a realização de simulações realísticas. Neste contexto, surge a necessidade de se estudarem os métodos de solução de sistemas de equações que venham a possibilitar a redução do tempo de simulação mantendo, ao mesmo tempo, a confiabilidade dos resultados. Portanto, a utilização de bibliotecas bem estabelecidas e testadas passa a ser um diferencial no desenvolvimento de simuladores de reservatórios computacionalmente mais eficientes.

A implementação de um simulador utilizando a PETSc mostrou ser um desafio devido à carência de trabalhos e materiais de apoio, no âmbito da simulação de escoamentos em meios porosos. Durante a etapa de programação, surgiram muitos imprevisto que se mostraram difíceis de serem resolvidas. No entanto, após elas terem sido sanadas, o ambiente inerente à biblioteca torna-se natural e intuitivo.

A utilização do Simulador I do LABTRAN foi de extrema importância durante o processo de codificação do novo simulador utilizando as ferramentas da PETSc. A partir do seu uso foi possível validar os resultados, além de ter facilitado o rastreamento dos erros de implementação das equações e da matriz dos coeficientes. No entanto, um maior tempo será demandado para que se possa mensurar, com um maior grau de detalhamento, os ganhos de desempenho que podem ser almejados, tendo em mente o leque de possibilidades aberto com o uso da referida biblioteca.

Os resultados que aqui foram apresentados, em conjunto com os procedimentos realizados visando à viabilização do uso da biblioteca PETSc, são as principais contribuições deste trabalho.

Os tempos de execução dos Simuladores I e II evidenciaram uma diferença no que diz respeito ao desempenho computacional. De um lado, tem-se um código eficiente que fornece apenas um método para tratar de um problema específico e, do outro, uma biblioteca disponibilizando diversos métodos que podem ser empregados em diferentes situações; isto é, um alto grau de escolha, mas com altos níveis de abstração. Portanto, é possível concluir que a PETSc é uma ferramenta indicada para o seu uso na simulação de reservatórios, favorecendo a determinação da melhor estratégia de solução a ser empregada e, com isso, viabilizando a otimização do simulador. Ademais, a biblioteca TAO pode contribuir para que se alcance um maior desempenho computacional do simulador, criado para a resolução de um dado problema particular.

Por fim, verificou-se que todos os resultados obtidos apresentaram, qualitativamente, o comportamento físico esperado com base naqueles disponíveis em outros trabalhos.

Perspectivas

Diferentes perspectivas emergem com a finalização desta dissertação. Primeiramente, se deve avançar na busca pela simulação de escoamentos tridimensionais.

Pretende-se, também, caminhar na direção da melhoria do desempenho computacional. Com tal finalidade, deve-se compreender como é possível efetivar a computação em paralelo, via *Message Passing Interface*, uma das opções disponíveis na PETSc.

Além disso, tem-se como perspectiva a obtenção da solução numérica utilizando uma estratégia de decomposição de operadores. Como exemplo de aplicação, pensou-se no caso do escoamento monofásico não-isotérmico em reservatórios de óleo pesado, incluindo aquecedores com a finalidade de se aumentar a mobilidade do fluido. Neste caso, ter-se-ão dois sistemas de equações algébricas, cujas variáveis dependentes serão a pressão do óleo e a temperatura média do reservatório, quando considerado o modelo a uma equação para a transferência de energia. Por outro lado, no modelo a duas equações, haverá três sistemas de equações para a determinação da pressão do óleo, da temperatura da rocha e da temperatura do óleo. Esses são alguns exemplos de problemas onde o uso das ferramentas da PETSc pode fazer a diferença.

Propõe-se, também, investigar a utilização dos recursos da PETSc quando da simulação de problemas nos quais outras técnicas de acoplamento poço-reservatório sejam consideradas. Por exemplo, quando o índice de produtividade for dependente do tempo e/ou quando poços horizontais forem empregados.

Por fim, recomenda-se que a viabilidade de uso da PETSc seja estudada nos casos dos escoamentos de gás natural e multifásicos.

