



OpenCAEPoro

多相多组分渗流模拟软件

张晨松，中科院数学院

<https://faspdevteam.github.io/OpenCAEPoro/>

Chensong Zhang, AMSS, Chinese Academy of Sciences



油藏模拟器开发小组



湘潭大学
冯春生



中国科学院
李仕哲



乔长河



宾州州立大学
齐浩然



北京大学
王锦东



中国科学院
张晨松



应超智能计算研究院
张炼



宾州州立大学
许进超



湘潭大学
赵梨



湘潭大学
王慧

<https://github.com/FaspDevTeam/OpenCAEPoro>



交叉学科研发团队

团队成员具有**应用数学、计算数学、计算机科学、渗流力学、油气藏开发工程**等专业背景，能力互补性强，具有长期合作基础



张晨松 团队

中国科学院数学与系统科学研究院，主模拟器、离散方法、线性求解算法、解耦方法等



舒适 团队

湘潭大学，区域分解法、代数多重网格法、时间并行算法、异构并行算法等



刘伟峰 团队

中国石油大学（北京），主从核异构并行加速、稀疏代数运算算法库、稀疏直接法等



黄朝琴 团队

中国石油大学（华东），油藏工程、多组分模型、不确定性量化、多尺度多场耦合方法等



吴淑红 团队

中国石油勘探开发研究院，油气开发工程、油气藏数值模型、数据处理分析、应用验证等

合作团队

- 张林波团队（中国科学院数学与系统科学研究院）：高性能计算、可扩展非线性/线性解法器
- 徐小文团队（北京应用物理与计算数学研究所）：智能解法器、并行代数多重网格解法器

报告内容

01

背景介绍

Background

02

求解方法

Solution Methods

03

模拟软件

Software Design

04

发展规划

Future Plans

01

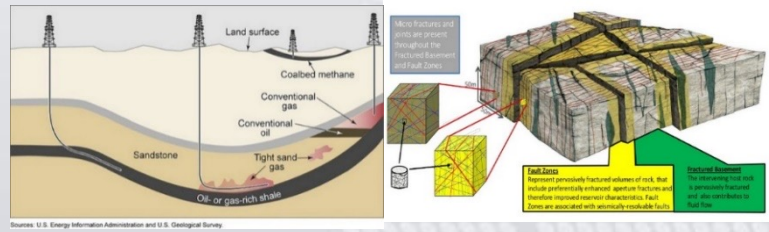
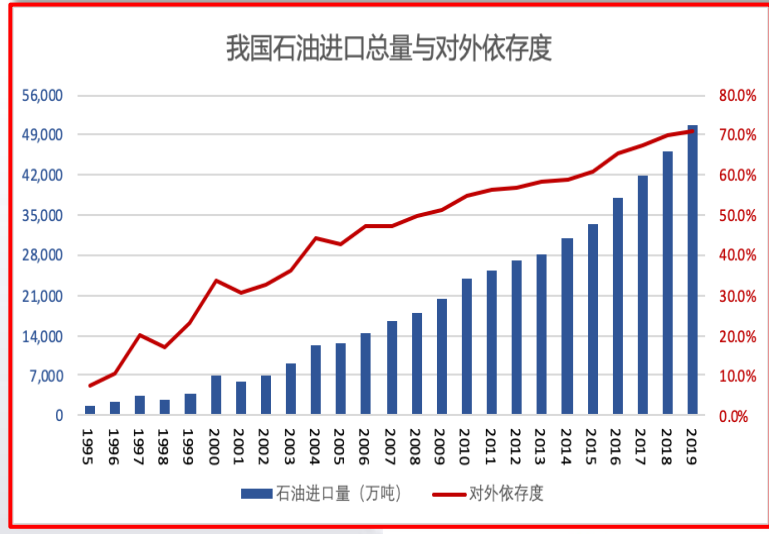
背景介绍

Significance and background of topic selection



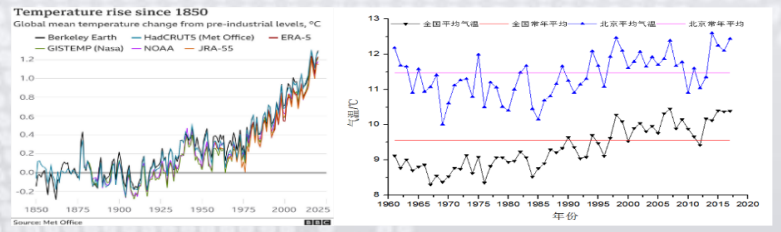
多相多组分渗流力学问题

能源困局



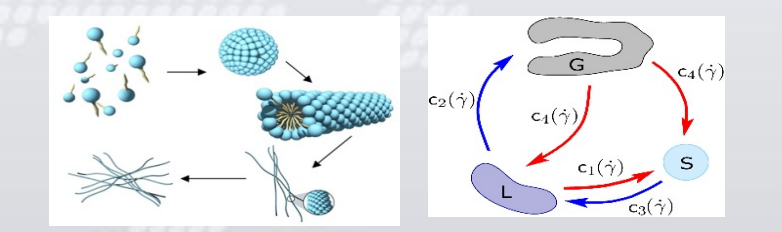
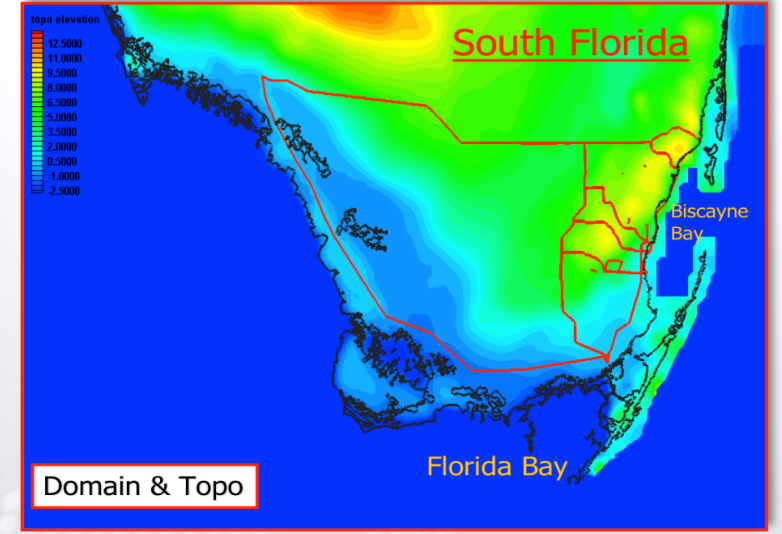
传统油藏、页岩油气、凝析气藏

双碳目标



地热开发、二氧化碳埋存

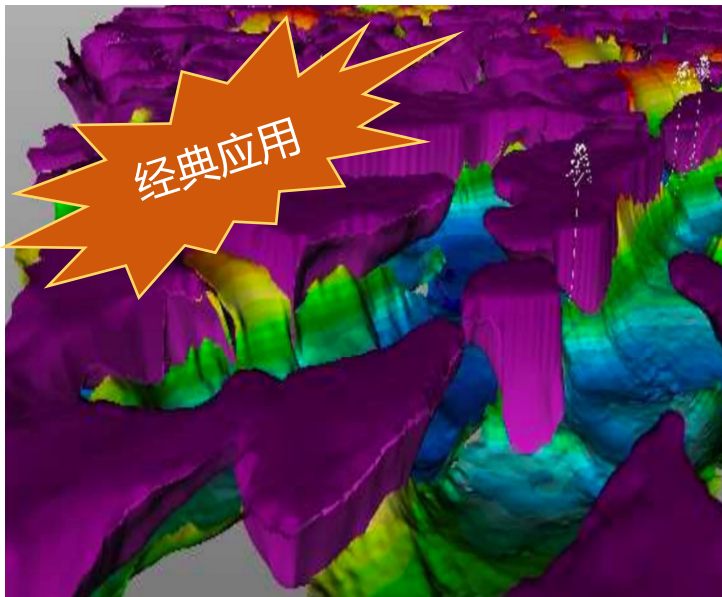
污染治理



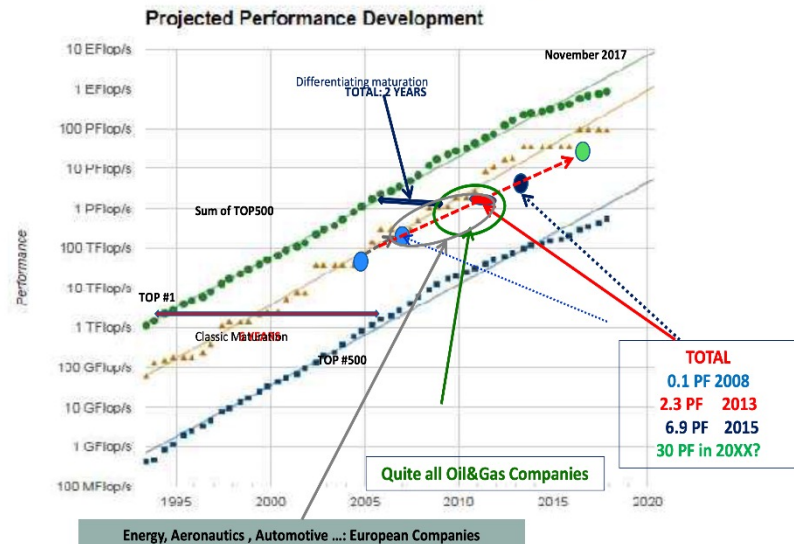
地下水污染处理、核废料埋存

研究目标：为这些应用场景，提供一个开源、现代化、高效、并行模拟软件包

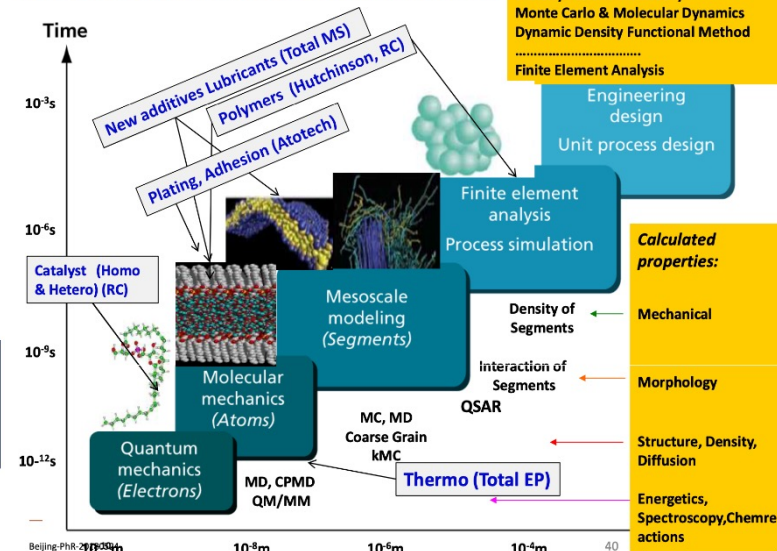
油气开发工程中的应用



TOTAL WELL PLACED INTO HPC PERFORMANCE (TOP 500)



TOTAL APPLICATION: MOLECULAR SIMULATION



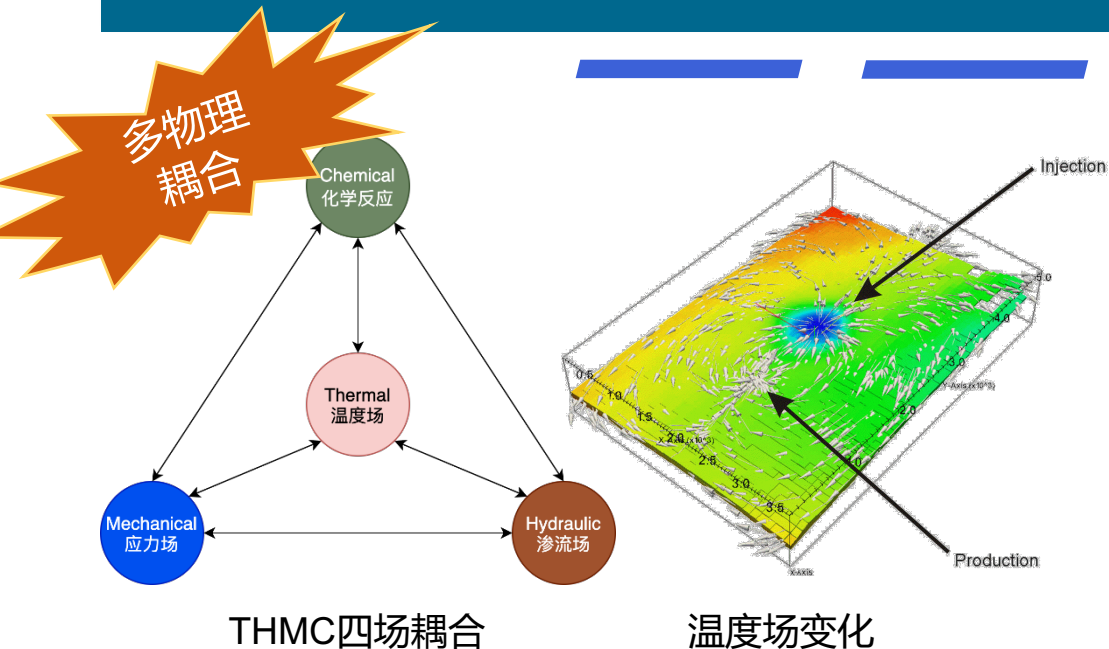
- 难点：多介质、多尺度、多物理、不确定性、高分辨率、.....
- 精细的数值模拟需要更符合物理的模型，更高的空间、时间分辨率，所以常需要大规模并行模拟
- 大规模油气勘探开发数值模拟是超算的主要发展动力之一
- 国际大型石油公司拥有世界一流的HPC计算资源（硬件、软件、人才）



Philippe Ricoux (TOTAL R&D Senior Scientist)于2018年在中科院计算数学所的报告

地热能源开发中的应用

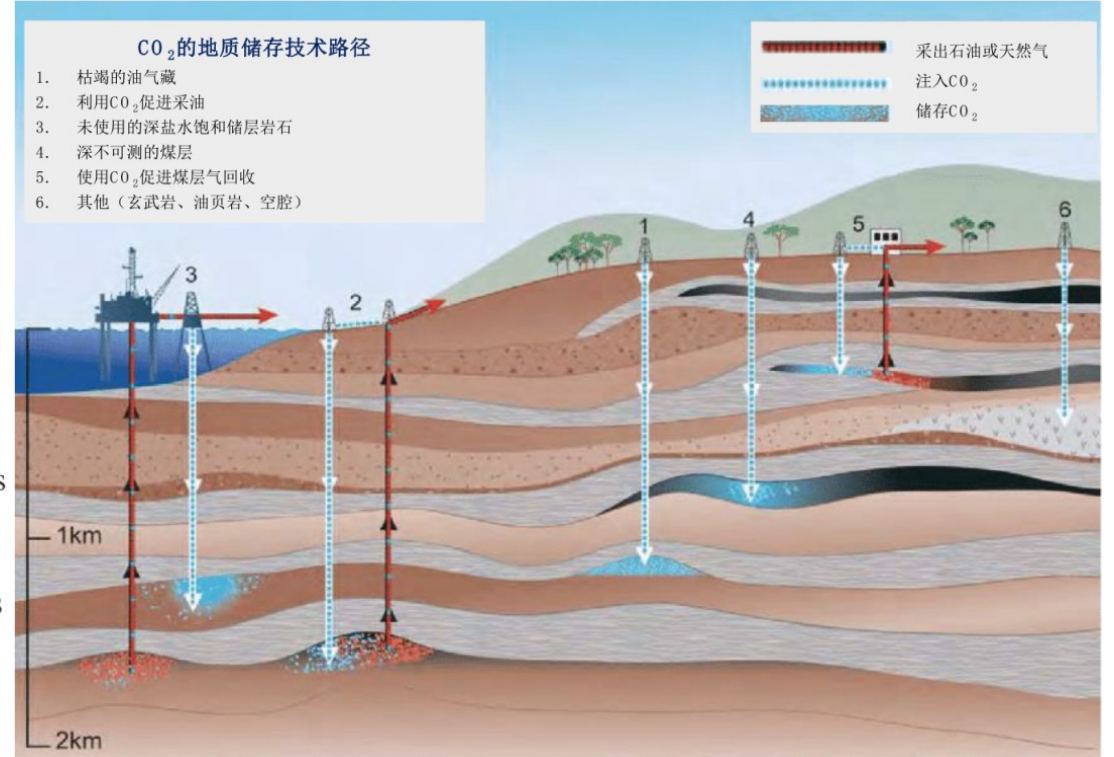
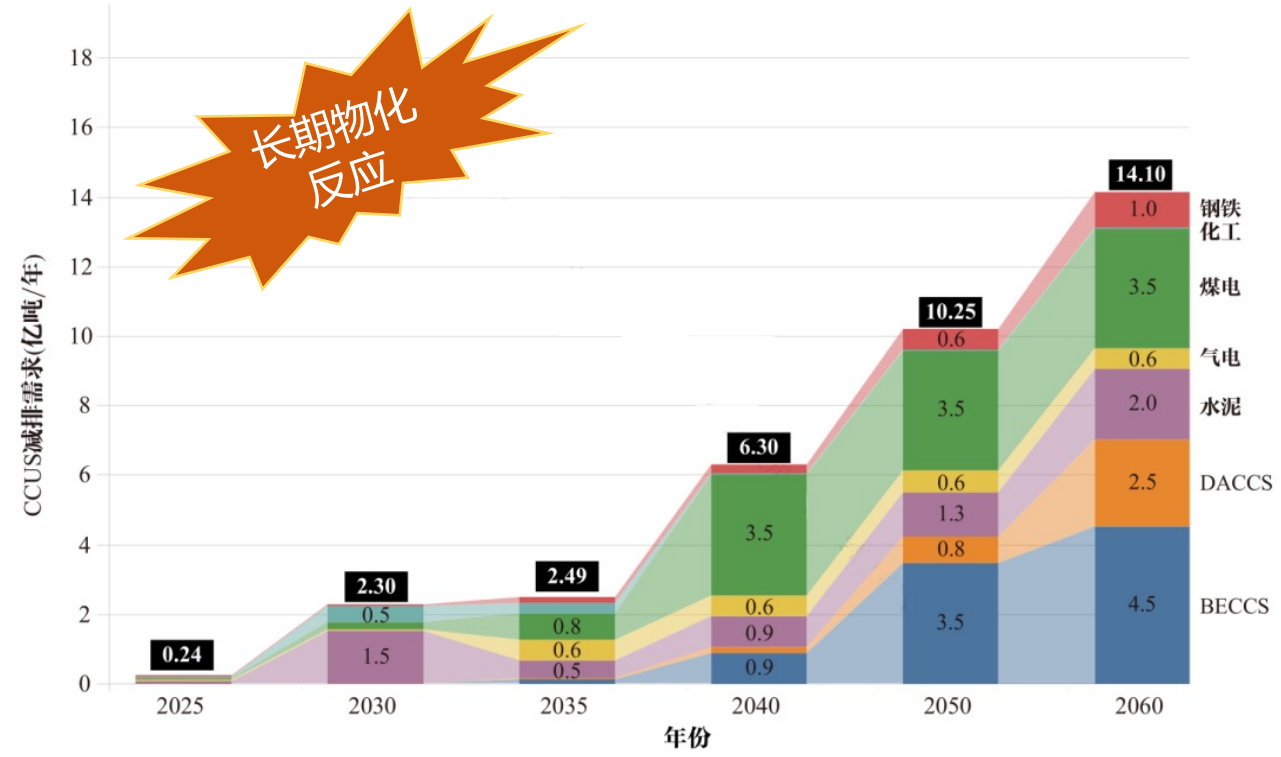
- 2020年9月22日，习近平总书记提出：二氧化碳排放力争于2030年前达到峰值，争取于2060年前实现碳中和；2030年的目标是单位国内生产总值二氧化碳排放量比2005年下降65%以上
- 2021年1月28日，国家发改委能源所发布《2020中国可再生能源展望报告》
- 地热资源是一种清洁环保的非化石能源，也是稳定可靠的本土能源，开发利用不受地缘政治、季节、昼夜、气候等因素影响，可作为基础能源



- 地热开发需要模拟多重介质（如裂隙介质与多孔介质）中的多相、多组分渗流与热量运移（多物理场耦合问题）
- 国外可用于地热模拟的软件包括美国的Tough、德国的OGS和FEFLOW、加拿大的CMG、瑞典的COMSOL等
- 国内尚无成熟的、完全自主的地热数值模拟软件，针对地热数值模拟的软件主要有中国科学院地质与地球物理研究所研发的**地热计算器**（调用OGS模块，不能商用）



二氧化碳地质储存中的应用



- 二氧化碳地质封存具有存储容量大、存储时间长、成熟技术可迁移、可与二氧化碳利用相结合等优点
- 地质储存面临着长时间封存泄漏的风险，需要大量数值模拟进行风险评估，并进行日常泄漏监测
- CCS和CCUS技术是碳中和为地球物理行业带来的重要机遇，但碳捕集与封存的代价目前仍很高

参考文献：赵改善《地学新视野》，2021



典型的交叉学科问题



渗流力学

多组分多相流在多孔介质（孔、洞、裂隙）中的流动规律



岩石力学

岩石与流体的物理化学反应，孔隙变形、裂缝扩展等



油藏工程

油气藏开发工程、油井工程、水力压裂、生产机制等



计算科学

应用数学、计算数学、科学计算、并行计算等



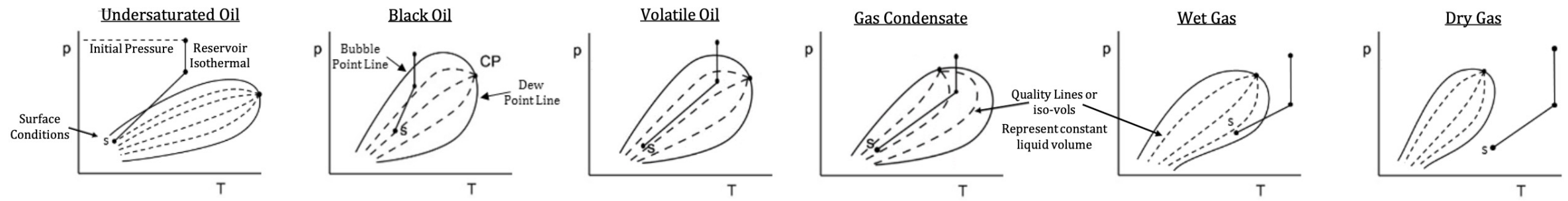
软件工程

程序设计、开发、维护、标准，人机接口等

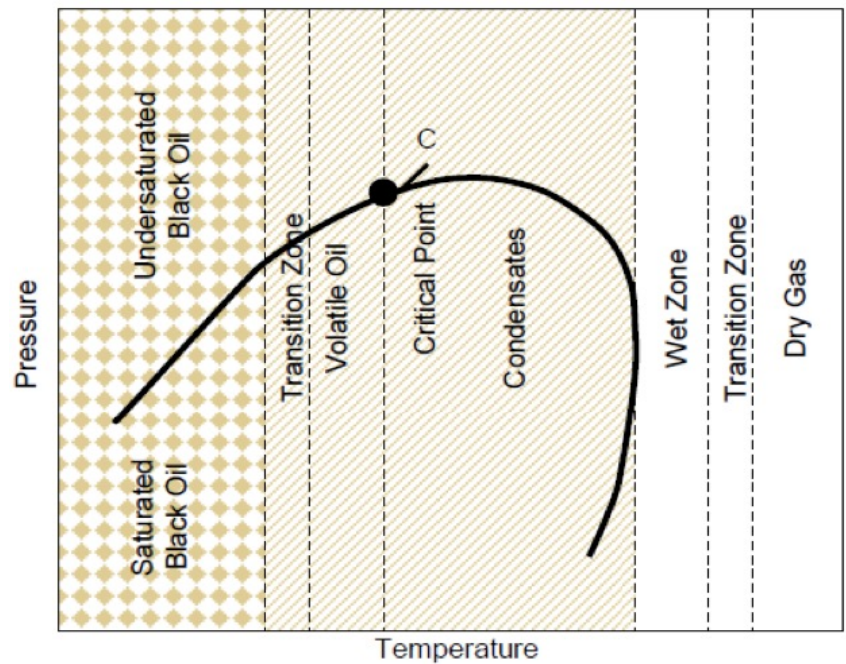




各种常用模型的适用条件



油藏模拟常用模型适用范围与P-T相图

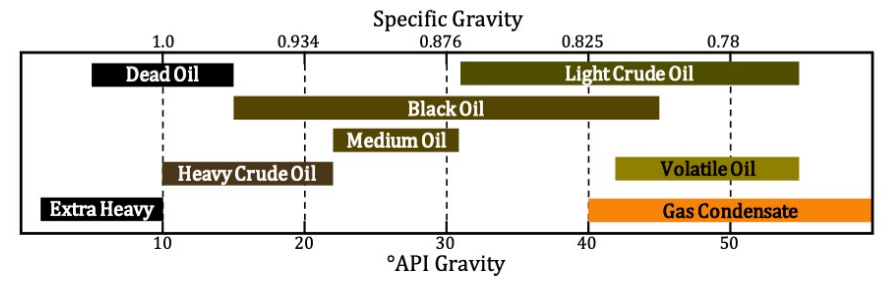


Laboratory and Field Characteristics

Fluid Type	T^{RC}	Initial GOR scf/STB	Oil Gravity °API	Initial B_o RB/STB	C_{7+} Fraction Mole %	Phase Behavior
Dry Gas	$> T^{crc}$	--	--	--	--	Single phase at all pressures and temperatures
Wet Gas	$> T^{crc}$	$> 50,000$	--	--	--	Gas phase in reservoir at all P & T. Separator within two-phase region.
Gas Condensate	$T^c - T^{crc}$	3300 - 50000	40 - 60	--	< 12.5	All gas initially; As pressure falls below dew point a liquid phase forms
Volatile Oil	$< T^c$	2000 - 3300	42 - 55	1.7 - 3.0	12.5 - 20	T^{RC} close to T^c . Key difference between volatile and black oils is that the gas phase can produce liquid at surface.
Black Oil	$< T^c$	200 - 2000	15 - 45	1.1 - 1.7	25 - 50	As reservoir pressure falls below bubble point, gas phase forms.
Undersaturated Oil	$< T^c$	200 - 2000	15 - 45	1.1 - 1.7	25 - 50	Oil phase in reservoir at all P & T. Separator within two-phase region.
Dead Oil	$< T^c$	--	5 - 15	1.0 - 1.1	> 50	Single phase at all pressures and temperatures.

T^{crc} = cricondentherm

API Classification	
Fluid Type	°API Gravity
Light Crude Oil	> 31.1
Medium Oil	22.3 - 31.1
Heavy Crude Oil	10.0 - 22.3
Extra Heavy Oil	< 10.0



Ref: Thermodynamics and Phase Behavior, J. Riddle, Univ of Texas at Austin



通用多组分模型框架

$$\frac{\partial}{\partial t} \left(\phi \sum_{j=1}^{n_p} x_{ij} \xi_j S_j \right) + \nabla \cdot \mathbf{F}_i - \sum_{j=1}^{n_p} S_j r_{ij} = Q_i, \quad i = 1 : n_c \quad \text{物质守恒}$$

$$\mathbf{F}_i = \sum_{j=1}^{n_p} \left(x_{ij} \xi_j \mathbf{u}_j - S_j \mathbf{D}_j \nabla (\xi_j x_{ij}) \right), \quad i = 1 : n_c \quad \text{流量方程}$$

$$\mathbf{u}_j = - \frac{\kappa \kappa_{rj}}{\mu_j} (\nabla P_j - \gamma_j \nabla z), \quad j = 1 : n_p \quad \text{Darcy定律}$$

$$\sum_{j=1}^{n_p} S_j = 1, \quad \text{饱和度关系}$$

$$\sum_{i=1}^{n_c} x_{ij} = 1, \quad j = 1 : n_p \quad \text{组分比例关系}$$

$$P_1 - P_j = P_{c1j}, \quad j = 2 : n_p \quad \text{表面张力}$$

$$f_{ij} = f_{i1}, \quad i = 1 : n_c, j = 2 : n_p \quad \text{相平衡方程}$$

目标：为工程和科学研究提供更丰富、更精确的物理模型选择

多重介质模型

EOS状态方程

Brinkman方程

化学反应方程

Navier-Stokes方程

非等温模型

非Darcy模型

吸附解吸模型

岩石溶解模型

岩石力学方程

热力学平衡与状态方程

问题：如何确定混合物的物质处于什么相态？存在多少相？是否处于稳定的平衡状态？某一具体的相中包含了多少种物质？以及包含了多少该物质？

Van der Waals / Redlich–Kwong / Redlich–Kwong–Soave EOS:

$$P_j := \frac{RT}{V_j - b_j} - \frac{a_j}{V_j(V_j + b_j)}, \quad j = o, g$$

Peng–Robinson EOS: [Peng, Robinson 1976]

$$P_j := \frac{RT}{V_j - b_j} - \frac{a_j}{V_j(V_j + b_j) + b_j(V_j - b_j)}, \quad j = o, g$$

Change of variables:

$$A_j := \frac{a_j P_j}{R^2 T^2}, \quad B_j := \frac{b_j P_j}{RT}, \quad Z_j := \frac{P_j V_j}{RT}$$

$$Z_j^3 - (1 - B_j)Z_j^2 + (A_j - 2B_j - 3B_j^2)Z_j - (A_j B_j - B_j^2 - B_j^3) = 0$$

Fugacity:

$$f_{ij} := P_j x_{ij} \varphi_{ij}, \quad i = 1, \dots, n_c, \quad j = o, g \quad (\varphi_{ij} : \text{fugacity coefficient})$$

常用相平衡计算方法

- ✓ 平衡常数法
- ✓ 基于RR方程的闪蒸计算
- ✓ 基于Gibbs自由能最小化

无量纲化

经典三相黑油模型

可以利用这些关系式来给出组分模型框架下的黑油模型，并在统一的程序框架内对黑油和组分模型进行模拟！

$$\begin{matrix} & O & G & W \\ \begin{matrix} Ww \\ Oo \\ Gg \\ Go \end{matrix} & \begin{pmatrix} 0 & 0 & 1 \\ 1 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 \\ 0 & 1 & 0 \end{pmatrix}
 \end{matrix}$$

$$\begin{aligned}
 \xi_w &= \frac{1}{B_w} \\
 \xi_g &= \frac{1}{B_g} \\
 \xi_o &= \frac{1 + R_s}{B_o}
 \end{aligned}$$

$$\begin{bmatrix} x_{Oo} & x_{Go} & x_{Wo} \\ x_{Og} & x_{Gg} & x_{Wg} \\ x_{Ow} & x_{Gw} & x_{Ww} \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} \frac{1}{1+R_s} & \frac{R_s}{1+R_s} & 0 \\ 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{bmatrix}$$

物质守恒

$$\frac{\partial}{\partial t} \left(\phi \frac{S_w}{B_w} \right) = -\nabla \cdot \left(\frac{1}{B_w} \mathbf{u}_w \right) + \tilde{q}_w$$

$$\frac{\partial}{\partial t} \left(\phi \frac{S_o}{B_o} \right) = -\nabla \cdot \left(\frac{1}{B_o} \mathbf{u}_o \right) + \tilde{q}_o$$

$$\frac{\partial}{\partial t} \left(\phi \frac{S_g}{B_g} + \phi \frac{R_s S_o}{B_o} \right) = -\nabla \cdot \left(\frac{1}{B_g} \mathbf{u}_g + \frac{R_s}{B_o} \mathbf{u}_o \right) + \tilde{q}_g$$

Darcy定律

$$\mathbf{u}_j = -\frac{\kappa \kappa_{rj}}{\mu_j} \left(\nabla P_j - \gamma_j \nabla z \right), \quad j = o, w, g$$

其它关系式

$$S_o + S_g + S_w = 1$$

$$P_{cog} = P_o - P_g$$

$$P_{cow} = P_o - P_w$$

标准油水两相模型

物质守恒

$$\frac{\partial}{\partial t} \left(\phi \frac{S_w}{B_w} \right) = -\nabla \cdot \left(\frac{1}{B_w} \mathbf{u}_w \right) + \tilde{q}_w$$

$$\frac{\partial}{\partial t} \left(\phi \frac{S_o}{B_o} \right) = -\nabla \cdot \left(\frac{1}{B_o} \mathbf{u}_o \right) + \tilde{q}_o$$

Darcy定律

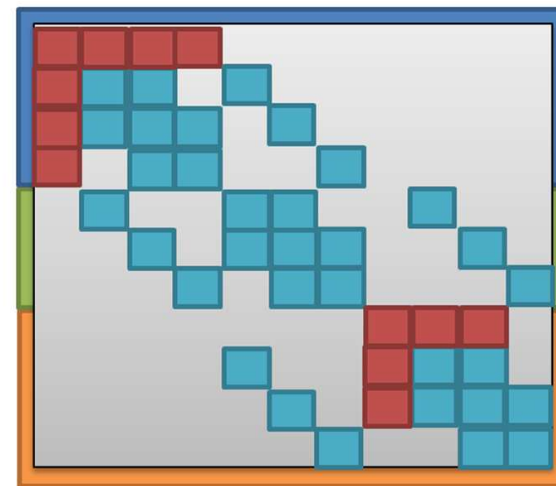
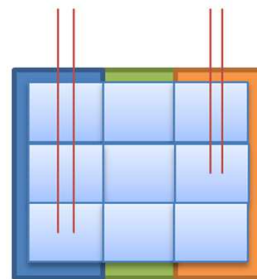
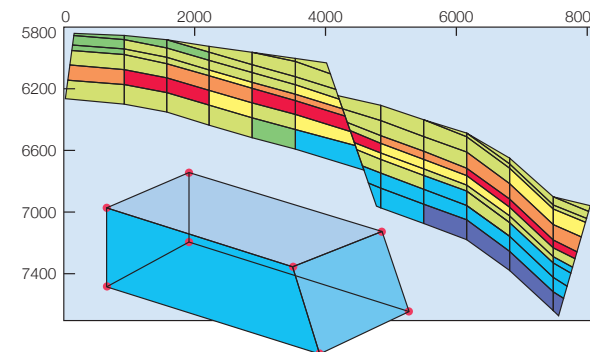
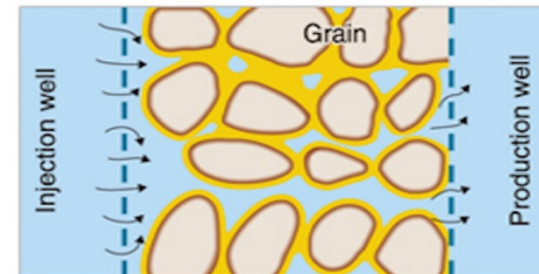
$$\mathbf{u}_j = -\frac{\kappa \kappa_{rj}}{\mu_j} \left(\nabla P_j - \gamma_j \nabla z \right), \quad j = o, w$$

其它关系式

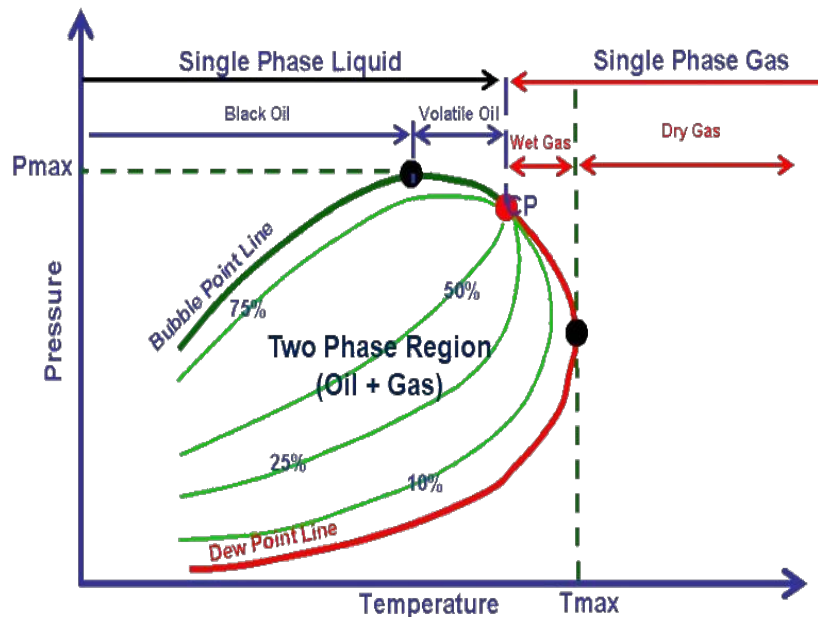
$$S_w + S_o = 1$$

$$P_{cow} = P_o - P_w$$

方程的数学性质：Trangenstein, Bell SINUM 1989; SISC 1989



多相多组分数值模拟



- <https://tools.aolocentral.com/petroleum-engineering-pvt-hydrocarbon-phase-behavior/>
- <https://youtu.be/QDJuar3zBH4>

组分模型并行数值模拟

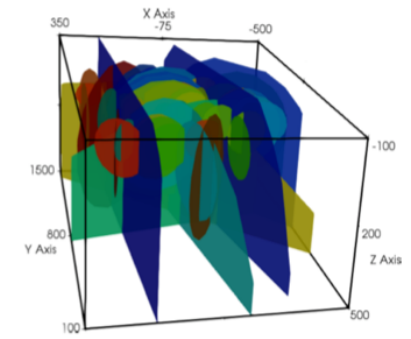
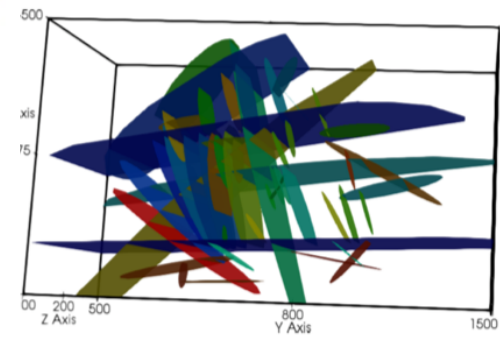
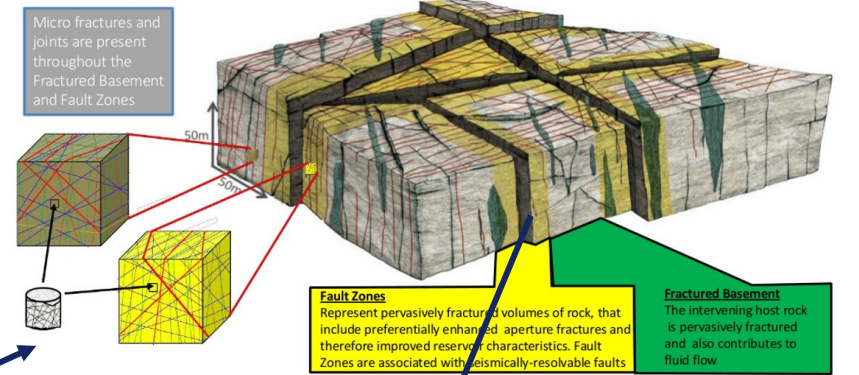
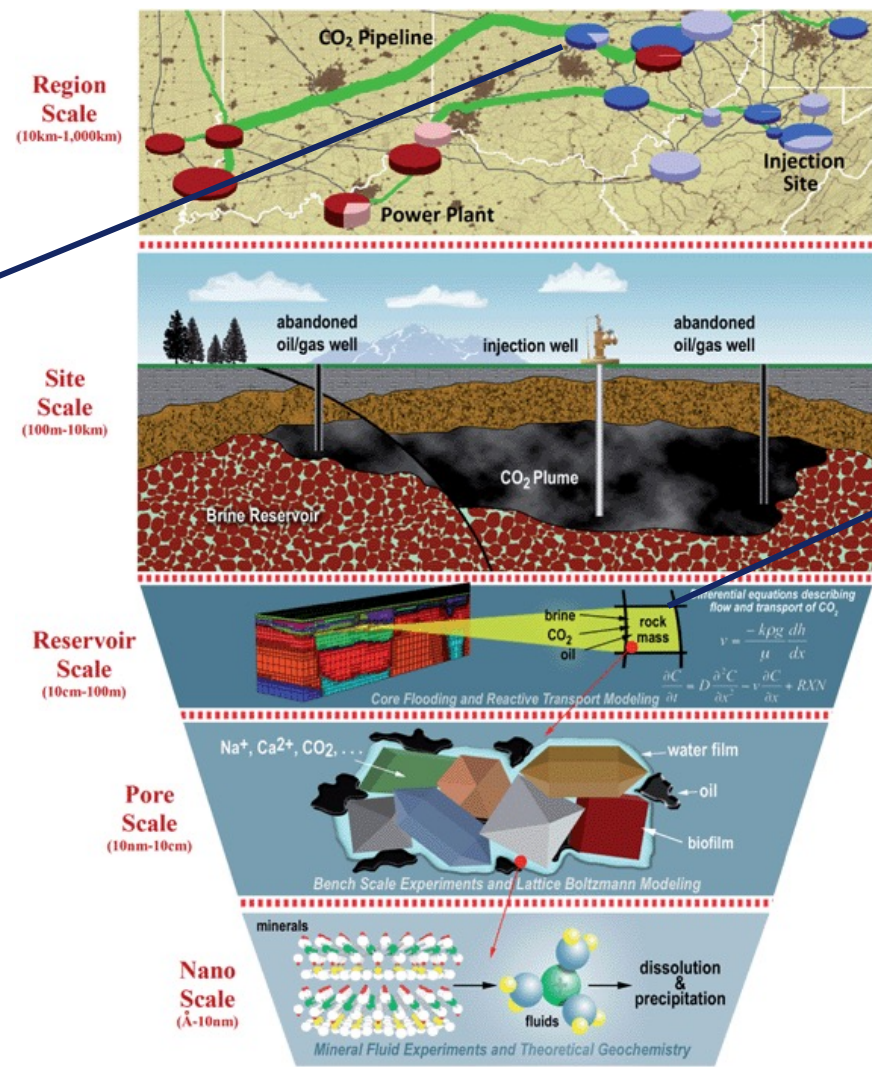
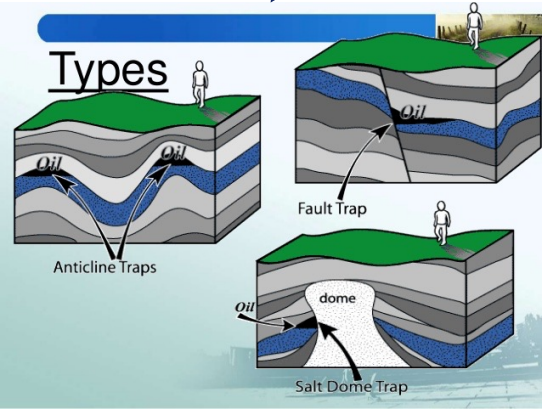
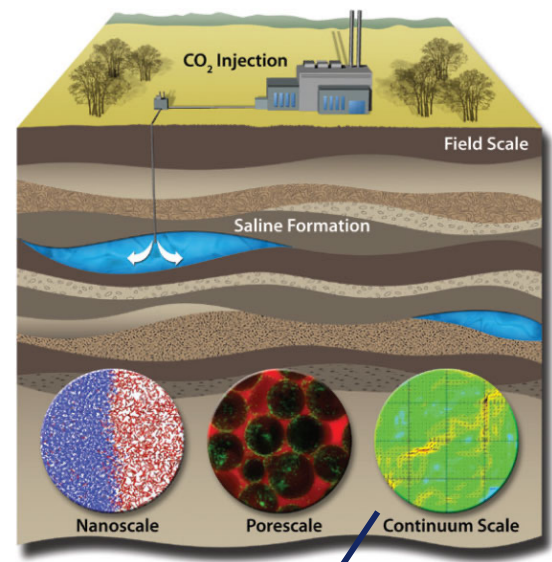


- T - 温度
- V - 体积
- P_j - 相压力
- S_j - 相饱和度
- μ_j - 相黏度
- ρ_j - 相质量密度
- ξ_{ij} - 相中组分摩尔密度
- ξ_j - 相摩尔密度
- x_{ij} - 相中某组分的比例
- f_{ij} - 逸度

求解多组分多相渗流问题的关键：选择合适的求解方法与主求解变量，准确区分混合物的所处相态及其所含物质组分的量



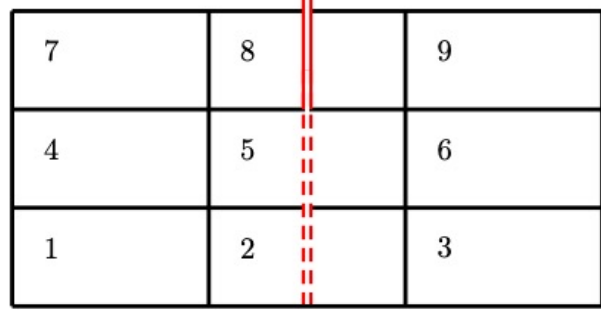
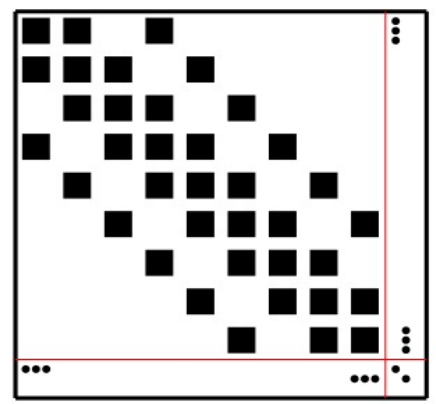
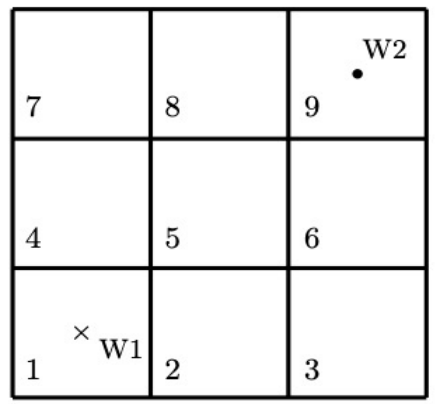
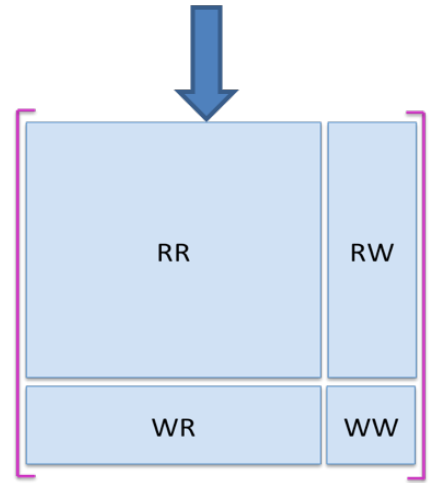
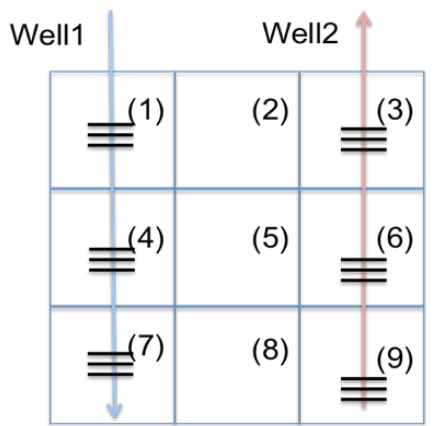
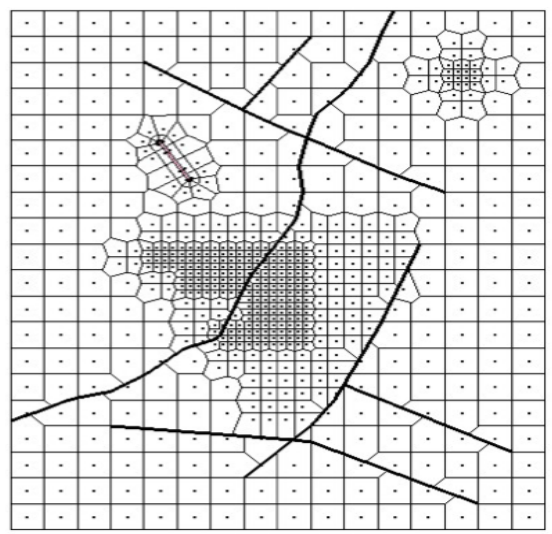
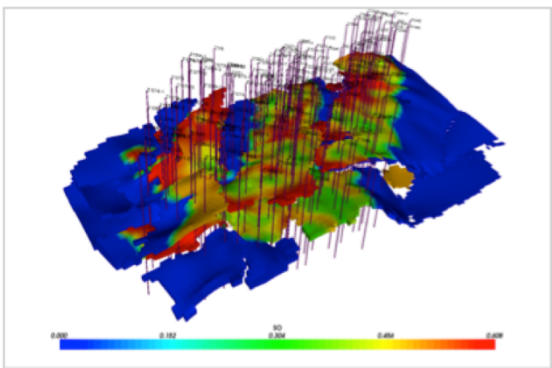
不同尺度的数值模拟问题



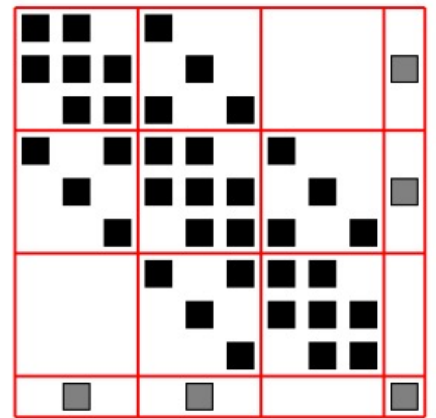
来源 : Center for Petroleum & Geosystems Eng, UT Austin



需要适用于复杂网格类型



(a) 一口在 2 号和 5 号网格单元完井的直井



(b) 对应的稀疏矩阵结构

- 实际应用中，网格较为复杂：结构网格、PEBI网格、非结构网格、自适应网格等
- 井方程的变量个数与油藏网格块对应的变量个数可能不一致，可以通过填充来解决这个问题



主流商业油藏模拟软件



ECLIPSE Industry-Reference Reservoir Simulator

STARS
Thermal & Advanced Processes Simulator

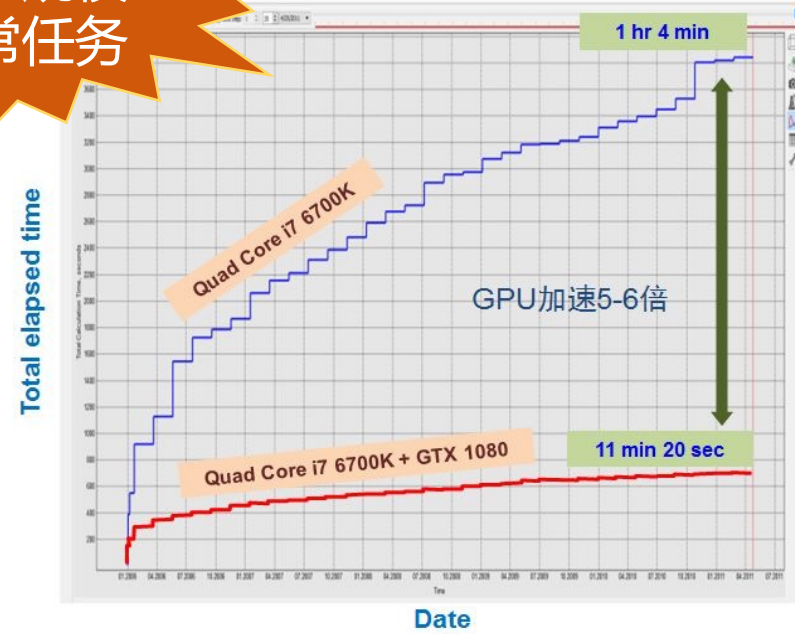
Black oil reservoir

tNavigator®

INTERSECT High-Resolution Reservoir Simulator

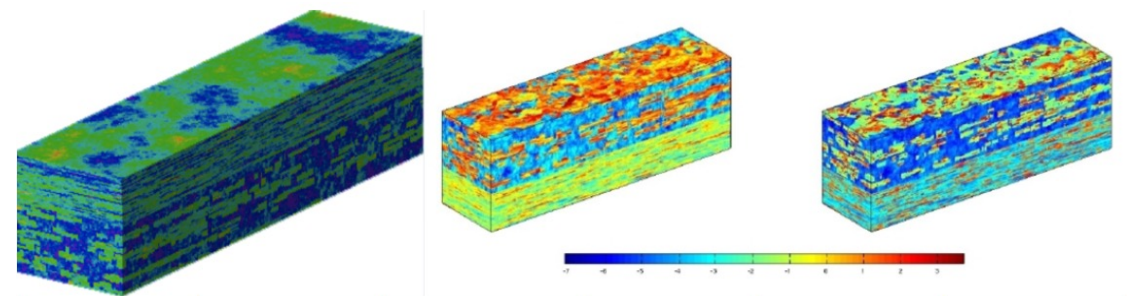
中小规模
日常任务

Model size - 1.09M active grid blocks, History – 2000 days
1 injection well, 4 producing wells, total number of connections – 412



tNavigator的GPU高效并行技术获2020国际石油十大科技进展

国际油藏工程师协会SPE10算例（两相，1.1百万网格）



模拟器	商业软件A	商业软件B	商业软件C	HiSim (CPU版)	HiSim (GPU版)
计算时间	120小时	18小时	29小时	38分钟	11分钟

快190倍 快655倍

- 2011年我们的算法被集成到HiSim中，成为其核心竞争力的体现，HiSim先后获2013年中国石油十大科技进展、2018年中国石油科技进步一等奖、2021年中国石油十大科技进展……
- HiSim在国内外100多个油田区块的产能建设、方案调整中得到应用，项目成果获2021年首届CSIAM应用数学落地成果认证



学术界科研数值模拟软件



CPGE CENTER FOR PETROLEUM & GEOSYSTEMS ENGINEERING

The University of Texas at Austin
Hildebrand Department of Petroleum and Geosystems Engineering
Cookrell School of Engineering

Home » Simulators

Simulators

Reservoir Simulators

MPS

The objective of this project is to develop a reservoir simulator with the capability of simulating various recovery processes under one framework. This new simulator is designed to handle miscible gas flooding, chemical flooding, and thermal flooding processes for conventional and unconventional reservoirs. The simulator will also have the capability of executing on parallel computers. The main goal of the project is development of a unified simulator capable of performing simulations for large complex reservoirs operating under various recovery processes.

UTCHEMRS

UTCHEMRS is a three-dimensional, chemical flooding reservoir simulator capable of modelling up to four-phase flow, namely, an aqueous phase, and oleic phase, a microemulsion phase, and a gas phase. An adaptive implicit method (AIM) with switching criteria based on stability analysis is implemented to improve both time-step size selection and performance. Reservoirs can be discretized using Cartesian and Corner-Point grids. A stable third order high resolution scheme is implemented for Cartesian grids, reducing the need for very fine grids and the effects of grid orientation.

Read more

UTCOMPRES

UTCOMPRES is a three-dimensional, EOS Compositional reservoir simulator capable of modelling up to four-phase flow, namely, an aqueous phase, a gaseous phase, and a second nonaqueous liquid phase. An adaptive implicit method (AIM) with switching criteria based on stability analysis is implemented to improve both time-step size selection and performance. Reservoirs can be discretized using Cartesian, Corner-Point or Unstructured grids. Stable high resolution schemes are also implemented for both Cartesian and Unstructured grids, reducing the need for very fine grids and the effects of grid orientation.

Read more

CSM Center for Subsurface Modeling

Introduction Source code Documentation Build Run

Integrated Parallel Accurate Reservoir Simulator

Stanford SCHOOL OF EARTH, ENERGY & ENVIRONMENTAL SCIENCES SUPRI-B: Reservoir Simulation

HOME ABOUT PEOPLE ACADEMICS RESEARCH AFFILIATES PUBLICATIONS

Research

We work in virtually all aspects of reservoir simulation, and our research program is constantly evolving to meet the changing needs of the industry, the wider community, and the interests of students.

- AD-GPRS
- Compositional Simulation
- Fracture Modeling
- Geomechanics
- Multiscale Methods
- Optimization
- Parallel Computing
- Pore-Scale Simulation
- Reactive Transport
- Stochastic PDEs

BERKELEY LAB Bringing Science Solutions to the World

A7 INDEX | DIRECTORY | SEARCH

TOUGH

Home Software Licensing & Download Research Papers News and Events User Support

TOUGH: Suite of Simulators for Nonisothermal Multiphase Flow and Transport in Fractured Porous Media

The **TOUGH** ("Transport Of Unsaturated Groundwater and Heat") suite of software codes are multi-dimensional numerical models for simulating the coupled transport of water, vapor, non-condensable gas, and heat in porous and fractured media. Developed at the Lawrence Berkeley National Laboratory (LBNL) in the early 1980s primarily for geothermal reservoir engineering, the suite of simulators is now widely used at universities, government organizations, and private industry for applications to nuclear waste disposal, environmental remediation problems, energy production from geothermal, oil and gas reservoirs as well as gas hydrate deposits, geological carbon sequestration, vadose zone hydrology, and other uses that involve coupled thermal, hydrological, geochemical, and mechanical processes in permeable media. The **TOUGH** suite of simulators is continually updated, with new equation-of-state (EOS) modules being developed, and refined process descriptions implemented into the **TOUGH** framework (see the overview of the **TOUGH** development history). Notably, EOS property modules for mixtures of water, NaCl, and CO₂ has been developed and is widely used for the analysis of geologic carbon sequestration processes.

TOUGH and its application have been the subject of more than 500 peer-reviewed journal articles, conference proceedings, and project reports. **TOUGH** and its various modules are documented in a series of manuals.

PFLOTRAN About Bitbucket Installation Documentation Parallel Performance Development Team Publications

PFLOTRAN

A Massively Parallel Reactive Flow and Transport Model for describing Subsurface Processes

PFLOTRAN is an open source, state-of-the-art massively parallel subsurface flow and reactive transport code. PFLOTRAN solves a system of generally nonlinear partial differential equations describing multiphase, multicomponent and multiscale reactive flow and transport in porous materials. The code is designed to run on massively parallel computing architectures as well as workstations and laptops. Parallelization is achieved through domain decomposition using the PETSc (Portable Extensible Toolkit for Scientific Computation) libraries. PFLOTRAN has been developed from the ground up for parallel scalability and has been run on up to 2*18 processor cores with problem sizes up to 2 billion degrees of freedom. PFLOTRAN is written in object oriented, free formatted Fortran 2003. The choice of Fortran over C/C++ was based primarily on the need to enlist and preserve tight collaboration with experienced domain scientists, without which PFLOTRAN's sophisticated process models would not exist. The reactive transport equations can be solved using either a fully implicit Newton-Raphson algorithm or the less robust operator splitting method.