REFERÊNCIAS

- AL-MOHANNADI, N. *Simulation of Horizontal Well Tests*. Tese (Doutorado) — Colorado School of Mines, Golden, USA, 2004.
- AZIZ, M.; SETTARI, A. *Petroleum Reservoir Simulation*. New York, USA: Elsevier Applied Science, 1990.
- BALAY, S. et al. *PETSc Web page*. 2024. Disponível em: <https://petsc.org>. Acesso em: 12 de jun. 2024.
- BHOWMICK, S. et al. Parallel adaptive solvers in compressible PETSc-FUN3D simulations. In: DEANE, A. et al. (Ed.). *Parallel Computational Fluid Dynamics 2005*. Amsterdam: Elsevier, 2006. p. 277–284.
- BOFFI, D. et al. A parallel solver for fluid–structure interaction problems with Lagrange multiplier. *Mathematics and Computers in Simulation*, v. 220, p. 406–424, 2024.
- BONART, H. et al. Source code generation for parallelized simulations of large-scale nonlinear equation systems on a supercomputer using MOSAIC, PETSc, and ADOL-C. In: ESPUÑA, A.; GRAELLS, M.; PUIGJANER, L. (Ed.). *27th European Symposium on Computer Aided Process Engineering*. [S.l.]: Elsevier, 2017, (Computer Aided Chemical Engineering, v. 40). p. 2083–2088.
- BOOM, P. D. et al. Parallelized discrete exterior calculus for three-dimensional elliptic problems. *Computer Physics Communications*, v. 279, p. 108456, 2022.
- CANAL, A. P. *Paralelização de Métodos de Resolução de Sistemas Lineares Esparsos com o DECK em um Cluster de PCs*. 2000. Dissertação (Dissertação de Mestrado) — Universidade Federal do Rio Grande do Sul, Porto Alegre, 2000.
- CARRACCIUOLO, L.; D’AMORE, L.; MURLI, A. Towards a parallel component for imaging in PETSc programming environment: a case study in 3-D echocardiography. *Parallel Computing*, v. 32, n. 1, p. 67–83, 2006.
- CENTOFANTI, E.; SCACCHI, S. A comparison of algebraic multigrid bidomain solvers on hybrid CPU–GPU architectures. *Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering*, v. 423, p. 116875, 2024.
- CHENG, T.; YANG, H.; SUN, S. Parallel fully coupled methods for bound-preserving solution of subsurface flow and transport in porous media. *Journal of Computational Physics*, v. 470, p. 111537, 2022.
- CHUNG, C. L. et al. Numerical reservoir simulation of shale gas in the slip flow regime. In: *XXXVI Ibero-Latin Congress on Computational Methods in Engineering*, 36. Rio de Janeiro: [s.n.], 2015.
- CLARKE, L. E.; KRISHNAMOORTHY, G. Pre-conditioning strategies to accelerate the convergence of iterative methods in multiphase flow simulations. *Mathematics and Computers in Simulation*, v. 165, p. 200–222, 2019.

- CROUCHER, A. et al. Waiwera: A parallel open-source geothermal flow simulator. *Computers & Geosciences*, v. 141, p. 104529, 2020.
- CUOMO, S. et al. Toward a multi-level parallel framework on GPU cluster with PETSc-CUDA for PDE-based optical flow computation. *Procedia Computer Science*, v. 51, p. 170–179, 2015.
- DANDEKAR, A. Y. *Petroleum Reservoir Rock and Fluid Properties*. USA: CRC Press, 2013.
- DARCY, H. *Les fontaines publiques de la ville de Dijon. Exposition et application des principes à suivre et des formules à employer dans les questions de distribution d'eau*. [S.l.]: Victor Dalmont, 1856.
- DEMIDOV, D. AMGCL-A C++ library for efficient solution of large sparse linear systems. *Software Impacts*, v. 6, p. 100037, 2020.
- DEVRIES, B. et al. Parallel implementations of FGMRES for solving large, sparse non-symmetric linear systems. *Procedia Computer Science*, Elsevier, v. 18, p. 491–500, 2013.
- DORNELLES, A. A. F. *Cálculo Numérico*. Porto Alegre, Brasil: Editora Bookman, 2016.
- DYRDAHL, J. *Thermal flow in fractured porous media and operator splitting*. Dissertação (Mestrado) — Norwegian University of Science and Technology, Trondheim, Norway, 2014.
- ERTEKIN, T.; ABOU-KASSEM, J. H.; KING, G. R. *Basic Applied Reservoir Simulation*. Richardson, USA: Society of Petroleum Engineers, 2001.
- GRATIEN, J.-M. A robust and scalable multi-level domain decomposition preconditioner for multi-core architecture with large number of cores. *Journal of Computational and Applied Mathematics*, v. 373, p. 112614, 2020.
- GUO, X. et al. New massively parallel scheme for incompressible smoothed particle hydrodynamics (ISPH) for highly nonlinear and distorted flow. *Computer Physics Communications*, v. 233, p. 16–28, 2018.
- HOVLAND, P. D.; MCINNES, L. C. Parallel simulation of compressible flow using automatic differentiation and PETSc. *Parallel Computing*, v. 27, n. 4, p. 503–519, 2001.
- ISLAM, M. R. et al. *Advanced Petroleum Reservoir Simulation*. Trondheim, Norway: Wiley, 2010.
- JOLIVET, P.; ROMAN, J. E.; ZAMPINI, S. KSPHPDDM and PCHPDDM: Extending PETSc with advanced Krylov methods and robust multilevel overlapping Schwarz preconditioners. *Computers & Mathematics with Applications*, v. 84, p. 277–295, 2021.
- JUNG, Y. et al. TOUGH3: A new efficient version of the TOUGH suite of multiphase flow and transport simulators. *Computers & Geosciences*, v. 108, p. 2–7, 2017.
- KANG, S. et al. Multirate partitioned Runge–Kutta methods for coupled Navier–Stokes equations. *Computers & Fluids*, v. 264, p. 105964, 2023.