OPM The Open Porous Media Initiative

HOME FLOW UPSCALING RESINGGIT TOOLBOX DATASETS GALLERY DOCUMENTATION DOWNLOAD

GALLERY

Here, we would like to share with you some of the many cases we have studied with OPM software. This way, we seek to highlight features and capabilities that are not described in tutorials.

RECENT OPM NEWS

- Flow manual for the 2021.10 release available November 17, 2021
- OPM Release 2021.10 November 10, 2021
- Flow manual for the 2021.04 release available June 17, 2021
- OPM RELEASE 2021.04 July 5, 2021
- Commercial support for OPM Flow: January 27, 2021

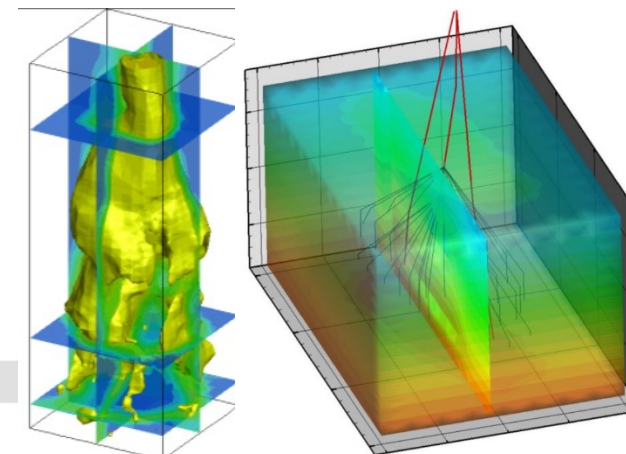
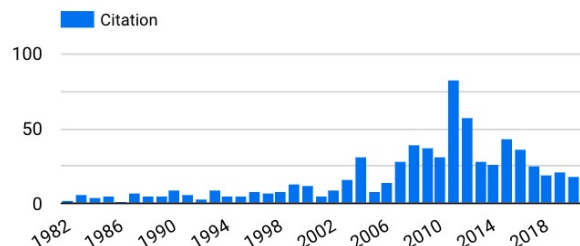
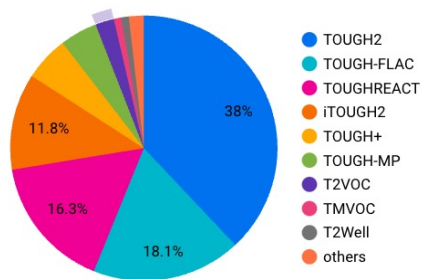
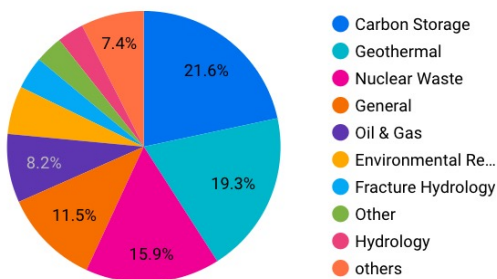
ALL OPM NEWS

The OPM news archive.

META

Log In
Entries RSS
Comments RSS
WordPress.org

TOUGH系列软件介绍

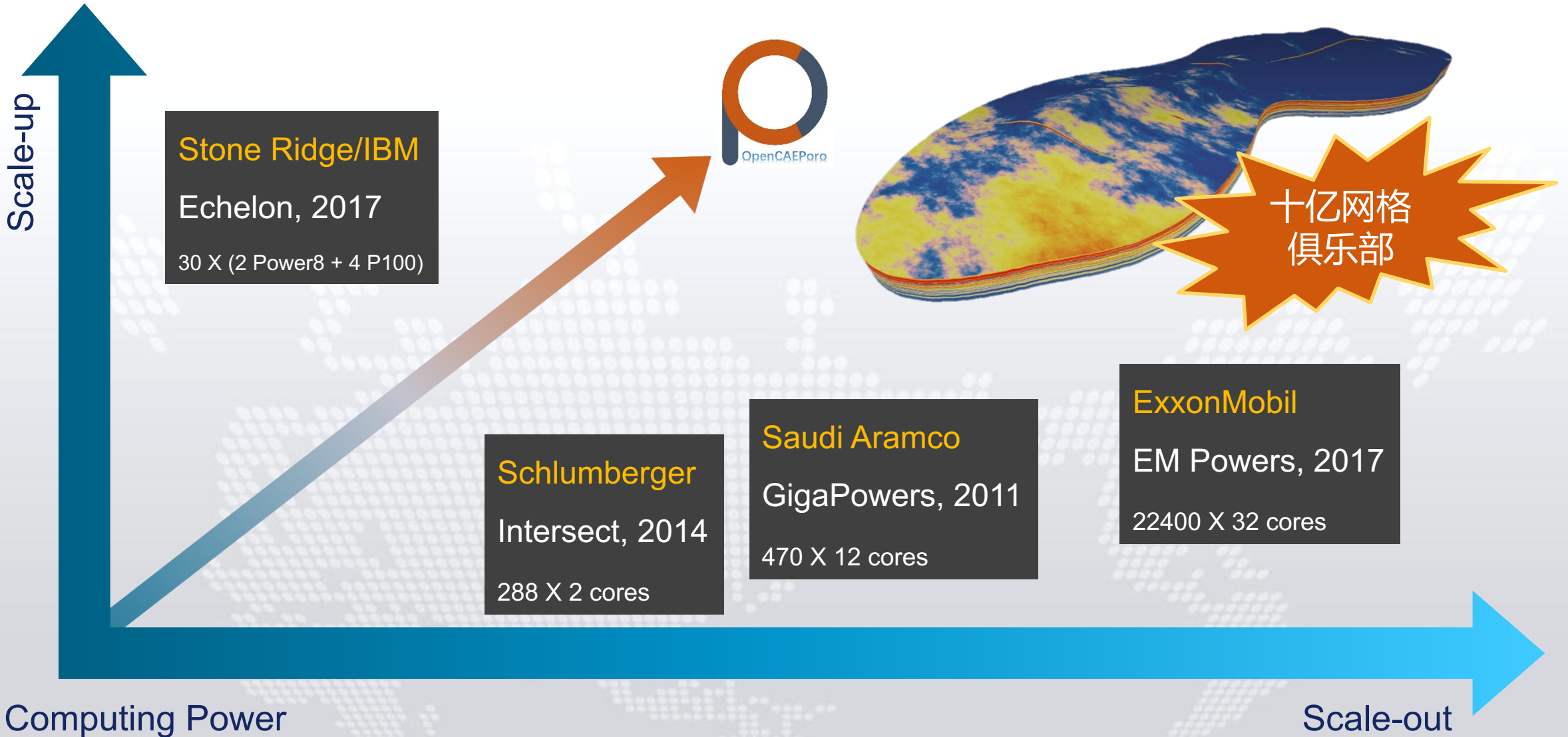


Citation	Journal	TOUGH M...	Year
1. Pruess, K. and Narasimhan, T.N., (1982). On fluid reserves and the production of superheated steam from fractured, vapor-dominated geothermal reservoirs, J. Geophys. Res., 87:B11, 9329-9339.	Journal of Geophysical Research	TOUGH2	1982
2. Pruess, K., Bodvarsson, G.S., Schroeder, R.C., and Witherspoon, P.A., (1982). Model studies of the depletion of two-phase geothermal reservoirs, Society of Petroleum Engineers (SPE) Journal, 22:2, 280-290.	SPE Journal	TOUGH2	1982
3. Bodvarsson, G.S. and Lippmann, M.J., (1983). Numerical studies of the heat and mass transport in the Cerro Prieto geothermal field, Water Resource Res., 19(3), 753-767.	Water Resources Research	TOUGH2	1983
4. Lippmann, M.J., Tsang, C.-F., Mangold, D.C., and Doughty, C., (1983). Prediction of reinjection effects in the Cerro Prieto geothermal system, Geothermics, 13, 141-162.	Geothermics	TOUGH2	1983
5. Lippmann, M.J., and Bodvarsson, G.S., (1983). Numerical studies of the heat and mass transport in the Cerro Prieto geothermal field, Mexico, Water Resources Research, 19, 753-767.	Water Resources Research	TOUGH2	1983
6. Pruess, K., (1983). Heat transfer in fractured geothermal reservoirs with boiling, Water Resources Research, 19(1), 201-208.	Water Resources Research	TOUGH2	1983
7. Pruess, K., Weres, O., and Schroeder, R.C., (1983). Distributed parameter modeling of a producing vapor-dominated geothermal reservoir - Serrazzano, Italy, Water Resources Research, 19(5), 1219-1230.	Water Resources Research	TOUGH2	1983
8. Pruess, K., Wilt, M., Bodvarsson, G.S., and Goldstein N.E., (1983). Simulation and resistivity modeling of a geothermal reservoir with waters of different salinity, Geothermics, 12 no. 4, 291-307.	Geothermics	TOUGH2	1983
9. Bodvarsson, G.S., Pruess, K., Stefansson, V., and Eliasson, E.T., (1984). The Krafla geothermal field, Iceland: 2. The Natural State of the System, Water Resources Research, 20:11, 1531-1544.	Water Resources Research	TOUGH2	1984
1... Bodvarsson, G.S., Pruess, K., Stefansson, V., and Eliasson, E.T., (1984). The Krafla geothermal field, Iceland: 3. The generating capacity of the field, Water Resources Res., 20:11, 1545-1559.	Water Resources Research	TOUGH2	1984
1... Pruess, K. and Bodvarsson, G.S., (1984). Thermal effects of reinjection in geothermal reservoirs with major vertical fractures, J. Pet. Tech., 36:10, 15671578.	Journal of Petroleum Technology	TOUGH2	1984

Tough是由美国能源部劳伦斯伯克利国家实验室开发一系列渗流模拟软件，包括多种EOS模块，主要用于地热和核废料埋存研究；部分软件模块开源，支持MPI和OpenMP并行。



超大规模并行油藏模拟能力

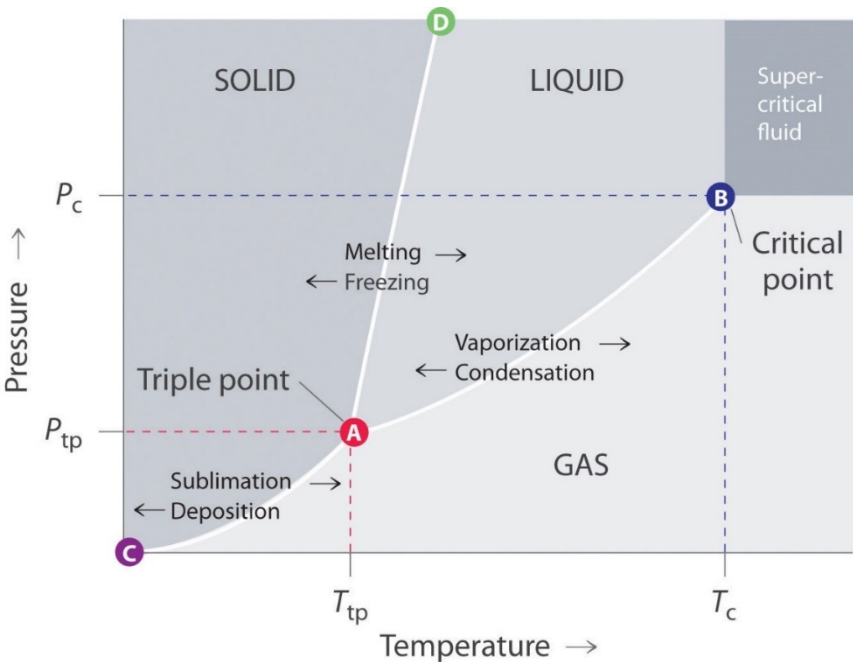


02

求解方法

Linear solvers and data structures for sparse systems

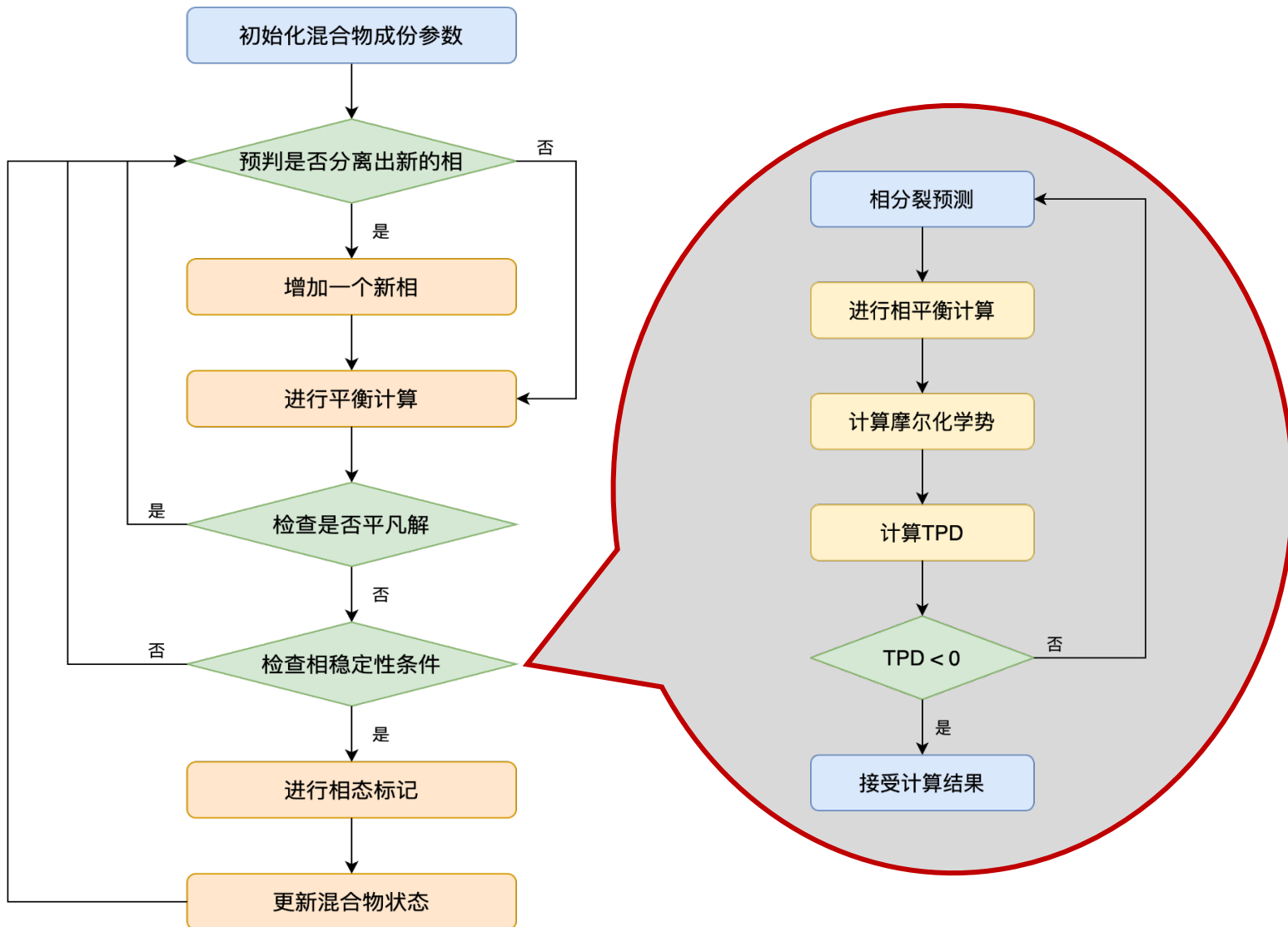
基于RR方程的相平衡计算



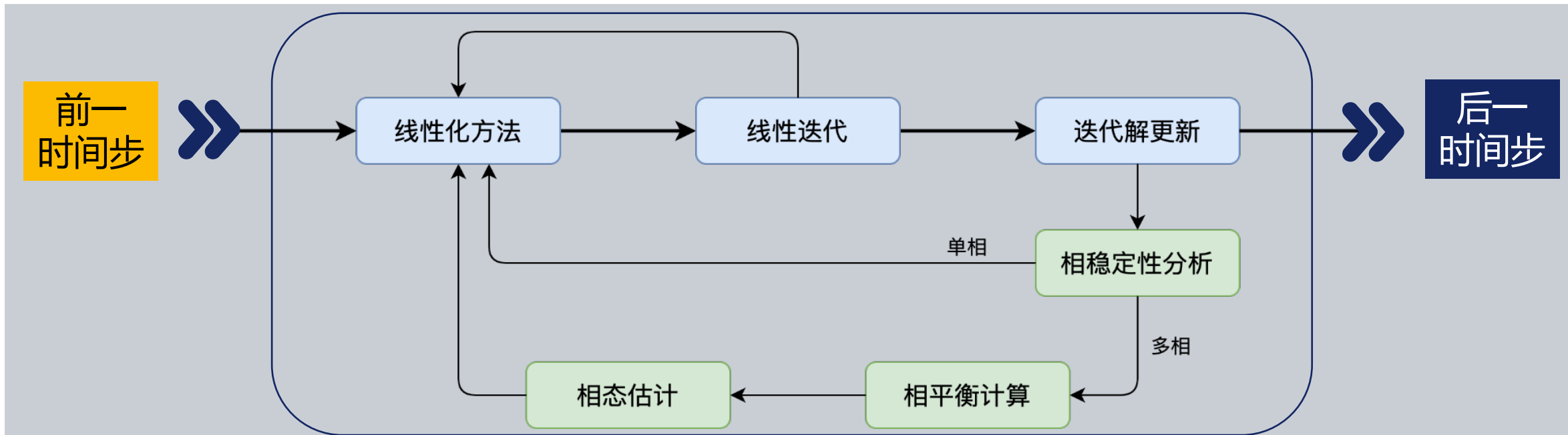
Phase Diagram

参考文献：General Chemistry -- Principles, Patterns, and Applications

http://saylordotorg.github.io/text_general-chemistry-principles-patterns-and-applications-v1.0/index.html



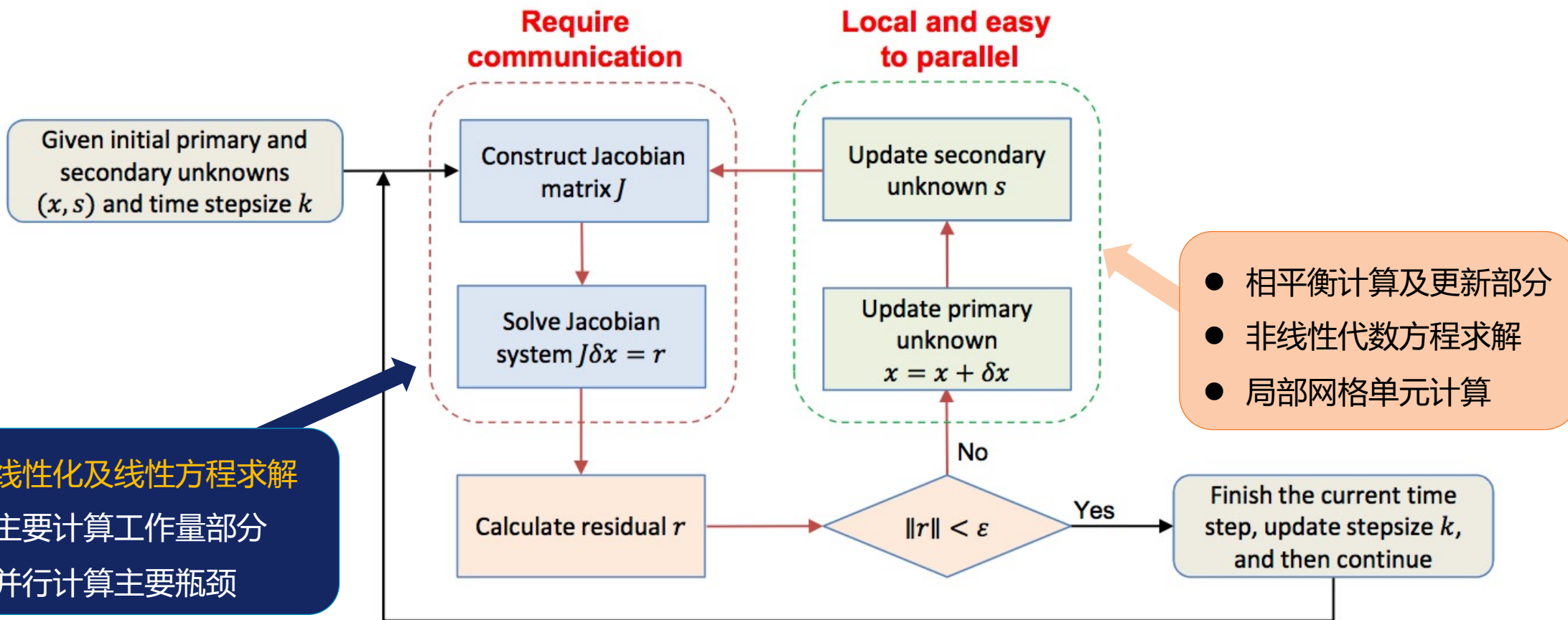
单时间步算法流程图



求解非线性方程组，使得耦合的方程组成立，该过程对时间步长和初值非常敏感：

- 计算主变量（非线性方程组）
- 检查混合物相态（单相？两相？多相？稳定？）
- 对多相情况进行闪蒸计算（非线性代数方程）
- 更新变量，自动选择时间步长（根据后验误差、非线性迭代次数、线性迭代次数、……）

并行油藏模拟的性能瓶颈



- 大规模模拟的主要并行瓶颈：线性方程组求解、非线性迭代、Jacobian矩阵形成、文件读写等
- 求解问题规模扩大，则时间步长更小、非线性迭代次数更多：需尽量保持线性！



并行计算效率与最优算法

Amdahl's Law 1967



如果串行部分占总时间的10%，那并行加速比不可能超过10倍

对于大规模系统来说，很多应用程序的强可扩展性是很难实现的！

Gustafson-Barsis's Law 1988



对于很多应用来说，更需要的是计算越来越大规模的问题！需要是弱可扩展性，而不是强可扩展性

当问题规模与计算资源同比例增大S倍时，加速比最高就可达 $0.9S+0.1$

Gabriel Wittum: HPC Paradox



当购买了大10倍的硬件系统，希望能更快地求解大10倍的问题；但现实很残酷，必须有最优算法才可以！

最优算法对于充分发挥HPC效率及实现弱可扩展性至关重要！

硬件投资



并行效率



最优算法

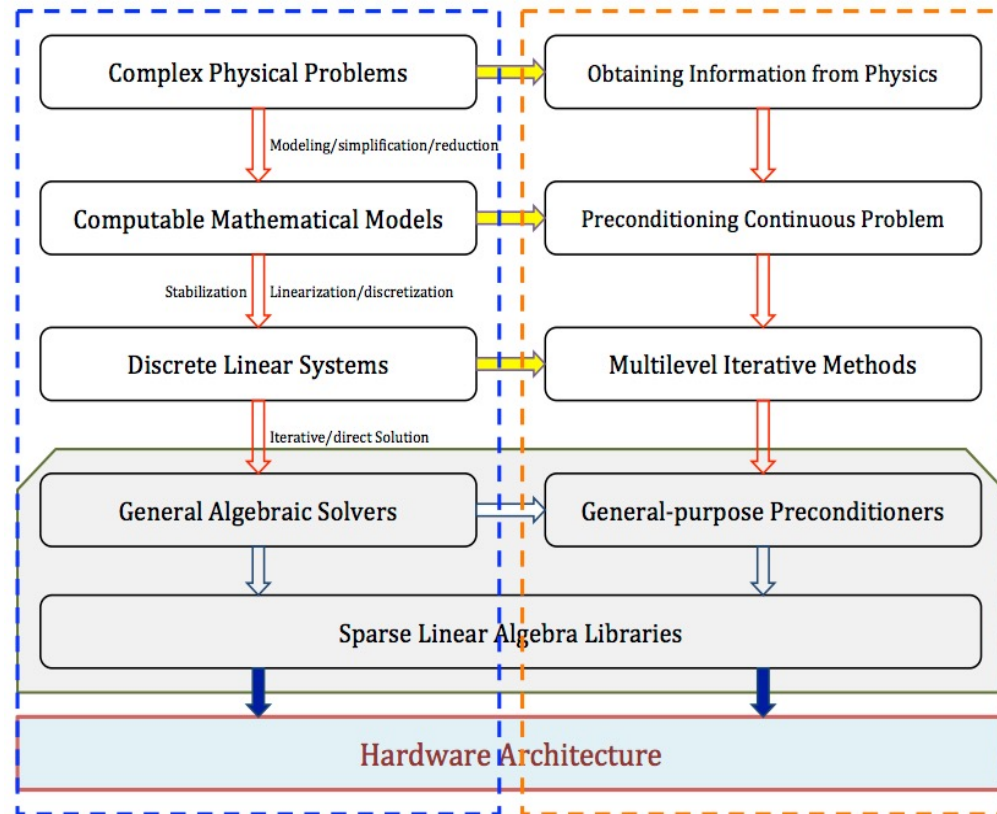
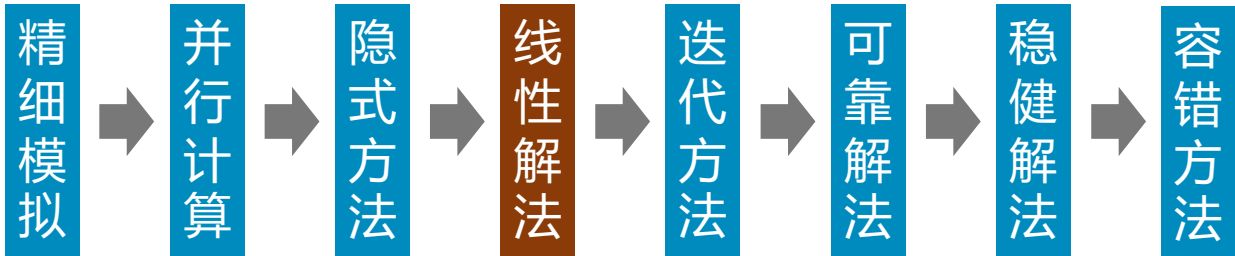


软件投资

大规模数值模拟中的线性解法器



- 大规模高精度的模拟需要变革性的算法支撑
- 大规模网格并行生成和自适应仍是主要技术瓶颈
- 分析和优化过程需要稳健的自动化的求解器技术
- 精细模拟带来大量的数据需要存储、处理和传输
- HPC硬件发展迅速，其发展趋势难以预测



- 快速线性求解器同时是大规模计算中的主要瓶颈，形成**高效、通用、可扩展**的线性求解器软件是一个难题
- 快速线性求解器是大规模数值模拟的重要组件，在一些应用问题的数值模拟中占用了80%以上的时间
- 对超算硬件的性能排名（如HPC TOP500）常采用线性求解器作为Benchmark（如HPL、HPCG等）



线性解法器最优算法的重要性



- 对超算硬件的性能排名（如HPC TOP500）就常采用线性解法器的性能作为标准（如HPL、HPCG等）
- 线性解法器是大规模数值模拟的重要部分，在很多全隐式油藏数值模拟问题中占用了80%以上的时间
- 同时，线性解法器也是并行计算中的主要瓶颈，形成高效、通用、可扩展的线性解法器软件是一个公认的难题

问题规模	网格剖分	64x64x64			128x128x128	256x256x256	512x512x512
	变量个数	274,625			2,146,689	16,974,593	135,005,697
稀疏直接法软件 Intel MKL Pardiso 北京超级云超算	计算核数	8x1	16x1	32x1	16x8	16x64	16x512
	求解时间	5.38s	3.86s	3.26s	59.78s	999.46s	内存不足
几何多重网格法 FASP求解器软件 个人笔记本电脑	计算核数	1x1			1x1	1x1	1x1
	求解时间	0.030s			0.303s	2.815s	23.54s

三维Poisson方程（均匀网格七点差分格式）的线性解法器对比，稀疏直接法Pardiso（北京超级云超算）和几何多重网格法FASP（笔记本电脑）：线程数x进程数。2020年，北京超级云计算中心A分区以Linpack测试性能3.74PFlops，获中国HPC TOP100榜单第三名及通用CPU算力第一名。单节点配两块AMD EPYC7452共64核心256GB内存。

油藏模拟求解器代码优化

中国石油大学（华东）油藏工程系：SimFast模拟器的求解器优化

- 继承了石油部引进的黑油模拟器代码，进行二次开发
- 增加前后处理、各种现场应用功能和实用模型等，……，**已经花费了近30年时间**

中国石油勘探开发研究院：个性化井网设计软件求解性能测试与优化

- 通过斯坦福大学的Industrial Consortium获得油藏模拟器全套代码
- **18万行代码，消化这些代码比较困难，更重要的是：没有人愿意去读**
- 一些算例不能算，一些算法不能算；或者跑一段时间死机，或者跑得很慢……



AMG求解时间	算例A			算例B		
	耗时（秒）	调用次数	加速比	耗时（秒）	调用次数	加速比
修改前	1705.188	192	---	2034.765	107	---
修改后	7.815	72	219倍	94.475	37	22倍

预条件方法代码修改（**其中一行**）前后计算速度对比

求解全隐式离散方程中的困难

- 全隐式模拟中，线性方程组求解时间常常超过80%！
- 全隐式模拟方法稳健、可用较大的时间步长，但会给线性代数方程求解带来很多困难

性质不同的耦合方程

$$\frac{\partial}{\partial t} \left(\phi \sum_{j=1}^{n_p} x_{ij} \xi_j S_j \right) + \nabla \cdot \mathbf{F}_i - \sum_{j=1}^{n_p} S_j T_{ij} = Q_i,$$

$$\mathbf{F}_i = \sum_{j=1}^{n_p} \left(x_{ij} \xi_j \mathbf{u}_j - S_j \mathbf{D}_j \nabla (\xi_j x_{ij}) \right),$$

$$\mathbf{u}_j = -\frac{\kappa \kappa_{rj}}{\mu_j} (\nabla P_j - \gamma_j \nabla z),$$

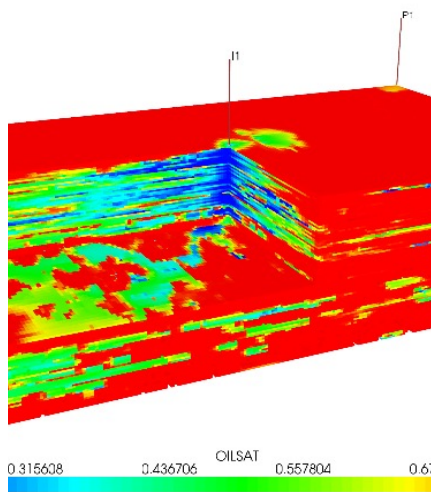
$$f_{ij} = f_{i1}, \quad i = 1 : n_c$$

$$\sum_{j=1}^{n_p} S_j = 1,$$

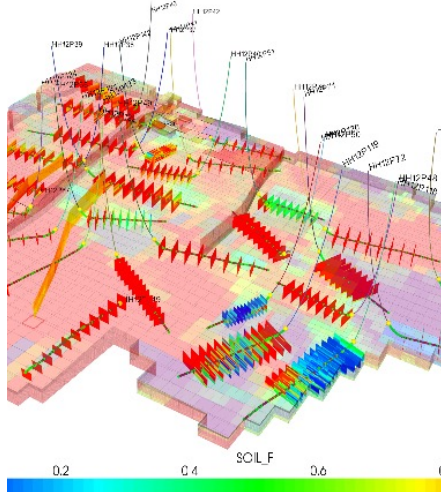
$$\sum_{i=1}^{n_c} x_{ij} = 1,$$

$$P_1 - P_j = P_{c1j},$$

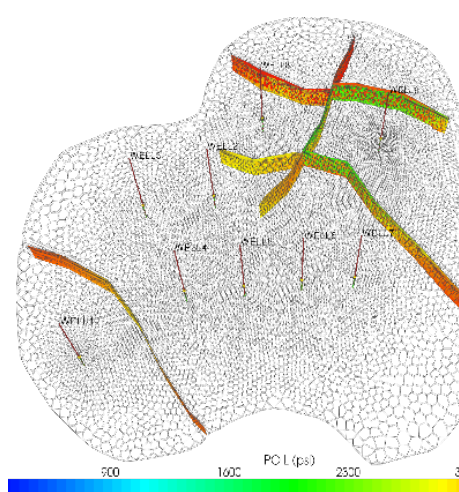
系数的强非均质性



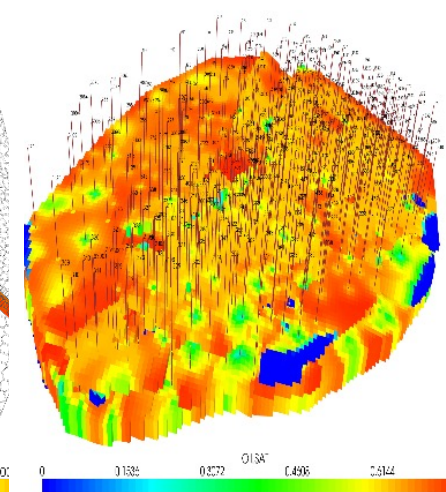
井方程的复杂变化



网格复杂和退化



有效节点数量巨大



设计与预条件方法配合的高效解耦方法，在代数层面处理耦合性

在预条件方法中使用低复杂度代数多重网格法，提升算法稳健性

在预条件方法中使用纯代数方法来处理井方程，提升算法稳健性

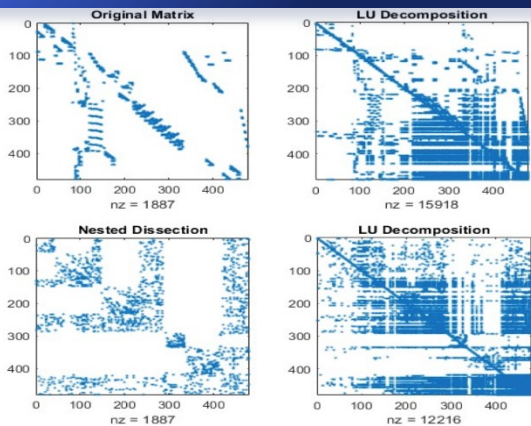
采用无结构的矩阵存储格式BSR，用统一的存储结构处理各种情况

设计最优预条件方法，并结合大规模并行计算技术提高计算效率

科学/工程计算中的预条件方法



基于代数的方法

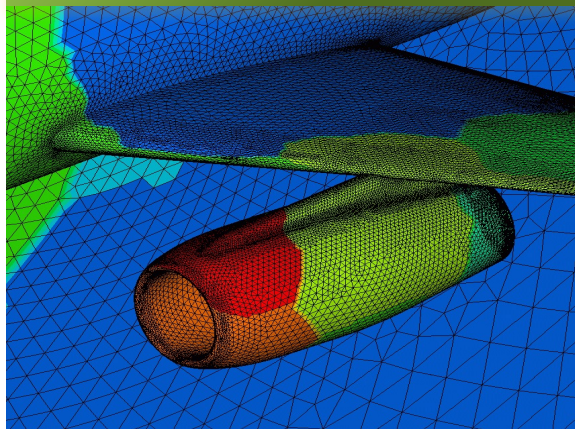


01.

LU, ILU, SAI, ...

纯代数，通用性强，稳健性高，用户友好；效率一般不高，并行可扩展性较差。

基于区域分解的方法

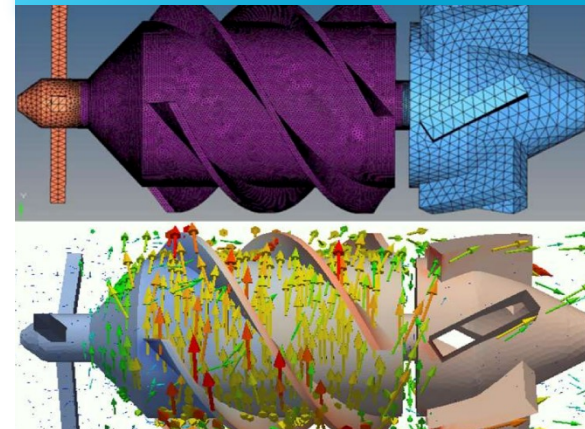


02.

DDM, RAS, FETI-DP, ...

可以基于网格进行，效率高，通用性较强，可扩展性较强；难以兼顾通用性与最优性。

基于物理的方法



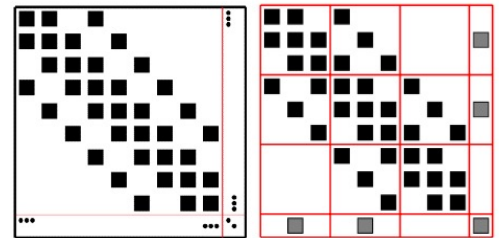
03.

Block Preconditioners

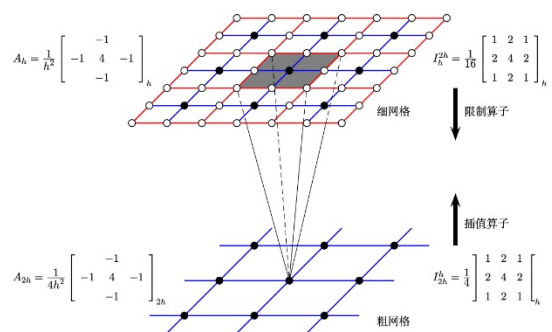
算法灵活，基于成熟算法开发，效率高，可扩展性强；通用性弱，用户友好度差。

线性解法器：多阶段预条件

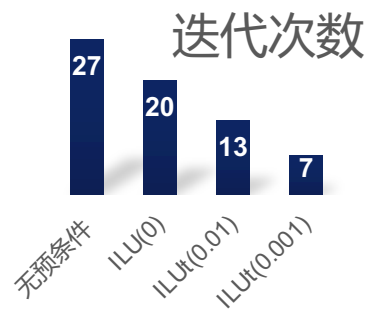
- 方便求解多种不同模型
- 提高内存数据访问效率



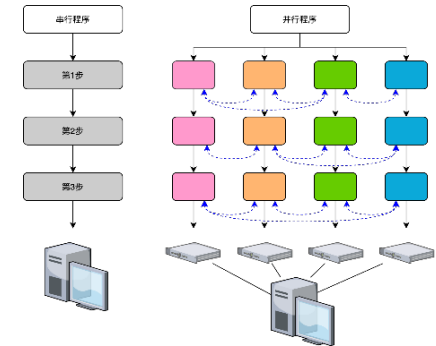
统一矩阵结构



AMG方法

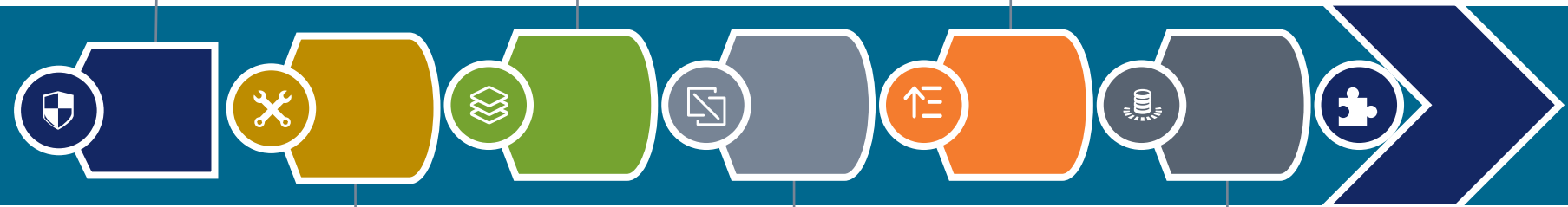


ILU方法

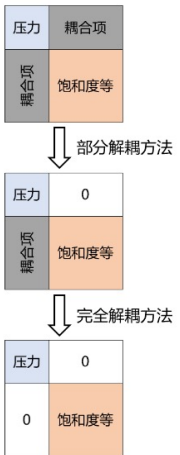


矩阵并行划分

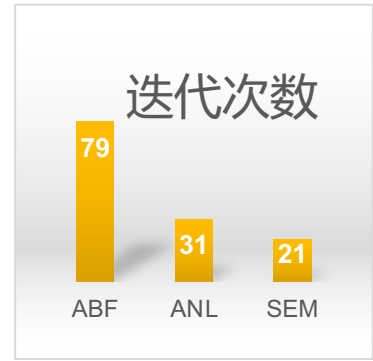
方程



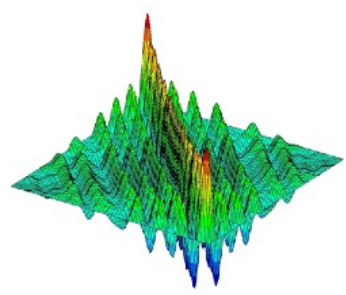
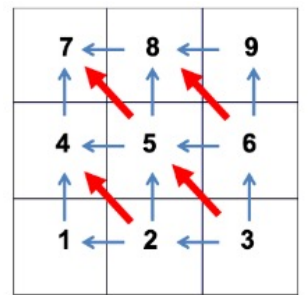
解



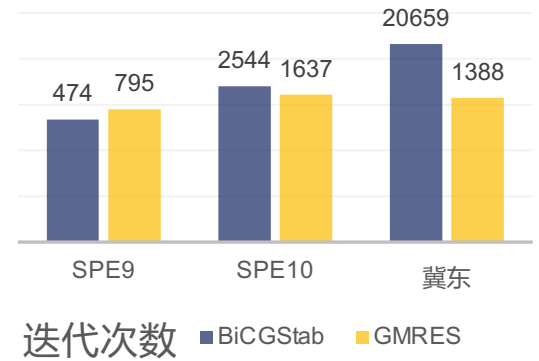
代数解耦方法



顺风磨光



Krylov子空间方法





解耦方法与预条件方法

压力	耦合项
耦合项	饱和度等

部分解耦方法

压力	0
耦合项	饱和度等

完全解耦方法

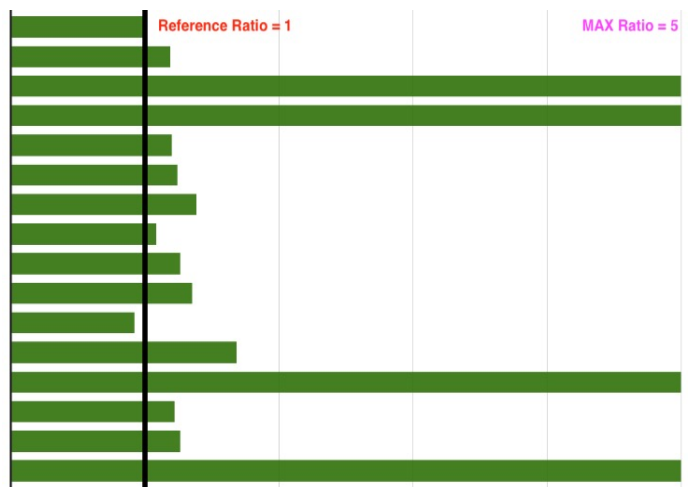
压力	0
0	饱和度等

$$\text{Original} \begin{bmatrix} * & * & \dots & * \\ 0 & 1 & \dots & 0 \\ 0 & \vdots & \ddots & \vdots \\ 0 & 0 & \dots & 1 \end{bmatrix} + \begin{bmatrix} 0 & 0 & \dots & 0 \\ * & * & \dots & * \\ * & \vdots & \ddots & \vdots \\ * & * & \dots & * \end{bmatrix}$$

$$\text{SEM} \left\{ \begin{array}{l} \text{ANL} \\ \text{ABF} \end{array} \right. \begin{bmatrix} * & 0 & \dots & 0 \\ 0 & 1 & \dots & 0 \\ 0 & \vdots & \ddots & \vdots \\ 0 & 0 & \dots & 1 \end{bmatrix} + \begin{bmatrix} * & * & \dots & * \\ * & * & \dots & * \\ * & \vdots & \ddots & \vdots \\ * & * & \dots & * \end{bmatrix}$$

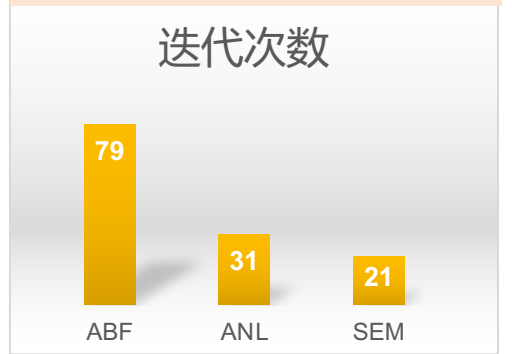
- 解耦方法简单，复杂度低，本身不需要收敛
- 解耦后的问题，需要适用于整体多阶段预条件方法
- 解耦后的问题，每个子问题都“易于求解”

Qiao, Wu, Xu, Zhang. JCP2017



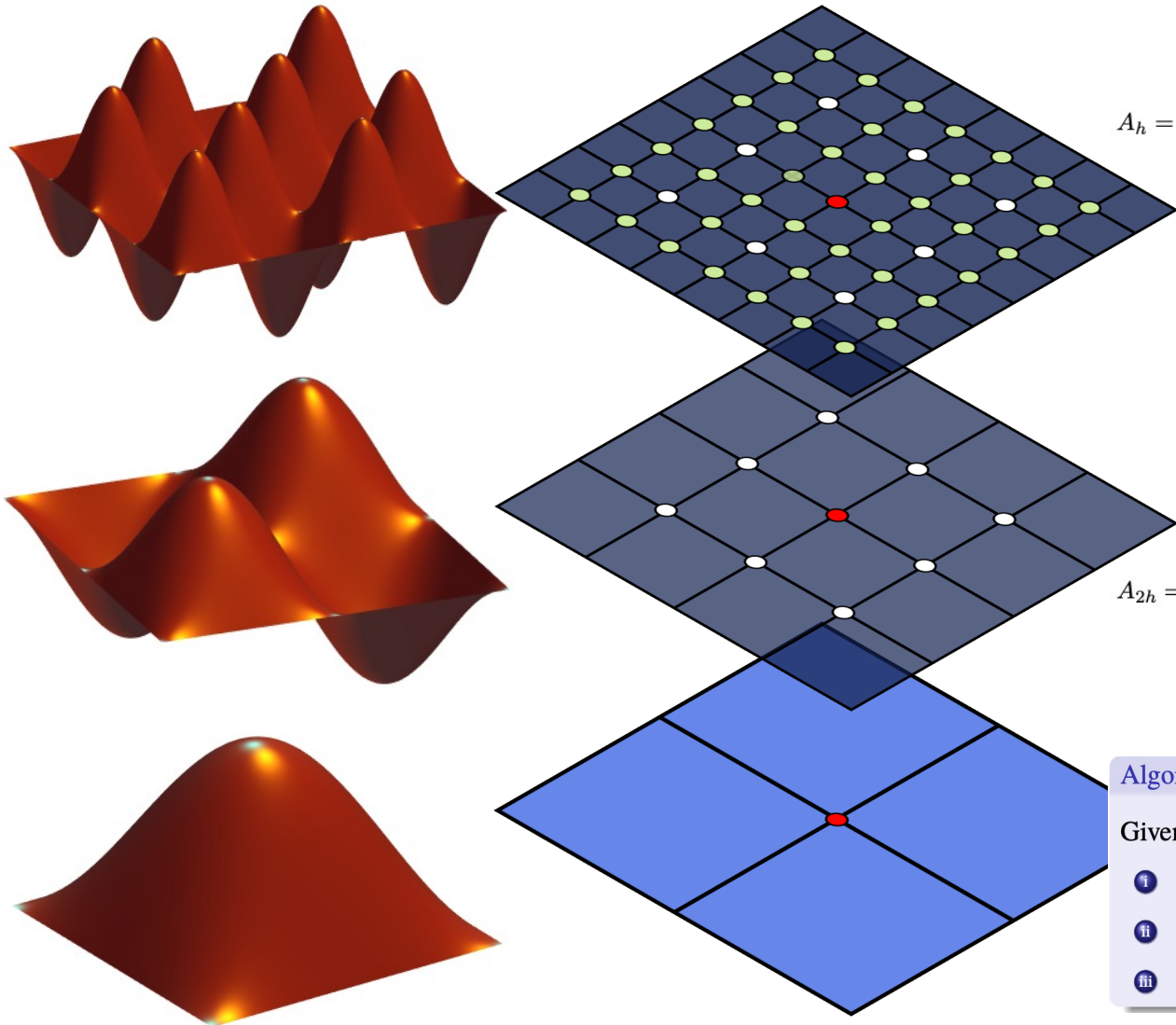
ABF方法的解耦效果强，但是会使得压力方程更难求解，需要对其进行特殊处理才能获得较高的整体性能

Method	Time Steps	Nonlinear Iterations	Linear Iterations	AMG Iterations	Linear Solver Time (s)
ABF	60	352	2505	37235	7756
Analytical	57	332	2209	16212	3149
Semi-analytical	56	320	1338	13813	2464

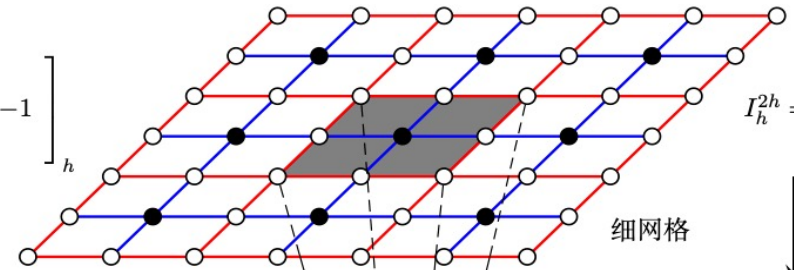




几何多重网格法



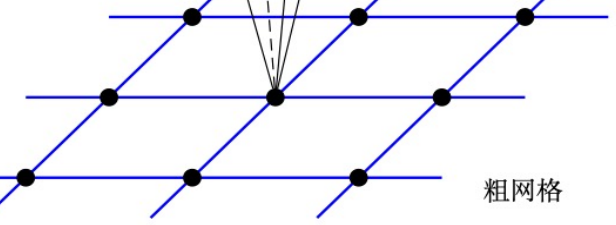
$$A_h = \frac{1}{h^2} \begin{bmatrix} & -1 & & & \\ -1 & 4 & -1 & & \\ & -1 & 4 & -1 & \\ & & -1 & 4 & -1 \\ & & & -1 & \end{bmatrix}_h$$



$$I_h^{2h} = \frac{1}{16} \begin{bmatrix} 1 & 2 & 1 \\ 2 & 4 & 2 \\ 1 & 2 & 1 \end{bmatrix}_h$$

限制算子

$$A_{2h} = \frac{1}{4h^2} \begin{bmatrix} & -1 & & & \\ -1 & 4 & -1 & & \\ & -1 & 4 & -1 & \\ & & -1 & 4 & -1 \\ & & & -1 & \end{bmatrix}_{2h}$$



$$I_{2h}^h = \frac{1}{4} \begin{bmatrix} 1 & 2 & 1 \\ 2 & 4 & 2 \\ 1 & 2 & 1 \end{bmatrix}_h$$

插值算子

Algorithm (Two-grid method in operator form)

Given an initial guess $u^{(0)} \in V$.

- i Pre-smoothing: $u^{(1)} = u^{(0)} + \mathcal{S}(f - Au^{(0)})$;
- ii Coarse-grid Correction: $u^{(2)} = u^{(1)} + (\mathcal{I}_c \mathcal{B}_c \mathcal{I}_c^T)(f - Au^{(1)})$;
- iii Post-smoothing: $u^{(3)} = u^{(2)} + \mathcal{S}^T(f - Au^{(2)})$.

代数多重网格法

- 代数多重网格法通过系数矩阵构造限制和提升算子，从而得到不同“网格层”之间的信息传递方式和粗网格问题

- 粗网格自由度：C/F分裂、聚集法

- 插值和限制算子：

- 确定插值局部区域 – 稀疏模式
- 确定插值权系数 – 获得 P (and R)

- 粗空间求解器：

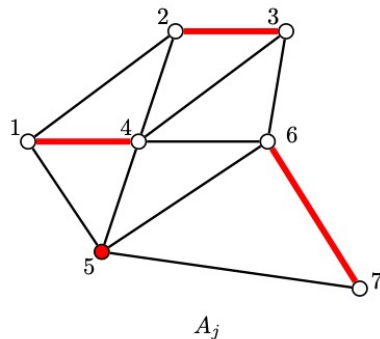
- 确定粗水平上的求解问题
- 多层迭代: V, W, AMLI, K, ...

- 磨光算子：降低误差的光滑部分

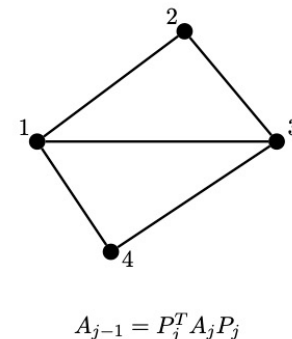
- 简单通用的光滑子
- 依赖问题的光滑子

聚集法：

$$P_{ij} = \begin{cases} 1, & \text{if } i \in A_j, \\ 0, & \text{if } i \notin A_j. \end{cases}$$



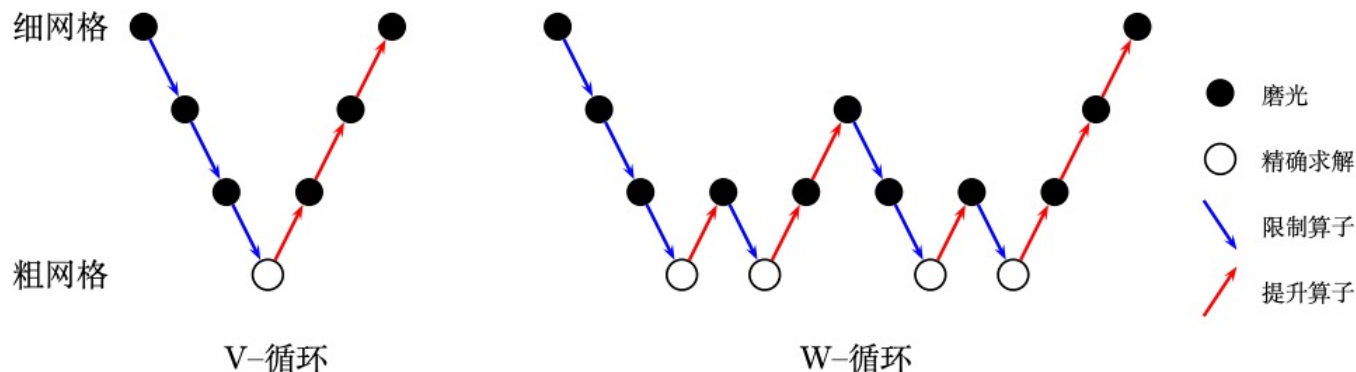
$$P_j = \begin{bmatrix} 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 & 0 \\ 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 1 \\ 0 & 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 1 & 0 \end{bmatrix}$$



$$A_{j-1} = P_j^T A_j P_j$$

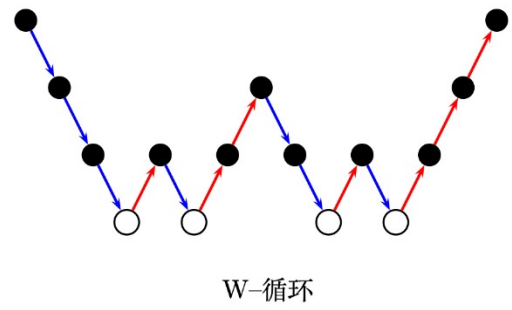
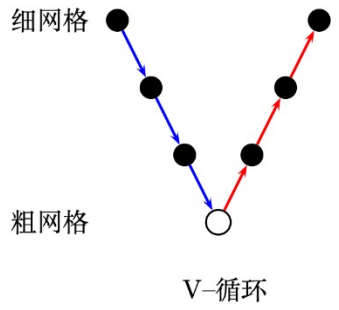
- 非光滑聚集法的插值算子简单，基于聚集法的AMG方法过程更简单，更容易并行！

- 光滑聚集法AMG的插值算子是在非光滑聚集法AMG的插值算子的基础上左乘一个磨光算子





两层网格法的收敛性分析



- 多层迭代法是高效解法，如GMG, HB, BPX, AMG等
- 几何多层迭代法的收敛性分析相对比较成熟

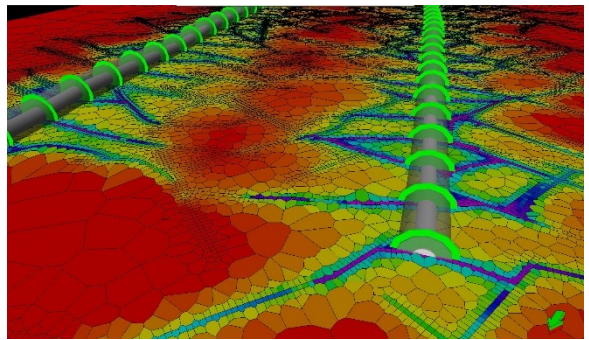
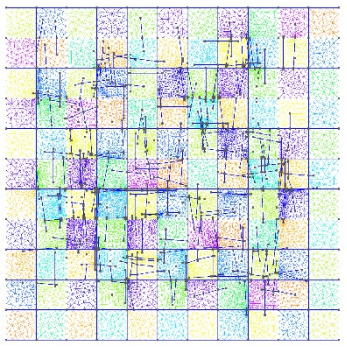
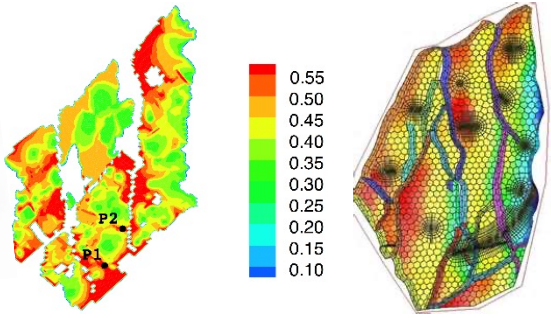
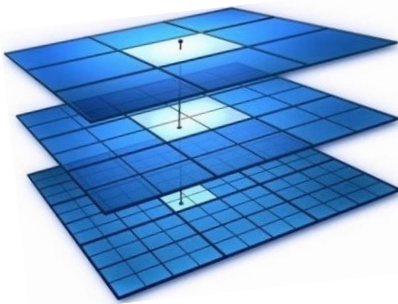
- J. Xu & L. Zikatanov, Acta Numerica, 2017: “a rigorous multilevel convergence theory for AMG without using geometric information is still very much an open problem ...”