- KATZ, R. et al. Numerical simulation of geodynamic processes with the portable extensible toolkit for scientific computation. *Physics of the Earth and Planetary Interiors*, v. 163, n. 1, p. 52–68, 2007.
- KEMPE, T. et al. Performance of a projection method for incompressible flows on heterogeneous hardware. *Computers & Fluids*, v. 121, p. 37–43, 2015.
- LI, L. et al. Applying massively parallel interface for MPFA scheme with advanced linearization for fluid flow in porous media. *Journal of Petroleum Science and Engineering*, v. 220, p. 111190, 2023.
- LOPES, R. B. *Simulação numérica de escoamento não-isotérmico em reservatório de óleo*. [S.l.], 2016.
- MA, Y.; CHEN, Z. Parallel computation for reservoir thermal simulation of multicomponent and multiphase fluid flow. *Journal of Computational Physics*, v. 201, p. 224–237, 2004.
- MANTRAVADI, B.; JAGAD, P.; SAMTANEY, R. A hybrid discrete exterior calculus and finite difference method for Boussinesq convection in spherical shells. *Journal of Computational Physics*, v. 491, p. 112397, 2023.
- MILLS, R. T. et al. Toward performance-portable PETSc for GPU-based exascale systems. *Parallel Computing*, v. 108, p. 102831, 2021.
- PEACEMAN, D. W. Interpretation of well-block pressures in numerical reservoir simulation. *Society of Petroleum Engineers Journal*, v. 18, n. 3, p. 183–194, 1978.
- PEACEMAN, D. W. Interpretation of well-block pressures in numerical reservoir simulation with nonsquare grid blocks and anisotropic permeability. *Society of Petroleum Engineers Journal*, v. 23, n. 3, p. 531–543, 1983.
- ROSA, A. J.; CARVALHO, R. S.; XAVIER, J. A. D. *Engenharia de reservatórios de petróleo*. [S.l.]: Interciência, 2006.
- SOUZA, G. de. *Acoplamento Poço-reservatório na Simulação Numérica de Reservatórios de Gás*. Tese (Doutorado) — Universidade Estadual do Norte Fluminense, Macaé, Brasil, 2013.
- SUN, J.-C.; CAO, J.-W.; YANG, C. Parallel preconditioners for large scale partial difference equation systems. *Journal of Computational and Applied Mathematics*, v. 226, p. 125–135, 2009.
- TIAB, D.; DONALDSON, E. C. *Petrophysics, Theory and Practice of Measuring Reservoir Rock and Fluid Transport Properties*. Second edition. Burlington, USA: Gulf Professional Publishing, 2004.
- WANG, W.; KOLDITZ, O.; NAGEL, T. A parallel FEM scheme for the simulation of large scale thermochemical energy storage with complex geometries using PETSc routines. *Energy Procedia*, v. 75, p. 2080–2086, 2015.
- WERNECK, L. F. *Implementação paralelizada de métodos de resolução de sistemas algébricos na simulação de reservatórios de gás*. Dissertação (Mestrado) — Universidade do Estado do Rio de Janeiro, Nova Friburgo, 2016.

WERNECK, L. F. et al. An OpenMP parallel implementation using a coprocessor for numerical simulation of oil reservoirs. *Computational and Applied Mathematics*, v. 38, p. 1–30, 2019.

WHITAKER, S. *The Method of Volume Average. Theory and Applications of Transport in Porous Media*. [S.l.]: Kluwer Academic Publishers, 1999.

YANG, H. et al. A scalable fully implicit framework for reservoir simulation on parallel computers. *Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering*, v. 330, p. 334–350, 2018.

YANG, H. et al. Parallel reservoir simulators for fully implicit complementarity formulation of multicomponent compressible flows. *Computer Physics Communications*, v. 244, p. 2–12, 2019.

ZHANG, H.; CONSTANTINESCU, E. M. Optimal checkpointing for adjoint multistage time-stepping schemes. *Journal of Computational Science*, v. 66, p. 101913, 2023.

ZHANG, M. et al. Parallel multilevel domain decomposition preconditioners for monolithic solution of non-isothermal flow in reservoir simulation. *Computers & Fluids*, v. 232, p. 105183, 2022.

ZHAO, Y.; ZHANG, L.; SHAN, B. Mathematical model of fractured horizontal well in shale gas reservoir with rectangular stimulated reservoir volume. *Journal of Natural Gas Science and Engineering*, v. 59, p. 67–79, 2018.