- 从**最优(Optimal)**插值算子到**理想(Ideal)**插值算子

- X. Xu & Z., SINUM, 2018. Math Review: “This interesting and clearly written paper establishes new characterizations (including a sufficient condition, a necessary condition, and an equivalent condition) of the so-called ideal interpolation operator ...”
- 徐雪枫获2018年北京计算数学学会优秀青年论文一等奖

- **非精确两层网格收敛性分析**：给出量化上下界估计

- Y. Notay, SINUM, 2007
- X. Xu & Z., SINUM, accept; SIMAX accept



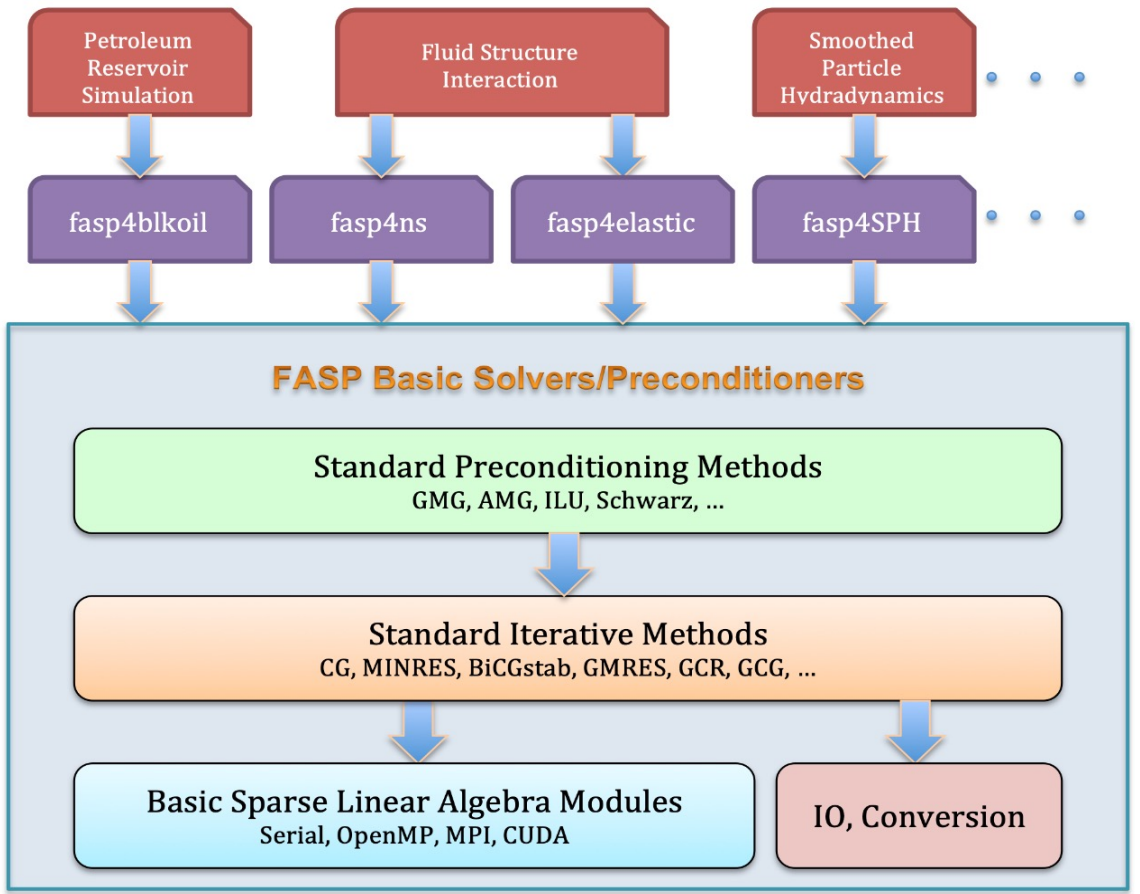
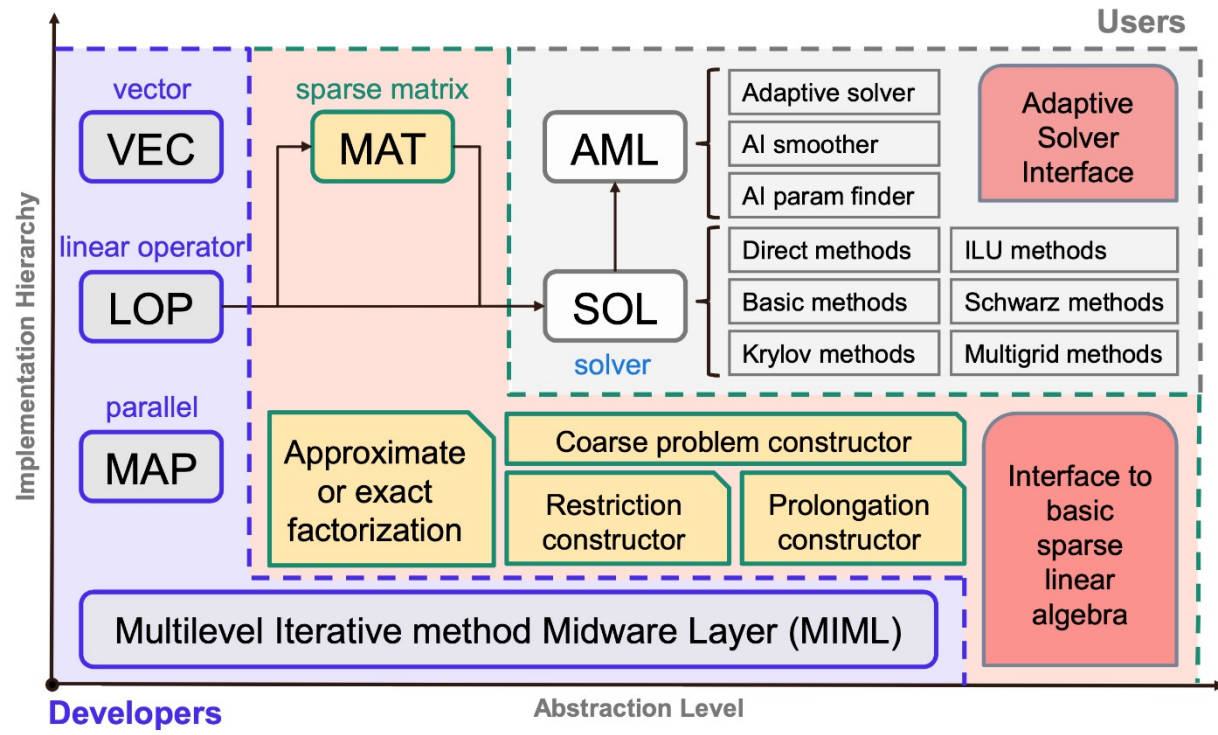


FASP线性解法器软件介绍

```

FaspRetCode LOP :: Solve(VEC& b, VEC& x)
FaspRetCode LOP :: Solve(VEC& b, VEC& x, SOL& pc)
FaspRetCode MAT :: Solve(VEC& b, VEC& x, SOL& pc, Param& par)

```



FASP 开源项目网址

- <http://www.multigrid.org/fasp>
- <https://github.com/FaspDevTeam/faspsolver>
- <https://github.com/FaspDevTeam/faspxx>

解法在油藏模拟器中的应用

国内外油藏模拟软件

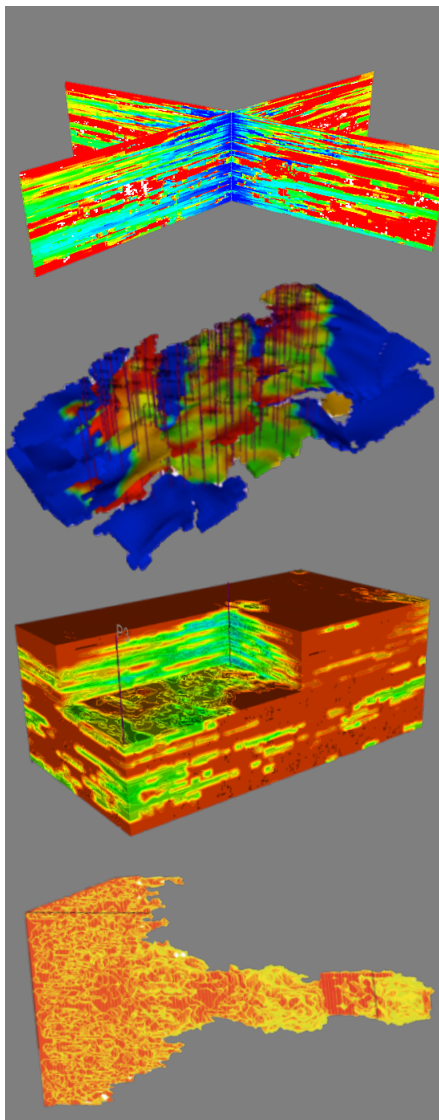
- Monix Energy：黑油、挥发黑油、双孔（8个算例）
- 中海油SOCF模拟器：黑油、聚合物驱（10个算例）
- 中石油HiSim模拟器：黑油（40个算例）
- 石油大学（华东）Simfast模拟器：黑油（16个算例）
- 中石化KarstSim模拟器：碳酸盐油藏（5个算例）
- 北京软能创：黑油、离散裂缝、双孔双渗（5个算例）
- PECLOUDS：黑油、多组分、热采、蒸汽驱（70个算例）
- PennSim：多组分（10个算例）
- 其他油藏模拟软件：
 - 大庆黑油串、并行模拟软件
 - 南京特雷西能源（获斯坦福大学模拟器授权）
 - 中国科技大学、湖南大学、中国地质大学、石油大学（北京）……

中石油HiSim模拟器

任务编号	任务类型	任务状态	创建时间	开始时间	结束/中止时间	任务文件路径名称
0	BLK	completed	2021/12/17 05:40	2021/12/17 05:40	2021/12/17 05:27	D:\HiSim\software\Release20210121-CHN\examples\SPE100-SPE10-3M\SPE10-3W.DATA
1	BLK	completed	2021/12/17 05:50	2021/12/17 05:50	2021/12/17 07:51	D:\HiSim\software\Release20210121-CHN\examples\SPE103-SPE10-7M\SPE10-7W.DATA
2	BLK	completed	2021/12/17 06:00	2021/12/17 06:00	2021/12/17 10:03	D:\HiSim\software\Release20210121-CHN\examples\SPE104-SPE10-13M\SPE10-13W.DATA
3	BLK	completed	2021/12/17 06:09	2021/12/17 06:09	2021/12/17 06:39	D:\HiSim\software\Release20210121-CHN\examples\G17ZRPE10_TEST1.DATA
4	BLK	completed	2021/12/17 06:30	2021/12/17 06:30	2021/12/17 06:52	D:\HiSim\software\Release20210121-CHN\examples\SPE18PE1.DATA
5	BLK	completed	2021/12/17 10:21	2021/12/17 10:21	2021/12/17 10:22	D:\HiSim\software\Release20210121-CHN\examples\SPE22.DATA
6	BLK	completed	2021/12/17 10:26	2021/12/17 10:26	2021/12/17 10:26	D:\HiSim\software\Release20210121-CHN\examples\SPE22.DATA
7	BLK	completed	2021/12/17 10:31	2021/12/17 10:31	2021/12/17 11:12	D:\HiSim\software\Release20210121-CHN\examples\SPE7type7.DATA

具备地质建模、黑油模拟、组分模拟、裂缝模拟、化学驱模拟等十大功能模块，已在国内外百余个油藏区块中得到应用，节省软件购置费用超3亿元。2017年，国资委刊文《打破国外垄断，中国石油新一代油藏数值模拟软件研制成功》！

一些模拟软件中的测试结果



No	Name	Properties				Ecl100		HiSim	
		Model	# Total Cells	# Active Cells	Peroid (day)	Newton	Time (min)	Newton	Time (min)
1	SPE10-2	Two-phase	1122000	1094422	2000	—	—	295	41.82
2	SPE9-9k	Black-oil	9000	9000	900	339	0.12	269	0.20
3	SPE1	CO2 flooding	300	300	3656	536	0.04	445	0.08
4	SPE2	Three-phase coning	150	150	900	209	0.01	538	0.14
5	SPE10-3	Black-oil	1122000	1094422	2000	—	—	1462	354.12
6	SPE6	Dual porosity	100	100	7300	306	0.01	322	0.02
7	DPSP	Dual porosity	60984	40294	360	545	2.64	116	0.81
8	SPE7	Horizontal wells	488	488	1500	120	0.01	75	0.02
9	Voliatile	Extended black-oil	2100	2100	0.694			67	0.03
10	Zaoyuan	Field test (black-oil)	417480	143786	10653	3302	105.49	5204	66.20
11	Jidong	Field test (black-oil)	335664	154598	10587	1091	139.69	161	4.41
12	Chengbei	Field test (black-oil)	1646500	585123	2191	1971	155.57	420	28.47
13	Daqing1	Field test (black-oil)	1453248	466913	15616	—	—	5227	338.00
14	Daqing2	Field test (black-oil)	847895	241474	15096	8562	92.46	3072	88.05
15	SPE10-10M	Two-phase (large-scale)	11220000	10944220	2000	—	—	592	962.12
16	SPE9-9M	Black-oil (large-scale)	9000000	9000000	900	—	—	2460	10932.81

应用单位	模型	有效网格	使用FASP解法器	未使用FASP解法器
北京软能创	页岩气	762万	61小时	245小时
PEClouds	SPE10	109万	0.8小时	5.5小时
PEClouds	黑油实例	14万	0.28小时	0.78小时

03

模拟软件

Software design considerations for OpenCAEPoro



提高日常工作绝对效率

百万规模黑油问题，夕发朝至，甚至朝发夕至

——曾经是油藏工程师的梦想

过去需要大规模集群，现在只用笔记本电脑

过去需要几天至几周，现在已在分、秒量级

- 数万至数百万量级自由度的问题仍是目前工程中最常用需要求解的规模（中小规模）
- 传统的简化模型和算法已不能满足工程师的需要
- 更精细的模型、更复杂的物理、更快速地求解
- 更复杂的计算硬件环境（CPU、GPU、DCU）

满足高含水、高采出程度的双高油田的开发需求

使用化学驱替剂，如聚合物、表面活性剂等

多种流体物质组分之间，及流体与岩石间的反应

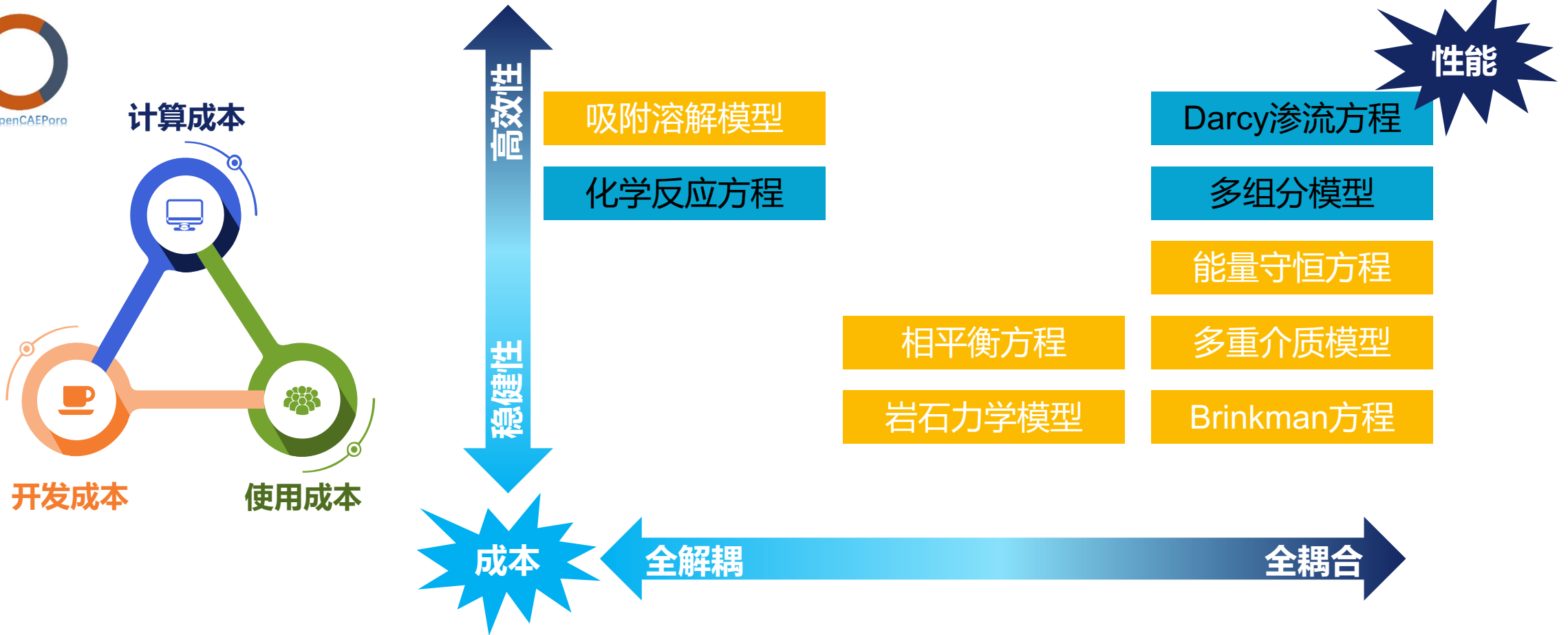
地层中存在裂缝、溶洞、断层、尖灭、高低渗透带

深层及超深层储层，需要考虑地层骨架变形

储层地质情况越发复杂，非均质性强，不确定性强

油气开发越发趋向于强耦合的复杂多物理过程

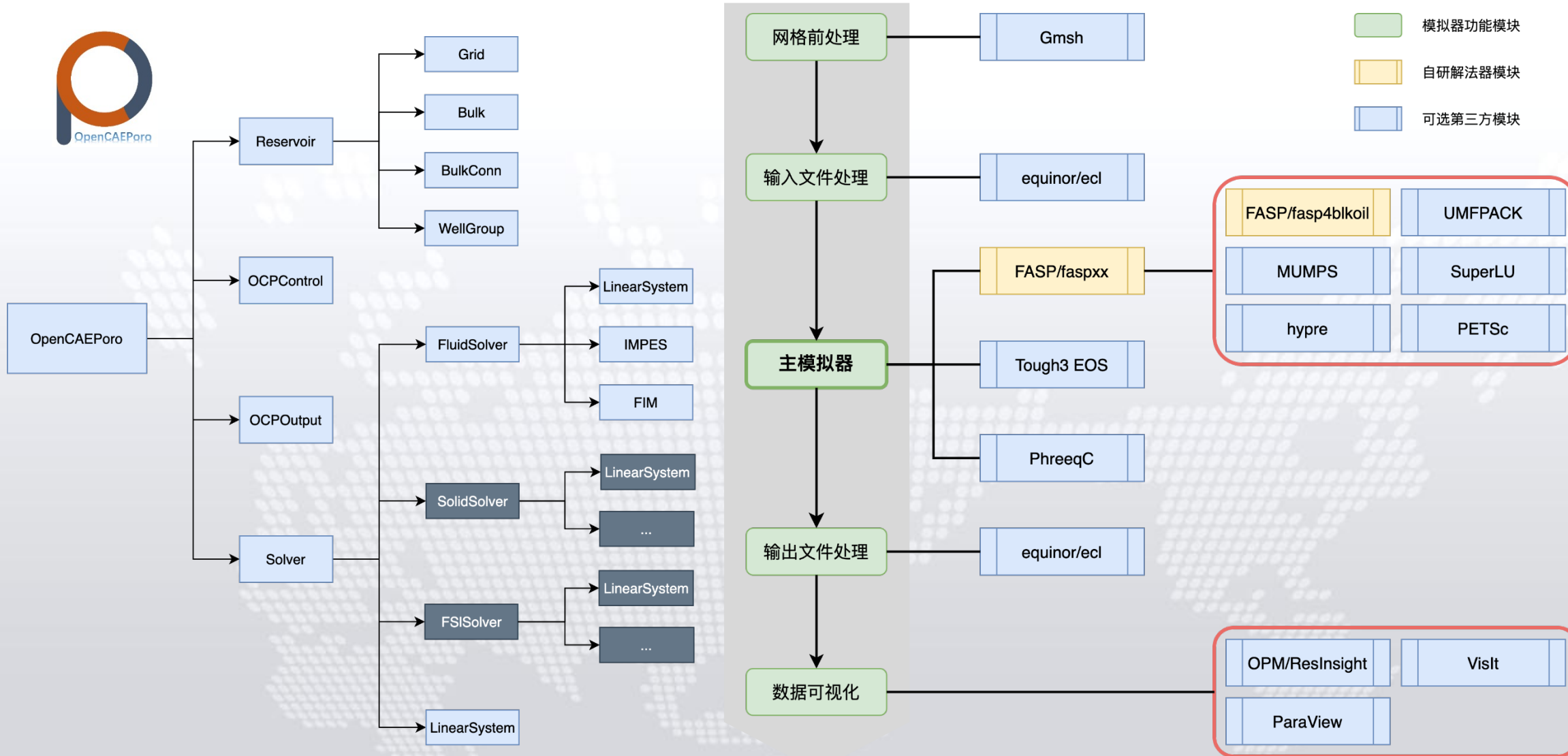
OpenCAEPoro求解方法的选择



全隐式方法 + 向后Euler时间离散 + 自适应时间步长 + Newton线性化 + 无结构网格 + TPF有限体积法 + 上游加权 + 拟Newton法 + 半解析解耦方法 + 多阶段预条件 + FGMRES

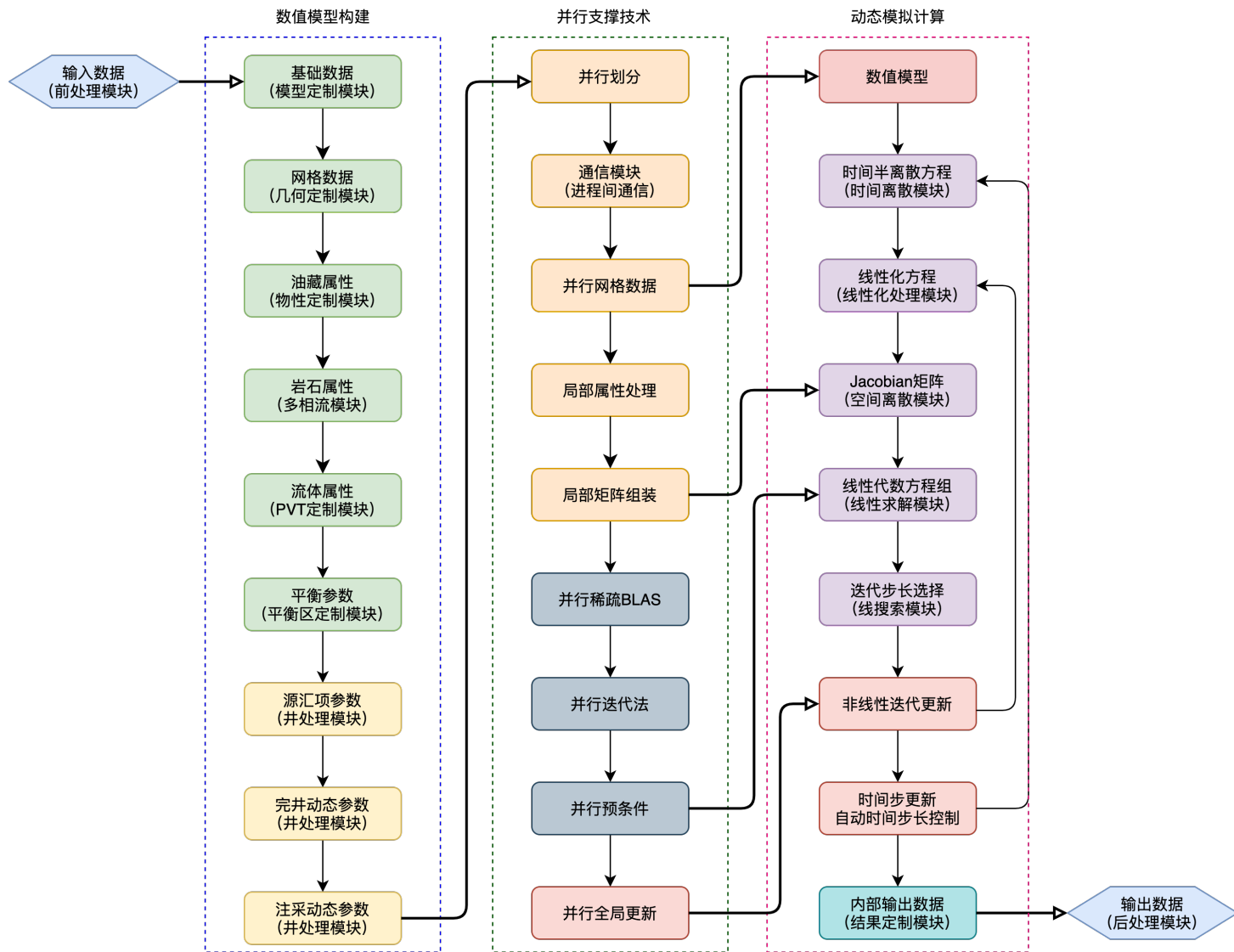


OpenCAEPoro软件模块设计



模拟器功能模块
 自研解法器模块
 可选第三方模块

分布式并行程序设计



将网格划分成若干个部分 (子区域)

进程有自己的数据及邻居的部分数据

进程之间在需要的时候可以交换数据

形成Jacobian系统分布式矩阵和右端项

调用并行线性解法器求解Jacobian系统

发布解，对解向量进行并行更新

测试算例设计



- **串并行实现**

串行、OpenMP , GPU , MPI

- **模型方程**

黑油模型、组分模型

- **多相流体**

单相、两相、三相

- **算法框架**

FIM、IMPEC、Improved IMPEC

- **离散网格**

正交网格、角点网格

- **测试问题**

理论模型、SPE标准算例、实际油田算例

正确性

稳健性

稳定性

收敛性

高效性

可用性

国际油藏工程师协会标准算例



TABLE 17.1—SPE COMPARATIVE SOLUTION PROJECT PROBLEMS

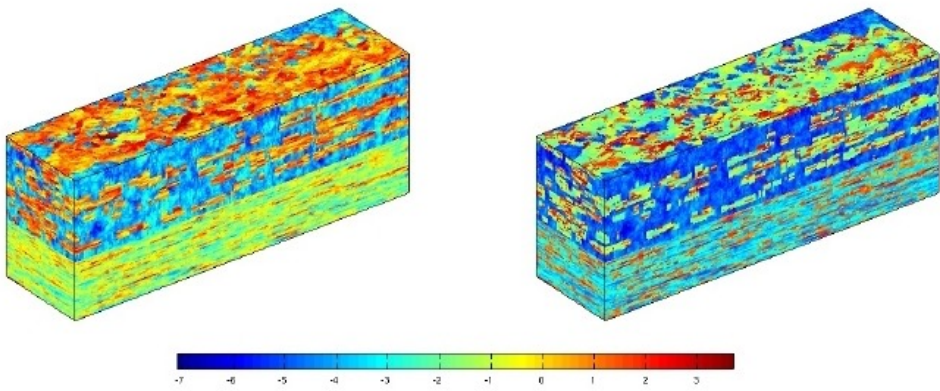
SPE1	Three-phase black oil 10×10×3 300-block grid 3,650-day depletion with gas injection
SPE2	Three-phase black oil 10×1×15 150-block r-z grid 900-day single-well coning depletion
SPE3	Nine-component retrograde gas 9×9×4 324-block grid 5,480-day cycling and blowdown
SPE4	Cyclic steam injection and steam displacement of heavy oils
SPE5	Six-component volatile oil 7×7×3 147-block grid 20-year WAG injection
SPE6	Three-phase black oil Single-block and cross-sectional dual porosity with drainage and gas and water injection cases
SPE7	Three-phase black oil 9×9×6 486-block grid with horizontal wells Eight 1,500-day injection-production cases
SPE8	Two-phase gas-oil black oil 10×10×4 400-block grid Comparison of 2,500-day 400-block grid results with 20-block unstructured and locally refined grid results
SPE9	Three-phase black oil 24×25×15 9,000-block 25-well grid with geostatistical description 900-day depletion
SPE10	Model 1: Two-phase gas-oil case with a 2,000-block 100×1×20 grid and gas injection to 2000 days Model 2: Two-phase water-oil case with a 1.12-million block 60×220×85 grid and water injection to 2,000 days Both models have geostatistical descriptions

- 1) **Odeh, A.S. 1981. Comparison of Solutions to a Three-Dimensional Black-Oil Reservoir Simulation Problem. J Pet Technol 33 (1): 13–25. SPE-9723-PA.**
- 2) Weinstein, H.G., Chappellear, J.E., and Nolen, J.S. 1986. Second Comparative Solution Project: A Three-Phase Coning Study. J Pet Technol 38 (3): 345-353. SPE-10489-PA.
- 3) **Kenyon, D. 1987. Third SPE Comparative Solution Project: Gas Cycling of Retrograde Condensate Reservoirs. J Pet Technol 39 (8): 981-997. SPE-12278-PA.**
- 4) Aziz, K., Ramesh, A.B., and Woo, P.T. 1987. Fourth SPE Comparative Solution Project: Comparison of Steam Injection Simulators. J Pet Technol 39 (12): 1576–1584. SPE-13510-PA.
- 5) **Killough, J.E. and Kossack, C.A. 1987. Fifth Comparative Solution Project: Evaluation of Miscible Flood Simulators. Presented at the SPE Symposium on Reservoir Simulation, San Antonio, Texas, 1–4 February. SPE-16000-MS.**
- 6) Firoozabadi, A. and Thomas, L.K. 1990. Sixth SPE Comparative Solution Project: Dual-Porosity Simulators. J Pet Technol 42 (6): 710-715, 762-763. SPE-18741-PA.
- 7) **Nghiem, L., Collins, D.A., and Sharma, R. 1991. Seventh SPE Comparative Solution Project: Modelling of Horizontal Wells in Reservoir Simulation. Presented at the SPE Symposium on Reservoir Simulation, Anaheim, California, 17-20 February 1991. SPE-21221-MS.**
- 8) Quandalle, P. 1993. Eighth SPE Comparative Solution Project: Gridding Techniques in Reservoir Simulation. Presented at the SPE Symposium on Reservoir Simulation, New Orleans, Louisiana, 28 February-3 March 1993. SPE-25263-MS.
- 9) **Killough, J.E. 1995. Ninth SPE Comparative Solution Project: A Reexamination of Black-Oil Simulation. Presented at the SPE Reservoir Simulation Symposium, San Antonio, Texas, USA, 12–15 February. SPE 29110.**
- 10) **Christie, M.A. and Blunt, M.J. 2001. Tenth SPE Comparative Solution Project: A Comparison of Upscaling Techniques. SPE Res Eval & Eng 4 (4): 308–317. SPE-72469-PA.**

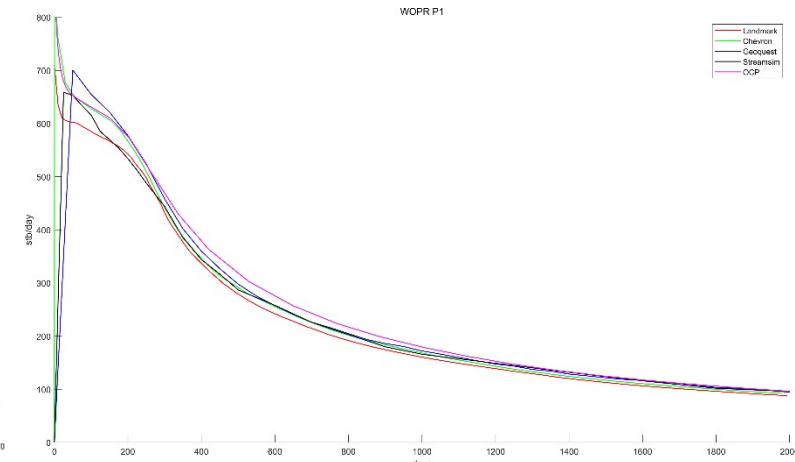
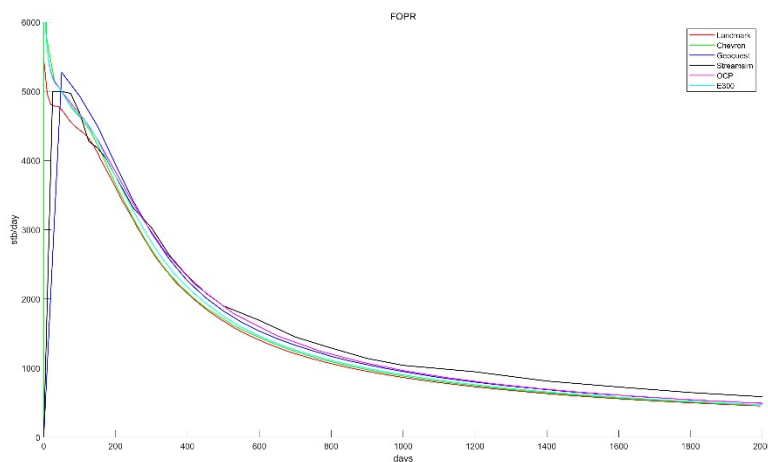
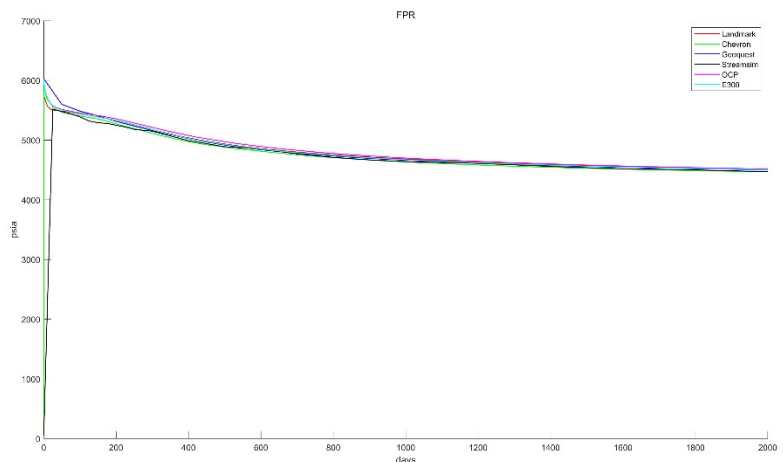
https://petrowiki.spe.org/Reservoir_simulation



SPE10标准算例：油水两相



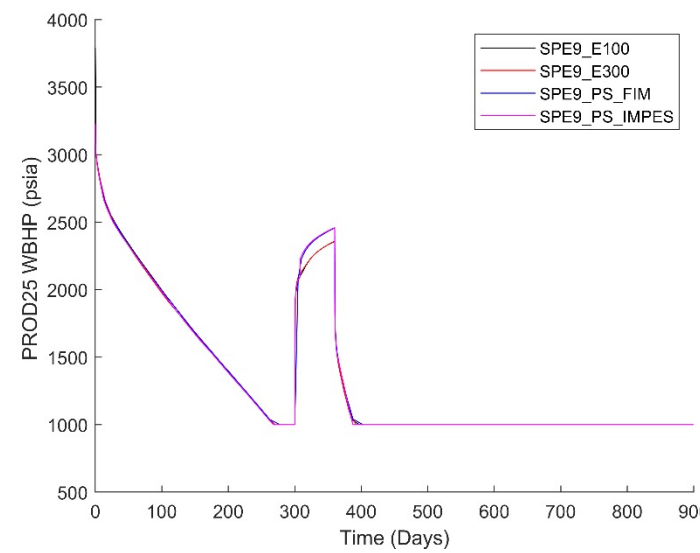
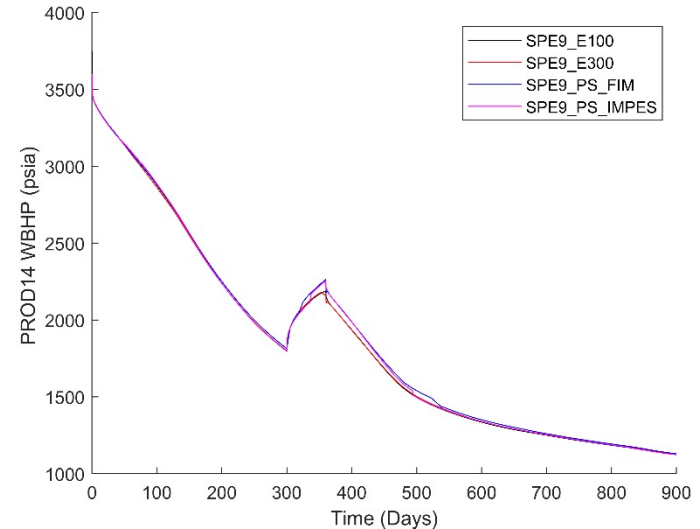
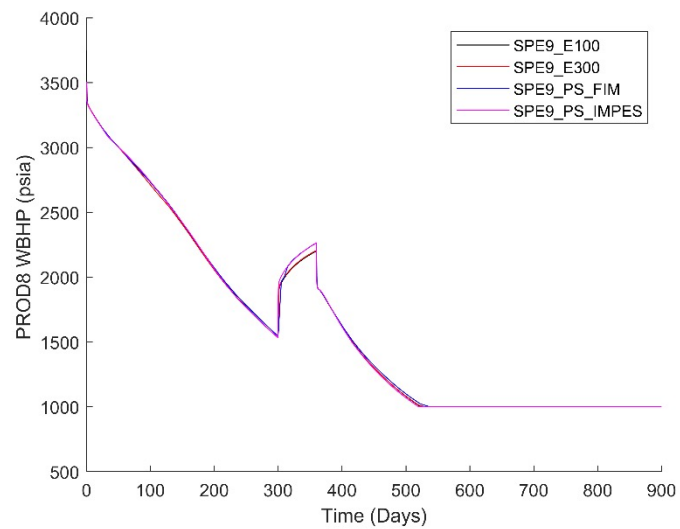
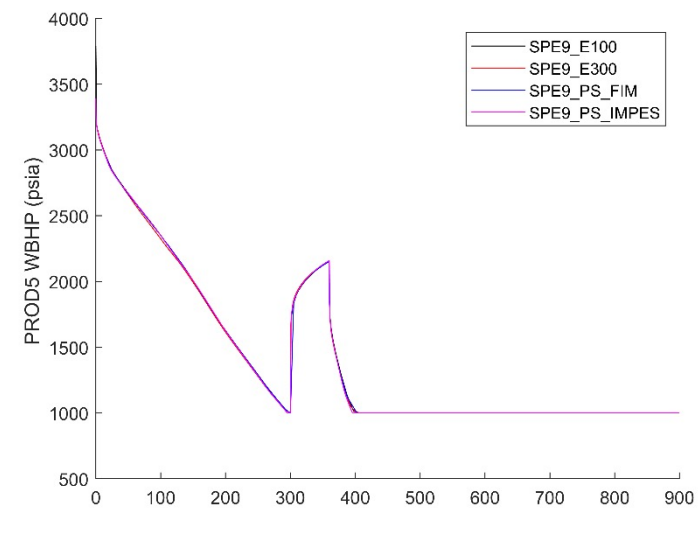
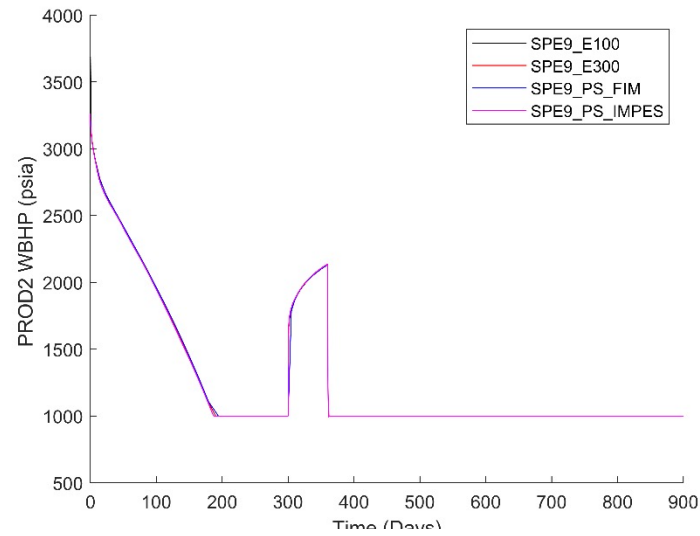
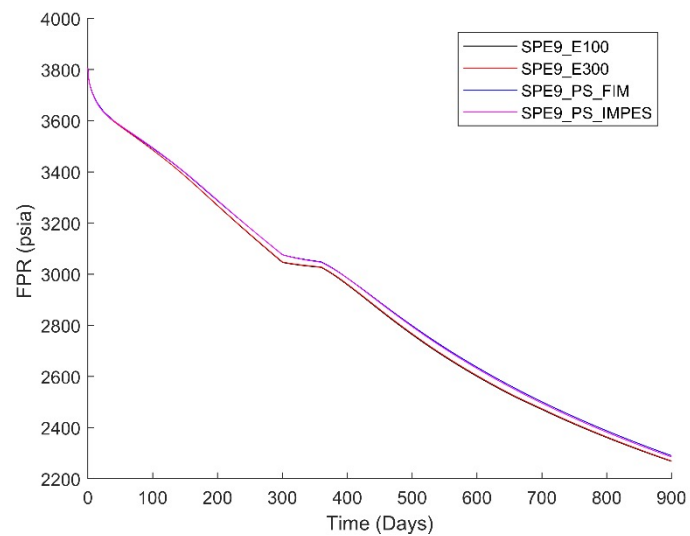
- 油藏工程师协会第10标准算例，CASE 2（大规模）
- 强非均质油水两相模型
- 网格规模：60 X 220 X 85，有效网格数：1,094,418
- 一注四采，模拟2000天注水



计算耗时2486秒：53个时间步，217个Newton步，1334个线性迭代步（占总时间的86%）

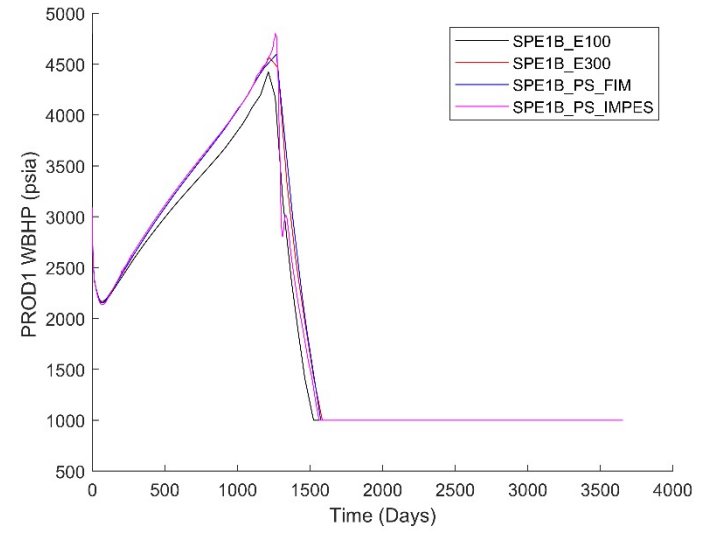
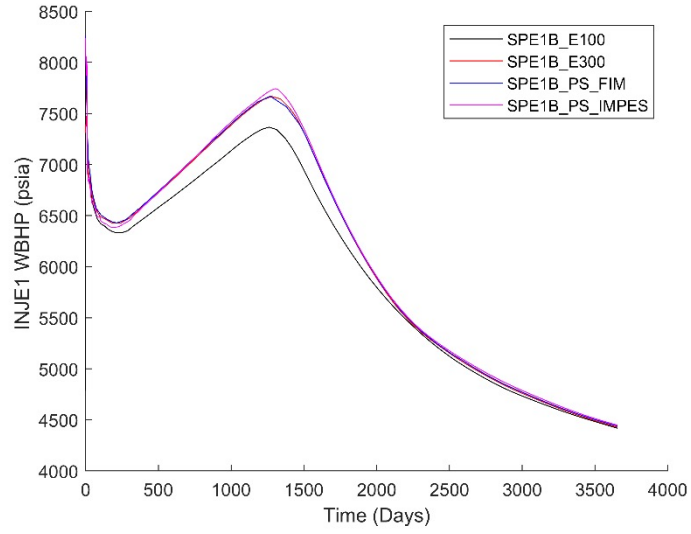
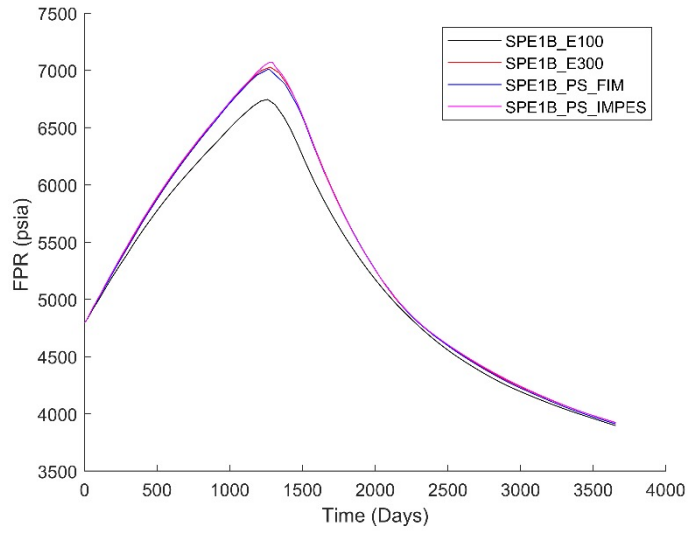
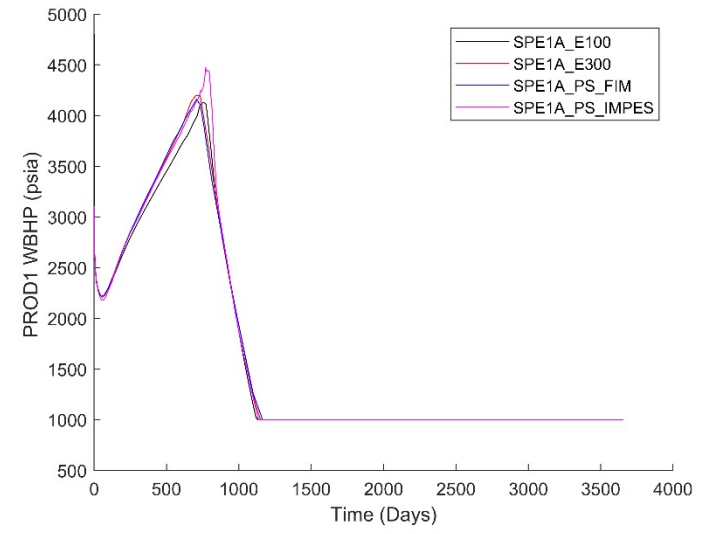
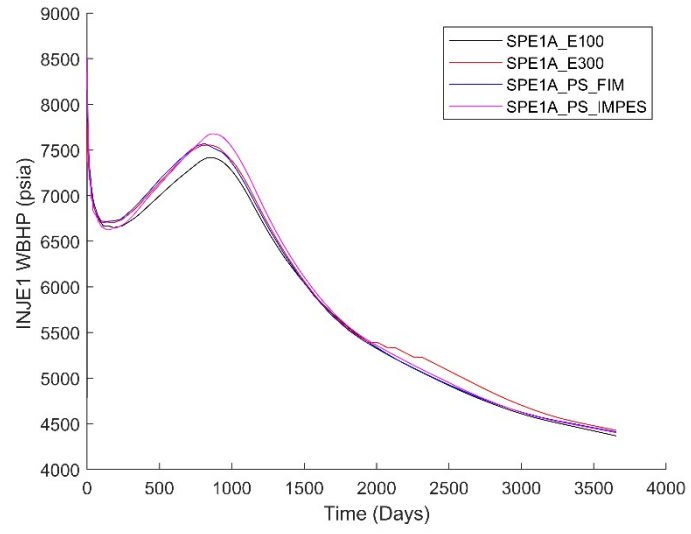
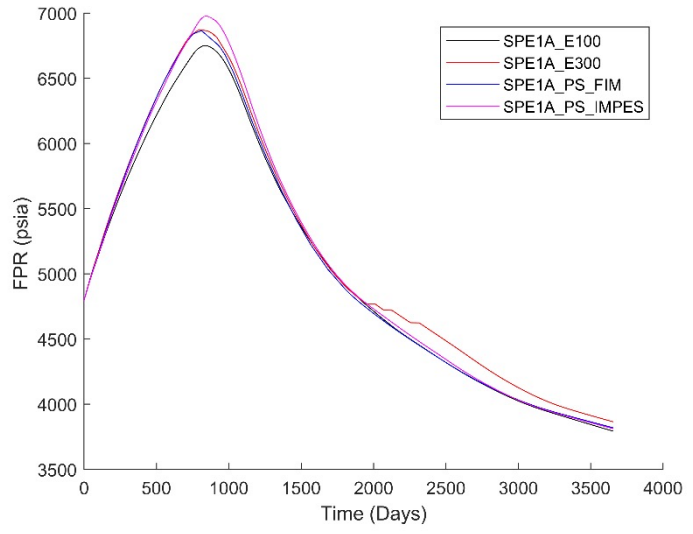


SPE9标准算例：三相问题



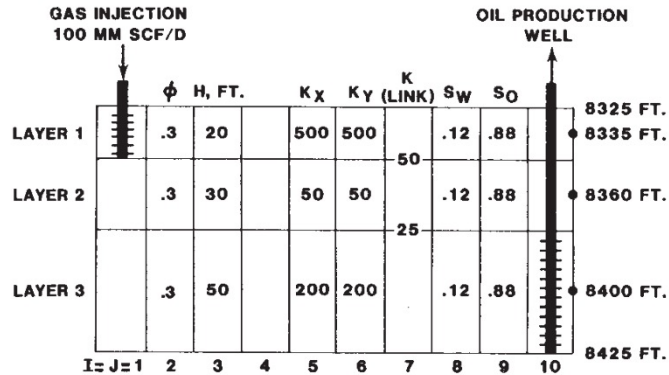


SPE1标准算例：非混相注气驱

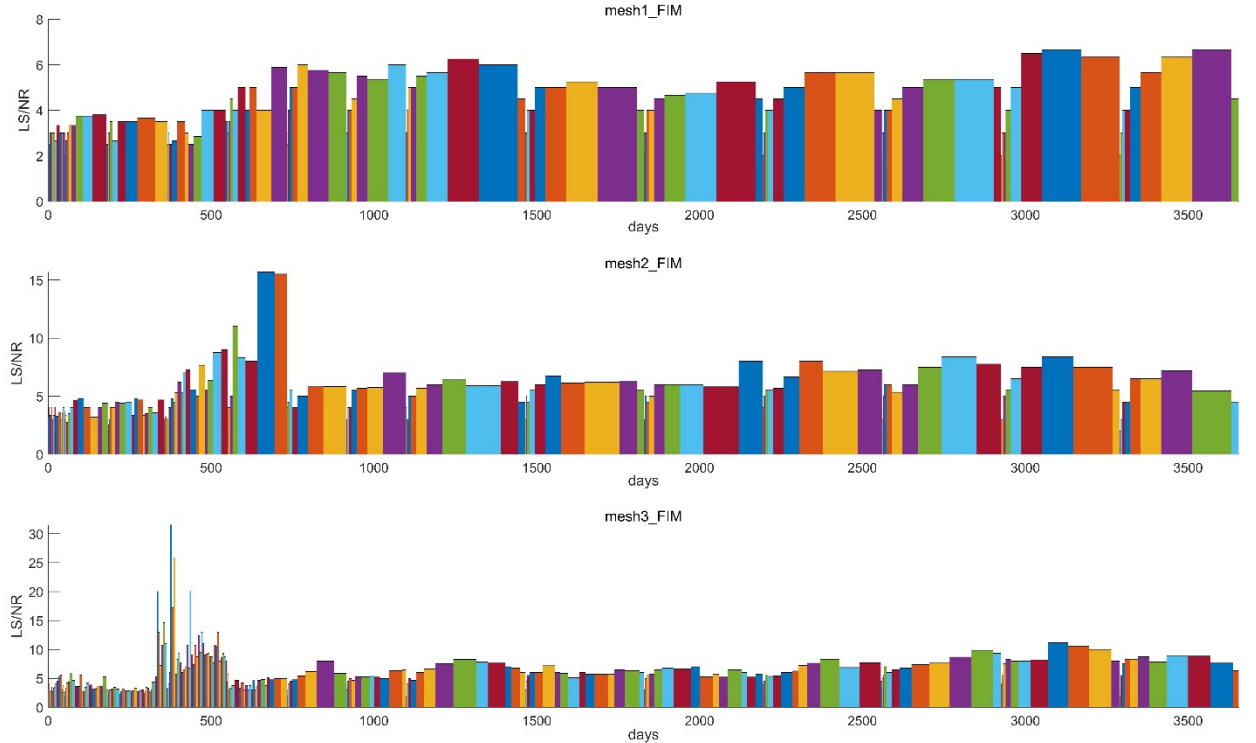
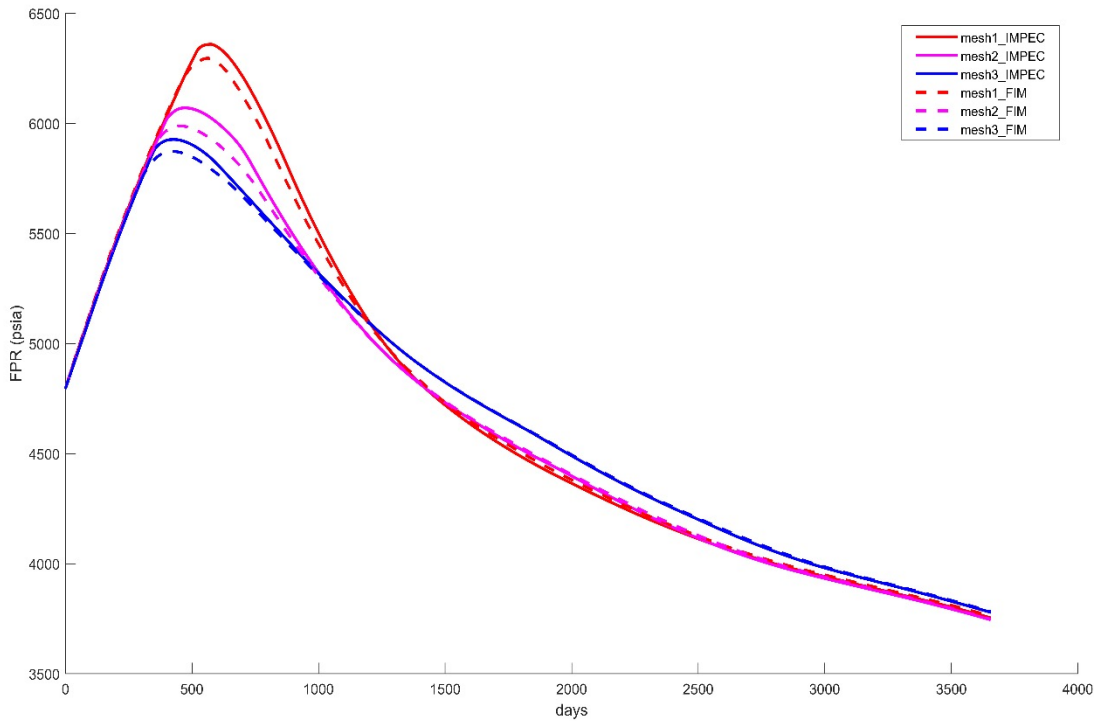




SPE1标准算例：网格收敛性



基于SPE1标准算例构造：油田区域的水平方向为边长10000ft的正方形，垂向厚度为100ft。初始状态下，参考深度（8400ft）的油压为4800psia，初始油饱和度0.88，初始水饱和度0.12；平衡状态油水界面为8500ft，油气界面为7000ft (mesh1 : 20×20×10 , mesh2 : 40×40×20 , mesh3 : 80×80×40)





SPE7标准算例：三相水平井

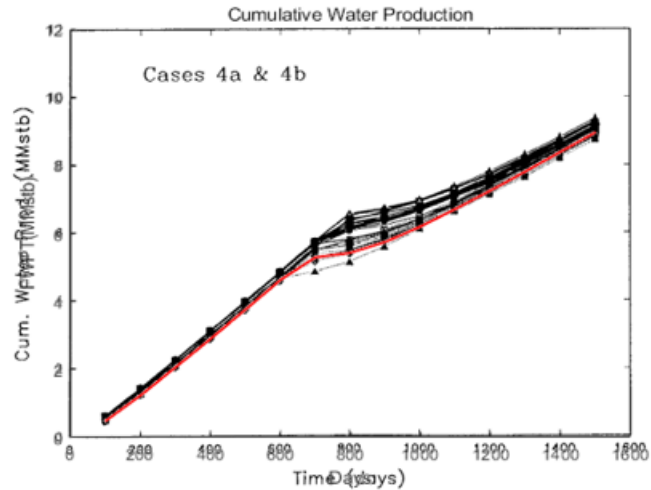


Figure 22: Cumulative water production for Case 4a (solid) and 4b (dashed)

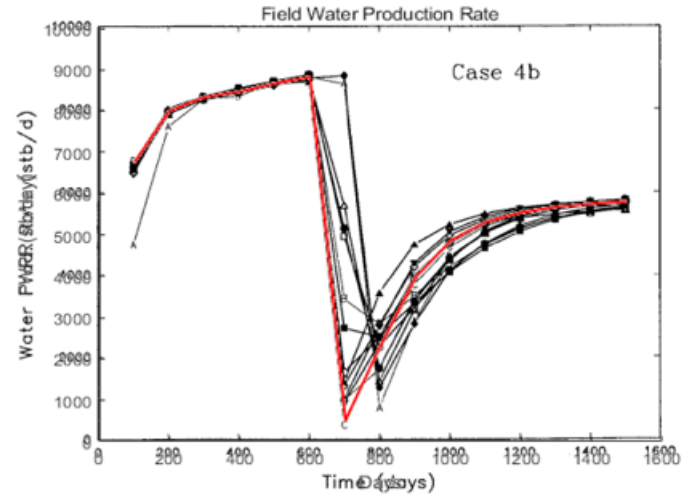


Figure 21: Water production rate for Case 4b

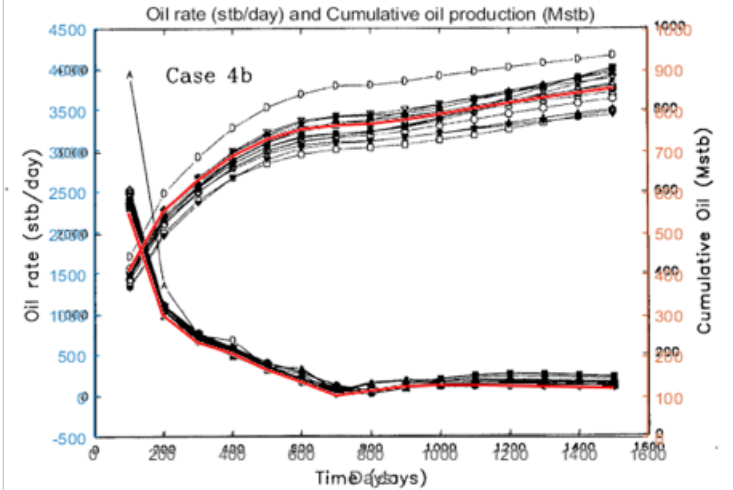


Figure 19: Oil rate (solid) and cumulative oil production (dashed) for Case 4b

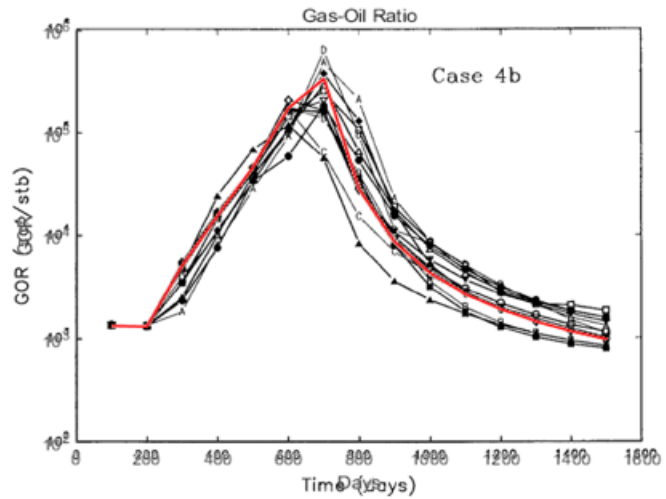


Figure 24: Gas-oil ratio for Case 4b

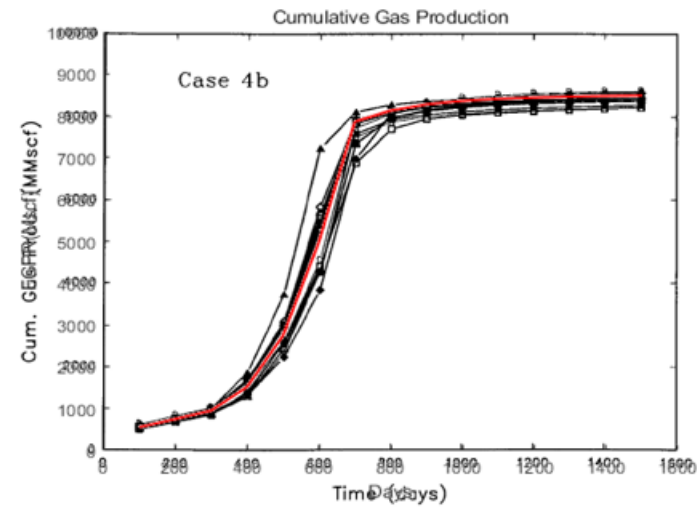


Figure 26: Cumulative gas production for Case 4b

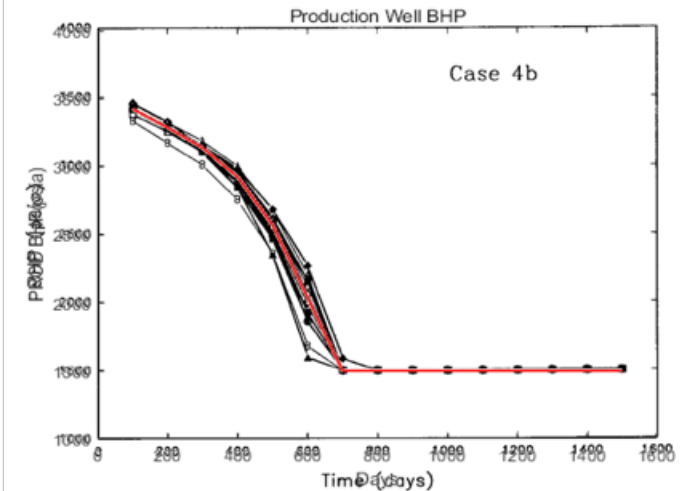
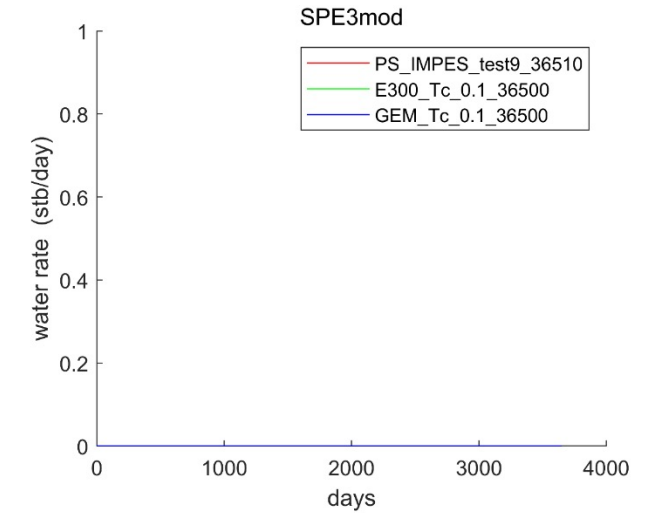
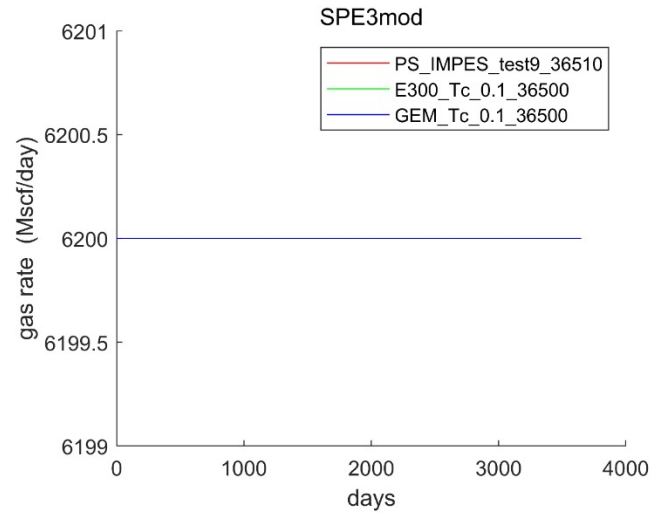
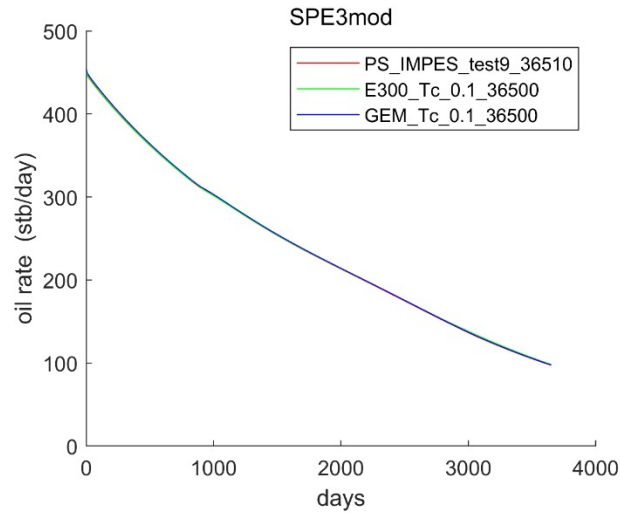
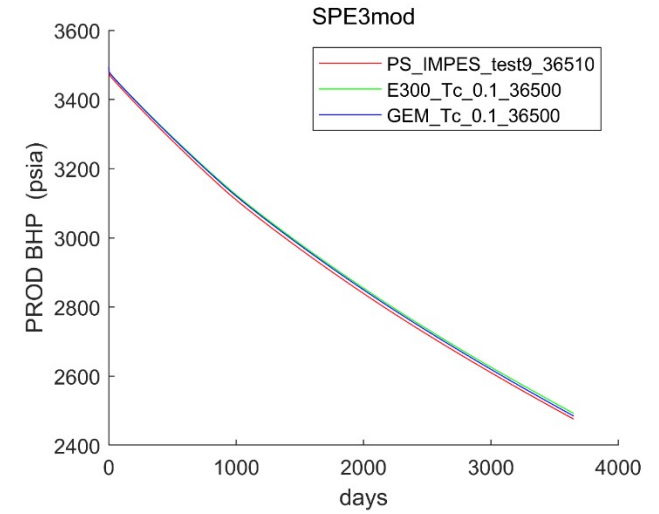
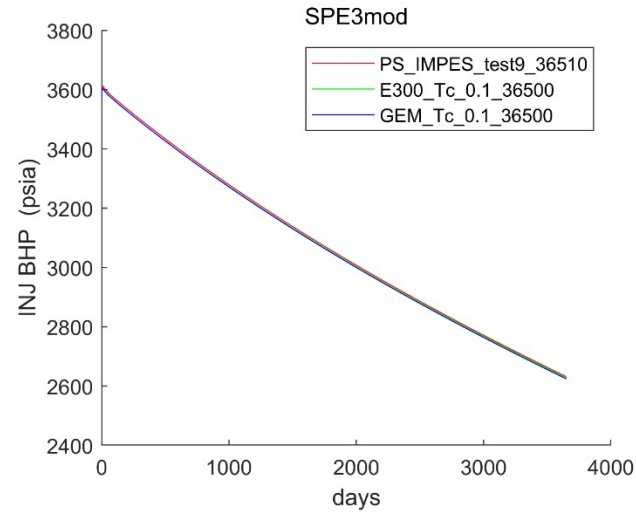
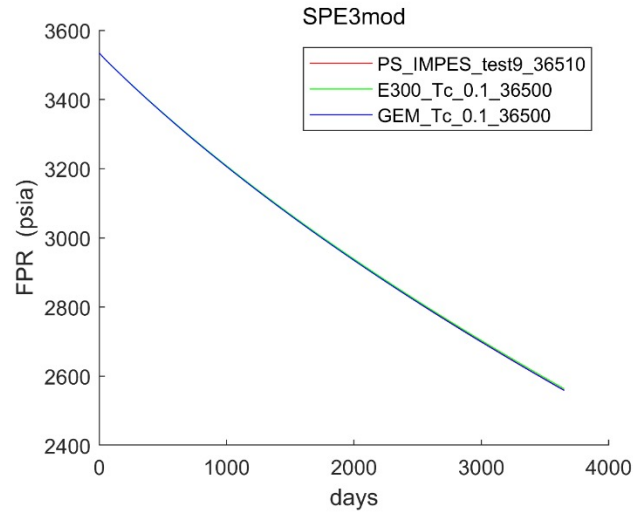


Figure 28: Bottom-hole pressure for Case 4b

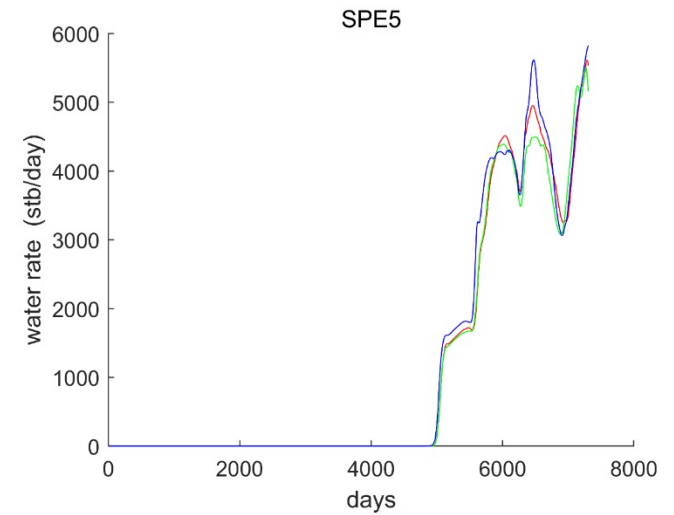
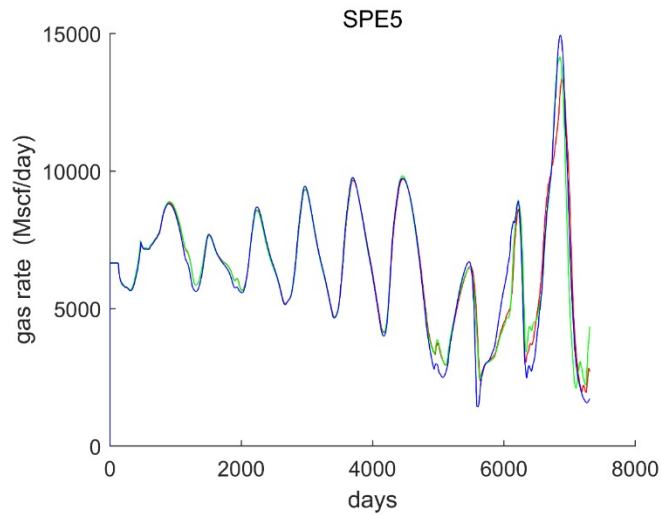
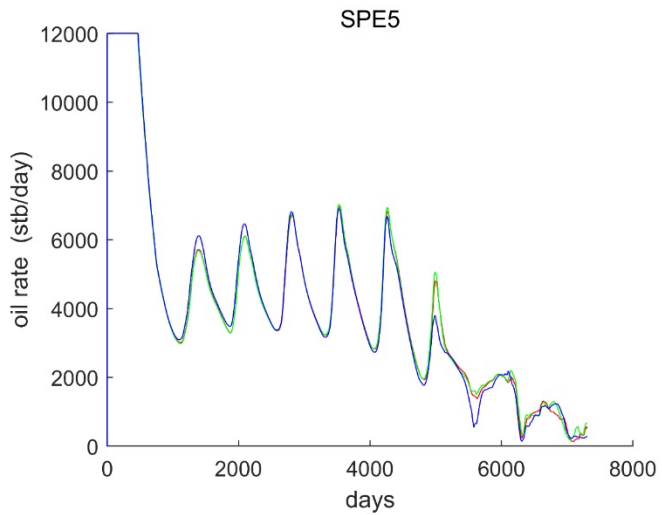
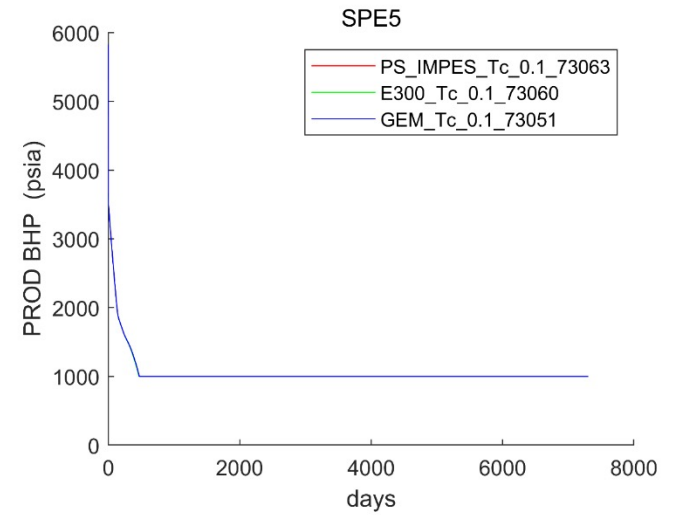
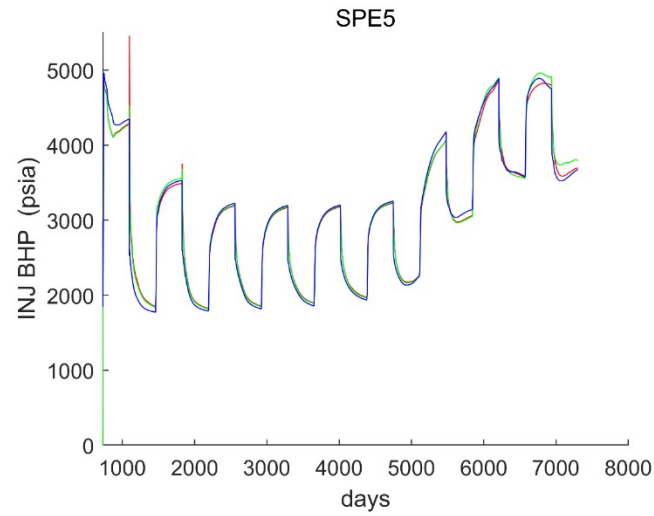
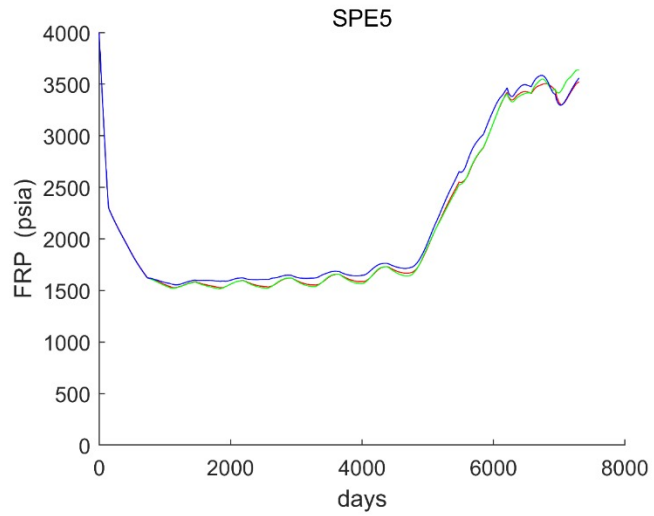


SPE3标准算例：九组分回注



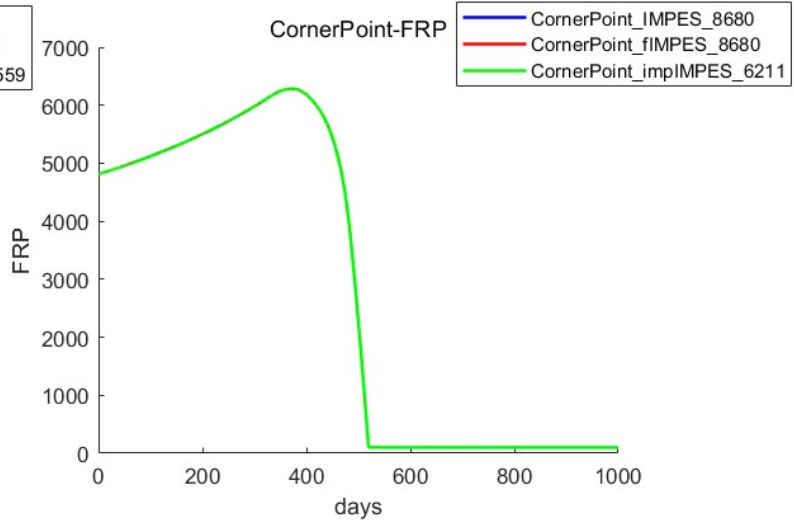
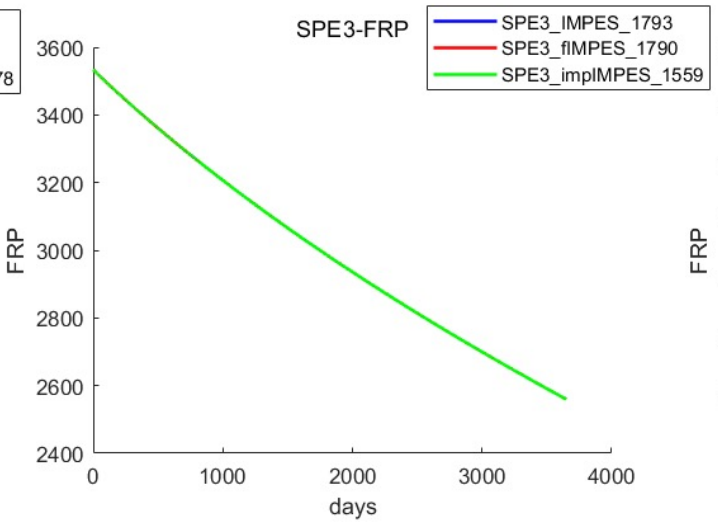
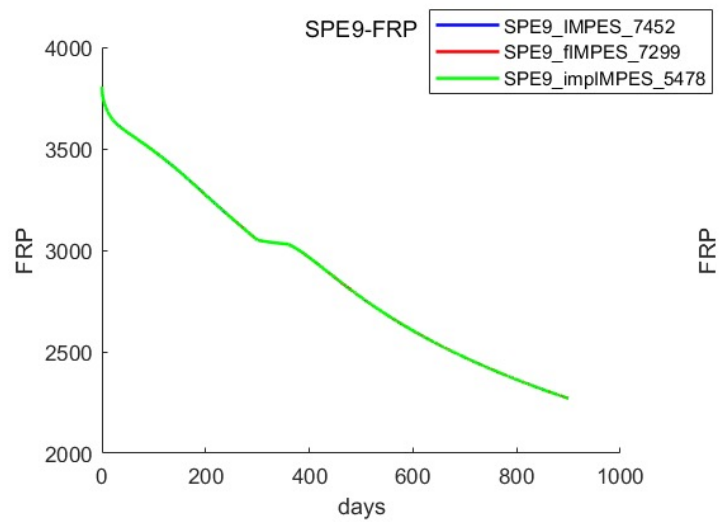
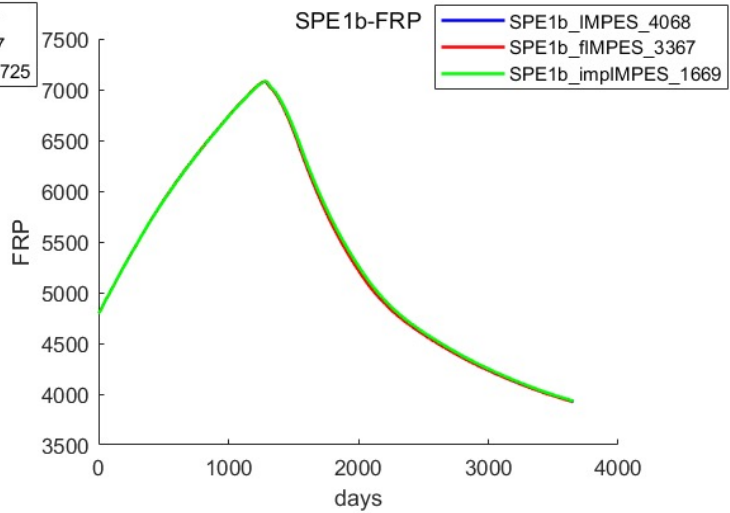
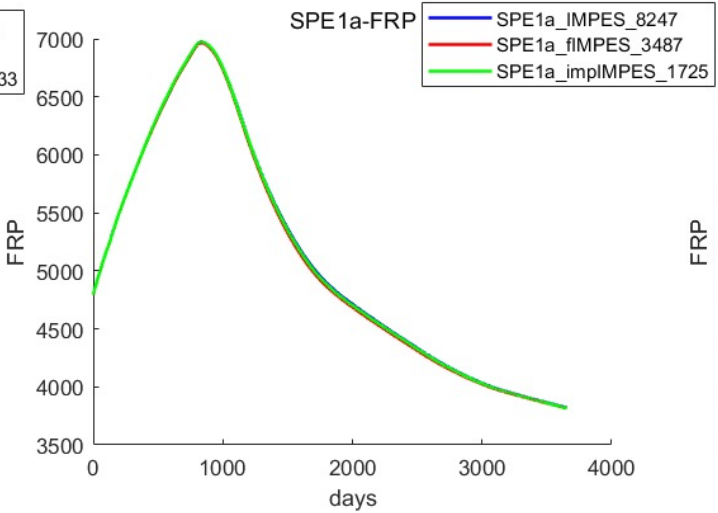
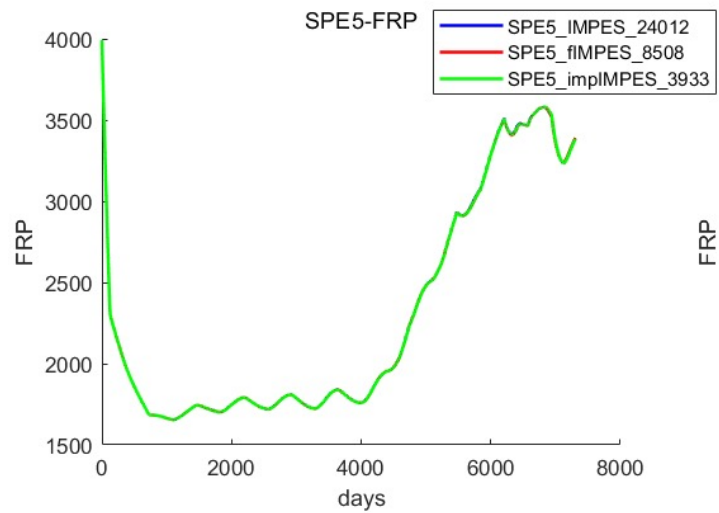


SPE5标准算例：六组分挥发油





改进的IMPEC方法：计算结果





改进的IMPEC方法：计算效率



算例	IMPEC	显式步迭代IMPEC	改进的IMPEC
SPE1a	8247/82.664s	3487/32.882s	1752/30.737s
SPE1b	4068/34.773s	3367/32.247s	1668/32.403s
SPE3	1793/435.449s	1790/735.277s	1555/725.629s
SPE5	24012/781.047s	8508/493.511s	3933/249.975s
SPE9	7452/625.049s	7299/607.304s	5478/620.026s
CornerPoint	8680/96.969s	8680/97.017s	6211/74.164s

- IMPEC类方法稳定性较弱，对时间步长的约束很强，导致模拟时间比较长
- 改进后的IMPEC方法的稳定性更强，可以使用较大时间步长
- 每步的工作量更大，比较难平衡时间步长与复杂度之间的关系
- 总体来说，改进幅度比较有限，未来需要自适应方法AIM

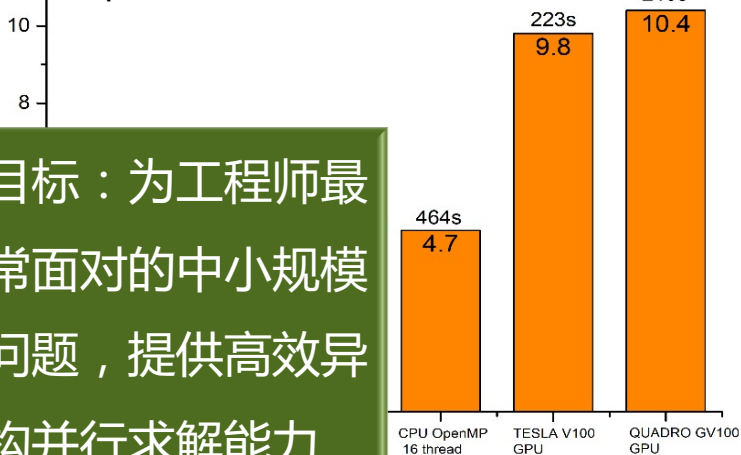
节点内并行效率测试

- 基于一般组分模型框架，实现黑油与组分模型的统一处理，完成了组分模型多相平衡计算的测试，非线性方程组解法器的稳健性得到验证
- 多阶段线性解法器在组分模型框架下的适用性和正确性得到初步验证
- 完成几种并行计算平台的测试

节点内MPI多进程并行测试（计算数学所LSSC-IV机器）

进程数	1	2	4	8	16	32
Newton步数	165	165	166	166	167	162
求解器步数	905	912	926	927	940	911
求解器时间（秒）	9992.0	5259.5	2686.1	1377.7	947.9	360.0
总计算时间（秒）	21023.4	10285.1	5179.1	2661.1	1616.9	717.3
并行效率（%）	100	100	101	98.8	81.3	91.6

OpenMP与CUDA加速对比



目标：为工程师最常面对的中小规模问题，提供高效异构并行求解能力

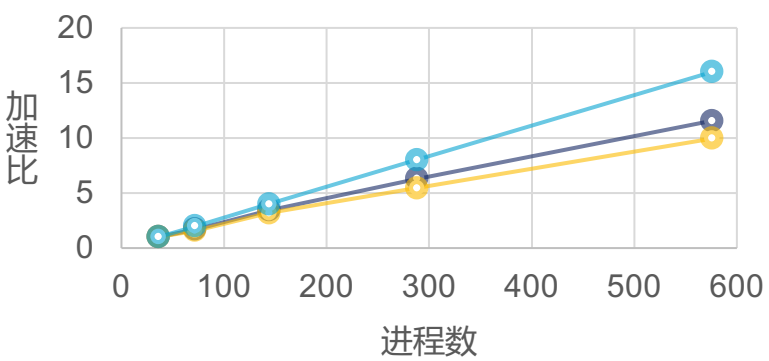
CPU-GPU/DCU异构并行测试（成都超算、网络中心419机器）

计算硬件	CPU	V100	成都超算	网络中心
初次调用求解时间（秒）	10.97	0.97	4.41	7.37
加速比（初次调用）	—	11.3	2.5	1.5
再次调用求解时间（秒）	10.34	0.36	0.84	1.33
加速比（再次调用）	—	28.5	12.4	7.8



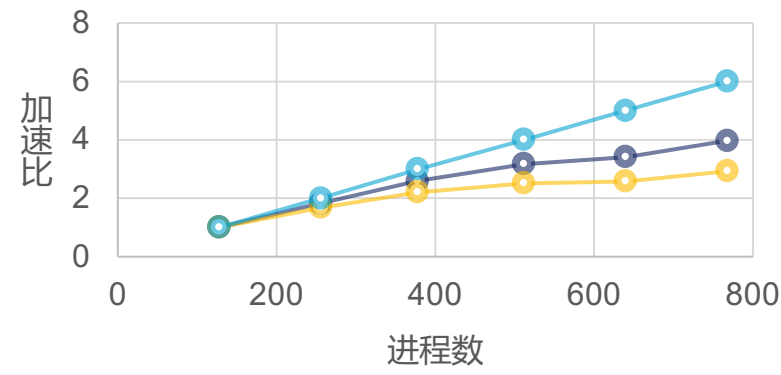
节点间并行效率测试

中科院超算-三百万网格

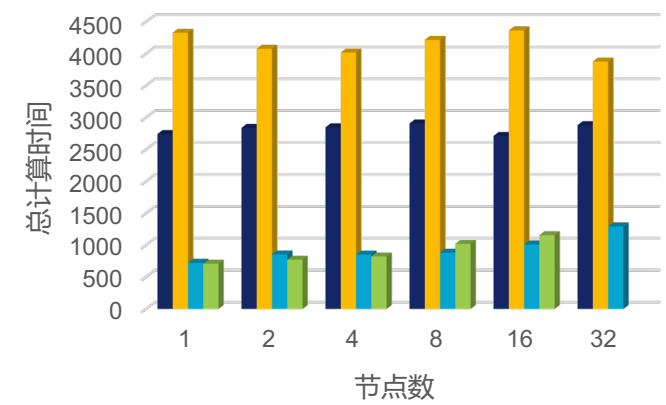


● 总时间 ● 线性求解时间 ● 理想加速比

天津超算-九百万网格



● 总时间 ● 线性求解时间 ● 理想加速比



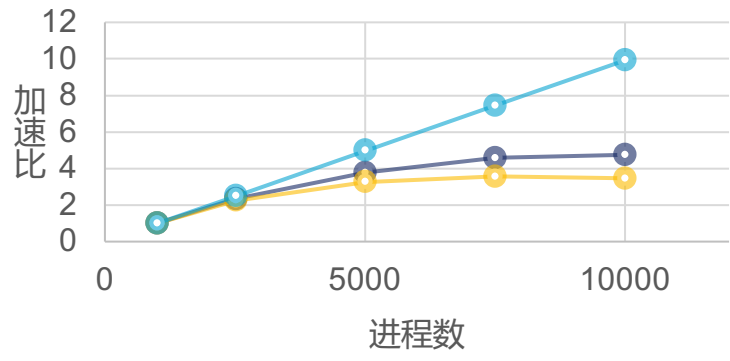
■ 广州超算-3M/24核 ■ 天津超算-2.4M/24核
■ 中科院超算-1.5M/36核 ■ 北京超算云-1.5M/32核

北京超算云-1.2亿网格

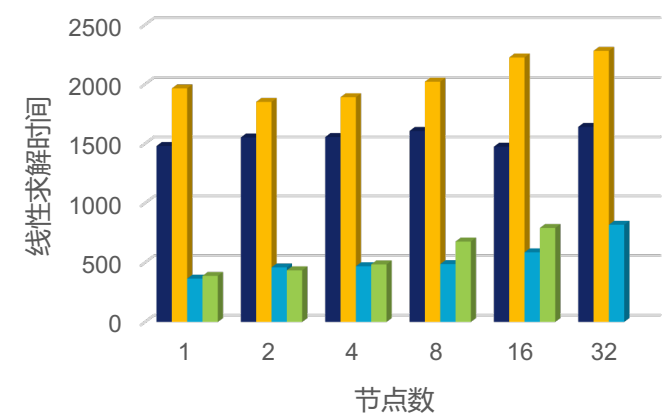


● 总时间 ● 线性求解时间 ● 理想加速比

广州超算-1.2亿网格



● 总时间 ● 线性求解时间 ● 理想加速比



■ 广州超算-3M/24核 ■ 天津超算-2.4M/24核
■ 中科院超算-1.5M/36核 ■ 北京超算云-1.5M/32核

目标：为重要的大规模和超大规模问题，提供高效异构并行求解能力

04

发展规划

Conclusion remarks and future plans



研究方法及相关基础

如何高效地解决这个“七多问题”？

① 多学科

多学科交叉研究团队，长期合作

② 多相态

稳定的非线性迭代方法

③ 多组分

基于通用多组分物质守恒的模型方程

④ 多尺度

多尺度分析、多尺度离散方法、……

⑤ 多介质

多重介质模型、离散裂缝模型、……

⑥ 多物理

耦合的全隐式方法及其快速解法器

⑦ 多种化学反应

借鉴成熟的化学反应方程与软件

- 半解析解耦方法
- 基于Level-scheduling和Multi-coloring的并行方法
- 组合型预条件方法理论
- 多阶段预条件方法
- 多阶段预条件方法的GPU/DCU并行
- 多阶段预条件方法的OMP并行
- 多阶段预条件方法的MPI并行（基于PETSc）
- 多物理场耦合模拟方法
- 自适应全隐式时间离散方法
- 非精确牛顿法
- 多尺度杂交混合元方法
- 基于聚集法的代数多重网格法
- 基于机器学习的智能解法器
- 基于通用多组分模型的并行模拟器软件



大规模并行技术路线

已有研究基础

共享内存OpenMP并行测试

GPU/DCU并行测试

通用CPU万核并行测试

模型问题时间并行测试

线性解法器适应性测试

非线性解法器稳健性测试

模型问题容错解法器测试

后续重点工作

进一步优化数据结构

减少冗余数据移动

优化主-从核异构并行算法

使用时间-空间并行算法

优化线性解法器效率

使用混合精度算法

结合通信避免和通信隐藏

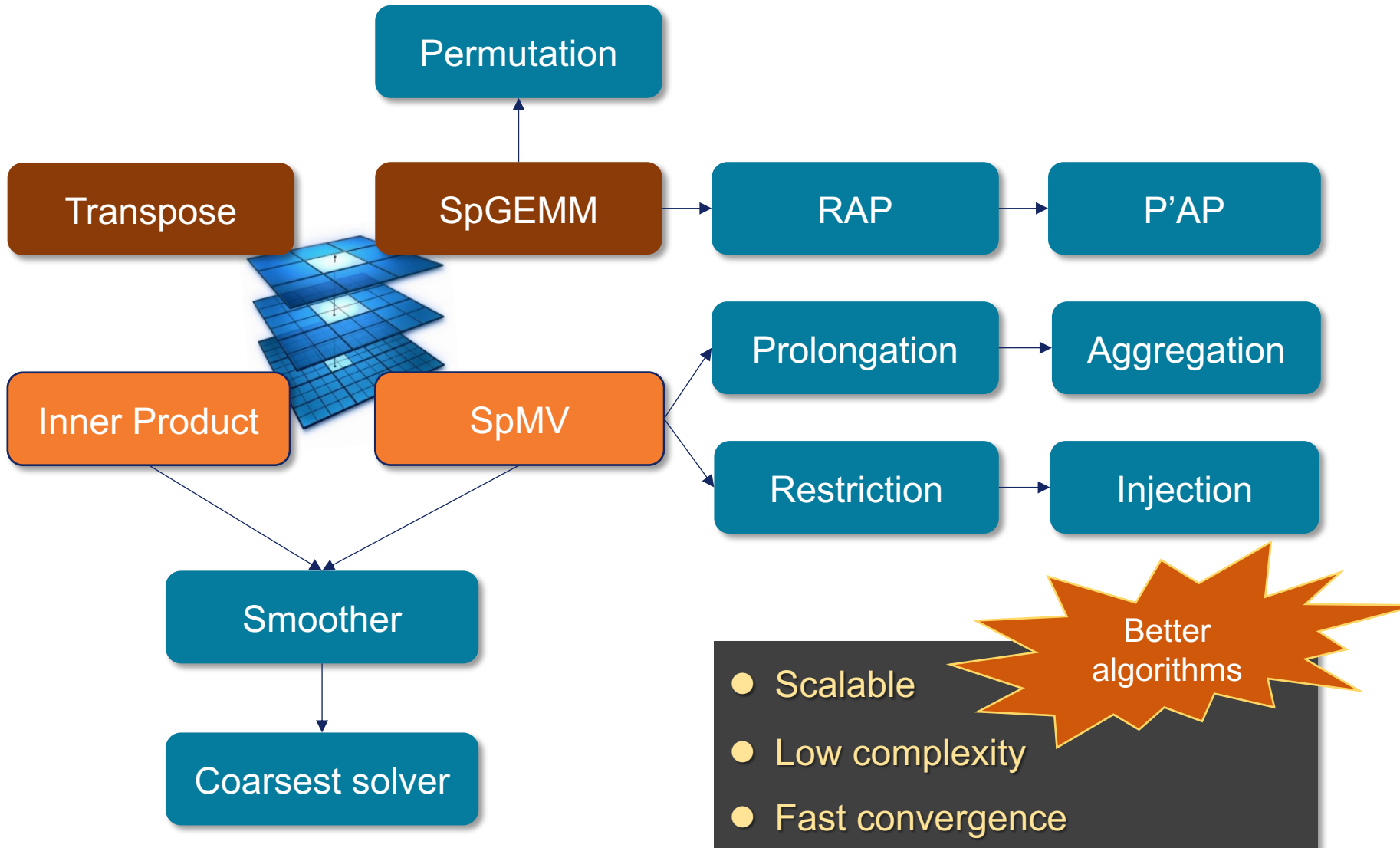
Nonhydrostatic Atmospheric DyCore,
Summit, 4600节点 (27600 V100GPU)

根据前期数值算法研究（解耦方法、多阶段预条件方法、多层迭代法、稀疏矩阵运算方法等）、在广州超算的万核扩展性实验、国际同行在数万加速器上的测试数据，我们有信心达成项目目标！

最大程度地保持应用目标和最优解法，
而不是基于简化的算法



多重网格法中的基本操作



New data structures

Predicting number of nnz

Software prefetching

Fusing operations

Avoid branching

Comm. avoiding / hiding

Mixed precisions

- Scalable
- Low complexity
- Fast convergence





稀疏矩阵存储数据结构



常用稀疏矩阵格式

Data structures for sparse matrices

- CSR
- CSC
- DIA
- ELL
- COO
- HYB
- CSR5



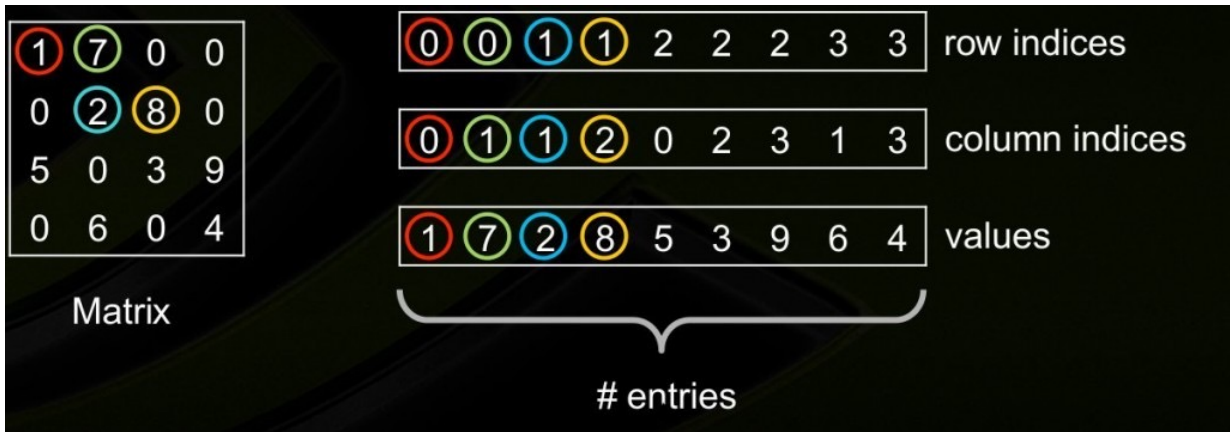
- 元素操作 (读写某些元素)
- 矩阵操作 (行列交换、转置)
- 矩阵运算 (SpMV、SpGEMM)
- 迭代算法 (Jacobi方法、GS方法)
- 代数算法 (LU、ILU、SAI方法)



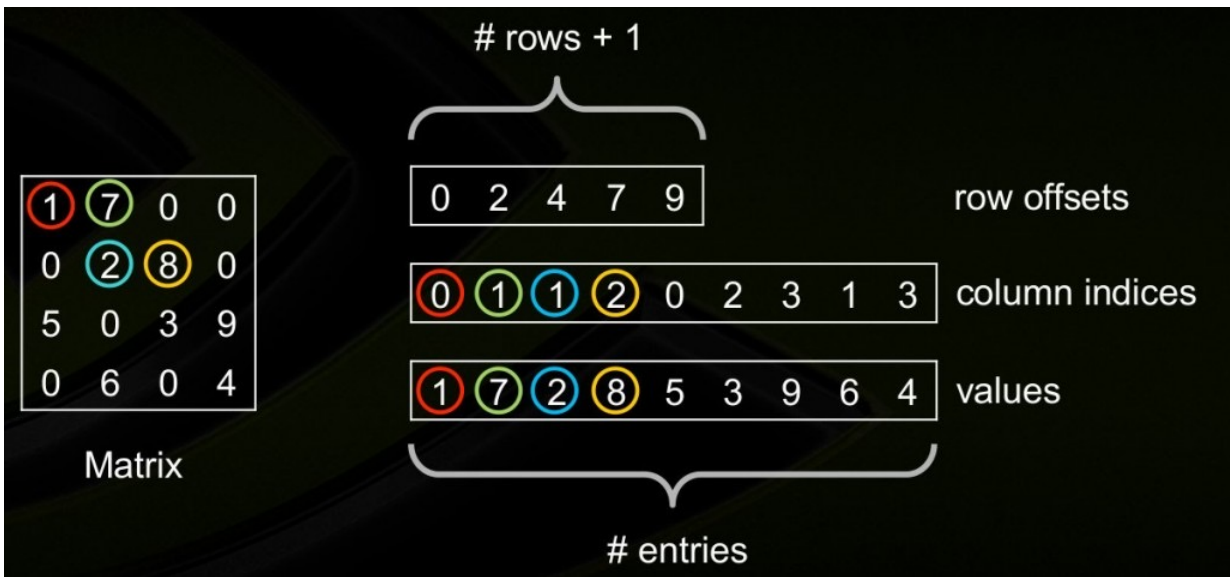
稀疏矩阵存储数据结构



COO

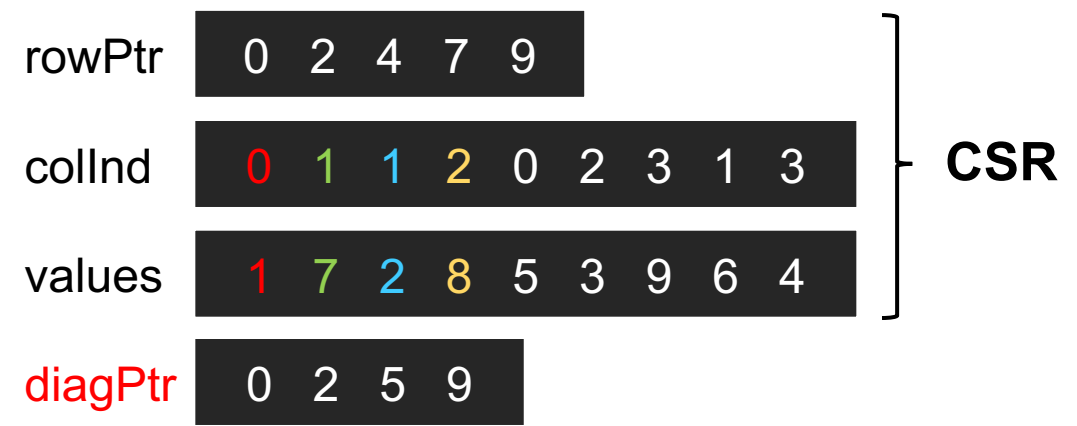


CSR

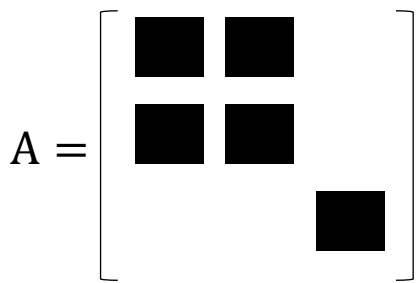
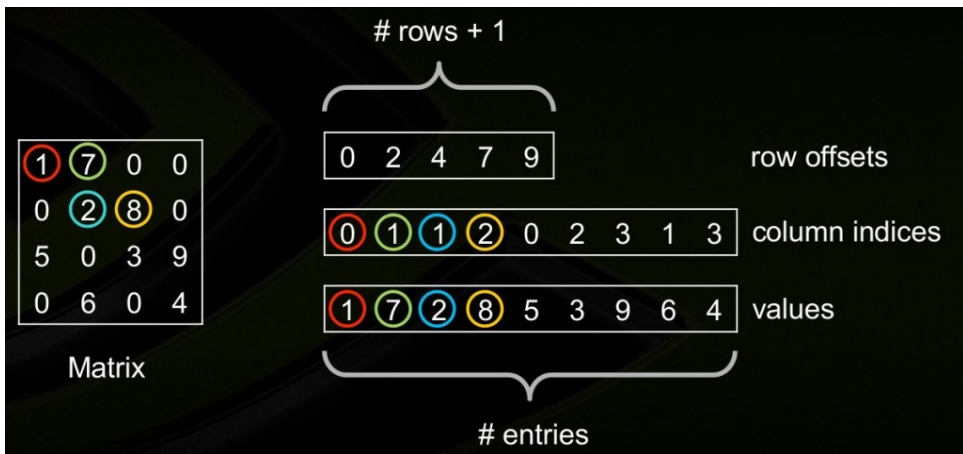


CSRx

- Compatible with CSR
- Easy to handle rows of matrix
- Easy to find diagonal entries
- Easy to find lower triangular entries
- Easy to find upper triangular entries
- Do not increase storage requirement



块稀疏行压缩存储格式



ROW=3
COL=3
NNZ=5
nb=2

```

1 A[0,0]=
2 +4.0000000000E+00 -5.0000000000E-01 -2.5000000000E-01 +4.0000000000E+00
3 A[0,1]=
4 -5.0000000000E-01 +0.0000000000E+00 +0.0000000000E+00 -5.0000000000E-01
5 A[1,0]=
6 -2.5000000000E-01 +0.0000000000E+00 +0.0000000000E+00 -2.5000000000E-01
7 A[1,1]=
8 +4.0000000000E+00 -5.0000000000E-01 -2.5000000000E-01 +4.0000000000E+00
9 A[2,2]=
10 +4.0000000000E+00 -5.0000000000E-01 -2.5000000000E-01 +4.0000000000E+00

```

```

1 3 3 5
2 2
3 0
4 4
5 0
6 2
7 4
8 5
9 5
10 0
11 1
12 0
13 1
14 2
15 20
16 4.00
17 -0.50
18 -0.25
19 4.00
20 -0.50
21 0.00
22 0.00
23 -0.50
24 -0.25
25 0.00
26 0.00
27 -0.25
28 4.00
29 -0.50
30 -0.25
31 4.00
32 4.00
33 -0.50
34 -0.25
35 4.00

```

ROW, COL, NNZ (number of nonzero sub-blocks);
nb (size of the square sub-blocks);
Storage format of sub-blocks (0: row-major, 1: column-major).

Size of the INT vector IA;
Values of the INT vector IA.

Size of the INT vector JA;
Values of the INT vector JA.

The first number gives the size of VAL;
From the second line, the numbers are the values of the nonzero blocks of the matrix.

IA, JA, VAL are all stored in generic vector format which is the same as the right-hand side.



OpenCAEPoro软件设计思想



平衡三个主要“成本”

Balancing between three costs



计算成本

程序实际计算的时间成本

开发成本

程序开发与优化的人工成本

使用成本

用户使用软件的学习成本



OpenCAEPoro软件设计目标



- 方便与其它模型的耦合作用
- 方便组分间的化学反应
- 方便更换EOS模型
- 方便支持不同网格类型
- 方便更换闪蒸计算算法
- 方便发展新型隐式/半隐式方法
- 方便发展新型离散方法
- 方便发展新型求解方法
- 方便进行底层的性能优化

- 适应分布式异构并行环境
- 增强接口灵活性，配合嵌套分布式并行调用
- 由任意求解器调用任意求解器作为预条件
- 对接底层稀疏数学库
- 增强程序的可读性和可维护性
- 重新设计报错信息
- 重新设计单元测试和回归测试
- 增加必要的文档
- 利用C++减少冗余代码



OpenCAEPoro五年开发计划



模型

- 裂缝模型（大尺度裂缝介质）
- 多重介质模型（小尺度裂缝介质）
- 非等温模型（能量守恒方程、物化性质）
- 流固耦合模型（压敏效应、岩石力学方程）

离散

- 能量守恒方程的耦合离散方法
- 裂缝方程的EDFM方法
- 局部加密网格、PEBI网格等网格类型
- 自适应隐式离散方法AIM

解法

- 非线性求解初值（公式、不动点迭代、ML）
- 智能解法器（迭代法+预条件组合参数）
- 多阶段预条件方法的扩展（温度、AIM）
- 岩石固结方程、裂缝模型方程的求解

实现

- 解法器多GPU/DCU卡并行
- 解法器MPI+GPU混合并行
- 主模拟器GPU/DCU并行
- 完整代码MPI+OpenMP+GPU混合并行



改进离散方法和求解方法

工程应用

求解水力压裂问题：流固耦合、应力集中、断裂模型

求解复杂裂隙问题：多重介质、DFM、EDFM

求解非等温问题：能量守恒方程、相平衡计算

提高半隐式方法效率：改进IMPEC方法、AIM方法

提高离散方法分辨率：局部加密网格、多段井模型

计算数学

提高离散方法收敛阶：多点连通格式、高阶时间格式

更多模型



离散方法



改进相平衡与闪蒸计算方法



热力学

修改建模方式，例如将PT闪蒸换为VT闪蒸

模型建立

修改模型方程，例如修改RR目标函数

修改变量选取，例如降阶模型、主成分分析等

修改非线性求解方法，例如初值、SSM、NR、TR等

修改线性求解方法，例如LU、LDU、Cholesky等

计算数学

利用机器学习和数据积累提高求解效率

求解方法



改进代数求解方法

代数求解



并行计算

能量守恒问题求解：热传导方程的预条件方法

流固耦合问题求解：弹性力学方程组的预条件方法

混合矩阵存储格式：AIM方法的系数矩阵求解

稀疏矩阵存储格式：CSRx格式、BSRx格式

提高代数运算效率：指令级并行、稀疏矩阵计算库

提高并行计算效率：分布式并行、异构并行

快速算法



并行实现



OpenCAEPoro软件开发规划





OpenCAEPoro软件开发进度



输入输出	简单输入输出格式			兼容商业软件格式	可视化软件格式
并行支撑	并行区域划分	并行通信	加速卡并行优化	节点内并行优化	节点间并行优化
耦合处理	半隐式方法	全隐式方法	迭代半隐式方法	自适应方法	耦合处理算法优化
初始化	单介质模型初始化	优化初始化结果		多重介质模型初始化	离散裂缝模型初始化
空间离散	TPF有限体积法	离散裂缝MHM方法	多重介质有限体积法	单介质模型混合元	离散裂缝混合元
时间离散	向后Euler时间离散	时间步长自适应	时间并行算法	优化时间步长选择	初值获取技术
线性化	Newton线性化	非线性迭代线搜索			拟Newton法
线性求解	解耦方法	多阶段预条件方法	Krylov子空间方法	最优求解参数选择	特殊情况处理
平衡计算	平衡方程闪蒸计算			化学反应方程求解	稳健的相平衡判断

多相多组分渗流问题大规模数值模拟关键技术

	现有基础
	需要研发

数模云平台建设

- 用户界面设计，方便远程使用，数模软件的适应性和性能
- 构建高速网络，提高访问速度，保护数据安全
- 实现前端、平台、数模无缝衔接，实现跨平台可移植性

用户

- 可使用任何移动终端访问计算服务
- 无需担心复杂的软硬件环境
- 计算发生在云端，对本地工作没有影响
- 数据实时备份，实现移动办公和移动计算

平台

- 提供高速网络、保护数据安全
- 提供高性能计算资源（CPU、GPU等）
- 提供软硬件运维和系统升级
- 提供快速有效的技术支持



数模

- 提供友好的用户界面和用户体验
- 提供高效能数模计算软件
- 维护与平台的软硬件接口
- 保持与对硬件平台的兼容性



一些工程应用示范尝试

二氧化碳埋存

在中石油长庆油田进行二氧化碳埋存效果与环境影晌应用研究



双高油田精细开发

在中石化胜利油田等高含水、高采出程度大油田应用2-3个区块

缝洞型油气藏开发

在中石油塔里木油田深层缝洞型碳酸盐岩凝析气藏应用3-5个区块



深层页岩气开发

在川南长宁-威远深层页岩气多层系井工厂开发方案设计与产能评价中应用2-3个平台

本页图片来自中国石油石化网、央广网、腾讯网等网络媒体



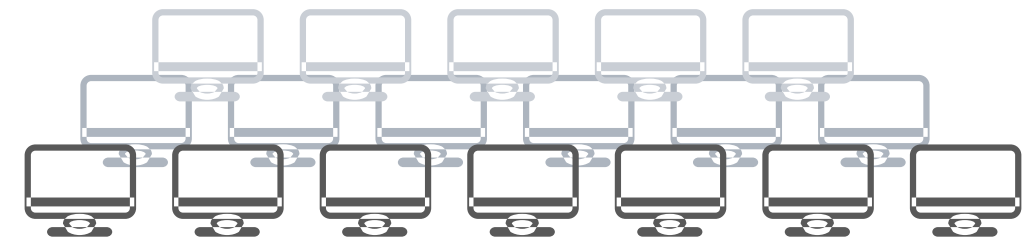
总结

超算能力是一个国家核心
科技竞争力的集中体现

异构并行环境给软件开发
带来重大机遇和巨大挑战

适应硬件体系结构的软件和
算法是发挥硬件性能的推动力

并行工业软件开发需要
长期和坚定不移的努力





请各位专家批评指正！

<http://lsec.cc.ac.cn/~zhangcs/>



主要参考文献



1. Convergence analysis of inexact two-grid methods: A theoretical framework, X. Xu and C.-S. Zhang, **SIAM Journal on Numerical Analysis**, to appear.
2. Multiscale hybrid-mixed finite element method for flow simulation in fractured porous media, P. Devloo, W. Teng, and C.-S. Zhang, **Computer Modeling in Engineering and Sciences**, 119, 145–163 (04/2019)
3. On the ideal interpolation operator in algebraic multigrid methods, X. Xu and C.-S. Zhang, **SIAM Journal on Numerical Analysis**, 56, 1693–1710 (06/2018).
4. Analytical decoupling techniques for fully implicit reservoir simulation, C. Qiao, S. Wu, J. Xu, and C.-S. Zhang, **Journal of Computational Physics**, 336, 664–681 (05/2017)
5. An error-resilient redundant subspace correction method, T. Cui, J. Xu, and C.-S. Zhang, **Journal of Computing and Visualization in Science**, 18, 65–77 (01/2017)
6. On Robust and Efficient Parallel Reservoir Simulation on Tianhe-2, W. Guan, C. Qiao, H. Zhang, C.-S. Zhang, et al., **SPE Reservoir Characterization and Simulation** Conference and Exhibition, SPE-175602 (08/2015)
7. A multilevel preconditioner and its shared memory implementation for a new generation reservoir simulator, S. Wu, J. Xu, C. Feng, C.-S. Zhang, et al., **Petroleum Science**, 11, 540–549 (10/2014)
8. Numerical study of geometric multigrid on CPU–GPU heterogenous computers, C. Feng, S. Shu, J. Xu, and C.-S. Zhang, **Advances in Applied Mathematics and Mechanics**, 6, 1–23 (01/2014)
9. Application of auxiliary space preconditioning in field-scale reservoir simulations, X. Hu, J. Xu, and C.-S. Zhang, **Science China Mathematics**, 56, 2737–2751 (12/2013)
10. Combined preconditioning with applications in reservoir simulation, X. Hu, S. Wu, X.-H. Wu, J. Xu, C.-S. Zhang, S. Zhang, and L. Zikatanov, **Multiscale Modeling and Simulation**, 11, 507– 521 (08/2013)